

Spekwin32

*Vollständige
Dokumentation*



Software: Version 1.71.6
Dokumentation: Version 3.1

© 2011 Dr. Friedrich Menges
D-83471 Berchtesgaden
spekwin32@effemm2.de
www.effemm2.de/spekwin/

INHALTSVERZEICHNIS

1. Allgemeine Beschreibung	1
1.1. Historisches	1
1.2. Beschreibung	1
1.3. Systemvoraussetzungen/Installation	2
1.4. Nutzungsbedingungen	2
1.5. Zitierung	2
2. Hauptfenster und Hauptmenü	3
2.1. Hauptmenü	3
2.2. Iconleiste	3
2.3. Grafikfenster	3
2.4. Statusleiste	3
3. Untermenü [Datei]	4
3.1. Menüpunkt [Öffnen]	4
3.2. Menüpunkt [Speichern]	6
3.3. Menüpunkt [Speichern als ...]	6
3.4. Menüpunkt [Speichern für Gnuplot]	8
3.5. Menüpunkt [Grafik kopieren (Zwischenablage)]	8
3.6. Menüpunkt [Daten kopieren (Zwischenablage)]	9
3.7. Menüpunkt [Drucken]	9
3.8. Menüpunkt [Beenden]	9
4. Untermenü [Spektren]	10
4.1. Menüpunkt [Allgemein]	10
4.2. Menüpunkt [Information]	11
4.3. Menüpunkt [Normieren]	11
4.4. Menüpunkt [Grundlinienkorrektur]	11
4.5. Menüpunkt [Spike-Entfernung]	12
4.6. Menüpunkt [Korrektur (CCD)]	12

4.7. Menüpunkt [Abspielen]	12
4.8. Menüpunkt [Glätten]	13
4.9. Menüpunkt [Peaks finden]	13
4.10. Menüpunkt [Integral]	13
4.11. Menüpunkt [Ausschneiden]	13
4.12. Menüpunkt [Sortieren]	14
4.13. Untermenü [Löschen]	14
4.13.1. Menüpunkt [Alle]	14
4.13.2. Menüpunkt [Auswahl]	14
4.13.3. Menüpunkt [Letztes]	14
5. Untermenü [Rechnen]	15
5.1. Menüpunkt [Addieren]	15
5.2. Menüpunkt [Subtrahieren]	15
5.3. Menüpunkt [Multiplizieren]	15
5.4. Menüpunkt [Dividieren]	15
5.5. Menüpunkt [Spektren mitteln]	16
5.6. Menüpunkt [Y Konstanten]	16
5.7. Menüpunkt [X Konstanten]	16
5.8. Menüpunkt [Ableitung]	16
5.9. Menüpunkt [Konzentration]	17
5.10. Menüpunkt [effekt. Extinktion]	17
5.11. Menüpunkt [Schwerpunkt]	18
5.12. Menüpunkt [Transmission/Reflektion]	18
5.13. Menüpunkt [Schichtdicke]	18
5.14. Menüpunkt [Polarisationsgrad/Gesamtspektrum]	19
5.15. Menüpunkt [FQ]	19
6. Untermenü [2D/TT]	19
6.1. Menüpunkt [Erregerintensität korrigieren]	19
6.2. Menüpunkt [2D-Spektrum (EEM)]	20

6.3. Menüpunkt [Erregerspektren berechnen].....	20
6.4. Menüpunkt [IT-Quantenausbeute]	20
7. Untermenü [GaussFit]	20
7.1. Menüpunkt [Manuell].....	20
7.2. Menüpunkt [Öffnen].....	20
7.3. Menüpunkt [Speichern]	20
8. Untermenü [Plot/Optionen]	21
8.1. Menüpunkt [Konfiguration].....	21
8.2. Menüpunkt [Achsen].....	21
8.3. Menüpunkt [Achsenfont]	22
8.4. Menüpunkt [Legendenfont]	22
8.5. Menüpunkt [Legende ein/aus]	22
8.6. Menüpunkt [Gitter ein/aus].....	22
8.7. Menüpunkt [zweite x-Achse ein/aus].....	22
8.8. Menüpunkt [Punkte/Linien].....	22
8.9. Menüpunkt [x-Achse umdrehen]	22
8.10. Menüpunkt [Standard-Linienarten]	22
8.11. Menüpunkt [Linien breiter].....	23
8.12. Menüpunkt [Linien dünner].....	23
8.13. Menüpunkt [Alle Schwarz].....	23
8.14. Menüpunkt [Linienarten]	23
8.15. Menüpunkt [Werteleser]	23
8.16. Menüpunkt [Hintergrundfarbe]	23
9. Anhang	24
9.1. Berechnung der Oszillatorstärke f	24

1. Allgemeine Beschreibung

1.1. Historisches

Das ursprüngliche Programm namens **Spekwin** (16Bit-Version) wurde in den Jahren 1997-1998 an der Universität Konstanz in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. E. Daltrozzi unter *DELPHI 1* von Dr. Claus Vielsack entwickelt. Es basiert auf einem noch älteren, von Dr. G. Kollmannsberger in *TURBO PASCAL* programmierten Kern (DOS-Programm *tpbld.exe*, bis 1993). Die Weiterentwicklung wird seit 1999 von mir betrieben. Inzwischen liegt das Programm (neuer Name: **Spekwin32**) als 32Bit-Version (*DELPHI 4*) mit erweiterten Fähigkeiten vor. Der größte Teil der Arbeiten an Spekwin32 fand während meiner Promotionszeit von 2000-2005 in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. E. Daltrozzi statt.

1.2. Beschreibung

Ein Hauptziel des Programms ist die einheitliche Darstellung von Spektren aus verschiedenen Quellen. Zurzeit können 30 verschiedene Dateiformate eingelesen werden. Diese entstammen sowohl kommerziellen wie auch in der Arbeitsgruppe Daltrozzi selbst gebauten Spektrometern.

Weiterhin können viele im spektroskopischen Alltag notwendige Manipulationen an Spektren vorgenommen werden (Grundlinienkorrektur, normieren, glätten, integrieren, Berechnung von Konzentration, Extinktionskoeffizient und Oszillatorstärke, ...).

Für die Fluoreszenzspektroskopie wichtig sind die Berechnung von Polarisationsgradspektrum, Fluoreszenzschwerpunkt und Fluoreszenzquantenausbeute, sowie die Korrektur der Anregungsintensität von Fluoreszenzspektren, die Berechnung von Erregerspektren aus zweidimensionalen Fluoreszenzspektren und die Darstellung von 2D-Spektren (EEMs) aus Fluoreszenz- oder Erregerspektren.

Zur Simulation von Absorptionsspektren ist ein Algorithmus implementiert, mit dem sich beliebige Scharen von gaussförmigen Kurven an vorhandene Spektren anfitzen lassen.

Zur einfachen Dokumentation lassen sich beliebig viele Spektren sowohl in einem internen Binär-Format als auch in zwei allgemein lesbaren ASCII-Formaten (*.dat, *.csv) gemeinsam abspeichern. Spektren können auch in zwei allgemein verbreiteten Dateiformaten exportiert werden: JCAMP-DX (*.dx) und THERMO Galactic/GRAMS (*.spc). Zudem lässt sich die momentane Bildschirmdarstellung ausdrucken, über die Zwischenablage direkt in Textverarbeitungs- oder Grafiksoftware (z. B. Word) übertragen oder als Grafik (Formate: WMF, GIF, TIFF, BMP, PNG) abspeichern. Für LaTeX-Freaks wurde ein Ausgabeformat für Gnuplot zur direkten Erzeugung von EPS-Dateien integriert.

1.3. Systemvoraussetzungen/Installation

Das Programm läuft unter Win95/98/ME und WinNT/2000/XP/Vista/7. Die Anforderungen an den Rechner sind minimal, Spekwin32 läuft mindestens ab 486/25MHz/16MB. Die Installationsdatei installiert die zeitlich unbegrenzte deutsche Vollversion inklusive HTML-Manual. Der anfängliche Benutzerstatus ist „unbekannt“, bitte ändern sie diesen zu Beginn auf den für sie zurechnenden Status (Hilfe => Benutzerstatus).

1.4. Nutzungsbedingungen

Spekwin32 ist für nicht-kommerziellen, privaten, akademischen Gebrauch und für die Benutzung durch Non-Profit-Organisationen (z.B. Schulen, Universitäten, öffentliche Dienste, UN-Organisationen, Krankenhäuser, Polizei, Feuerwehr, Katastrophenschutz) kostenlos und Freeware. In diesem Fall wird ihnen das Recht gewährt eine unbegrenzte Anzahl von Kopien dieser Software zu erstellen und zu benutzen.

Für die gewerbliche Nutzung müssen Sie einmalig eine gültige Lizenz erwerben. Eine Einzel-Lizenz ist gültig entweder pro Person (mehrere Computer) oder pro Computer (mehrere Personen), aber nicht beides gleichzeitig. Die Lizenz-Bestellung und Zahlungsabwicklung wird von J-M-S (<http://www.j-m-s.de/index.htm>) abgewickelt, eine Einzel-Lizenz kostet 95€ netto, für den Erwerb mehrerer Lizenzen gibt es stark reduzierte Staffelpreise.

Das Programm Spekwin32 ist urheberrechtlich geschützt. Es ist niemandem außer dem Autor erlaubt, das Programm Spekwin32 zum Download anzubieten, zu vertreiben oder zu verkaufen, es sei denn mit ausdrücklicher Erlaubnis des Autors. Es ist Ihnen nicht gestattet, das Programm Spekwin32 abzuändern, zu übersetzen, zurückzuentwickeln, zu dekompileieren oder zu disassemblieren.

Der Programmautor übernimmt keine Haftung für Schäden, die aus der sachgemäßen oder unsachgemäßen Nutzung des Produktes, wie z. B. Datenverlust, Geldverluste oder sonstige Schäden jeglicher Art, resultieren. Vorstehender Satz ist gültig, soweit dies mit nationalem Recht vereinbar ist. Gerichtsstandort ist Deutschland.

1.5. Zitierung

Bei Benutzung von Spekwin32 für wissenschaftliche Arbeiten bitte ich um diesen Verweis:

*F. Menges "Spekwin32 - Software für optische Spektroskopie", Version x.xx.x, 201x,
<http://www.ffmpeg2.de/spekwin/>*

Bitte die aktuelle Programmversion und das Herstellungsjahr einfügen (Hilfe => über Spekwin32...). Der Teil in Anführungszeichen kann weggelassen werden.

2. Hauptfenster und Hauptmenü

2.1. Hauptmenü

Alle Funktionen (außer Zoom/Rescale) sind über das Hauptmenü abrufbar.

2.2. Iconleiste

Die wichtigsten Menüpunkte sind auch in der **Iconleiste** unter dem Hauptmenü abrufbar. Verweilt man mit dem Mauszeiger kurz über einem **Icon**, wird seine Funktion angezeigt.

2.3. Grafikfenster

Das Grafikfenster ist immer sichtbar und besteht aus dem **Koordinatensystem** (mit Wellenlänge/ Wellenzahl/ Elektronenvolt als Abszisse und Transmission/ Extinktion/ Extinktionskoeffizient (ϵ)/ $\log(\epsilon)$ als Ordinate), der **Legende** und den geladenen **Spektren**.

Die **Achsen** lassen sich in $[Plot/Optionen] \rightarrow [Achsen]$ umstellen. Die Schriftart der **Achsenbeschriftung** läßt sich in $[Plot/Optionen] \rightarrow [Achsenfont]$, die Schriftart der **Legendenbeschriftung** und **Achsentitel** in $[Plot/Optionen] \rightarrow [Legendenfont]$ verändern. Dauerhaft verändern lassen sie sich über $[Plot/Optionen]/[Konfiguration]$. Die Spektrendarstellung (Farbe, Linienart, Linienstärke) und der jeweilige Legendentext kann in $[Spektren] \rightarrow [Allgemein]$ verändert werden.

Die Maus dient zum **Zoomen**. Bei gedrückter linker Maustaste ($\langle lm \rangle$) lässt sich der rechteckige Zoombereich auswählen. Nach Loslassen der Maus wird der neue Ausschnitt dargestellt. Dabei rastet der Bereich jeweils auf den von der Zoombox nach außen nächstgelegenen Achsen-Tick ein. Die mittlere Maustaste ($\langle mm \rangle$) zeichnet das Grafikfenster neu. Der rechte Mausklick ($\langle rm \rangle$) schaltet die Zoom-Funktion aus (Rescale), die Spektren werden wieder ganz dargestellt.

Die **Legende-Box** läßt sich mit $\langle lm \rangle$ beliebig verschieben. Die Anzeige der Legende kann mit $[Plot/Optionen] \rightarrow [Legende\ ein/aus]$ abgestellt werden.

2.4. Statusleiste

Die Statusleiste am unteren Rand ist dreigeteilt:

- Links wird die aktuelle Spektrenzahl angezeigt.
- Der Mittelteil ist für verschiedene Meldungen vorgesehen.
- Rechts wird ständig die aktuelle Mausposition (x-Achse | y-Achse) angezeigt. Die Einheiten entsprechen der momentanen Wahl der Achseneinheiten.

3. Untermenü [Datei]

Enthält alle Befehle zum Öffnen, Speichern, Drucken, Exportieren von Spektren.

Unterhalb der Menüpunkte ist eine Liste der zuletzt geöffneten oder erzeugten Spekwin32-Dateien (*.spv) zugänglich.

3.1. Menüpunkt [Öffnen]

Dialog zum Einlesen der Spektren. Auswahl mehrerer Dateien auf die für Windows übliche Weise. Während des Einlesens wird der aktuelle Stand des Einlesevorgangs im mittleren Teil der Statusleiste angezeigt. Wenn möglich und bekannt, werden x- und y-Achsentyp der Darstellung entsprechend der zuletzt geöffneten Datei gewählt.

Zurzeit werden folgende Dateiformate erkannt:

***.asc** : • ASCII-Format der Absorptionsspektren des MILTON ROY MR3000 Diodenarray-Absorptionsspektrometers. Konvertierung geschieht dort mit $\langle F1 \rangle + \langle F2 \rangle + \langle F4 \rangle + \langle esc \rangle + \langle esc \rangle + \langle esc \rangle$. Der Ordinatentyp wird automatisch detektiert.
• ASCII-Format der Absorptionsspektren der BECKMAN COULTER DU 600/7000 Absorptionsspektrometer.

***.csv** : ASCII-Format aus verschiedenen Quellen ("csv" = comma separated values):
• Absorptionsspektren des VARIAN CARY 50 -Absorptionsspektrometers (Software: Cary WinUV). Werden dort bei der Messung automatisch erzeugt, wenn in [Setup]/[Reports] der Punkt "Select for ASCII (csv)" und in [Setup]/[Auto Store] der Punkt "Storage On" aktiviert sind. Nachträglich erstellbar mit [Save as ...] + "*.csv". Es werden Transmissions- und Extinktionsspektren eingelesen.
• Absorptionsspektren des Hewlett Packard 8453 -Absorptionsspektrometers
• IR-Spektren des Bio-Rad FTS 3000 MX FTIR-Spektrometers (Software: Varian Resolution Pro)
• Absorptionsspektren des Scinco Neosys 2000 UV-Vis-Spektrometers (Software: Lab Pro Duo)
• Absorptionsspektren der WTW photoLab spectral-Software
• Absorptionsspektren des Thermo Electron Helios Alpha Spectrometers
• von Spekwin32 selbst erzeugte csv-Dateien, Multiformat, beliebig viele Spektren.

***.dat** : Spekwin32-ASCII-Tabellen-Format. Enthält beliebig viele Spektren mit ihrem Legendentext. VORSICHT: y-Werte werden immer als Extinktion eingelesen!!

***.dio** : Speicherformat für Fluoreszenzspektren des von Dr. C. Vielsack aufgebauten NIR-Fluoreszenzspektrometers.

***.dms** : Absorptionsspektrum (Binärdatei) vom Tieftemperatur-Absorptionsspektrometer VARIAN DMS 100 der Arbeitsgruppe Daltrozzo. Dokumentation bei mir.

***.dx** : JCAMP-DX 4.24/5.00-Format von UV/VIS-, Raman- und IR-Spektren. NMR- und MS-Spektren werden nicht eingelesen!! DIFDUP-codierte Spektren werden auch nicht eingelesen. Getestete Perkin Elmer-Software: UVCSS & FLDM (DOS-Software), UV-Winlab & FL-Winlab. Weitere Testspektren waren verfügbar von Bio-Rad DigiLab, Mattson Instruments, Galactic Industries Lab Calc und GRAMS, Sadtler, Jasco HPLC System, NIST Chemistry WebBook, der JCAMP-Homepage von Robert S. McDonald und der JCAMP-Seite von Robert J. Lancashire.

***.fak** : Einfaches ASCII-Format zum Einlesen eigener Wertetabellen: xy-Paare durch Tabulator getrennt, ein Paar pro Zeile, kein Header, x-Werte mit gleicher Schrittweite, Punkt oder Komma als Dezimaltrenner, optionaler Header: steht in der ersten Zeile *wavenumbers* oder *1/cm* oder *wellenzahlen* oder *cm-1* oder *cm⁻¹*, wird als x-Achsentyp Wellenzahlen verwendet, sonst Wellenlängen. Automatische Dialogabfrage der Achsentypen, falls unbekannt.

***.g** : Sammeldatei (UNIX-Format) des Tieftemperatur-Fluoreszenzspektrometers der Arbeitsgruppe Daltrozzo. Dokumentation bei Christian Jost.

***.gdm** : mit GSPEK konvertiertes Absorptionsspektrum (DOS-Datei) vom Tieftemperatur-Absorptionsspektrometer VARIAN DMS 100 der Arbeitsgruppe Daltrozzo. Dokumentation bei Christian Jost.

***.ggg** : Einzelspektrum (UNIX-Datei) des Tieftemperatur-Fluoreszenzspektrometers der Arbeitsgruppe Daltrozzo. Dokumentation bei Christian Jost.

***.gkl** : mit GSPEK konvertiertes Einzelspektrum (DOS-Datei) des Tieftemperatur-Fluoreszenzspektrometers der Arbeitsgruppe Daltrozzo. Dokumentation bei C. Jost.

***.gpo** : mit GSPEK konvertiertes Polarisationsgradspektrum (DOS-Datei) des Tieftemperatur-Fluoreszenzspektrometers der Arbeitsgruppe Daltrozzo. Doku bei Christian Jost.

***.par** : Format der Parameterdatei der Fluoreszenzspektren des AMINCO SPF-500 Absorptionsspektrometers (selbstgeschriebene Software!). Eine gleichnamige Binär-Datei (*.spe) muss sich im gleichen Verzeichnis befinden.

***.prn** : ASCII-Format der Fluoreszenzspektren des CCD-Fluoreszenzspektrometers der Arbeitsgruppe Daltrozzo. Speichern dort als ASCII-1 oder ASCII-XY. Siehe 4.6 zur Korrektur der Spektren.

***.scn** : Binär-Format der Absorptionsspektren der BECKMAN COULTER DU 600/7000-Absorptionsspektrometer.

***.sp** : Binär- und ASCII-Format der Absorptions-, Fluoreszenz- und Ramanspektren der PERKIN ELMER Spektrometer. Getestete Software: UVCSS (DOS-Software), UV-/FL-WinLab. Die Ordinatenwerte der Fluoreszenzspektren werden beim Einlesen durch 250 dividiert!

***.spe** : Binär-Format der Roper Scientific / Princeton Instruments WinSpec/WinView Software (16bit und 32bit). Als x-Achseneinheit möglich sind Wellenlängen, absolute und relative Wellenzahlen (Ramanspektren).

***.spk** : ASCII-Format der Absorptionsspektren des IKS X-DAP Diodenarray-Absorptionsspektrometers.

***.spv** : Eigenformat von Spekwin32. Sammeldatei mit beliebig vielen Spektren. Legendentext und andere Eigenschaften einzelner Spektren sind mit abgespeichert

Format geändert in den Versionen 1.68.1 und 1.69.2 ! Ältere Programmversionen können neuere *.spv nicht einlesen. Siehe auch Kap. 3.2 unten und 3.3 zum Speichern.

3.2. Menüpunkt [Speichern]

Speichert die momentan angezeigten Spektren. Wurde seit Programmstart noch nichts gespeichert, erscheint ein „Speichern“-Dialog zur Eingabe eines Dateinamens. In allen anderen Fällen wird der momentane Inhalt an Spektren (nach Bestätigung) unter dem letzten beim Speichern benutzten Dateinamen abgespeichert.

3.3. Menüpunkt [Speichern als ...]

Speichert die momentan angezeigten Spektren. Es erscheint ein „Speichern“-Dialog zur Eingabe eines Dateinamens und Auswahl des Speicherorts.

Es gibt 11 Dateiformate zur Auswahl beim Abspeichern:

- spv-Dateien zum schnellen Archivieren und Wiedereinlesen in Spekwin32 von Spektren in beliebiger Zusammenstellung
- spc-Dateien zum Speichern einzelner Spektren im weit verbreiteten Format von Galactic
- dx-Dateien zum Speichern einzelner Spektren im international bekannten JCAMP-DX-Format der IUPAC
- dat-Dateien dienen zum Import in Programme wie Origin oder Excel
- csv-Dateien dienen ebenfalls zum Datenimport in Programme wie Origin oder Excel
- gas-Dateien sind spezielle ASCII-Dateien, die außer Jochen niemand braucht
- gif-Dateien zum Abspeichern als Internet-taugliche Grafik, komprimiertes Dateiformat, 256 Farben, 1350x900 Pixel

- bmp-Dateien zum Abspeichern als verlustfreie Pixelgrafik, große Dateien, 1024x768Pixel
- wmf-Dateien zum Abspeichern als frei skalierbare Vektorgrafik mit geringem Speicherbedarf, für Windows-Anwendungen die Methode der Wahl
- tif-Dateien zum Abspeichern als relativ kleine, verlustfrei komprimierte Dateien mit einem Farbraum bis 32bit, besonders zum Druck geeignet. 1350x900 Pixel
- png-Dateien zum Abspeichern als kleine verlustfrei komprimierte Dateien, das Internet-Bildformat der Zukunft. 1350x900 Pixel

Details zu den Dateiformaten:

*.spv	: Beschreibung siehe 3.1 obenoben. Binärdatei, nicht mit Texteditor lesbar. Alle Spektren werden mit ihrem gesamten Wertebereich abgespeichert und mit ihrer grafischen Darstellung (Linienfarbe, -dicke, usw.).
--------------	--

*.spc	: Binär-Format von Thermo Fisher Galactic, Software: GRAMS/32. Quasi-Standard, der von einigen anderen Herstellern benutzt wird. Spektren nur einzeln speicherbar.
--------------	--

*.dx	ASCII-Format des offenen Spektrenstandardformats JCAMP-DX, definiert von der IUPAC. Weit verbreitet, "human readable". Spektren nur einzeln speicherbar.
-------------	--

*.dat	: ASCII-Tabellen-Format. Einzeiliger Header mit Tabulator-getrennten Legendetexten der Spektren. Darunter Tabelle mit Tabulator-getrennten Werten (Dezimaltrenner: Komma). Erste Spalte: Wellenlängen, zweite: entsprechende Wellenzahlen, dann folgen die Spalten mit den Ordinatenwerten. Für die Schrittweite der x-Werte gibt es drei Möglichkeiten: „fest (1nm)“, „variabel (kleinste)“ und „variabel (größte)“. Einstellbar im Konfigurationsdialog unter Dateien/Speichern. Defaultwert ist „variabel (kleinste)“. Es wird nur der im Grafikfenster angezeigte Bereich gespeichert.
--------------	---

*.csv	ASCII-Tabellen-Format, besonders als Datenexport für Excel geeignet, mehrere Spektren möglich, jedes Spektren wird als zwei Spalten aus x,y-Wertepaaren abgespeichert. Die erste Zeile enthält die Legendentexte, die zweite Zeile den Typ der x- und y-Werte.
--------------	--

*.gas	: ASCII-Tabellen-Format für Jochen, zur Benutzung mit der AWK-Scriptsprache
--------------	---

*.gif	: Comuserve-GIF. Komprimiertes Pixelgrafikformat mit 256 Farben, optimal für Liniengrafik. Internet-tauglich.
--------------	---

*.bmp	: Windows-Bitmap. Unkomprimiertes Pixelgrafikformat, gibt sehr große Dateien. Wird von jedem grafikfähigen Programm erkannt.
--------------	--

***.wmf** : Windows-Metafile, Vektorformat. Grafiken im Vektorformat sind beliebig skalierbar. WMF-Dateien können in alle gängigen Textverarbeitungs- und Grafikprogramme importiert werden und sind das Grafikformat der Zwischenablage.

***.png** : Portable Network Graphics, kleine verlustlos komprimierte Pixelgraphik, für Internet.

***.tif** : Tagged Image File Format, verlustlos komprimierte Pixelgraphik, großer Farbraum, zum Drucken.

Hinweise für optimalen Grafikexport:

- Bei Bildschirmen mit hoher Auflösung empfiehlt es sich, das Programmfenster nicht maximiert zu haben, da die Achsen- und Legendenschriftgröße im Verhältnis zur ganzen Grafik sonst etwas klein erscheint.
- Bei Linienbreite 1 (siehe Spektren/allgemein) werden die Spektren als Haarlinien dargestellt. Als Standardwert für den Graphikexport empfiehlt sich Linienbreite 2 oder 3. Bei Linienbreiten >1 erscheinen die Linien im Grafikfenster leider etwas dicker als in der exportierten Grafik.

3.4. Menüpunkt [Speichern für Gnuplot]

Erzeugt zwei Dateien mit dem gleichen Namen: eine Gnuplot-Parameterdatei (*.plt) und eine zweite (*.tat), welche die Spektraldaten enthält. Die Parameterdatei enthält die notwendigen Befehle für Titel, Achsenbeschriftung/ -skalierung, zweite y-Achse (wenn Polarisationsgradspektren enthalten sind), Lage/Inhalt der Legende und **Erzeugung einer EPS-Datei** mit gleichem Namen. Diese Parameter lassen sich vor dem Abspeichern in einem Auswahldialog konfigurieren, dort besteht auch die Möglichkeit zusätzliche Gnuplot-Befehle einzugeben. Damit dieser Menüpunkt funktioniert, müssen folgende (in *spekwin32_install.exe* oder *spekwin32.zip* enthaltene) Parameterdateien im Programmverzeichnis liegen: *gexit.plt*, *ginit.plt*, *ginit2.plt*, *ginit2d.plt*, *pola36.plt*, *polaset.plt*, *postcol.plt*, *postmon.plt*, *wlachse.plt*, *wlachse2.plt*. Getestet mit Gnuplot 3.7 für Windows (32bit).

3.5. Menüpunkt [Grafik kopieren (Zwischenablage)]

Kopiert das aktuelle Grafikfenster in die Zwischenablage. Von dort lässt es sich in Grafik- und Textverarbeitungsprogramme einfügen. Zur Optimierung der Grafiken gelten die gleichen Hinweise wie im Abschnitt 3.3 für das Speichern als Grafik.

Zusätzlicher **Hinweis** für WORD97: Einfügen nicht mit [Bearbeiten]→[Einfügen] oder <STRG+V>, sondern mit [Bearbeiten]→[Inhalte einfügen...]→[Als: Grafik]. Sonst gibt's eventuell Unannehmlichkeiten mit der Skalierung (Grafik anfänglich etwas groß)!

3.6. Menüpunkt [Daten kopieren (Zwischenablage)]

Kopiert die Gesamt-Daten aller geladenen Spektren die Zwischenablage. Von dort lässt es sich in Tabellenkalkulationsprogramme (z. B. MS Excel, Originlab Origin) direkt einfügen.

Besitzen alle Spektren die gleichen x-Werte (Bereich und Schrittweite identisch) haben die exportierten Daten das Spalten-Format x..y..y..y.. (gemeinsame x-Werte), sonst das Spalten-Format x..y..x..y..x..y.. (d. h. jedes Spektrum separat als xy-Wertepaare).

Die erste Zeile beinhaltet die Legendentexte, die zweite Spalten die x- und y-Formate.

3.7. Menüpunkt [Drucken]

Druckt das aktuelle Grafikenfenster. Die installierten Drucker sind wie üblich anwählbar. Zur Optimierung der Grafiken gelten die gleichen Hinweise wie im Abschnitt 3.3 für das Speichern als Grafik. Ist ein PostScript-fähiger Drucker am lokalen FILE-Port installiert, lassen sich auch PS-Dateien erzeugen.

Hinweis: Bedingt durch die Unzahl an möglichen Druckern und Druckertreibern kann nicht für alle Kombinationen ein optimales Druckbild gewährleistet werden. In diesen Fällen wird der Druck eines Word-Dokuments mit eingefügter Grafik oder der WMF-/ GIF-Datei aus einem Grafikprogramm empfohlen.

3.8. Menüpunkt [Beenden]

Beendet das Programm. Nichtgespeicherte Spektren gehen verloren!

Hinweis: Spekwin32 ist ein Programm ohne Netz und doppelten Boden! Deshalb gibt es auch keine UnDo-Funktion. (UnDo ist für Weicheier!)

Kommentar: Trotz dieser im Jahr 2003 geschriebenen Worte könnte sich in naher Zukunft eine Undo-Funktion in Spekwin32 wiederfinden.

4. Untermenü [Spektren]

4.1. Menüpunkt [Allgemein]

Hier lassen sich alle für die Spektrendarstellung wesentlichen Parameter (Linienbreite, -art, -farbe) und der Legendentext verändern. Außerdem ist die Schichtdicke einstellbar, und die Konzentration kann aus den Einwaageparametern berechnet werden.

Alle Anzeigen (und Eingaben) gelten für das momentan im Auswahlfeld (oben) mit seinem Legendentext angezeigte Spektrum! Das aktuell ausgewählte Spektrum wird im Grafikfenster dicker dargestellt.

- **Legendentext:** Im oberen Auswahlfeld lässt sich der Legendentext der einzelnen Spektren verändern durch Eingabe mit der Tastatur. Mit *<Up>* und *<Down>* kann man sich durch die Legendentext-Liste bewegen, gleichfalls mit den *[Zurück]*- und *[Vor]*-Schaltfeldern. Klickt man das Schaltfeld mit dem Dreiecks-Symbol am rechten Rand des oberen Textfensters, so lassen sich alle Spektren in der Liste direkt anwählen. Eingegebene Änderungen werden beim Wechseln des Spektrums automatisch vom Programm aktualisiert. Mit *[Dateiname als Legende]* lässt sich der bestehende Legendentext durch den Dateinamen ersetzen.
Mit *[alle ändern...]* lassen sich alle Legendentexte in einem separaten Fenster bearbeiten. Beim Suchen/Ersetzen dient dort das Zeichen "#" als Wildcard. Es ist dort ebenfalls möglich, alle Legendentexte durch den entsprechenden Dateinamen zu ersetzen.
- **Linienbreite:** Teilfenster. Die Linienbreite kann für jedes Spektrum einzeln festgelegt werden, relativ zur globalen Linienbreite, die über die Menüpunkte *[Linien breiter]* und *[Linien dünner]* eingestellt wird. Zum Export in die Zwischenablage und als Grafik sowie zum Drucken empfiehlt es sich, die Linienbreite eher auf einen Wert von 2 - 5 zu setzen, je nach gewünschter Liniendicke im Druckbild (Probieren geht über Studieren!).
- **Temperatur:** Teilfenster. Hier wird für bestimmte Spektrenarten (*.ggg, *.gdm, *.gkl, *.gpo) die Messtemperatur des aktuellen Spektrums angezeigt. Eingegebene (ganzzahlige) Werte werden beim Wechseln des Spektrums automatisch vom Programm aktualisiert.
- **Wellenlänge:** Teilfenster. Hier wird für bestimmte Spektrenarten (*.sp, *.ggg, *.gdm, *.gkl, *.gpo, *.spe) die Wellenlänge des aktuellen Spektrums angezeigt. Das ist für Fluoreszenzspektren die Anregungswellenlänge und für Erregerspektren die Detektionswellenlänge. Eingegebene (ganzzahlige) Werte werden beim Wechseln des Spektrums automatisch vom Programm aktualisiert.
- **Linientyp:** Teilfenster. Es gibt drei Linienarten. *Solid* steht für durchgehende Linien, *Gestrichelt* und *Gepunktet* sind wohl selbsterklärend. Beliebige Reihenfolgen sind möglich. Änderung für das jeweils im oberen Auswahlfeld angezeigte Spektrum.

- **Linienfarbe:** Die Linienfarbe des im oberen Auswahlfeld angezeigte Spektrums wird in der vertikalen Farbleiste auf der rechten Seite angezeigt. Für die ersten 14 angezeigten Spektren ist die Farbe vorgegeben, dann fängt die Farbreihenfolge wieder von vorne an. Mit dem Schaltfeld [Farbe ändern] lässt sich für jedes Spektrum einzeln die Farbe festlegen. Es können eine Reihe von Grundfarben benutzt werden, oder auch benutzerdefinierte Farben über das Schaltfeld [*Farben definieren >>*].
- **Schichtdicke:** Editierfeld¹. Standardwert ist $d = 1\text{cm}$. Änderung wirkt sich aus bei Darstellung mit ϵ und $\log(\epsilon)$ als Ordinate, sowie bei der Konzentrationsberechnung über den Extinktionskoeffizienten im Menüpunkt [*Konzentration*] (5.9).
- **Konzentration:** Editierfeld. Standardwert ist $c = 0\text{ mol/l}$. Zur Darstellung mit ϵ und $\log(\epsilon)$ als Ordinate muss eine Konzentration $c \neq 0$ eingegeben sein. Sind die drei Editierfelder **Mol.gewicht**, **Einwaage** und **Lösungsmittel** im Teilfenster [*Berechnung der Konzentration*] ausgefüllt, kann mit dem Schaltfeld [*Berechnen*] die Konzentration berechnet und in das Editierfeld **Konzentration** eingesetzt werden.

4.2. Menüpunkt [Information]

Für das im oberen Auswahlfeld gewählte Spektrum werden folgende Eigenschaften angezeigt: Dateipfad, Dateiname, Datum, Beschreibung, Kommentar1, Kommentar2, Spektrentyp, Lösungsmittel, Schichtdicke, Konzentration, Wellenlänge, Temperatur, Start-Wellenlänge, End-Wellenlänge, Schrittweite, Anzahl Werte. Der Text im unteren Fenster ist kopierbar.

4.3. Menüpunkt [Normieren]

Normieren bedeutet hier: Das Maximum des Spektrums wird gleich 1 gesetzt.

Hiermit werden alle Spektren bei ihrem jeweiligen Maximum im momentanen Darstellungsbereich auf 1 normiert. Zur Normierung auf ein bestimmtes Maximum wählt man vorher durch Zoomen mit der Maus den entsprechenden Bereich aus. Die Normierung verändert die Ordinatenwerte der Spektren irreversibel und ist beliebig oft ausführbar.

4.4. Menüpunkt [Grundlinienkorrektur]

Liegt bei einem Spektrum die **Grundlinie** nicht genau bei Null, lässt sich das mit dieser Funktion korrigieren. Nach Aufruf des Menüpunkts wählt man mit der Maus den Bereich, in dem die

¹ Zahlen werden hier wie überall im Programm mit Komma als Dezimaltrenner eingegeben. Besonders große und besonders kleine Zahlen können auch in wissenschaftlicher Notation (z.B.: $0,342E-7$) eingegeben werden.

Grundlinie auf Null gesetzt werden soll. Der Mittelwert der Ordinatenwerte im ausgewählten Bereich wird als Konstante vom Spektrum subtrahiert.

Die Grundlinienkorrektur wird für alle momentan angezeigten Spektren ausgeführt.

4.5. Menüpunkt [Spike-Entfernung]

Erkennt Spikes und interpoliert das Spektrum im Bereich des Spikes. Das restliche Spektrum bleibt unverändert. Spektren ohne Spikes bleiben völlig unverändert. Zu breite Spikes (>5 Stützpunkte) werden nicht erkannt, um sehr schmale Fluoreszenzbanden nicht zu verändern. Im Auswahlfeld wählt man das zu behandelnde Spektrum. Das behandelte Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt

- [*Original löschen*] löscht das Originalspektrum.
- [*alle Spektren behandeln*] entspiket alle Spektren und löscht alle Originalspektren.
- [*rückwärts entspiken*] lässt den Entspike-Vorgang von rechts nach links ablaufen. So können im Normalbetrieb nicht erfasste Spikes teilweise noch entfernt werden.
- [*Legendetext + "entspiket"*] erweitert den Legendetext der entspiketen Spektren um den Zusatz "entspiket".

4.6. Menüpunkt [Korrektur (CCD)]

Dient zur Korrektur der wellenlängenabhängigen Detektorempfindlichkeit von Fluoreszenzspektrometern (bei **unkorrigierten Fluoreszenzspektren**). Mit dem Schaltfeld [*Korrektur laden*] wird die Korrekturkurve (Detektorempfindlichkeit gegen Wellenlänge, im fak-Format) geladen. Im mittleren Auswahlfeld wählt man das zu korrigierende Spektrum. Das korrigierte Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendetext um den Zusatz „korrigiert“ erweitert. Optionen:

- [*Original löschen*] löscht das Originalspektrum.
- [*Alle korrigieren*] korrigiert alle geladenen Spektren und löscht alle Originalspektren.

Hinweis: Für Fluoreszenzspektren des CCD- Fluoreszenzspektrometers der AG Daltrozzo ist „*empfkorr_neu.fak*“ (wird von „*spekwin32_install_de.exe*“ mit entpackt) die Korrekturkurve.

4.7. Menüpunkt [Abspielen]

Die Intensität wird in eine Tonhöhe umgewandelt und von niedrigen nach hohen Wellenlängen über den Lautsprecher ausgegeben. Die Abspielgeschwindigkeit beträgt 50nm / sec, unabhängig von der Auflösung des Spektrums.

Bei richtiger Wahl von Intensität und Wellenlängen lässt sich so auch Musik machen.

4.8. Menüpunkt [Glätten]

Glättet alle momentan geladenen Spektren. Die Stärke der **Glättung** ist auflösungsabhängig. Die geglätteten Spektren werden am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext um den Zusatz „geglättet“ erweitert. Da der Glättvorgang einer „Verschönerung“ der Originaldaten entspricht, ist diese Funktion nur unter Vorbehalt zu benutzen.

Hinweis: Der Glättvorgang wird von einer Verlaufsanzeige im Mittelteil der Statusleiste begleitet, da die Glättung von vielen Spektren hoher Auflösung merkliche Zeit beanspruchen kann.

4.9. Menüpunkt [Peaks finden]

Für das im oberen Auswahlfeld gewählte Spektrum wird eine Wertetabelle der Maxima (im momentanen Darstellungsbereich) im unteren Fenster angezeigt.

Der Text im unteren Fenster ist kopierbar, entweder durch Markieren mit der Maus und Copy&Paste oder mit *[Daten kopieren]*.

4.10. Menüpunkt [Integral]

Nach Aufruf des Menüpunkts wählt man mit der Maus den Bereich, in dem integriert werden soll, dabei sind der linke und rechte Rand der Zoombox die Integralgrenzen. Für jedes Spektrum erscheint ein separates Meldungsfenster, in dem der Integrationsbereich und der Wert des Integrals angegeben werden.

Hinweis: Sind Wellenzahl und Epsilon als Koordinatenachsen ausgewählt, so wird auch die **Oszillatorstärke** ausgegeben. Der Wert für die Oszillatorstärke ist natürlich nur dann sinnvoll, wenn die Absorptionsbande des ersten Übergangs als Integrationsbereich ausgewählt wurde. Siehe Anhang (9.1) für die Berechnung der Oszillatorstärke.

4.11. Menüpunkt [Ausschneiden]

Schneidet aus einem bestimmten Spektrum ein **Teilspektrum** aus. Im mittleren Auswahlfeld wählt man das Spektrum, in den beiden Editierfeldern gibt man die Grenzen ein. Das Teilspektrum wird als neues Spektrum am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext um den Vorsatz „Teilspektrum: “ erweitert, wenn die Option *[Zusatz "Teilspektrum: "]* aktiviert ist. Die eingegebenen Grenzen werden beibehalten, solange das Programm läuft.

- *[alle Spektren eines Typs]*: alle Spektren eines Typs werden auf einmal beschnitten.
- *[Original(e) löschen]*: die ausgewählten Original-Spektren werden gelöscht.

4.12. Menüpunkt [Sortieren]

Ermöglicht es, die Reihenfolge der geladenen Spektren zu verändern. Im linken Fenster werden alle Spektren angezeigt, hier ist eine manuelle Sortierung möglich. Mit der linken Maustaste werden die zu verschiebenden Spektren markiert (nicht zusammenhängende bei gedrückter SHIFT-Taste), mit der rechten Maustaste werden die markierten Spektren verschoben. Dabei landen alle markierten Spektren oberhalb des mit der rechten Maustaste ausgewählten Spektrums. Ist die Option *[automatisch]* aktiviert, können alle Spektren nach einem von drei Kriterien vor- oder rückwärts sortiert werden:

<Alphabetisch> ist auf alle Spektren anwendbar,

<Temperatur> momentan auf Spektren vom Typ *.gdm, *.dms, *.ggg, *.gkl und *.gpo und

<Wellenlänge> auf Spektren des Typs *.prn, *.ggg, *.gkl, *.gpo, sowie natürlich auf alle aus diesen Spektren erzeugte Spektren (z. B. Gesamtspektren), sowie seit Version 1.68.5 auch für *.sp-Spektren, sofern sie von PE Fluoreszenzspektrometern stammen. Für *.spe-Spektren (Winspec/Winview) wird die Laser-Wellenlänge angezeigt, falls es sich um Ramanspektren handelt.

4.13. Untermenü [Löschen]

4.13.1. Menüpunkt [Alle]

Alle geladenen Spektren werden gelöscht. Vor dem **Löschen** erscheint ein Bestätigungsfenster, hier lässt sich der Vorgang abbrechen.

4.13.2. Menüpunkt [Auswahl]

Erlaubt das Löschen einzelner oder mehrerer Spektren. Im linken Editierfeld steht die Spektrenliste, im rechten die Spektren, die nach Betätigung von *[OK]* gelöscht werden. Einzelne Spektren und aufeinanderfolgende Spektren können mit *<lm>* ausgewählt werden, nicht zusammenhängende Spektren mit *<Shift>+<lm>*. Die ausgewählten Spektren werden mit dem Schaltfeld *[>]* ins rechte Editierfeld gebracht. Das Schaltfeld *[>>]* bringt alle Spektren nach rechts. Mit den Schaltfeldern *[<]* und *[<<]* lässt sich die Auswahl entsprechend rückgängig machen. Ist die Option *[alle Spektren eines Typs löschen]* aktiviert, können alle Spektren eines bestimmten Typs auf einmal gelöscht werden.

4.13.3. Menüpunkt [Letztes]

Das letzte Spektrum in der Spektrenliste wird gelöscht.

5. Untermenü [Rechnen]

5.1. Menüpunkt [Addieren]

Die Ordinatenwerte der in den beiden Auswahlfeldern gewählten Spektren werden **addiert**. Mit der Option [alle Spektren] wird die Rechenoperation auf alle Spektren ausgeführt, wobei das im unteren Feld ausgewählte Spektrum als Argument benutzt wird. Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext lautet „Addition“. Mit der Option [Legende beibehalten] bleibt der Legendentext des Originalspektrums erhalten. Die x-Achsen-Schrittweite wird vom oberen Spektrum übernommen, der Wellenlängenbereich durch den Überlapp der beiden Spektren begrenzt.

5.2. Menüpunkt [Subtrahieren]

Die Ordinatenwerte des im unteren Auswahlfeld gewählten Spektrums werden von denen des Spektrums im oberen Auswahlfeld **subtrahiert**. Mit der Option [alle Spektren] wird die Rechenoperation auf alle Spektren ausgeführt, wobei das im unteren Feld ausgewählte Spektrum als Argument benutzt wird. Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext lautet „Subtraktion“. Mit der Option [Legende beibehalten] bleibt der Legendentext des Originalspektrums erhalten. Die x-Achsen-Schrittweite wird vom oberen Spektrum übernommen, der Wellenlängenbereich durch den Überlapp der beiden Spektren begrenzt.

5.3. Menüpunkt [Multiplizieren]

Die Ordinatenwerte der in den beiden Auswahlfeldern gewählten Spektren werden **multipliziert**. Mit der Option [alle Spektren] wird die Rechenoperation auf alle Spektren ausgeführt, wobei das im unteren Feld ausgewählte Spektrum als Argument benutzt wird. Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext lautet „Multiplikation“. Mit der Option [Legende beibehalten] bleibt der Legendentext des Originalspektrums erhalten. Die x-Achsen-Schrittweite wird vom oberen Spektrum übernommen, der Wellenlängenbereich durch den Überlapp der beiden Spektren begrenzt.

5.4. Menüpunkt [Dividieren]

Die Ordinatenwerte des im oberen Auswahlfeld gewählten Spektrums werden durch die des Spektrums im unteren Auswahlfeld **dividiert**. Mit der Option [alle Spektren] wird die Rechenoperation auf alle Spektren ausgeführt, wobei das im unteren Feld ausgewählte Spektrum als Argument benutzt wird. Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext lautet „Division“. Mit der Option [Legende beibehalten] bleibt der Legendentext des Originalspektrums erhalten. Die x-Achsen-Schrittweite wird vom oberen Spektrum übernommen, der Wellenlängenbereich durch den Überlapp der beiden Spektren begrenzt.

5.5. Menüpunkt [Spektren mitteln]

Die Ordinatenwerte aller ausgewählten Spektren (linke Maustaste) werden gemittelt. Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext kann im unteren Editierfeld eingegeben werden.

5.6. Menüpunkt [Y Konstanten]

Die Ordinatenwerte des im oberen Auswahlfeld gewählten Spektrums werden mit einer im rechten Editierfeld einzugebenden Zahl z je nach der gewählten Grundrechenart verrechnet. Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext entsprechend der gewählten Grundrechenart um dem Zusatz $+z$, $-z$, $\times z$ oder $/z$ erweitert, wenn die Option [Zusatz "..."] aktiviert ist.

- [alle Spektren eines Typs]: alle Spektren eines Typs werden auf einmal beschnitten.
- [Original(e) löschen]: die ausgewählten Original-Spektren werden gelöscht.

Hinweis: Zur Darstellung eines Fluoreszenzspektrums in der Wellenzahlskala werden dessen Ordinatenwerte zuvor mit λ^2 bzw. λ^4 multipliziert. Dies läßt sich mit diesem Menüpunkt erreichen, indem man Multiplikation [*] als Rechenart auswählt und $\times 2$ bzw. $\times 4$ ins rechte Editierfeld eingibt.

Allgemein kann man durch Eingabe von x^n ($n \in \mathbb{N}$) ein Spektrum mit λ^n (bzw. $\tilde{\nu}^n$ in der Wellenzahlskala) multiplizieren oder auch durch λ^n dividieren, wenn [/] als Rechenart gewählt ist.

5.7. Menüpunkt [X Konstanten]

Je nach gewählter Grundrechenart lassen sich hiermit die Spektren in der x-Achse nach rechts/links verschieben, strecken und stauchen. Dabei werden die Stützpunkte des Spektrums auf der x-Achse mit der im rechten Editierfeld eingegebenen Zahl verrechnet. Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext entsprechend der gewählten Grundrechenart um den Zusatz $+z$, $-z$, $\times z$ oder $/z$ erweitert.

Hinweis: Nur möglich, wenn der aktuelle Abszissentyp mit dem des ausgewählten Spektrums übereinstimmt.

Hinweis: Diese Funktion sollte nur benutzt werden, wenn man weiß, was man tut, da die Spektren auf eine normalerweise ungebräuchliche Weise verändert werden.

5.8. Menüpunkt [Ableitung]

Die 1., 2., 3. oder 4. Ableitung des im Auswahlfeld gewählten Spektrums wird berechnet. Ist die Option [alle Spektren ableiten] aktiviert, werden alle Spektren auf einmal abgeleitet.

Ist die Option *[Original(e) löschen]* aktiviert, werden/wird die/das ausgewählte(n) Original-Spektren/Spektrum gelöscht.

Das neue Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext um dem Zusatz "x. Ableitung" erweitert.

Noch höhere Ableitungen als die 4. Ableitung lassen sich durch wiederholtes Anwenden auf abgeleitete Spektren erreichen.

Hinweis: Es empfiehlt sich, auf verrauschte Spektren vor der Ableitung die Glättoption zu aktivieren. Bei höheren Ableitungen ist dies unbedingt notwendig.

5.9. Menüpunkt [Konzentration]

Diese Funktion ist neben dem Menüpunkt *[Allgemein]* (4.1) die zweite Möglichkeit, einem Spektrum eine Konzentration zuzuweisen. Hierbei muss der Extinktionskoeffizient bekannt sein. Die Konzentrationsberechnung erfolgt nach **Lambert-Beer** (Gleichung(6)).

Alle Werte in den Editierfeldern gelten jeweils für das im oberen Auswahlfeld angezeigte Spektrum. Sind die drei Editierfelder **Extinktionskoeffizient**, **Wellenlänge** und **Schichtdicke** ausgefüllt, kann mit dem Schaltfeld *[Berechnen]* die Konzentration berechnet und in das Editierfeld **Konzentration** eingesetzt werden. Mit dem Schaltfeld *[Peak einsetzen]* lässt sich λ_{\max} des aktuellen Spektrums automatisch in das Editierfeld **Wellenlänge** einsetzen.

Hinweis: Um die Konzentration einem Spektrum direkt zuzuweisen, gibt man dies im Menüpunkt *[Allgemein]* (4.1) ins Editierfeld **Konzentration** ein.

5.10. Menüpunkt [effekt. Extinktion]

In der Fluoreszenzquantenausbeute-Bestimmung ist es wichtig, den Anteil des vom Farbstoff absorbierten Anregungslichts zu kennen. Da dieses immer (außer bei Laserlicht) eine gewisse Bandbreite (der Bandpaß) besitzt, muss man die über diese Bandbreite gemittelte Extinktion, die **effektive Extinktion**, ermitteln. Dies geschieht nach der Formel:

$$E = \frac{\int E(\lambda)I(\lambda)d\lambda}{\int I(\lambda)d\lambda} \quad (1)$$

mit $E(\lambda)$: Absorptionsspektrum

$I(\lambda)$: Bandpaß des Anregungslichts

Der Bandpaß ist gewöhnlich eine Dreiecksfunktion, die durch die zentrale Wellenlänge und die Halbwertsbreite charakterisiert wird.

5.11. Menüpunkt [Schwerpunkt]

Für das im Auswahlfeld ausgewählte Spektrum wird der **Schwerpunkt** berechnet, d. h. den mit den Ordinatenwerten (Extinktionen $E(\lambda)$ bzw. $E(\tilde{\nu})$) gewichteten Mittelwert $\langle \lambda \rangle$ bzw. $\langle \tilde{\nu} \rangle$ der Abszissenwerte nach der Gleichung:

$$\langle \lambda \rangle = \frac{\int \lambda E(\lambda) d\lambda}{\int E(\lambda) d\lambda} \quad \text{bzw.} \quad \langle \tilde{\nu} \rangle = \frac{\int \tilde{\nu} E(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}}{\int E(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}} \quad (2)$$

Als Integralgrenzen werden Anfang und Ende der momentan angezeigten x-Achse verwendet. Der berechnete Schwerpunkt wird im mittleren Teil der Statusleiste angezeigt.

Angewandt auf Fluoreszenzspektren wird dieser Wert bei der Fluoreszenzquantenausbeutebestimmung in der Thermal-Lens-Spektroskopie benötigt.

Hinweis: Der Schwerpunkt in der Wellenlängenskala entspricht nicht dem Kehrwert des Schwerpunkts in der Wellenzahlskala: $\langle \lambda \rangle \neq \langle \tilde{\nu} \rangle^{-1}$!

5.12. Menüpunkt [Transmission/Reflektion]

Für die Berechnung von Transmissions- bzw. Reflektionsspektren aus den Rohdaten (Intensitätsspektren). Die Berechnung erfolgt nach der Gleichung $T = I/I_0$

Das Proben- und das Referenzspektrum werden in den beiden Auswahlfenstern festgelegt. Der Legendentext des erzeugten Spektrums besteht aus den Titeln der beiden Spektren und dem Vorsatz "Transmission" bzw. "Reflektion" je nach Auswahl.

5.13. Menüpunkt [Schichtdicke]

Für die Bestimmung von Schichtdicken einlagiger Schichten mit Weißlicht-Reflektionsspektren (durch Ausnutzung der Interferenzlöschung).

Für das im Auswahlfeld ausgewählte Spektrum wird die Schichtdicke berechnet. Dabei muss der Brechungsindex der Schicht und der Einfallswinkel des reflektierten Weißlichts (senkrechte Beleuchtung entspricht 0°) eingegeben werden. Der für die Auswertung benutzte Wellenlängenbereich kann verändert werden.

Im Ergebnisfenster werden die Input-Daten und die Anzahl der für die Auswertung gefundenen Maxima angezeigt, zusammen mit der errechneten Schichtdicke und einem Maß für die Zuverlässigkeit. Übersteigt der StDev-Wert einige Prozent der Schichtdicke, sollte das Ergebnis der Berechnung verworfen werden.

Mit der Option [Ergebnis kopieren] kann der Inhalt des Ergebnisfensters in die Zwischenablage kopiert werden. Mit jeder Betätigung von [Berechnen] werden die errechneten Werte für Schichtdicke und StDev ebenfalls in die Zwischenablage kopiert.

5.14. Menüpunkt [Polarisationsgrad/Gesamtspektrum]

Hat man polarisationsabhängig gemessene Fluoreszenz- und Erregerspektren zu verarbeiten, so muss oft ein **Polarisationsgradspektrum** und ein **Gesamtspektrum** berechnet werden.

Berechnet werden sie aus zwei Spektren mit jeweils verschiedener Polarisatorstellung nach den Gleichungen:

$$P = \frac{I_y - I_x}{I_y + I_x} \quad (3)$$

$$G = I_y + 2 \cdot I_x \quad (4)$$

mit **G : Gesamtspektrum**

P : Polarisationsgrad

I_x : Fluoreszenzintensität mit senkrecht stehenden Polarisatoren

I_y : Fluoreszenzintensität mit parallel stehenden Polarisatoren.

Die Spektren werden in den beiden Auswahl Fenstern festgelegt, das berechnete Spektrum wird am Ende der Spektrenliste angefügt, der Legendentext lautet „Gesamtspektrum“ oder „Polarisationsgrad“. Mit der Option *[alle]* lassen sich die Gesamt- bzw. Polarisationsgradspektren aller geladenen Spektren (nur *.ggg-Typ) auf einmal berechnen.

5.15. Menüpunkt [FQ]

Dieser Menüpunkt ist recht aufwendig in der Beschreibung und wird deshalb hier nicht erklärt. Bei Interesse kann man sich direkt an mich wenden.

6. Untermenü [2D/TT]

6.1. Menüpunkt [Erregerintensität korrigieren]

Dient zur Korrektur der Anregungsintensität bei der jeweiligen Anregungswellenlänge einer Serie von Fluoreszenzspektren.

Mit dem Schaltfeld *[Lampenspektrum laden]* wird die Korrekturkurve (Intensität des Anregungslichts gegen Wellenlänge, im fak-Format) geladen. Mit den beiden Auswahl Feldern wählt man die zu korrigierenden Fluoreszenzspektren. Die korrigierten Spektren ersetzen die Originalspektren, der Legendentext wird jeweils um den Zusatz "Erregerintensität korrigiert" erweitert.

Hinweis: Die Anregungswellenlänge kann im Menüpunkt [Allgemein] für jedes Spektrum separat eingegeben und zugeordnet werden.

6.2. Menüpunkt [2D-Spektrum (EEM)]

Zeigt eine Serie von Fluoreszenz- oder Anregungsspektren als zweidimensionale Darstellung an. Die Spektren sollten mit einer Wellenlänge versehen sein und die Anregungsintensität korrigiert sein (siehe oben). Die Anzeige funktioniert jedoch mit allen Spektren.

Im Anzeigefeld links unten wird ständig die aktuelle Mausposition angezeigt (Anregung, Fluoreszenz, Intensität). Auf der rechten Seite gibt es verschiedene Darstellungsoptionen. Die Grafik ist immer so orientiert, dass die Anregung in x-Richtung und die Emission in y-Richtung verläuft.

Hinweis: Die Grafik lässt sich zurzeit weder abspeichern noch ausdrucken, Achsen gibt es keine.

6.3. Menüpunkt [Erregerspektren berechnen]

Dient zur Berechnung einer Serie von Anregungsspektren aus einer Serie von Fluoreszenzspektren. Die Fluoreszenzspektren müssen mit einer Wellenlänge versehen sein und die Anregungsintensität sollte korrigiert sein (siehe oben).

In die Editierfelder gibt man Schrittweite und den Bereich der Detektionswellenlängen für die Erregerspektren ein. Ist die Option *[Fluoreszenzspektren löschen]* aktiviert, werden die Fluoreszenzspektren gelöscht.

6.4. Menüpunkt [TT-Quantenausbeute]

Eine Erklärung würde den Rahmen dieses Manual sprengen.

7. Untermenü [GaussFit]

Diese Funktionen wurden fast unverändert aus dem Vorläuferprogramm übernommen und sind funktionsfähig, wenn auch nicht immer zuverlässig. Hiermit kann man mit Scharen von Gaussförmigen Kurven ein Spektrum simulieren und dieses auch fitten. Als x-Achse wird die Wellenzahlkala benötigt.

7.1. Menüpunkt [Manuell]

Hier geschieht die eigentliche Arbeit. Beschreibung in einer späteren Version des Manuals...

7.2. Menüpunkt [Öffnen]

Öffnet einen abgespeicherten Datensatz von Gauss-Spektren (*.gss) .

7.3. Menüpunkt [Speichern]

Speichert den aktuellen Datensatz an Gauss-Spektren.

8. Untermenü [Plot/Optionen]

8.1. Menüpunkt [Konfiguration]

Hiermit können viele Programmeinstellungen geändert und gespeichert werden. Die Einstellungen werden im Programmordner in der Datei spekwin32.ini gespeichert. Beim Programmstart werden diese Einstellungen wieder eingelesen.

Besteht keine Schreibberechtigung, werden die Einstellungen zwar gelesen, können aber nicht gespeichert werden. Es empfiehlt sich dann, das Programm im eigenen User-Verzeichnis oder einem anderen Verzeichnis mit Schreibberechtigung abzulegen.

8.2. Menüpunkt [Achsen]

Erlaubt die Konvertierung der Koordinatenachsen. Die Abszisse lässt sich als **Wellenlängen-** oder **Wellenzahl**skala darstellen. Wellenzahlen sind proportional zur Energie. Dabei gilt:

$$\lambda = \frac{10^7}{\tilde{\nu}} \quad \text{und} \quad \tilde{\nu} = \frac{10^7}{\lambda} \quad (5)$$

wenn als Einheiten nm und cm^{-1} gewählt wurden. Zusätzlich ist die Darstellung in **Elektronenvolt** (eV) möglich. Dabei gilt: $1\text{eV}=8065,5\text{cm}^{-1}$. Die Grenzen der Abszisse lassen sich auch von Hand im Teilfenster [*Grenzen*] festlegen.

Die Ordinate lässt sich als **Transmission T**, **Extinktion E**, **Extinktionskoeffizient ϵ** oder **$\log \epsilon$** darstellen. Für die Umrechnung gelten:

$$E = -\log T \quad \text{und} \quad E = \epsilon cd \quad (6)$$

Die ϵ -Darstellung und $\log \epsilon$ -Darstellung ist nur möglich, wenn dem entsprechenden Spektrum eine Konzentration zugewiesen wurde. Dies kann im Menüpunkt [*Allgemein*] (4.1) oder im Menüpunkt [*Konzentration*] (5.9) geschehen. Zusätzlich werden die Ordinatentypen "Reflektivität" (entspricht Transmission) und "relative Intensität" (entspricht Extinktion) erkannt und gehandhabt.

Wenn möglich und bekannt, werden x- und y-Achsentyp entsprechend der zuletzt geöffneten Datei automatisch ausgewählt.

Die **Achsentitel** können jeweils mit der Option [*Beschriftung*] abgeschaltet werden. Eine individuelle Achsenbeschriftung kann jeweils mit dem Editierfeld [*andere Beschriftung*] erreicht werden. In der Wellenzahlskala ist es manchmal sinnvoll, weniger x-Achsen-Ticks zu beschriften. Dies geschieht mit der Option [*Jeden zweiten Tic*].

8.3. Menüpunkt [Achsenfont]

Hiermit kann die Beschriftung der Achsen-Ticks (beide Achsen) formatiert werden. Schriftart, -schnitt, -grad und -farbe lassen sich verändern.

8.4. Menüpunkt [Legendenfont]

Hiermit können die Achsentitel (beide Achsen) und der Legendentext formatiert werden. Schriftart, -schnitt, -grad und -farbe lassen sich verändern.

Hinweis: Wird der Schriftgrad extrem groß gewählt, können sich Achsentitel und -beschriftung teilweise überlappen.

8.5. Menüpunkt [Legende ein/aus]

Blendet die Legende aus. Ein zweiter Aufruf der Funktion macht dies wieder rückgängig.

8.6. Menüpunkt [Gitter ein/aus]

Einblenden eines Gitters (in Verlängerung der Achsenticks). Ein zweiter Aufruf der Funktion macht dies wieder rückgängig

8.7. Menüpunkt [zweite x-Achse ein/aus]

Am oberen Rand des Koordinatensystems wird eine zweite, reziproke x-Achse eingeblendet. Ein zweiter Aufruf der Funktion macht dies wieder rückgängig.

8.8. Menüpunkt [Punkte/Linien]

Statt der normalen Darstellung mit durchgehenden Linien werden die Spektren als Punkte dargestellt. Ein zweiter Aufruf der Funktion macht dies wieder rückgängig.

8.9. Menüpunkt [x-Achse umdrehen]

Die Spektren werden in x-Richtung in umgekehrter Richtung dargestellt. Gilt nur für die Darstellung als Grafik, Daten werden immer in Default-Richtung abgespeichert.

Ein zweiter Aufruf der Funktion macht dies wieder rückgängig.

8.10. Menüpunkt [Standard-Linienarten]

Setzt für alle Spektren die Farbe auf Standardabfolge, Linienbreiten auf 1 und Linienart auf "solid".

8.11. Menüpunkt [Linien breiter]

Die Linienbreite aller Spektren wird jeweils um eins erhöht. Werte von 1 – 7 möglich.

8.12. Menüpunkt [Linien dünner]

Die Linienbreite aller Spektren wird um jeweils eins erniedrigt. Werte von 1 – 7 möglich.

8.13. Menüpunkt [Alle Schwarz]

Die Linienfarbe aller Spektren wird auf „Schwarz“ gesetzt. Ein Aufruf des Menüpunkts [*Allgemein*] macht dies wieder rückgängig.

8.14. Menüpunkt [Linienarten]

Die Linienarten der Spektren werden so verändert, dass sich „Solid“, „Gestrichelt“ und „Gepunktet“ abwechseln. Ein Aufruf des Menüpunkts [*Allgemein*] macht dies wieder rückgängig.

8.15. Menüpunkt [Werteleser]

Für das im Auswahlfenster gewählte Spektrum erscheint ein kleines Anzeigefenster, in dem fortwährend die x- und y-Werte des in x-Richtung der Mausposition am nächsten liegenden Stützpunkts angezeigt werden. Das Schaltfeld [*Abort*] schließt das Anzeigefenster.

8.16. Menüpunkt [Hintergrundfarbe]

Hiermit lässt sich die Hintergrundfarbe des Grafikfensters verändern. Sie wird nicht mit exportiert, gespeichert oder gedruckt, der Hintergrund bleibt transparent.

9. Anhang

9.1. Berechnung der Oszillatorstärke f

$$f = \frac{4\epsilon_0 m_e c_0^2 \ln 10}{e^2 N_A} \int_{s_0 \rightarrow s_1} \epsilon(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu} = 4,319 \times 10^{-9} \frac{\text{mol} \cdot \text{cm}^2}{\text{l}} \int_{s_0 \rightarrow s_1} \epsilon(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu} \quad (7)$$