

# Spekwin32

*Vollständige  
Dokumentation*



Software: Version 1.72  
Dokumentation: Version 3.2

© 2015 Dr. Friedrich Menges  
D-83471 Berchtesgaden  
spekwin32@effemm2.de  
[www.effemm2.de/spekwin/](http://www.effemm2.de/spekwin/)

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>1. Allgemeine Beschreibung .....</b>	<b>1</b>
1.1. Historisches .....	1
1.2. Beschreibung .....	1
1.3. Systemvoraussetzungen/Installation .....	2
1.4. Nutzungsbedingungen .....	2
1.5. Zitierung .....	2
<b>2. Hauptfenster und Hauptmenü .....</b>	<b>3</b>
2.1. Hauptmenü .....	3
2.2. Iconleiste .....	3
2.3. Grafikkfenster .....	3
2.4. Statusleiste .....	3
<b>3. Untermenü [Datei] .....</b>	<b>4</b>
3.1. Menüpunkt [Öffnen] .....	4
3.2. Menüpunkt [Öffnen: unbekannte Binärdatei] .....	7
3.3. Menüpunkt [Daten einfügen (Zwischenablage)] .....	7
3.4. Menüpunkt [Speichern] .....	7
3.5. Menüpunkt [Daten speichern als ...] .....	8
3.6. Menüpunkt [Speichern als RRUFF ...] .....	9
3.7. Menüpunkt [Batch-Datenexport] .....	9
3.8. Menüpunkt [Grafik speichern als] .....	10
3.9. Menüpunkt [Speichern für Gnuplot] .....	11
3.10. Menüpunkt [Daten kopieren (Zwischenablage)] .....	11
3.11. Menüpunkt [Grafik kopieren (Zwischenablage)] .....	11
3.12. Menüpunkt [Drucken] .....	11
3.13. Menüpunkt [Beenden] .....	12
<b>4. Untermenü [Spektren] .....</b>	<b>12</b>
4.1. Menüpunkt [Allgemein] .....	12
4.2. Menüpunkt [Information] .....	13
4.3. Menüpunkt [Normieren] .....	14
4.4. Menüpunkt [Grundlinienkorrektur] .....	14
4.5. Menüpunkt [Grundlinienkorrektur, interaktiv] .....	14
4.6. Menüpunkt [Spike-Entfernung] .....	15
4.7. Menüpunkt [Abspielen] .....	15
4.8. Menüpunkt [Glätten] .....	15
4.9. Menüpunkt [erweitertes Glätten] .....	16
4.10. Menüpunkt [Peaks & Bandbreiten] .....	16
4.11. Menüpunkt [Integral & Mittelwert] .....	16
4.12. Menüpunkt [Ausschneiden] .....	17

4.13. Menüpunkt [Sortieren] .....	17
4.14. Untermenü [Schließen] .....	17
4.14.1. Menüpunkt [Alle] .....	17
4.14.2. Menüpunkt [Auswahl] .....	18
4.14.3. Menüpunkt [Letztes] .....	18
<b>5. Untermenü [Rechnen] .....</b>	<b>18</b>
5.1. Menüpunkt [Addieren] .....	18
5.2. Menüpunkt [Subtrahieren] .....	18
5.3. Menüpunkt [Multiplizieren] .....	18
5.4. Menüpunkt [Dividieren] .....	19
5.5. Menüpunkt [Spektren mitteln] .....	19
5.6. Menüpunkt [Y Konstanten] .....	19
5.7. Menüpunkt [X Konstanten] .....	20
5.8. Menüpunkt [Ableitung] .....	20
5.9. Menüpunkt [Transmission/Reflektion] .....	20
5.10. Menüpunkt [Polarisationsgrad/Gesamtspektrum] .....	20
5.11. Menüpunkt[Raman Spektrum] .....	21
5.12. Menüpunkt [Konzentration] .....	21
5.13. Menüpunkt [effekt. Extinktion] .....	21
5.14. Menüpunkt [Schwerpunkt] .....	22
5.15. Menüpunkt [Schichtdicke] .....	22
5.16. Menüpunkt [FQ] .....	23
5.17. Menüpunkt [IT-Quantenausbeute] .....	23
<b>6. Untermenü [2D/TT] .....</b>	<b>23</b>
6.1. Menüpunkt [Emission: Sensitivitätskorrektur] .....	23
6.2. Menüpunkt [Anregungswellenlänge zuweisen] .....	23
6.3. Menüpunkt [Anregungsintensität korrigieren] .....	24
6.4. Menüpunkt [Rayleigh/ Raman-Streupeaks entfernen] .....	24
6.5. Menüpunkt [Blank-EEM Datensatz subtrahieren] .....	25
6.6. Menüpunkt [2D-Spektrum (EEM)] .....	25
6.7. Menüpunkt [Anregungsspektren berechnen] .....	25
<b>7. Untermenü [GaussFit] .....</b>	<b>26</b>
7.1. Menüpunkt [Manuell] .....	26
7.2. Menüpunkt [Öffnen] .....	26
7.3. Menüpunkt [Speichern] .....	26
<b>8. Untermenü [Plot/Optionen] .....</b>	<b>26</b>
8.1. Menüpunkt [Konfiguration] .....	26
8.2. Menüpunkt [Peak Label aktivieren] .....	26
8.3. Menüpunkt [Spektroskop-Ansicht] .....	27
8.4. Menüpunkt [Achsen] .....	28

8.5. Menüpunkt [Achsenfont] .....	28
8.6. Menüpunkt [Legendenfont] .....	28
8.7. Menüpunkt [Legende ein/aus] .....	29
8.8. Menüpunkt [Gitter ein/aus] .....	29
8.9. Menüpunkt [zweite x-Achse ein/aus] .....	29
8.10. Menüpunkt [Punkte/Linien] .....	29
8.11. Menüpunkt [x-Achse umdrehen] .....	29
8.12. Menüpunkt [Standard-Linienarten] .....	29
8.13. Menüpunkt [Linien breiter] .....	29
8.14. Menüpunkt [Linien dünner] .....	29
8.15. Menüpunkt [Alle Schwarz] .....	29
8.16. Menüpunkt [Linienarten] .....	30
8.17. Menüpunkt [Werteleser] .....	30
8.18. Menüpunkt [Hintergrundfarbe] .....	30

# 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. Daltrozzo 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. Ein großer Teil der Arbeiten an Spekwin32 fand während meiner Promotionszeit von 2000-2005 in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. E. Daltrozzo statt. Seit 2010 sind viele neue Funktionen entstanden.

## 1.2. Beschreibung

Ein Hauptziel des Programms ist die einheitliche Darstellung von Spektren aus verschiedenen Quellen. Zurzeit können 37 verschiedene Dateiformate eingelesen werden. Diese entstammen vielen kommerziellen sowie in der Arbeitsgruppe Daltrozzo selbst gebauten Spektrometern. Durch Kopieren&Einfügen über die Zwischenablage können (beinahe) beliebig formatierte Spektraldaten dargestellt werden.

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

Für die Fluoreszenzspektroskopie wichtig sind die Berechnung von Polarisationsgradspektrum, Fluoreszenzschwerpunkt und Fluoreszenzquantenausbeute, Korrektur der Detektionsempfindlichkeit für Emissionsspektren sowie die Korrektur der Anregungsintensität von Fluoreszenzspektren, Entfernung von Rayleigh- und Raman-Streupeaks, die Berechnung von Erregerspektren aus zweidimensionalen Fluoreszenzspektren und die Darstellung von 2D-Spektren (EEMs) aus Fluoreszenz- oder Erregerspektren. Die EEM-Funktionen sind hilfreich für die Vorbehandlung von Daten für chemometrische Analysen.

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 könne auch in zwei allgemein verbreiteten Dateiformaten exportiert werden: JCAMP-DX (\*.dx) und THERMO Galactic/GRAMS (\*.spc). Eine Batchexportfunktion erlaubt die bequeme Konvertierung aller erkannten Dateiformate in drei Formaten (dx, spc, csv). 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 Win XP/Vista/7/8.1/ 10. Die Anforderungen an den Rechner sind minimal. Die Installationsdatei enthält die deutsche Vollversion inklusive HTML-Manual. Bitte mit Admin-Rechten installieren, ansonsten funktioniert das Einlesen von spc-Spektren nicht.

### 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 über MyCommerce/ShareIt abgewickelt, eine Einzel-Lizenz kostet 210€ netto, für den Erwerb mehrerer Lizenzen gibt es 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 nicht gestattet, das Programm Spekwin32 zu ändern, 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 1.72.0, 2015,  
<http://www.ffmpeg2.de/spekwin/>*

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

Einige 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/ RamanShift/Elektronenvolt als Abszisse und Transmission/ Extinktion/ Extinktionskoeffizient ( $\epsilon$ )/  $\log(\epsilon)$  als Ordinate), der **Legende** und den geladenen **Spektren**. Ohne geladenes Spektrum bleiben die Achsen unbeschriftet.

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. Es werden folgende Dateiformate erkannt:

---

<b>*.abs</b>	ASCII-Formate der StellarNet SpectraWiz –Software
<b>*.trm</b>	abs - Absorption
<b>*.ssm</b>	.trm - Transmission
<b>*.irr</b>	.ssm - Scope Modus
<b>*.lib</b>	.irr - Irradiance Modus (beliebige Einheit, von Watts bis Candela) .lib - library Datei für LIBS und Raman

---

<b>*.asc</b>	: <ul style="list-style-type: none"><li>• ASCII-Format der Absorptionsspektren des MILTON ROY MR3000 Diodenarray-Absorptionsspektrometers. Konvertierung geschieht dort mit <math>\langle F1 \rangle + \langle F2 \rangle + \langle F4 \rangle + \langle esc \rangle + \langle esc \rangle + \langle esc \rangle</math>. Der Ordinatentyp wird automatisch detektiert.</li><li>• ASCII-Format der Absorptionsspektren der BECKMAN COULTER DU 600/7000 Absorptionsspektrometer.</li><li>• ASCII-Format der USGS Spektraldatenbank.</li></ul>
--------------	---

---

<b>*.csv</b>	: ASCII-Format aus verschiedenen Quellen ("csv" = comma separated values): <ul style="list-style-type: none"><li>• 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.</li><li>• Absorptionsspektren des Hewlett Packard 8453 -Absorptionsspektrometers</li><li>• IR-Spektren des Bio-Rad FTS 3000 MX FTIR-Spektrometers (Software: Varian Resolution Pro)</li><li>• Absorptionsspektren des Scinco Neosys 2000 UV-Vis-Spektrometers (Software: Lab Pro Duo)</li><li>• Absorptionsspektren der WTW photoLab spectral-Software</li><li>• Absorptionsspektren des Thermo Electron Helios Alpha Spectrometers</li></ul>
--------------	---

---



---

- 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.

---

**\*.dsp** Binär-Format der Ascanis Lambda-SPX/ VISIONlite Software.

---

**\*.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<sup>-1</sup>*, wird als x-Achsentyp Wellenzahlen verwendet, sonst Wellenlängen. Versucht ebenfalls, den Y-Achsentyp herauszufinden. 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.

---

**\*.jws** Binär-Format der JASCO-Spektrometer

---

- 
- \*.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 (Software: Princeton Instruments WinSpec 1.6). Speichern dort als ASCII-1 oder ASCII-XY. Siehe 1.1 zur Korrektur der Spektren.  
• ASCII-Exportformat der Horiba DataMax-Software.
- 
- \*.proc spec** Binär-Format der Ocean Optics SpectraSuite software, interner Name: “OOIBinary”
- 
- \*.rruff** ASCII-Dateiformat der Raman-Spektren von der RRUFF Online-Mineraldatenbank
- 
- \*.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!
- 
- \*.spc** • Binärformat der Absorptionsspektren vom SHIMADZU UV1600 und UV1800 – Spektrometer.  
• THERMO Fishers binäres Dateiformat (ursprünglich von der *Galactic Industries Corporation*). Software: GRAMS/AI. Quasi-standard für viele Hersteller (z.B. Ocean Optics, Jobin Yvon Horiba). Getestete Spektraltypen: UV/VIS, NIR, FTIR, Raman, Fluorescence. Funktioniert nicht für spc files von EDAX XRF Geräten, das ist ein anderes Dateiformat. Hierfürbitte den “EDAX Spectrum Viewer” benutzen.
- 
- \*.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. 3.4 und 3.5 zum Speichern.
- 
- \*.trt** ASCII-Format der Avantes Software. Getestet: Avantes SpectraWin Basic 5.0 und
-

---

<b>*.tat</b>	Avantes Avasoft 6.1. Meßmodus:
<b>*.ttt</b>	trt: "scope"
<b>*.tit</b>	tat: "absorbance"
	ttt: "transmittance"
	tit: "irradiance"

---

<b>*.wls</b>	ASCII-Format der VWR UV-1600PC Spectrometer, Software: "M.wave professional"
--------------	--

---

### 3.2. Menüpunkt [Öffnen: unbekannte Binärdatei]

Dieser Menüpunkt unterstützt dabei, Spektralinformation aus Binärdateien unbekanntem Format zu extrahieren. Nach dem Öffnen der unbekannteten Datei, öffnet sich eine vorformatierte Excel-datei, und der Dateiinhalte wurde in die Zwischenablage kopiert. Diesen bitte in Zelle A1 der Excel-datei einfügen. Die erste Zeile des Worksheets zeigt Dateinamen und -pfad. Die Spalten zeigen den binären Dateiinhalte „als ob“ sie dem genannten Zahlenformat entsprechen würden (die Zahlenwerte könnten auf verschiedene Arten mit verschiedenen Speichergrößen enthalten sein). Sinnvolle Bereiche können sich in jeder Spalte verstecken, meist aber als zusammenhängende Blöcke. Durch bedingte Formatierung werden Blöcke mit potentiell nützlichen Zahlenwerten hervorgehoben, bzw. unsinnige Zahlenwerte pastellfarben ausgeblendet.

### 3.3. Menüpunkt [Daten einfügen (Zwischenablage)]

Mit diesem Feature lassen sich (fast) beliebige und (fast) beliebig viele Spektraldatensätze aus Excel, Origin oder auch aus jedem Texteditor zur Spektraldarstellung in Spekwin32 einfügen. Es müssen mindestens zwei Spalten vorhanden sein, wobei mindestens eine Spalte x-Achsen-Werte enthalten soll. Zur Anwendung einfach den selektierten Datenbereich kopieren und in Spekwin32 mit STRG+EINFG einfügen. Funktioniert auch mit mehreren Spalten (bis zu 5000 Datensätze) und akzeptiert sowohl "x y y y" als auch "x y x y x y"-Anordnungen. In der Zeile über den Datenspalten definierte Achsentyper werden automatisch erkannt. Falls diese Information nicht enthalten ist, werden standardmäßig „Wellenlänge“ und „Absorption“ benutzt. Optional können Spektrennamen zuoberst in den y-Spalten enthalten sein.

**Hinweis:** In Excel können mit dem Tastatur-Shortcut STRG+UMSCHALT+Pfeil(runter, rechts) ganze Datenblöcke automatisch selektiert und dann kopiert werden. Bitte keine komplett leere Spalten auswählen.

### 3.4. 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.

### 3.5. Menüpunkt [Daten speichern als ...]

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

Es gibt 6 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

#### Details zu den Dateiformaten:

---

**\*.spv** : Beschreibung siehe 3.1 oben. 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. Es wird der ganze Spektralbereich gespeichert, unabhängig vom aktuellen Ausschnitt.

---

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

---

**Hinweise** für optimalen Grafikexport:

- Bei Bildschirme 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.

### 3.6. Menüpunkt [Speichern als RRUFF ...]

Zum Abspeichern von Raman-Spektren in das native Dateiformat für die RRUFF Mineral-Datenbank ([http://rruff.info/about/about\\_download.php](http://rruff.info/about/about_download.php)). Mit deren Software CrystalSleuth lässt sich eine eigene Ramanspektren-Datenbank für Mineralien mit Suchfunktion erstellen.

Das zu exportierende Spektrum in der oberen Spektrenliste auswählen, und entweder die Parameter aus der Input-Datei übernehmen, oder eigene einfügen. Der [*Speichern*]-Knopf speichert das gewählte Spektrum ins \*.rruff-Format. Am Ende das Fenster mit [*Schließen*] verlassen.

### 3.7. Menüpunkt [Batch-Datenexport]

Mit dieser Funktion lassen sich alle geladenen Spektren als Einzeldatei in einem von drei Formaten (\*.spc, \*.dx, \*.csv). Außerdem können sie gemeinsam als Multi-Datei gespeichert werden (\*.spc, \*.dx, \*.csv).

- *Exportieren als* individuelle Einzelspektrum-Dateien oder aber als gemeinsame Mehrfachdatei.
- *Dateipfad*: entweder bleibt der Dateipfad gleich (die Pfade der Originaldateien werden benutzt), oder ein gemeinsamer Dateipfad wird im Eingabefeld festgelegt.
- Ein *neuer Dateiname* kann festgelegt werden (mit fortlaufender Nummerierung), alternativ können auch die Legendentexte benutzt werden. Beide Optionen werden kombiniert, wenn beide ausgewählt sind.

Der [Export!]-Knopf startet den Exportprozess, der Exportfortschritt wird im Textfeld und mit einem Fortschrittsbalken angezeigt.

### 3.8. Menüpunkt [Grafik speichern als]

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

Es gibt 5 Grafikformate zur Auswahl beim Abspeichern:

- 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:

---

**\*.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 könne 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 Bildschirme 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.

### 3.9. 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 (mitinstallierte) 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).

### 3.10. 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.. (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.

### 3.11. 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 3.5 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)!

### 3.12. Menüpunkt [Drucken]

Druckt das aktuelle Grafikfenster. Die installierten Drucker sind wie üblich anwählbar. Zur Optimierung der Grafiken gelten die gleichen Hinweise wie im Abschnitt 3.5 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.

### 3.13. 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 angezeigten 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:** Editierfeld<sup>1</sup>. Standardwert ist  $d = 1\text{cm}$ . Änderung wirkt sich aus bei Darstellung mit  $\epsilon$  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  $\epsilon$  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, Lö-

---

<sup>1</sup> 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.

sungsmittel, 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 Darstellungsbe-  
reich 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 Ordina-  
tenwerte 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  
(waagerechte) 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 [Grundlinienkorrektur, interaktiv]

Falls die einfache (in Kap. 4.4 beschriebene Grundlinienkorrektur) nicht ausreicht, sind mit  
diesem Menüpunkt komplexere Methoden möglich. In der oberen Spektrenliste wird das Spekt-  
rum ausgewählt, anhand dessen die Grundlinie für die Subtraktion erstellt wird. Das korrigierte  
Spektrum wird als neues Spektrum hinzugefügt. Eine interaktive Vorschau erleichtert die Erstel-  
lung der Korrekturkurve. Zur Zeit gibt es drei unterschiedliche Methoden:

- Die **lineare** Methode ergibt eine gerade Grundlinie, welche gedreht und vertikal verschoben werden kann.
- Die **adaptive** Grundlinie empfiehlt sich bei Raman- und FTIR-Spektren, bei denen eine weit geschwungene Grundlinie von einem Spektrum mit schmalen Banden subtrahiert werden soll. Der Detailgrad ist variabel und das Resultat kann vertikal verschoben werden.
- Bei **streuenden Lösungen** steigt die Grundlinie kontinuierlich zu kürzeren Wellenlängen hin an. Der Anstieg folgt einem Potenzgesetz, bei dem der Exponent von der Teilchengröße abhängt (Stichwort: Rayleigh-Streuung, Mie-Streuung). Die resultierende Grundlinie kann vertikal gestaucht, gestreckt und verschoben werden.

Folgende Optionen sind einstellbar:

- *[alle Spektren]* subtrahiert die Grundlinie von allen geladenen Spektren.
- *[Orig. entfernen]* entfernt die Originalspektren.

- [*Legende behalten*] behält den Original-Legendentext bei. Sonst wird „(baseline corrected)“ an den Legendentext angefügt.
- [*Grundlinien-Spektrum erzeugen*] erzeugt ein neues Spektrum aus der benutzten Grundlinie. Dieses kann wie ein normales Spektrum weiterbehandelt werden (z. B. abspeichern, usw.).

#### 4.6. 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 entfernen*] 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 Legendentext der entspiketen Spektren um den Zusatz "entspiket".

#### 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 verwendete Glättfunktion entspricht dem Savitskij-Golay-Algorithmus aus Kap. 4.9 mit einem Polynom dritter Ordnung und einem Intervall von 6 – 30 Punkten, je nach Auflösung.

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 [erweitertes Glätten]

Hier ist mehr Kontrolle über die Glättfunktion möglich, dafür ist der Aufwand etwas größer. In der oberen Spektrenliste das zu glättende Spektrum auswählen. Das geglättete Spektrum wird als neues Spektrum hinzugefügt. Zur Zeit sind drei verschiedene Glätt-Algorithmen möglich:

- *[gleitender Durchschnitt]* berechnet für jeden Punkt den Durchschnittswerte seiner Umgebungspunkte im festgelegten Bereich. Mit der pyramidalen Durchschnittsfunktion werden weiter entfernte Punkte schwächer gewichtet.
- *[Savitsky-Golay]* berechnet die geglätteten Werte aus einer Polynom-Interpolation, wobei die Ordnung und der Interpolationsbereich wählbar sind.
- Beim *[Percentil-Filter]* wird für jeden Datenpunkt aus dem definierten Bereich um den Datenpunkt herum ein neuer Zahlenwert entsprechend dem Percentilwert gefunden. Eine untere und obere „Einhüllende“ ergibt sich bei Verwendung des 0%, bzw. des 100%-Percentils.

Folgende Einstellungen sind möglich:

- *[alle Spektren]*: die gewählte Glättfunktion wird auf alle Spektren angewendet.
- *[Original(e) entfernen]*: entfernen die Originalspektren.

## 4.10. Menüpunkt [Peaks & Bandbreiten]

Für das im oberen Auswahlfeld gewählte Spektrum wird eine Wertetabelle der Maxima (im momentanen Darstellungsbereich) im unteren Fenster angezeigt. Falls möglich wird auch der entsprechende FWHM-Wert (engl. Full Width at Half Maximum) angezeigt. Die Schwelle für die Peakdetektion ist von 1 – 95% variabel. Um Minima zu finden, wird *[invertiert (finde Minima...)]* aktiviert.

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

## 4.11. Menüpunkt [Integral & Mittelwert]

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, der Wert des Integrals und der Mittelwert im ausgewählten Bereich 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. Die folgende Formel wird für die Berechnung der Oszillatorstärke  $f$  benützt:

$$f = \frac{4\varepsilon_0 m_e c_0^2 \ln 10}{e^2 N_A} \int_{s_0 \rightarrow s_1} \varepsilon(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu} = 4,319 \times 10^{-9} \frac{\text{mol} \cdot \text{cm}^2}{1} \int_{s_0 \rightarrow s_1} \varepsilon(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu}$$

## 4.12. 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) entfernen]: die ausgewählten Original-Spektren werden entfernt.

## 4.13. 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.

## 4.14. Untermenü [Schließen]

### 4.14.1. Menüpunkt [Alle]

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

#### 4.14.2. Menüpunkt [Auswahl]

Erlaubt das Entfernen einzelner oder mehrerer Spektren. Im linken Editierfeld steht die Spektrenliste, im rechten die Spektren, die nach Betätigung von [OK] entfernt 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 schließen] aktiviert, können alle Spektren eines bestimmten Typs auf einmal entfernt werden.

#### 4.14.3. Menüpunkt [Letztes]

Das letzte Spektrum in der Spektrenliste wird geschlossen.

### 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) entfernen]: die ausgewählten Original-Spektren werden entfernt.

**Hinweis:** Zur Darstellung eines Fluoreszenzspektrums in der Wellenzahlskala werden dessen Ordinatenwerte zuvor mit  $\lambda^2$  bzw.  $\lambda^4$  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  $\times n$  ( $n$  als reelle Zahl) ein Spektrum mit  $\lambda^n$  (bzw.  $\tilde{\nu}^n$  in der Wellenzahlskala) multiplizieren oder auch durch  $\lambda^n$  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, ×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) entfernen]* aktiviert, werden/wird die/das ausgewählte(n) Original-Spektren/Spektrum entfernt.

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 [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.

## 5.10. 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:



$$P = \frac{I_y - I_x}{I_y + I_x} \quad (1)$$

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

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 Auswahlfenstern 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.

### 5.11. Menüpunkt[Raman Spektrum]

Hiermit lässt sich ein Ramanspektrum berechnen, ausgehend von einem (Fluoreszenz-)Intensitätsspektrum in der Wellenlängenskala und der Laser-Wellenlänge. Die Anfangswellenzahl des Ramanspektrums lässt sich vorgeben, da der Bereich um  $0 \text{ cm}^{-1}$  oft verzerrt ist.

Zwei weitere Optionen sind möglich:

- *[alle Spektren transformieren]* wendet die Umrechnung auf alle geladenen Spektren an.
- *[Original(e) löschen]* entfernt die Originalspektren.

### 5.12. 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  $\lambda_{\max}$  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.

### 5.13. 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:

$$E = \frac{\int E(\lambda)I(\lambda)d\lambda}{\int I(\lambda)d\lambda} \quad (3)$$

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.

## 5.14. 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:

$$\langle \lambda \rangle = \frac{\int \lambda E(\lambda)d\lambda}{\int E(\lambda)d\lambda} \quad \text{bzw.} \quad \langle \tilde{\nu} \rangle = \frac{\int \tilde{\nu} E(\tilde{\nu})d\tilde{\nu}}{\int E(\tilde{\nu})d\tilde{\nu}} \quad (4)$$

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:  $\langle \lambda \rangle \neq \langle \tilde{\nu} \rangle^{-1}$  !

## 5.15. 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  $0^\circ$ ) 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.

## 5.16. 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.

## 5.17. Menüpunkt [TT-Quantenausbeute]

Eine Erklärung würde den Rahmen dieses Manual sprengen.

## 6. Untermenü [2D/TT]

### 6.1. Menüpunkt [Emission: Sensitivitätskorrektur]

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 Legendentext um den Zusatz „korrigiert“ erweitert. Optionen:

- [Original entfernen] entfernt 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“ die Korrekturkurve (im Programmordner enthalten).

### 6.2. Menüpunkt [Anregungswellenlänge zuweisen]

Für die Darstellung als zweidimensionales Spektrum oder EEM (*engl.*, **excitation emission matrix**), muss jedem Fluoreszenzspektrum eine Anregungswellenlänge zugewiesen sein. Diese kann von Hand im „Allgemein“-Dialog (siehe Kap. 4.1) eingegeben werden, oder mit dieser Funktion automatisiert für einen ganzen Spektraldatensatz. Einfach die Anregungswellenlänge des ersten Spektrums und die Anregungsschrittweite eingeben. Falls der zu behandelnde Spektraldatensatz nur einen Teil der geladenen Spektren umfasst, kann das erste und letzte Spektrum davon in den beiden Spektrenlisten ausgewählt werden. Um die Spektren mit ihrer Anregungswellenlänge zu benennen, wird die Option [Legendentext ersetzen durch Anregungswellenlängen] aktiviert.

### 6.3. Menüpunkt [Anregungsintensität 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 Auswahlfeldern 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 auch im Menüpunkt [Allgemein] für jedes Spektrum separat eingegeben und zugeordnet werden.

### 6.4. Menüpunkt [Rayleigh/ Raman-Streupeaks entfernen]

EEMs sind häufig und besonders bei Proben mit geringer Fluoreszenzintensität durch Streupeaks verzerrt. Diese werden verursacht durch Rayleigh-Streuung erster und zweiter Ordnung sowie durch Raman-Streuung am Lösungsmittel. Durch optimierte Geometrien bei Küvette und optischem Strahlengang lassen sie sich reduzieren, können aber nicht vollständig zum Verschwinden gebracht werden. Besonders für die Verwendung in chemometrischen Analysen müssen die Streupeaks entfernt werden. Die einfachste und älteste Methode besteht darin, die betroffenen Wellenlängenbereiche einfach auf null zu setzen, jedoch gibt es wesentlich bessere Methoden, den Streulichteinfluss zu reduzieren.

Mit diesem Menüpunkt lassen sich alle Streupeaks aus einem ganzen EEM-Datensatz entfernen. Es gibt viele Einstellungsoptionen:

- [*alle Spektren*] wendet die Streupeak-Entfernung auf einmal auf alle geladenen Spektren an.
- [*Original(e) entfernen*] entfernt die Originalspektren aus der Darstellung.
- Im Bereich [*ersetzen durch*] kann man zwischen drei Interpolationsmethoden wählen:
  - **Nullen**, dies ist der älteste und häßlichste Weg
  - **Gerade Linie**, kann manchmal schon etwas besser sein
  - **Interpolierte Kurve**, die nützlichste Variante mit der geringsten Verzerrung. Die interpolierten Werte haben das Rauschpegel ihrer Umgebung.
- Die Anregungs-Bandbreite des Fluoreszenzspektrometers muss gesetzt werden, dies definiert die Breite der interpolierten Bereiche.
- [*Rayleigh-Peaks (1. Ordnung) entfernen*] entfernt die Streulichtintensität rund um die Anregungswellenlängen (Streulicht wird von der Probe verursacht)

- *[Rayleigh-Peaks (2. Ordnung) entfernen]* entfernt die Streulichtintensität rund um die doppelten Anregungswellenlängen (Streulicht wird vom Emissionsmonochromator verursacht, der das Streulicht 1. Ordnung auch in 2. Ordnung bei doppelter Wellenlänge durchlässt)
- *[Raman-Peaks (1. Ordnung) entfernen]* entfernt die Streulichtintensität rund um die um die Raman-verschobenen Anregungswellenlängen herum. Die Wellenlängenverschiebung ist lösungsmittelabhängig, einige Lösungsmittel können aus der Liste bereits ausgewählt werden. Weitere Lösungsmittel können aufgenommen werden (die Datei „Raman-Bands.csv“ im Programmordner bearbeiten).

## 6.5. Menüpunkt [Blank-EEM Datensatz subtrahieren]

Manchmal ist es nützlich, den Spektraldatensatz von einer Leermessung als “Blank” zu subtrahieren. Auf diese Weise können störende Hintergrundfluoreszenz und auch Streupeaks reduziert werden.

Im oberen Teil finden sich die Dimensionen des aktuell geladenen EEM-Datensatzes. Der Datensatz für die Subtraktion wird mit *[Blank-Datensatz laden]* geladen. Natürlich funktioniert die Subtraktion nur, wenn die Dimensionen beider Datensätze identisch sind. Der Blank-Datensatz muss zuvor im \*.spv-Format abgespeichert worden sein. Optional kann dem Legendentext „Blank subtrahiert“ hinzugefügt werden.

## 6.6. 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 standardmäßig so orientiert, dass die Anregung in x-Richtung und die Emission in y-Richtung verläuft. Diese Orientierung lässt sich mit *[x/y-Achsen tauschen]* umstellen. Die EEM-Grafik kann mit *[Kopieren => Zwischenabl.]* als Bitmap-Grafik über die Zwischenablage kopiert werden.

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

## 6.7. Menüpunkt [Anregungsspektren 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 entfernen]* aktiviert, werden die Fluoreszenzspektren entfernt.

## **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 Wellenzahlskala benötigt.

### **7.1. Menüpunkt [Manuell]**

Hier geschieht die eigentliche Arbeit. Eine Anleitung ist auf der Spekwin32-Webseite zu finden.

### **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.

Ist die Option *[mehrere Instanzen ... erlauben]* aktiviert, sollte man tunlichst vermeiden, viele Spektren gleichzeitig per Doppelklick im File-Explorer zu öffnen. Durch die vielen gleichzeitig geöffneten Instanzen (eine für jedes Spektrum) könnte das Betriebssystem für eine gewisse Zeit nahezu komplett lahmgelegt werden.

### **8.2. Menüpunkt [Peak Label aktivieren]**

Solange diese Funktion aktiviert ist, wird eine zusätzliche Menüleiste angezeigt, die alle Optionen zum Peaklabeling enthält.

- In Bereich **Labelsorte** kann man festlegen, ob ein Label für den x- oder y-Wert des gelabelten Maximums oder beides angezeigt werden soll.
- Der **Schwellwert** definiert die Untergrenze für gelabelte Maxima. Diese prozentuale Grenze wird für jedes Spektrum individuell berechnet.
- Die **Prominenz** ist ein Parameter, mit dem man eine Auswahl treffen kann zwischen „wichtigen“ und „unbedeutenden“ Peaks. Je kleiner der Zahlenwert (1 – 10 möglich), umso mehr und umso kleinere Peaks werden gelabelt.
- Die relevanten **Stellen** der Zahlenwerte können für x- und y-Werte getrennt gestgelegt werden.
- Der **Winkel** der Labeltexte kann von 0 – 90° variiert werden.
- Es können **alle Spektren** gelabelt werden oder **eines** ausgewählt werden.

**Hinweis:** Es gibt keine Möglichkeit, einzelne Peaks zum Labeln auszuwählen!

### 8.3. Menüpunkt [Spektroskop-Ansicht]

Die Spektroskop-Ansicht soll den visuellen Eindruck eines durch ein Hand-Spektrometer betrachteten Spektrums wiedergeben. Solche visuelle Spektrometer werden in manchen Branchen immer noch benutzt, besonders häufig z. B. bei Gemmologen. Die Spektroskop-Ansicht könnte dabei helfen, eine Brücke zwischen visuellen und spektroskopischen Methoden zu schlagen.

Aktiviert man die Funktion, zeigt sich unter dem Grafikbereich eine zusätzliche Menüleiste mit allen notwendigen Optionen. Ein komplettes „Regenbogenspektrum“ wird angezeigt, alle sichtbaren Wellenlängen werden dargestellt. Die Helligkeit einzelner Bereiche hängt dabei von den entsprechenden Werten des zugehörigen Spektrums ab.

- Die Anzeige der Wellenlängen im Regenbogenspektrum kann abgeschaltet werden und der **Tickabstand** variiert werden.
- Das farbige Regenbogenspektrum kann auch in **Graustufen** dargestellt werden (falls noch jemand Schwarzweiß-Bildschirme benutzt oder Bücher ohne Farbseiten herstellen will ☺).
- [*ausrichten*] bewirkt, dass die x-Achse obere Spektralgrafik analog zum unteren Regenbogenspektrum verläuft. Bei manchen Bildschirmen und Fenstergrößen kann es sein, dass das nicht ganz perfekt funktioniert.
- Die Modulation des unteren Regenbogenspektrums durch das gemessene Spektrum kann mit [*aktivieren*] an- und abgeschaltet werden. Das gemessene Spektrum wird in der Spektrenliste ausgewählt.
- Das angezeigte Regenbogenspektrum kann **in die Zwischenablage kopiert** werden.

- Mit [Speichern] kann das angezeigte Regenbogenspektrum in verschiedenen Grafikformaten abgespeichert werden.

## 8.4. Menüpunkt [Achsen]

Erlaubt die Konvertierung der Koordinatenachsen. Die Abszisse lässt sich als **Wellenlängen**- oder **Wellenzahlskala** 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<sup>-1</sup>** 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  $\epsilon$**  oder **log  $\epsilon$**  darstellen. Für die Umrechnung gelten:

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

Die  $\epsilon$ -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**] (5.12) 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*].

## 8.5. Menüpunkt [Achsenfont]

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

## 8.6. 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.



### 8.7. Menüpunkt [Legende ein/aus]

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

### 8.8. Menüpunkt [Gitter ein/aus]

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

### 8.9. 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.

### 8.10. 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.

### 8.11. 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.

### 8.12. Menüpunkt [Standard-Linienarten]

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

### 8.13. Menüpunkt [Linien breiter]

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

### 8.14. Menüpunkt [Linien dünner]

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

### 8.15. Menüpunkt [Alle Schwarz]

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

## 8.16. Menüpunkt [Linienarten]

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

## 8.17. 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.

## 8.18. Menüpunkt [Hintergrundfarbe]

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