



Dieses Dokument beschreibt die Entwickler-Version unserer Spektroskopie-Software QuickStep, die wir üblicherweise nicht an Externe herausgeben.

Es ist an mehreren Stellen noch nicht fertig oder schon nicht mehr aktuell.

Für besondere Partner und Kunden ist es jedoch sinnvoll, mit der Entwickler-Version zu arbeiten, weil sie einige zusätzliche Features enthält und auch Prototyp-Geräte unterstützt.

Diesen Kunden hilft dieses unfertige Handbuch meist mehr als die branchenspezifischen kurzen Handbücher, mit denen unseren Standard-Kunden besser zurechtkommen.



**Handbuch**

**QuickStep**

**Spektrometrie-Software  
für Analysegeräte und Spektrometer  
mit Scanning-Grating-Technologie**

Handbuch  
Spektrometrie-Software QuickStep

©HiperScan GmbH, März 2012

HiperScan GmbH  
Weißeritzstr. 3  
D-01067 Dresden

Telefon +49-351-212 496-33  
E-Mail [info@hiperscan.com](mailto:info@hiperscan.com)  
URL <http://www.hiperscan.com>

## Inhalt

<b>1. Einleitung.....</b>	<b>4</b>
1.1. Zweck der Spektrometrie-Software QuickStep .....	4
1.2. Nutzung von QuickStep .....	4
1.3. Zu diesem Handbuch geänderte Struktur berücksichtigen! .....	5
<b>2. Installation und Anschließen.....</b>	<b>5</b>
2.1. Installation der Software.....	5
2.2. Das erste Anschließen eines Finder/Apo-Ident .....	6
2.3. Das erste Anschließen eines reinen SGS-Spektrometers .....	6
2.4. Einschalten .....	<b>Fehler! Textmarke nicht definiert.</b>
<b>3. QuickStep mit einem SGS nutzen .....</b>	<b>7</b>
3.1. Erste Tour: Das Hauptfenster im Überblick .....	7
3.2. Zweite Tour: Das erste Absorbanzspektrum aufnehmen.....	8
3.3. Dritte Tour: Entlang einer Messung durch alle Features.....	9
3.3.1 Die Spektrometer-Liste (unten links) .....	9
3.3.2 Geräte-Einstellungen im Eigenschaftsfenster (unten rechts).....	9
3.3.3 Spektren erfassen .....	10
3.3.4 Das Diagramm-Fenster (in der Mitte) .....	10
3.3.5 Speichern.....	10
3.3.6 Der Diagrammbrowser (rechts) .....	11
3.3.7 Spektren wieder laden.....	11
3.3.8 Der Datenbrowser (rechts oben) .....	11
<b>4. QuickStep mit einem Finder/Apo-Ident nutzen .....</b>	<b>12</b>
4.1. Durchführen einer Identitätsprüfung in der Apotheke .....	12
4.2. Einmessen von Substanzen für eine neue Datenbank mit dem Finder/Apo-Ident ....	15
4.2.1 Einstellungen (nur bei der ersten Messreihe nach der Installation).....	15
4.2.2 Referenzieren (alle 15-20min).....	16
4.2.3 Eine Probe messen.....	16
4.3. ....	19
<b>5. Nach den Messungen .....</b>	<b>20</b>
5.1. Abschalten von Gerät und PC.....	20
5.2. Reinigung der Bechergläser.....	20
5.3. Reinigung des Gerätes .....	20
<b>6. Anhang.....</b>	<b>20</b>
6.1. Die Installation der QuickStep-Software im Detail .....	20

6.2. Die Installation der IdentModul-Software im Detail .....	22
6.3. Die Installation des USB-Treibers im Detail.....	23
6.4. Erstellen eines PCA-Modells aus aufgenommenen Spektren .....	33

## 1. Einleitung

### 1.1. Zweck der Spektroskopie-Software QuickStep

Wir haben *QuickStep* bei der Firma HiperScan entwickelt, damit Sie schnell, komfortabel und effizient mit unseren Spektrometern und Analysegeräten arbeiten können.

Mit *QuickStep* konfigurieren Sie ein oder mehrere Spektrometer oder Analysegeräte, starten eine Spektralmessung, zeigen die Spektren auf verschiedene Weise an, speichern die Spektren und lesen sie wieder ein und mittels Plugins nehmen Sie Auswertungen an den Spektren vor.

Das *Apo-Ident*-Plugin nimmt dabei eine besondere Rollen ein: Es übernimmt den gesamten Ablauf bei der Ausgangsstoff-Prüfung in der Apotheke bis hin zu Verwendung der chemometrischen Modelle (IdentModul), Validierungs-Informationen, Protokoll-Ausdruck und Archiv für frühere kann dafür aber. Das *Apo-Ident*-Plugin verdeckt die *QuickStep*-Oberfläche vollständig.

Für quantitative Analysen in der Produktion empfehlen wir unsere Industrie-Software *HS Predictor*, die insbesondere für die Bedienung durch Operator ausgelegt ist. Sie kann nur ein Gerät ansteuern, dafür aber mehrere chemometrische Modell (Applikationen) für konkrete Anwendungsfälle anbieten. Sie enthält auch eine Nutzerverwaltung und Log-Trail-Funktionen. Für Prozess-Anwendungen erlaubt der *HS Predictor* auch eine Script-Steuerung.

Für den OEM-Einsatz lässt sich die *HCL* (HiperScan Class Library) auch in andere Benutzeroberflächen einbinden. Sie liegt sowohl *QuickStep* als auch dem *HS Predictor* zugrunde und kann über eine C#-Schnittstelle als auch über eine vereinfachte C-Schnittstelle benutzt werden. Der Funktionsumfang reicht von der Ansteuerung des *Finder SD* über Berechnungen bis zu Datei-Operationen.

### 1.2. Nutzung von QuickStep

*QuickStep* ist dafür konzipiert, dass sich der Anfänger möglichst schnell zurechtfindet und dass dem häufigen Benutzer die Arbeit flüssig von der Hand geht. Sie haben das Gerät ja erworben, um bestimmte Aufgaben/Kontrollen effizient und sicher erledigen. Dieses Ziel sollen sie mit Erfolg umsetzen, ohne ihre Konzentration auf die Bedienung einer besonders mächtigen Software zu richten.

Zu diesem Zweck dürfen Sie *QuickStep* auch auf beliebig vielen PCs und Laptops installieren

Falls Sie spezielle Anforderungen haben, denen wir nicht nachkommen können, haben Sie die Möglichkeit eigene Plugins programmieren zu lassen. Und da wir die *QuickStep*-Software unter die Open-Source-Lizenz LGPL gestellt haben liegt über die Plugin-Schnittstelle hinaus der gesamte Quellcode offen, so dass Sie bei Bedarf sogar eigene Änderungen und Erweiterungen vornehmen können.

### 1.3. Zu diesem Handbuch

Die Nahinfrarot-Spektroskopie ist eine sehr mächtige Analystechnik, aber leider auch entsprechend komplex. Unsere *QuickStep*-Software erlaubt es, verschiedene Arbeitsabläufe effizient umzusetzen. Auch das ist durchaus komplex. So eine Software lässt sich nicht selbsterklärend aufbauen, wir versprechen Ihnen aber, dass Sie sich schnell zurechtfinden werden.

Wir haben dieses Handbuch deshalb in drei Schleifen (Touren) aufgebaut, die Sie am besten nacheinander am Gerät durchgehen. Danach folgen Beschreibungen spezieller Abläufe. Picken Sie Sich heraus, was Sie interessiert.. Die dritte Tour wird später Ihr Nachschlagewerk sein.

Die erste Tour führt Sie kurz durch die Bereiche des Hauptfensters. In der zweiten Tour nutzen Sie diese Elemente, um ganz schnell Ihr erstes Spektrum aufzunehmen. Dann wissen Sie schon, wo der Hase lang läuft- Die dritte Tour führt Sie noch einmal durch eine Messung. Aber dieses Mal lernen Sie unterwegs alle Möglichkeiten kennen und bedienen, die *QuickStep* Ihnen bietet.

Setzen Sie Sich also gleich ans Gerät, folgen den Schritten und probieren alles aus, was Sie interessiert. Sie können von der Software aus nichts kaputt machen.

Für praktisch alle unsere Kunden setzen wir die Produktiv-Software-Pakete *QuickStep Apolident* und *HS Predictor* ein. Die hier beschriebene *QuickStep*-Software entwickeln und verwenden wir überwiegend für unseren internen Gebrauch, Deshalb lassen wir in diesem Handbuch Lücken und unfertige Stellen. Trotzdem geben wir *Quickstep* gelegentlich auch an Kunden wie Sie mit speziellen Anforderungen.

## 2. Installation und Anschließen

### 2.1. Installation der Software

Die *QuickStep*-Software setzt die *Mono*-Laufzeitumgebung voraus, das Open-Source-Pendant von Microsofts .NET. Dadurch läuft *QuickStep* unter dem Betriebssystem Linux genauso, wie unter Windows XP, Windows Vista und Windows 7. Eine ausführliche Beschreibung der Installationsschritte finden Sie im Anhang. (Falls Sie die Software unter Linux installieren wollen, erhalten Sie von HiperScan auch die entsprechenden .deb-Pakete.)

1. Installieren Sie *Mono* in der Version 2.12 oder höher. Sie finden Mono 2.12 auf der beigelegten CD-ROM oder in der jeweils neusten Version unter <http://mono-project.com>.
2. Als nächstes installieren Sie die *QuickStep*-Software, welche das Spektrometer ansteuert und Nahinfrarotspektren abrufen. Dieser Schritt stellt im Betriebssystem auch den USB-Treiber bereit. Starten Sie den Installer durch Doppelklick auf *QuickStep.msi* und folgenden Anweisungen.
3. Sofern sie auch die Identifikations-Software *IdentModul* (mit der einfachen Applikationsoberfläche) erhalten haben, dürfen Sie diese erst installieren, wenn die *QuickStep*-Software installiert ist, sonst finden sich die beiden Programme nicht. Zur Installation starten sie *IdentModul.msi*.

Die Software ist nun installiert und der USB-Treiber ist im Betriebssystem verankert, und Sie können das Gerät an den PC/Laptop anschließen. Auf dem Desktop finden Sie den neuen Link auf *QuickStep* und gegebenenfalls noch einen zweiten auf das *IdentModul*. Den oder die gleichen Links finden Sie auch im Start-Menü unter *Start>Programme>QuickStep*. Die Apothekenanwendung zur Identitätsprüfung starten Sie mit dem Link *QuickStep Apo-Ident*.

Der Link *QuickStep* ohne Lupe startet das Spektrometerprogramm zum aufnehmen, anzeigen und speichern von Spektren. Um Verwechslungen zu vermeiden, können Sie den



nicht benötigten Link einfach löschen. QuickStep QuickStep Apo-Ident

## 2.2. Das erste Anschließen eines Finder/Apo-Ident

Das Analysegerät benötigt einen Netzanschluss und einen PC/Laptop mit installierter *QuickStep*-Software. Für die Prüfung der Ausgangsstoffe in der Apotheke muss auch das *QuickStep Apo-Ident* installiert sein. Gehen Sie folgendermaßen vor.

1. Stecken Sie das Netzkabel in die Kaltgerätebuchse auf der Rückseite (mit der linken Hand zu erreichen) und verbinden Sie es mit einer Schuko-Steckdose des 230V-Stromnetzes. (Das Analysegerät arbeitet auch an jedem anderen gängigen Stromnetz mit Schutzkontakt bei 100V bis 230V~ und 50/60Hz.)
2. Schalten Sie das Analysegerät ein. Der Netzschalter auf der Rückseite an der Netzleitung lässt sich mit der linken Hand erreichen.
  - Die Signalleuchte im Taster vorn links auf der Geräteoberseite leuchtet rot.
3. Verbinden Sie das Analysegerät über das mitgelieferte USB-Kabel mit einer USB-Buchse des PCs/Laptops. Am Apo-Ident befindet sich die USB-Buchse in der Rückseite und ist am besten mit dem Stecker in der rechten Hand zu erreichen.
  - Sobald Windows das USB-Gerät erkennt, sucht und installiert es den Treiber. Im dazugehörigen Dialog verzichten Sie auf eine Verbindung mit Windows-Update und wählen anschließend die automatische Installation. (Eine detaillierte Beschreibung finden Sie im Anhang.
  - Sobald die *Apo-Ident*-Software läuft, referenziert das Analysegerät. Sie hören vielleicht den Motor, der die Referenz-Standards bewegt.
  - Sobald die Referenzierung abgeschlossen ist, wechselt die Farbe der Signalleuchte nach grün.

Das Analysegerät ist nun bereit für den Einsatz.

## 2.3. Das erste Anschließen eines reinen SGS-Spektrometers


Das Netzteil des SGS benötigt einen Netzanschluss und einen PC/Laptop mit installierter *QuickStep*-Software. Gehen Sie folgendermaßen vor.

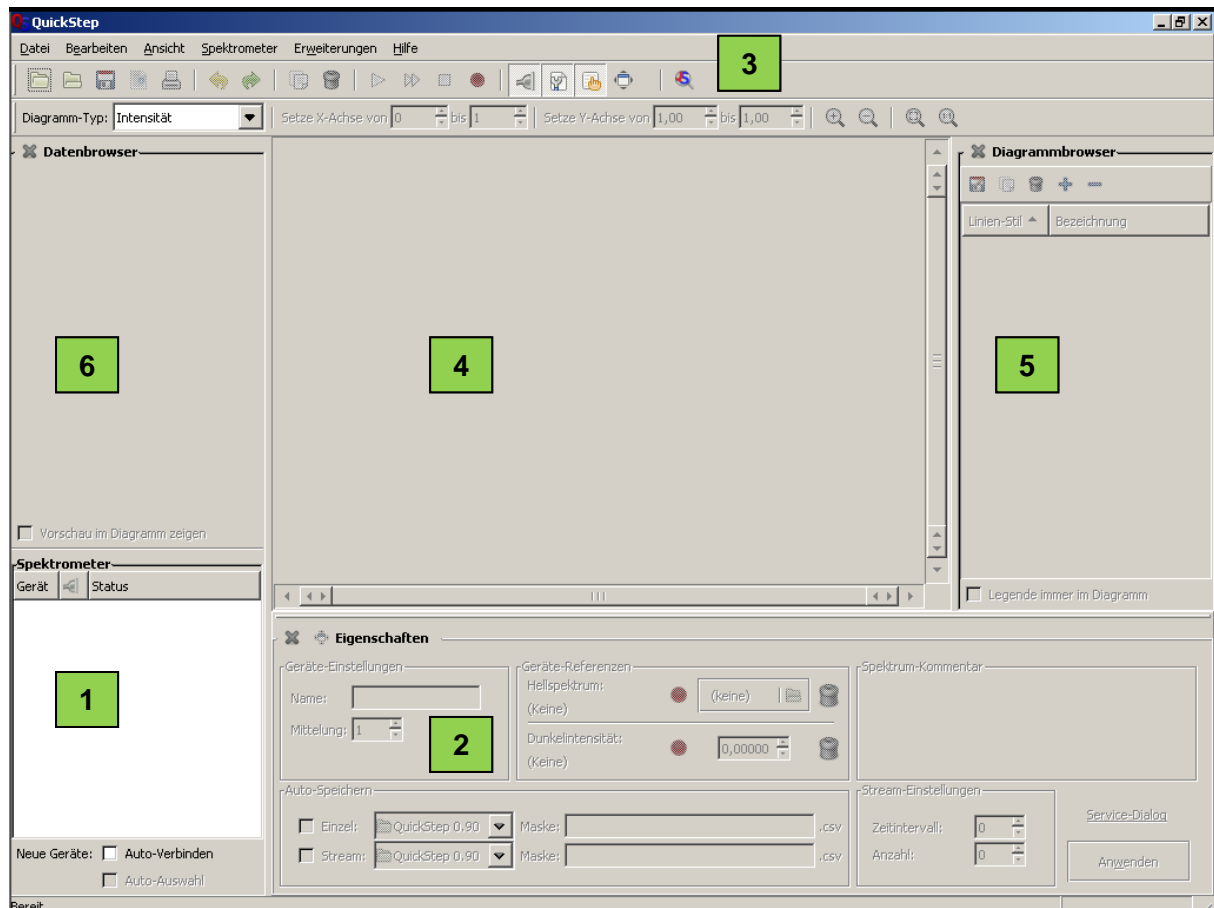
1. Verbinden Sie das Netzgerät des SGS mit einer Schuko-Steckdose des 230V-Stromnetzes und dem SGS. (Das Netzgerät des SGS arbeitet auch an jedem anderen gängigen Stromnetz mit Schutzkontakt bei 100V bis 230V~ und 50/60Hz.)
  - Die Signalleuchte ‚Power‘ vorn am SGS leuchtet grün.
2. Verbinden Sie das SGS über das mitgelieferte USB-Kabel mit einer USB-Buchse des PCs/Laptops. Am Apo-Ident befindet sich die USB-Buchse in der Rückseite und ist am besten mit dem Stecker in der rechten Hand zu erreichen.
  - Die Signalleuchte ‚USB‘ vorn am SGS leuchtet grün.
  - Sobald Windows das USB-Gerät erkennt, sucht und installiert es den Treiber. Im dazugehörigen Dialog verzichten Sie auf eine Verbindung mit Windows-Update und wählen anschließend die automatische Installation. (Eine detaillierte Beschreibung finden Sie im Anhang.

Das SGS ist nun bereit für den Einsatz.

### 3. QuickStep mit einem SGS nutzen

#### 3.1. Erste Tour: Das Hauptfenster im Überblick

Wenn Sie *QuickStep* zum ersten Mal starten, sind die Elemente des Hauptfensters überwiegend leer. Sollten nicht alle Elemente sichtbar sein, können Sie sie mit den Toolbar-Buttons  oder im Menü-Punkt Ansicht>Fenster Layout> ein- und ausblenden.



(aktuelles Bild mit Gerät, Spektren und geöffnetem Ordner verwenden!)

1. Die Spektrometer-Liste links unten zeigt alle angeschlossenen Spektrometer bzw. Analysegeräte an, die QuickStep steuern kann, im Normalfall also ein Gerät, wenn es eingeschaltet und über USB verbunden ist und von Windows erkannt wurde.
2. Rechts daneben befindet sich das Eigenschaften-Fenster, dessen Inhalt wechselt.
  - Ist ein Spektrometer/Analysegerät (in der Spektrometer-Liste **1**) ausgewählt, werden dessen Einstellungen angezeigt.
  - Ist ein angezeigtes Spektrum (im Diagrammbrowser **5**) selektiert, lässt sich dessen Aussehen verändern.
  - Ist ein Dateiordner (im Dateibrowser **6**) ausgewählt, kann er für das Mitschneiden aller Spektren konfiguriert werden.





3. Die Werkzeugleiste (Toolbar) enthält Buttons für alle möglichen Aktionen, z.B. Spektrum aufnehmen, speichern, laden, zoomen. Alle Aktionen sind auch über das Menü erreichbar.
4. Im Diagramm-Fenster in der Mitte werden die Spektren dargestellt. Sie können unter verschiedenen Darstellungen wählen wie Intensität oder Absorbanz, Ausschnitte betrachten und einiges mehr.
5. Im Diagrammbrowser auf der rechten Seite können Sie einzelne Spektren auswählen, um ihre Darstellung im Eigenschaften-Fenster
6. Im Dateibrowser links oben lassen sich Verzeichnisse einblenden, um Spektren darin schnell aussuchen und anzeigen zu können.



### 3.2. Zweite Tour: Das erste Absorbanzspektrum aufnehmen



Meist wird NIR-Spektrometrie eingesetzt, um chemische Informationen über eine Probe zu gewinnen, denn durch Interaktion mit den Molekülen wird das einfallende Licht verändert. Dazu müssen das Lichtspektrum der Lichtquelle und die Reflektion von der Probe gemessen und zueinander ins Verhältnis gesetzt werden. Da der Detektor auch ohne Beleuchtung ein Signal abgibt, muss zuvor auch dieses Dunkelsignal vermessen und von allen Spektren abgezogen werden. Folgende Schritte sind zu tun:

**Einschalten:** Schließen Sie zunächst das Spektrometer/Analysegerät an den PC/Laptop, schalten es ein und starten Sie die Software. (Die Reihenfolge ist dabei egal.) Falls das Gerät noch nie zuvor an diesen PC/Laptop angeschlossen war, muss Windows™ es erst dem richtigen Treiber zuordnen. (Siehe Abschnitt 2.2.)

**Gerät wählen:** Am besten setzen Sie unter der Spektrometer-Liste bei ‚neue Geräte‘ beide Optionen ‚Auto-Verbinden‘ und ‚Auto-Auswahl‘. Dann wird das angeschlossene Gerät auf die *QuickStep*-Software geleitet und dort selektiert. Oder Sie klicken das Gerät manuell in der Liste an. (Wahrscheinlich haben Sie nur das eine Gerät angeschlossen.)

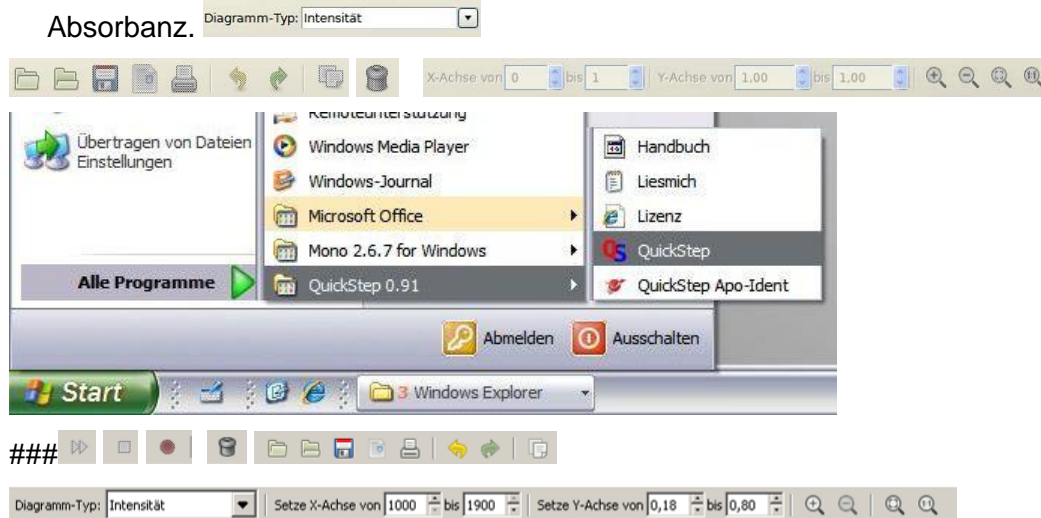
**Spektrometer Konfigurieren:** Im Eigenschaften-Fenster geben Sie bei ‚Mittelung‘ die Anzahl der Spektren ein, die gemittelt werden sollen um das Rauschen zu reduzieren, z.B. 500. Klicken Sie dann auf [Anwenden]. Dann stellen Sie die Dunkelintensität ein, indem Sie bei ausgeschalteter Lichtquelle auf den unteren -Button im Eigenschaften-Fenster klicken und dann wieder auf [Anwenden]. Anschließend messen Sie bei eingeschalteter Lichtquelle deren Hellspektrum ohne Probe durch Klick auf den oberen -Button im Eigenschaften-Fenster klicken und dann wieder auf [Anwenden].

**Lichtquelle einstellen:** Sollte die Lichtquelle das Spektrometer/Analysegerät in die Sättigung treiben oder zudunkel sein, müssen Sie die Lichtmenge anpassen. Starten Sie dazu durch Klick auf  einen Quick-Stream. Dann werden Spektren mit geringer Mittelung aufgenommen, in schneller Folge an *QuickStep* geschickt und fast ohne Verzögerung im Diagramm-Fenster angezeigt. Ist die Helligkeit der Lichtquelle optimal eingestellt, beenden Sie den Quick-Stream mit einem Klick auf .

**Spektrum erfassen:** Das Spektrum des von der Probe reflektieren Lichts erfassen Sie mit der eingestellten Mittelung mit  im Toolbar oder mit `Spektrometer>Spektrum erfassen` im Menü. Mit  können sie einen Stream starten. Anders als beim QuickStream die Spektren mit der eingestellten Mittelung kontinuierlich dargestellt.



**Diagrammfenster:** Darin sehen Sie zunächst das Intensitätsspektrum. Um auf die chemisch informativere Absorbanz umzustellen, wählen sie im Toolbar den Diagrammtyp Absorbanz.



### 3.3. Dritte Tour: Entlang einer Messung durch alle Features

#### 3.3.1 Die Spektrometer-Liste (unten links)

Gerade wenn Sie nur mit einem Spektrometer arbeiten, setzen Sie am besten beide Häkchen (Auto-Verbinden und Auto-Auswahl). Dann brauchen Sie die Spektrometer-Liste nie wieder.

Häufige Fehlerquelle: Sollten Sie *QuickStep* mehrmals parallel gestartet haben, kann jedes Gerät nur in einem der Fenster auftauchen. In der als zweites gestarteten Instanz suchen Sie Ihr Gerät dann vergebens.

#### 3.3.2 Geräte-Einstellungen im Eigenschaftsfenster (unten rechts)


Sie können die Anzahl der Mittelungen einstellen. Wir arbeiten meist mit 500 oder 2.000. (Pro Sekunde werden ca. 150 Scans aufgenommen.) Sie müssen auf **Anwenden** klicken, damit die Eingabe übernommen werden!



Außerdem sollten Sie vor der Messung die Dunkelintensität messen. Dann wird dieser Offset von jedem nachfolgend gemessenen Spektrum abgezogen. Nur dann steht die Intensität ohne Licht wirklich bei Null, denn der Dunkelstrom des Detektor ändert sich mit der Temperatur. (auf **Anwenden** klicken!) Auch die manuelle Einstellung der Dunkelintensität ist möglich. *ES20 hat übrigens kaum noch Temperatur-Drift.*


Wenn sie auch ein Hellspektrum aufnehmen (Spektrum der Lichtquelle) können Sie sich das Reflektions- oder Absorbanzspektrum der Probe anzeigen lassen. → Reflexion = (Licht von der Probe minus Dunkel intensität) / (Spektrum der Lichtquelle minus Dunkelintensität) Auch hier **Anwenden** nicht vergessen! Sie können auch ein gespeichertes Spektrum als Hellspektrum verwenden.


Außerdem können Sie in den Geräteeinstellungen festlegen, dass jedes aufgenommene Spektrum sofort gespeichert wird und ob eine ganze Serie in festen Zeitabständen aufgenommen (und gespeichert) werden sollen. (auf **Anwenden** klicken!)

### 3.3.3 Spektren erfassen


Mit dem -Button oben in der Werkzeugleiste (Tool-Bar) nehmen Sie ein einzelnes Spektrum auf. Es wird sofort dargestellt. ( `Spektrometer>Spektrum erfassen` im Menü geht auch.)

Mit  können Sie einen Stream starten. Dann wird das Spektrum sofort wieder neu gemessen und im Diagrammfenster aktualisiert, bis Sie auf  klicken. In den Geräte-Einstellungen (unten) können Sie auch ein längeres Intervall für die Wiederholung festlegen.

Da es bei 500er-Mittelung nur ca. alle 4s ein neues Spektrum gibt, können Sie mit  einen Quick-Stream. Dann werden Spektren mit geringer Mittelung aufgenommen, in schneller Folge an *QuickStep* geschickt und fast ohne Verzögerung im Diagramm-Fenster angezeigt.

 beendet auch den QuickStream.

Wenn Sie mit einem der Analysegeräte *Finder SD* oder *Apo-Ident* messen, müssten sie darauf achten, ob die Probe beleuchtet wird, oder ob eine interne Referenz in den Strahlengang gefahren ist. Sie können das im Menü steuern.

Zur Vereinfachung gibt es deshalb in der Werkzeugleiste die Button , Die auch die internen Referenz steuern. Die genaue Verwendung ist weiter unten beschrieben: 4.2 Einmessen von Substanzen für eine neue Datenbank mit dem Finder/Apo-Ident

Wir empfehlen für *Finder SD* eher unsere Industrie-Software *HS Predictor*, sofern Sie die QuickStep-Software nicht wegen ganz bestimmter Features gewählt haben. (z.B. automatische Mess-Serien, detailliertes Betrachten und Vergleichen von Spektren, Arbeit mit mehreren Geräten gleichzeitig)

### 3.3.4 Speichern

.csv → Datenformat, welches die viele Programme importieren können, z.B. auch Excel

.jcamp verbreitetes Dateiformat für Spektren

Anmerkungen (aber kein Edit)

Der Export als Bild in die Zwischenablage oder eine Bild-Datei hilft bei der Dokumentation in Berichten.

.csvc-Container ermöglichen es, alle dargestellten Spektren einschließlich der Farbgebung und Anmerkungen so zu speichern, dass man sie gesammelt wieder in QuickStep laden kann, ohne sich die Spektren wieder einzeln zusammensammeln zu müssen. Man kann dann wieder zoomen, einzelne Spektren färben und ein- und ausblenden und den Diagramm-Typ wechseln. (Anmerkungen lassen sich aber nicht editieren.)

Auto-save erlaubt es, alle Spektren (eines Streams oder einzeln aufgenommen) gleich automatisch zu speichern. Ort und Template für den Dateinamen gibt man im Eigenschaften-Fenster des Geräts (unten) ein.

### 3.3.5 Das Diagramm-Fenster (in der Mitte)

Rein- und Raus-Zoomen mit Lasso, Ende der Scrollbars, Doppelklick und manueller Eingabe in der Werkzeugleiste

Diagrammtypen, auch Datenvorbehandlungen. Der Bereich aus dem die Parameter von Datenvorbehandlungen wie SNV oder MSC ermittelt werden, lässt sich in der Werkzeugleiste festlegen.

Mehrere Einen anderen Reiter als Hintergrund einblenden. Wenn Sie dabei die Achsen nicht synchronisieren lassen, können Sie die Spektren im Diagramm über den Spektren im Hintergrund zurechtschieben und -zoomen.

Texte und Pfeile (aber nicht mehr editieren!)

### 3.3.6 Der Diagrammbrowser (rechts)

Einblenden/Ausblenden/aus Ansicht entfernen

Umbenennen, Farben (auch mehrere gleichzeitig ändern)

[Umschalt] und [Strg] verwenden, um mehrere zu selektieren.

Eigenschaften-Fenster unten **2**.

### 3.3.7 Spektren wieder laden

Öffnen-Dialog über Menü oder Werkzeugleiste

Drag&Drop

Datenbrowser

### 3.3.8 Der Datenbrowser (links oben)

Mehrere Ordner „abonnieren“

Vorschau → schnell durchscrollen

Mehrfach-Selektion

Spektren laden

Filter mit regulären Ausdrücken

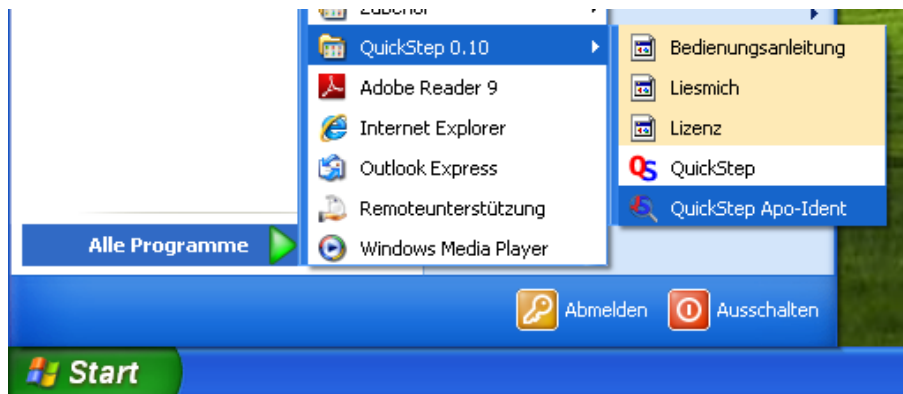


## 4. QuickStep mit einem Finder/Apo-Ident nutzen

### 4.1. Durchführen einer Identitätsprüfung in der Apotheke

#### EINSCHALTEN

- I. Schalten Sie das Analysegerät mit dem Netzschalter ein. (Er ist mit der rechten Hand unten an der Rückseite des Geräts zu erreichen.) Die Signalleuchte im Taster auf der Oberseite des Analysegeräts leuchtet rot.
- II. Starten Sie die Identitätsprüfungs-Software durch einen Klick auf *QuickStep Apo-Ident* im Startmenu oder auf dem Desktop.





- III. Beim ersten Start der Software werden Sie gebeten, die Daten Ihrer Apotheke einzugeben, wie sie in den Analyseprotokollen erscheinen soll. Außerdem werden Sie aufgefordert, einen Pfad für Ihren Archiv-Ordner anzugeben, unter dem elektronische Kopien der Prüfprotokolle und die dazugehörigen Spektren abgelegt werden.
- IV. Es öffnet sich die *QuickStep Apo-Ident*-Oberfläche.

Schritt


Schritt	QuickStep Apo-Ident 0.10 RC8
1.	Auswahl der Substanzklasse: <input type="text" value="Klassisch Flüssig/Salben"/>
(2.)	Leermessung: <span style="color: red;">●</span>
4.	Start der Messung: <span style="color: red;">●</span>
5.	Ausgabe des Ergebnisses: <div>             Name: <b>Lanolin</b>              Lateinisch: <b>Lanolinum DAB</b>              Konfidenz: <b>98,9 %</b> </div>
6.	Angaben zur Messung: <div>             Name des Benutzers: <input type="text" value="PTA Musterfrau"/>              Lieferant: <input type="text" value="Pharmafirma"/>              Verfallsdatum: <input type="text" value="29.10.2011"/>              Bezeichnung der Probe: <input type="text" value="Lanolin"/>              Chargennummer: <input type="text" value="0815"/>              Bemerkung: <input type="text"/> </div>
7.	Erstellen des Berichts: <div> <input type="button" value="Speichern"/> <input type="button" value="Drucken"/> <input type="button" value="Archiv öffnen"/> </div>

Gerätestatus: Bereitschaft

- V. Falls das Analysegerät noch ausgeschaltet ist, ist der Analyse-Knopf **Start der Messung**  grau unterlegt und nicht anklickbar. Die Signalleuchte am Analysegerät leuchtet nicht. Sie können das Analysegerät auch erst jetzt einschalten.
- VI. Das Analysegerät referenziert nun, was etwa 25 s dauert. Sie hören vielleicht den Motor, der die Referenz-Standards bewegt. Anschließend schaltet die Signalleuchte auf der Oberseite des Analysegeräts auf Grün und der Analyse-Knopf in der *Apo-Ident*-Oberfläche ist **Start der Messung**  anklickbar.

### Durchführen der Identitätsprüfung

Gehen Sie von oben nach unten durch die einzelnen Abschnitte des Fensters:


1. Unter Auswahl der Substanzklasse wählen Sie aus, ob es sich bei der Substanz um ein Pulver der klassischen Medizin handelt (*Klassisch Pulver*), um eine Flüssigkeit oder Salbengrundlage der klassischen Medizin (*Klassisch Flüssig/Salben*), um ein Granulat von traditionellen chinesischen Heilkräutern TCM (*Granulat*) oder um eine TCM-Rohdroge. Es können nur die abonnierten Datenbanken selektiert werden.
2. Falls Sie *Klassisch Flüssig/Salben* wählen, müssen Sie den Stempel und das dazu passende flache Becherglas verwenden und zuerst mit dem sauberen Stempel referenzieren. Stellen Sie dafür das leere flache Becherglas mit dem sauberen Stempel mittig auf das Messfenster und klicken dann auf den oberen Aufnahme-Knopf **Leermessung** .

Bei Pulvern, Granulaten und Rohdrogen ist dieser Schritt nicht erforderlich. Das Analysegerät referenziert intern. Der Aufnahme-Knopf ist grau unterlegt und lässt sich nicht anklicken.

3. Füllen Sie nun die Substanz in das Becherglas stellen Sie es mittig auf das Messfenster.
  - a. Bei Pulvern und Granulaten soll der Boden etwa 2mm dick bedeckt sein.
  - b. Bei Flüssigkeiten soll der Boden mindestens 1mm bedeckt sein. Stellen Sie dann den Messstempel in die Flüssigkeit. Er erzeugt eine fest Schichtdicke und eine streuende Reflektionsfläche.
  - c. Bei Salbengrundlagen (pastösen Substanzen) streichen Sie eine etwa 1mm dicke Schicht auf die Unterseite des Messtempels, setzen den Stempel in das flache Becherglas und drücken ihn leicht an.
  - d. Rohdrogen müssen nur so weit zerkleinert sein, dass sie auf dem Boden des Becherglases liegen.

Verwenden Sie ausschließlich die speziellen Bechergläser des Geräteherstellers, denn der Boden des Becherglases beeinflusst das aufgenommene Spektrum!

Achten Sie darauf, dass die Bechergläser immer gut gereinigt und nicht kontaminiert sind!

4. Klicken Sie jetzt auf den unteren **Start der Messung**  oder drücken Sie den Taster auf der Oberseite des Analysegeräts. Die Analyse beginnt, die Signalleuchte am Gerät schaltet auf Rot der Aufnahme-Knopf wird grau unterlegt. Die Probe wird für etwa 8 s beleuchtet. Anschließend prüft das Gerät, ob eine neue Referenzierung notwendig ist und führt diese gegebenenfalls durch. Das dauert etwa 25 s zusätzlich.
5. Sobald das Spektrum aufgenommen und ausgewertet ist, wird unter *Ausgabe des Ergebnisses* angezeigt, um welche Substanz es sich handelt (deutsche und

lateinische Bezeichnung). Die Signalleuchte am Gerät wechselt wieder auf Grün, und der Aufnahme-Knopf ist wieder rot und für eine erneute Messung anklickbar.


6. Für die Dokumentation nach §§6, 11 ApBetrO geben Sie nun die erforderlichen Angaben unter *Angaben zur Messung* ein.


Das Verfallsdatum können Sie über Tastatur eingeben oder mit der Maus auswählen.

Das Feld *Bezeichnung der Probe* unterbreitet Vorschläge aus der Datenbank. (Das Ergebnis der Identitätsprüfung hat keinen Einfluss auf die Vorschläge.)

Das Feld *Bemerkung* können Sie für eigene Zwecke verwenden oder es leer lassen.

7. Jetzt können Sie die Substanz als geprüft markieren, das Prüfprotokoll ausdrucken, es unterschreiben und zur Dokumentation in Ihren Unterlagen ablegen. Dazu klicken

Sie auf das Druckersymbol  unter *Erstellen des Berichts* und wählen im Drucken-Dialog den gewünschten Drucker. Eine Kopie des Ausdrucks im PDF-Format sowie das Spektrum werden automatisch gespeichert.

Weitere Kopien des PDFs können Sie mit dem Speichern-Symbol  an beliebigen Orten ablegen. Das letzte Prüfprotokoll können Sie anzeigen, wenn Sie auf das


Dokument-Symbol  klicken. Um ältere Protokolle anzusehen, öffnen Sie den

Archiv-Ordner mit Hilfe des Links [Archiv öffnen](#). Die Dateinamen enthalten die Probenbezeichnung sowie das Datum und die Uhrzeit der Prüfung.

## QuickStep-Kurzanleitung: feste&flüssige Substanzen Einmessen

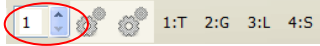
## 4.2. Einmessen von Substanzen für eine neue Datenbank mit dem Finder/Apo-Ident

[Wir arbeiten inzwischen lieber mit den Button **O:S** (für die Messung einer festen Probe / Pulver), **O:E** (für die Stempel-Leermessung vor der Messung einer flüssigen Probe), **O:F** (für die Messung einer flüssigen Probe), **O:I** (für die Messung von Pulver mit dem Probeneinsatz für geringe Substanzmengen). Die Referenzierung wird bei Bedarf angefordert.]

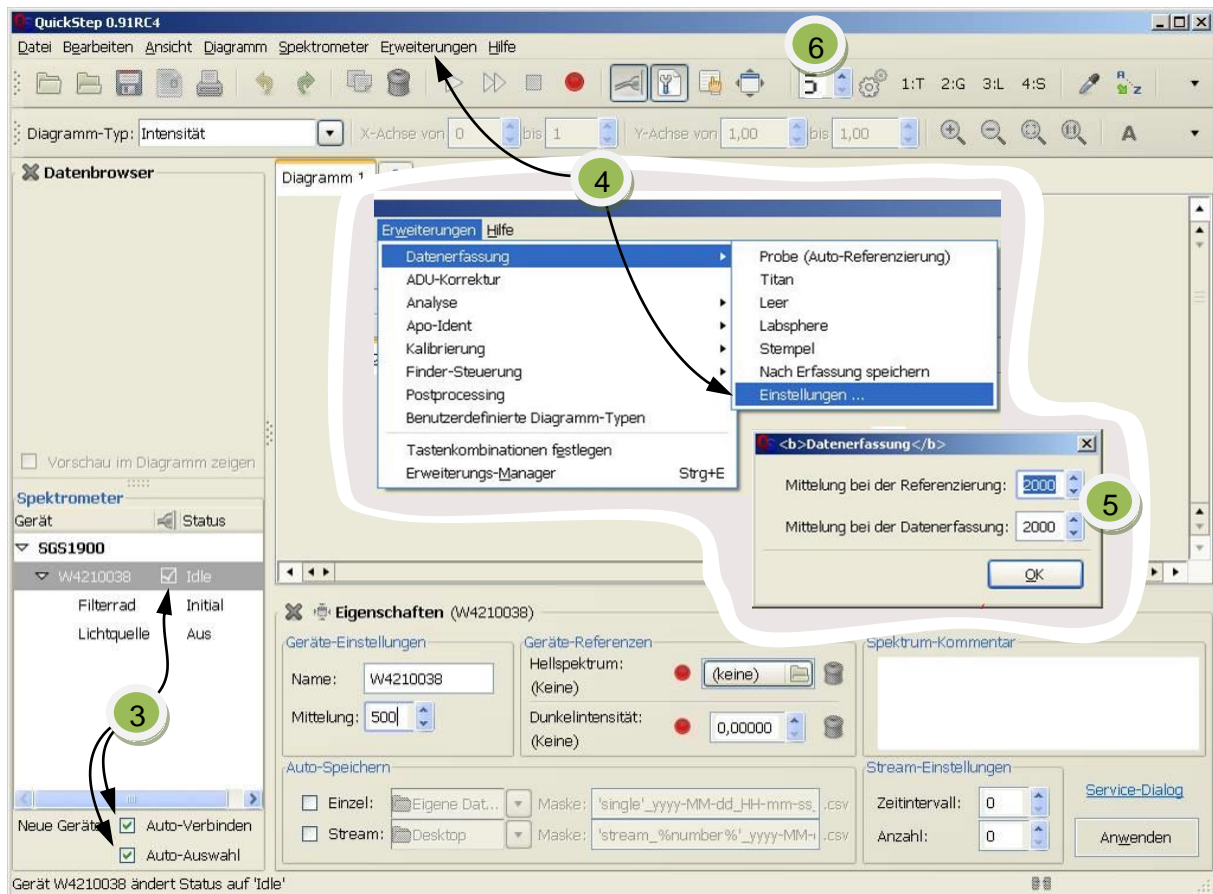
1. **QuickStep-Software starten, Gerät anschließen** und einschalten
2. Falls Sie (auch) die Spektren von **Flüssigkeiten** erfassen wollen, geben Sie im **Eigenschaften-Fenster** die Anzahl der Mittelungen ein. Wir empfehlen **2000 Mittelungen**. (Mindestens jedoch 500, falls beim Erfassen vieler Spektren die Zeit eine Rolle spielt.) Klicken Sie dann rechts unten auf . (Das Gerät muss selektiert sein =farbig unterlegt, damit die Geräte-Eigenschaften angezeigt werden.)



### 4.2.1 Einstellungen (nur bei der ersten Messreihe nach der Installation)




3. Bei ‚neue Geräte‘ unter der Spektrometer-Liste beide Optionen **‚Auto-Verbinden‘** und **‚Auto-Auswahl‘** mit einem **Häkchen** versehen. Dann verbindet sich die **QuickStep-Software** nach dem Start mit dem angeschlossenen Gerät. Eventuell müssen Sie das Gerät in der Liste dieses Mal noch manuell verbinden (Häkchen im Kästchen setzen).
4. Wählen Sie im Menü **‚Erweiterungen>Datenerfassung>Einstellungen ...‘**
5. In den sich öffnenden Einstellungen sind die Anzahlen der zu mittelnden Spektren vorzugeben. Wir empfehlen, sowohl beim **Referenzieren** als auch bei der **Datenerfassung 2000** einzutragen. (Sind die Spektren sehr vieler Proben zu erfassen, ist bei der Datenerfassung auch 500 ein guter Kompromiss.)
6. Im Toolbar  die Anzahl der nacheinander aufzunehmenden (gemittelten) Spektren vorgeben. Wir empfehlen **5 einzutragen**, um später zehn Spektren in zwei Folgen aufzunehmen.





## 4.2.2 Referenzieren (alle 15-20min)

Damit die Datenbank auf sehr präzisen Spektren beruht, müssen die externen Referenzen vor der ersten Messung und dann alle 15-20 Minuten aufgenommen werden, in der ersten Stunde nach dem Einschalten sogar noch häufiger. Und bei jedem Wechsel flüssig ↔ fest. (Die internen Referenzen werden automatisch bei jeder Messung aufgenommen.)


7. 1:T **Weißreferenz** Titanoxid messen. *Den schwarzen Ring nicht vergessen!*
8. 2:G Ein **leeres Probenglass** messen. Der grüne Button  ist aktiv. *Ring!*
9. **b) NUR** bei Flüssigkeiten/Pasten: 4:S Ein leeres Probenglass **mit Stempel** messen. Jetzt ist der blaue Button  1:T 2:G 3:L 4:S aktiv und der grüne wieder gesperrt. *Ring!*
10. Durch Klick auf den Button  **das Diagrammfenster leeren**.



## 4.2.3 Eine Probe messen

Das Probenglas muss beim Einmessen so mit der Probe befüllt werden, wie dies später bei den Prüfungen erfolgen soll. Bei Pulvern soll der Boden mit 2-3mm Substanz bedeckt sein.

Bei Flüssigkeiten reicht 1mm. Pasten werden auf den Stempel aufgetragen, so dass sie sich beim eindrücken in das Probenglas über die Stempelfläche verteilen. (Von unten sichtbar)

11. a) Bei festen Proben (Pulver, Granulate, Kräuter): Durch einen Klick auf  wird das Spektrum der Probe fünfmal gemessen (bzw. so oft, wie eingestellt). **Zwischen den Messungen** –wenn die Beleuchtung der Probe kurz erlischt– das **Probenglas drehen**, damit eventuelle Richtungsabhängigkeiten heraus gemittelt werden. **Dann die Probe schütteln**, damit eine neue Lage der Teilchen entsteht. *Den Ring nicht vergessen!*

Dann **noch einmal auf**  klicken und zwischendurch drehen.

- b) Flüssigkeiten/Pasten **genauso wie feste Proben** messen, aber mit . *Ring!*

12. Schließlich alle gesammelten Spektren **abspeichern**:  anklicken und dann

13. einen für die Weiterverarbeitung **geeigneten Dateinamen** eingeben und **Alle speichern** wählen.

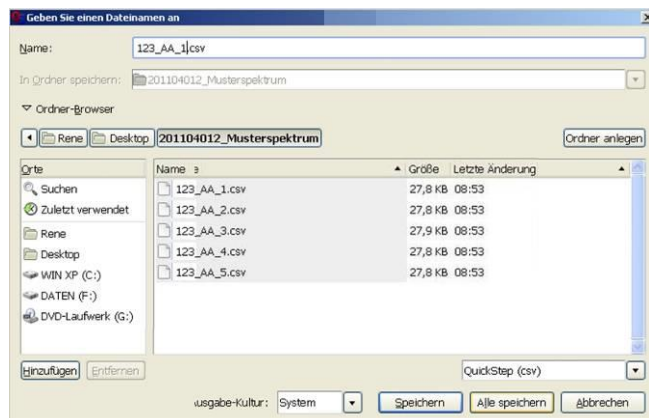
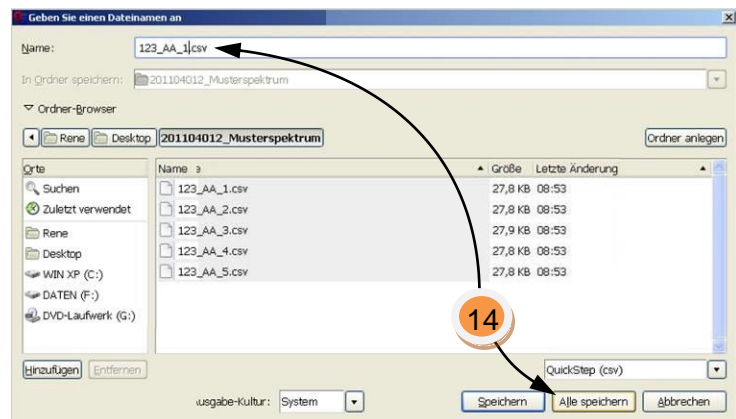
Der Dateiname muss die festgelegte Form haben, damit die Spektren beim Erstellen des chemometrischen Modells (=der Datenbank) berücksichtigt werden:

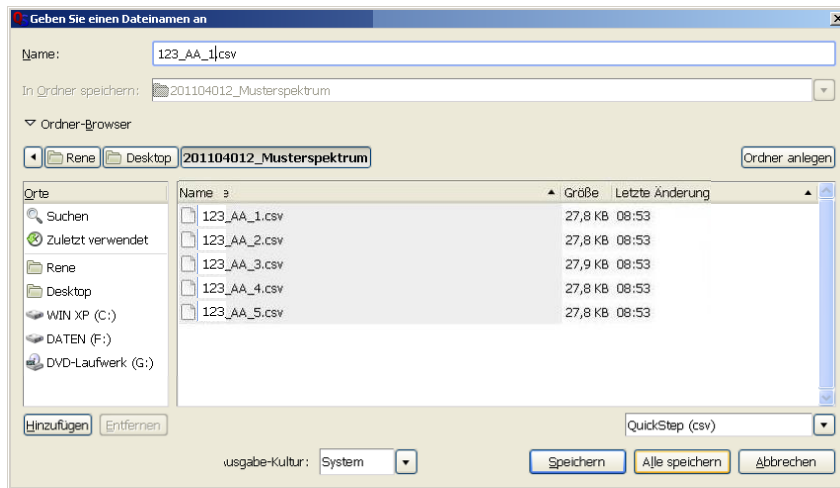
`[Ziffern]_[Buchstaben]_1.csv`

Die Ziffern stehen für die Probennummer, die zu der bestimmten Probe weist und auf dem Probenbehälter vermerkt werden sollte. Die (großen und kleinen Buchstaben vermeiden, dass ein Dateiname doppelt vorkommt. Wir empfehlen, die Messkampagnen mit A, B, ... Z, AA, AB, ... AZ, BA, ... durchzuzählen. Die „1“ sorgt dafür, dass **Alle speichern** die Dateien durchnummeriert.

14. Zuletzt durch Klick auf den Button  **das Diagrammfenster leeren**.

15. Ist es wieder Zeit zu **referenzieren?**






1. 

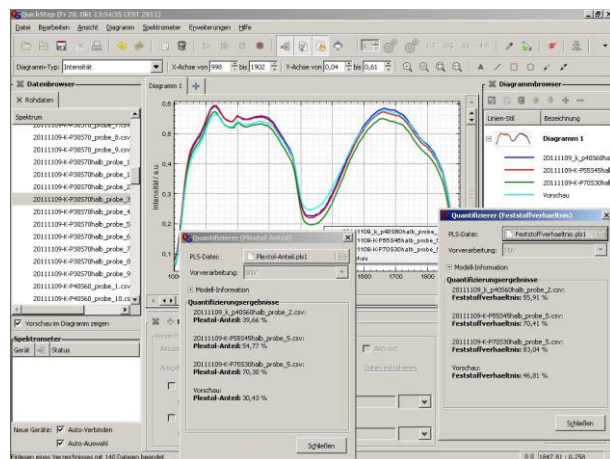
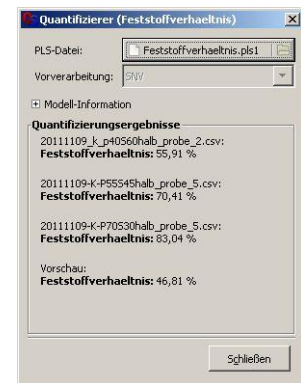
### 4.3. PLS - Der Quantifier (Nutzen einer Datenbank zur Konzentrationsmessung)

Dieses Plugin setzen wir nicht mehr ein, weil unsere Industrie-Software HS Predictor für diesen Zweck viel besser geeignet ist und auch chemometrische Modell verarbeitet, die mit dem *Calibration-Wizard* der Firma *SensoLogic* entwickelt wurden.

NIR-Spektroskopie eignet sich dazu, Konzentrationsmessungen in Gemischen, Lösungen oder Suspensionen durchzuführen. Dazu wird eine Reihe von Proben mit bekannten Konzentrationen zusammengestellt, welche den späteren Messbereich gut abdecken. Aus deren Spektren errechnet man mit Hilfe von multivariater Datenanalyse (einem statistischen Verfahren) das sog. chemometrische Modell. Dieses berechnet nun aus dem Spektrum jeder neuen Probe die Konzentrationen. Der grundlegendste Algorithmus ist die PLS1 (partial least square)

Liegt nun ein solch ein PLS1-Modell vor, kann man es mit Hilfe des Quantifier-Fensters in QuickStep einfach und schnell auf alle angezeigten Spektren anwenden, egal ob gespeichert oder gerade aufgenommen. Gehen Sie wie folgt vor:

2. Das Quantifier-Fenster öffnen Sie mit dem Button  oben rechts im Toolbar.
3. Wählen sie die gewünschte PLS-Datei. Der oberste Button öffnet den Datei-Browser.
4. Das Quantifier-Fenster zeigt die Ergebnisse für alle Spektren im Diagramm an. Wechseln Sie die Spektren in der Darstellung aktualisiert sich auch das Quantifier-Fenster.
5. Sie können auch mehrere Quantifier-Fenster öffnen und sich die Ergebnisse verschiedener PLS-Modelle gleichzeitig anzeigen lassen. (z.B. Fettgehalt und Proteingehalt)



#### 4.4. PCA - Der Identifier (Nutzen einer Datenbank zur Identifikation)

6. 

4.5.

## 5. Nach den Messungen

### 5.1. Abschalten von Gerät und PC

### 5.2. Reinigung der Bechergläser

### 5.3. Reinigung des Gerätes

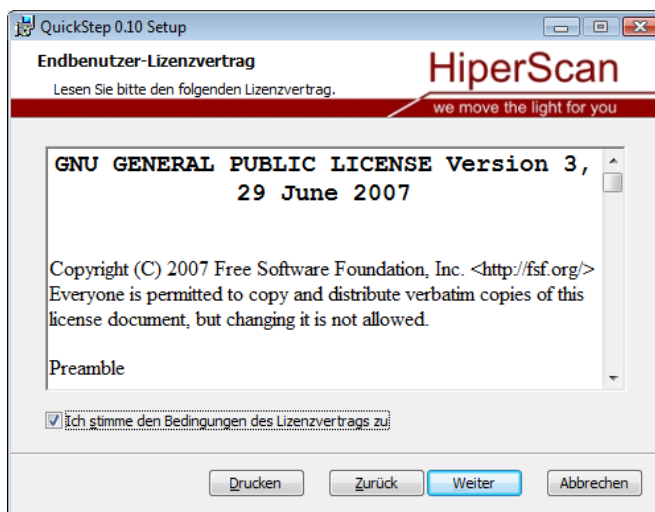
## 6. Anhang

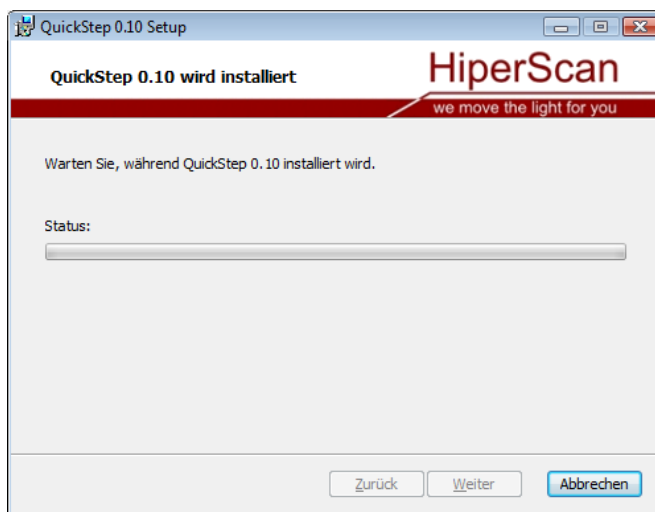
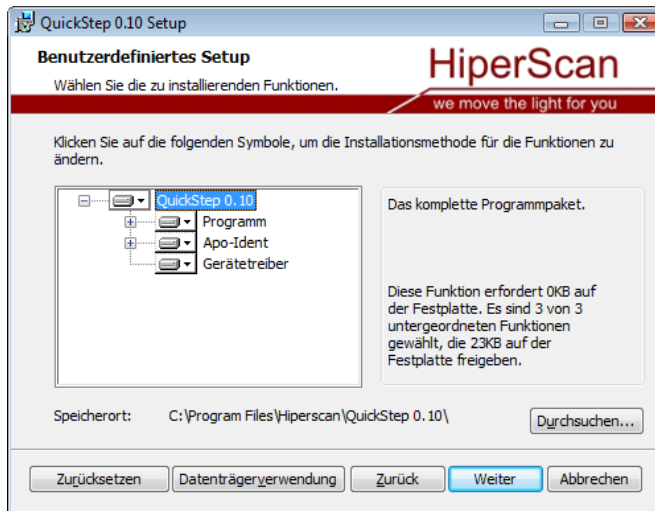
### 6.1. Die Installation der QuickStep-Software im Detail

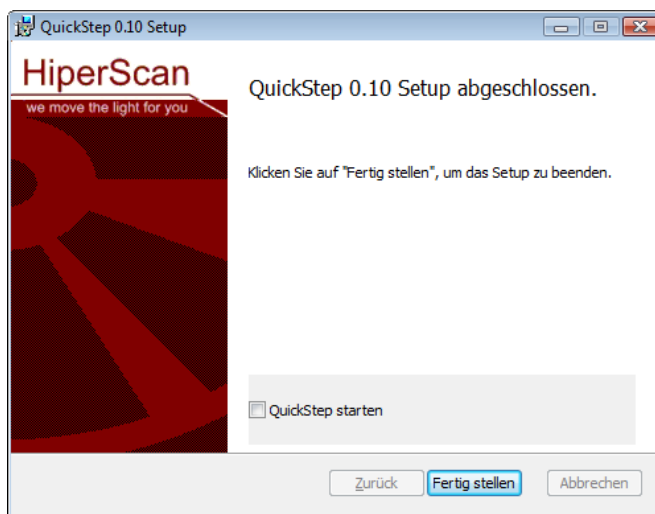
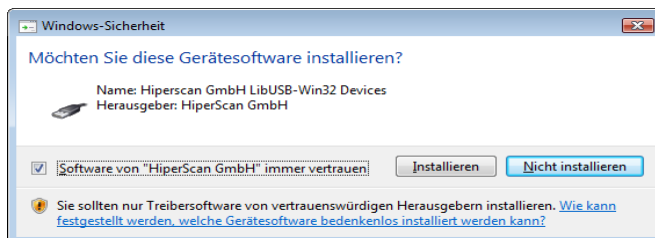
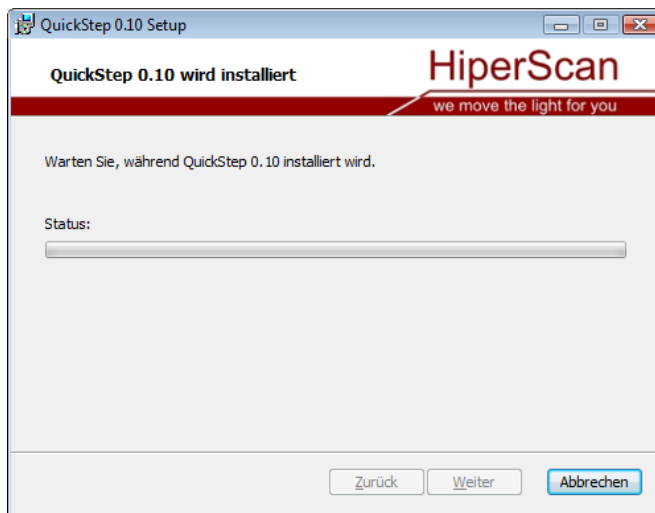
Da die Entwickler-Version in kurzen Zeitabständen verändert wird und dann jeweils nur wenige Installationen stattfinden, melden viele Virenscanner den Installer als verdächtig!

Das Programm *QuickStep.exe* startet den Installer für die *Quickstep*-Software, welche das Spektrometer ansteuert und die wir unter die Open-Source-Lizenz GPL gestellt haben.

Stimmen Sie dem Lizenzvertrag zu und klicken Sie *weiter*.

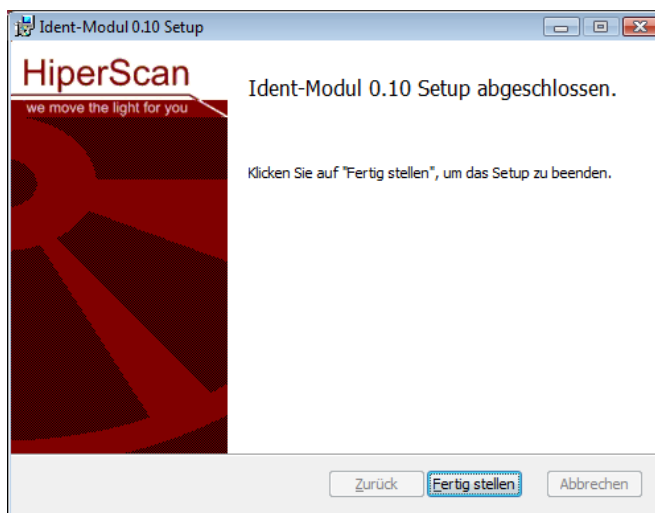
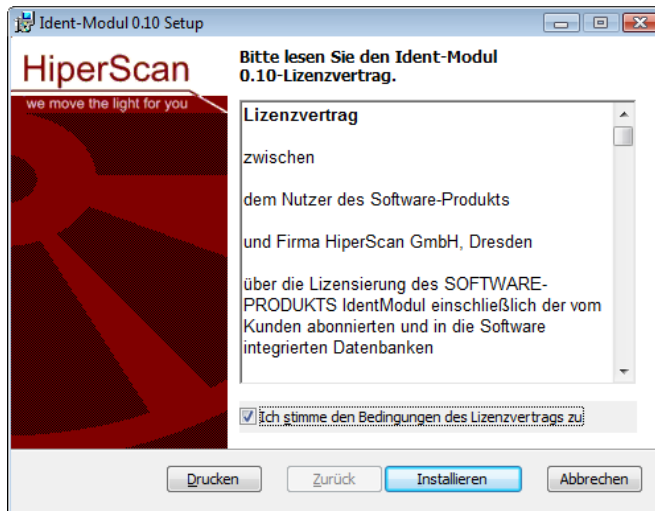






## 6.2. Die Installation der IdentModul-Software im Detail

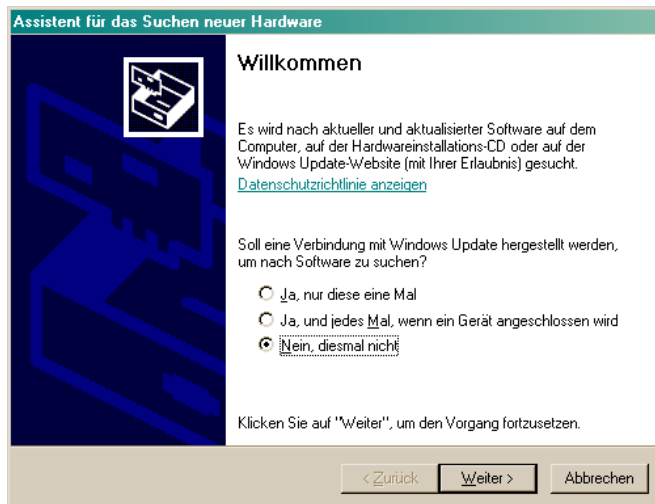




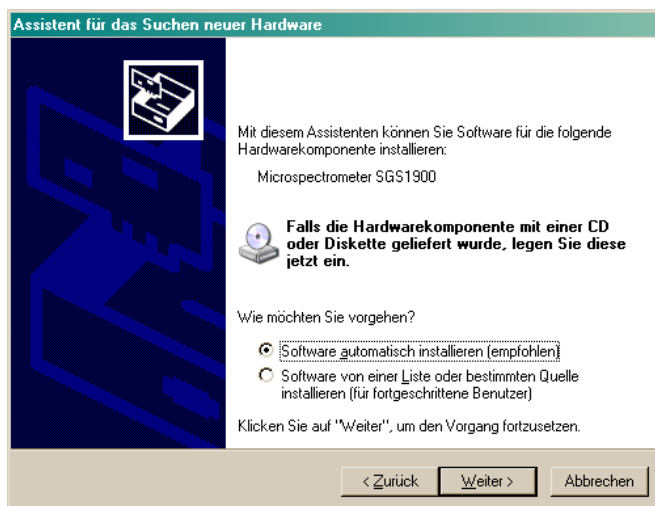
### 6.3. Die Installation des USB-Treibers im Detail

Sobald das Analysegerät per USB an den PC/Laptop mit der installierten *QuickStep*-Software angeschlossen ist, wird das USB-Gerät erkannt und der passende Treiber wird installiert. Das geht im Prinzip vollautomatisch erfordert aber dennoch ein paar Mausklicks.

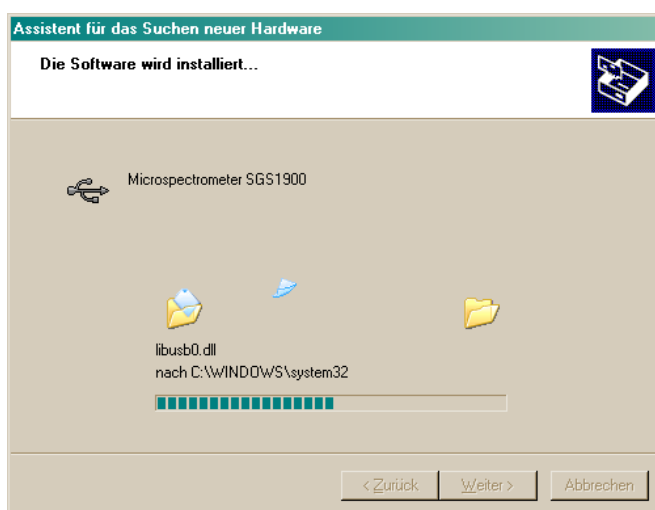
Im ersten erscheinenden Fenster können Sie auf die Verbindung zu Windows-Update verzichten. Klicken Sie Weiter.



Im zweiten Fenster wählen Sie automatisch installieren, denn die Installation der QuickStep-Software hat den Treiber bereits im System verankert. Windows kann ihn dem Analysegerät selbsttätig zuordnen. Klicken Sie Weiter.



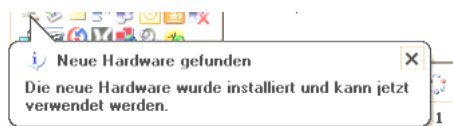
Der Verlauf der Installation wird mit einem Fortschrittsbalken angezeigt.



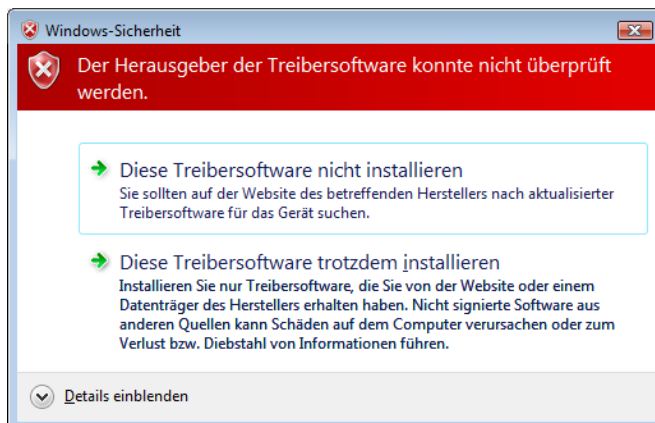
Im letzten Dialogfenster klicken Sie auf *Fertig stellen*.

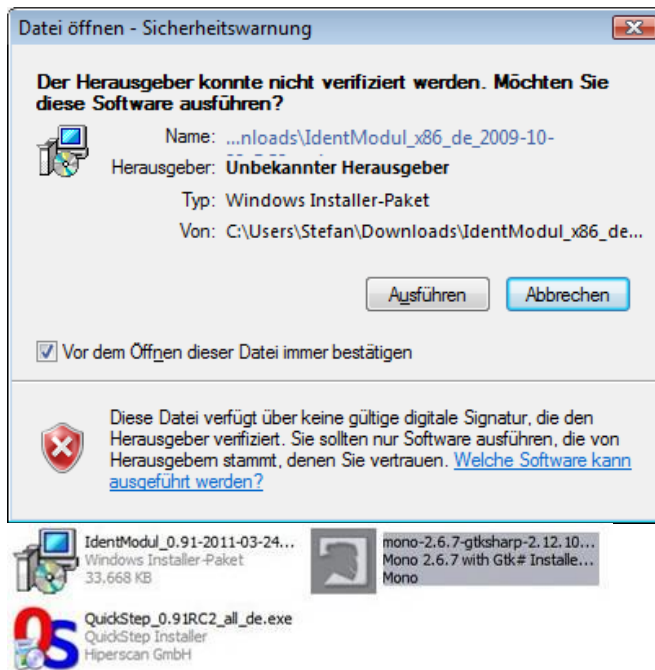


Das System meldet daraufhin die erfolgreiche Installation des USB-Treibers.



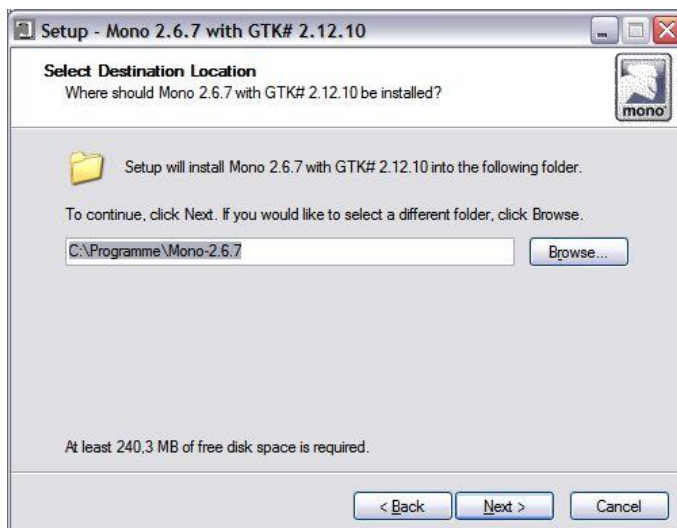
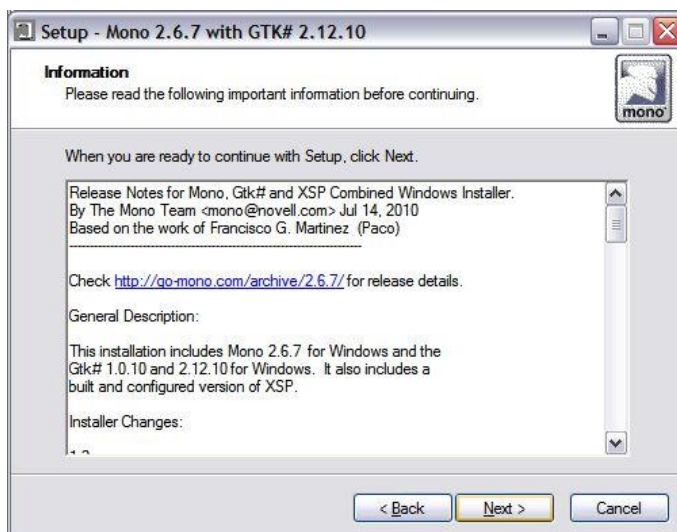
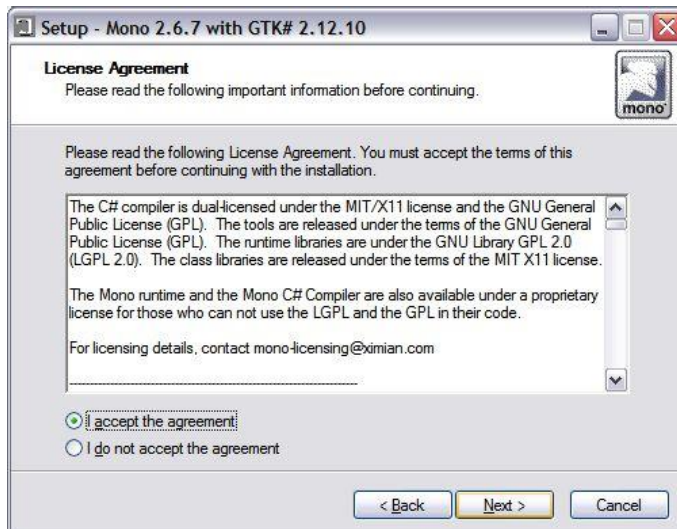
Seit Signatur nicht mehr benötigt:

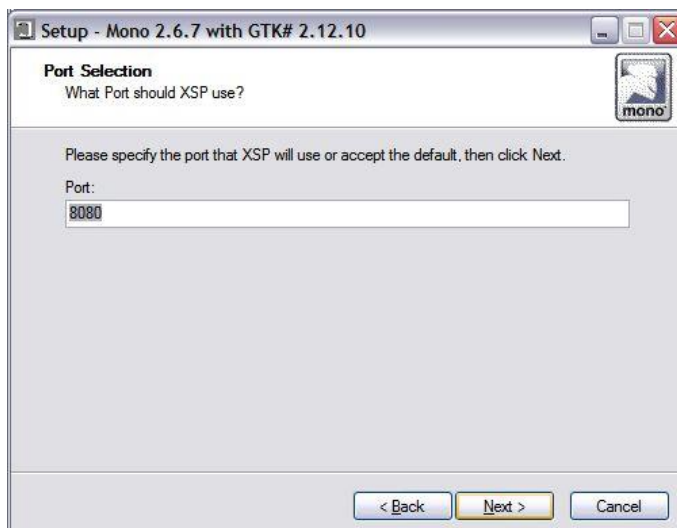
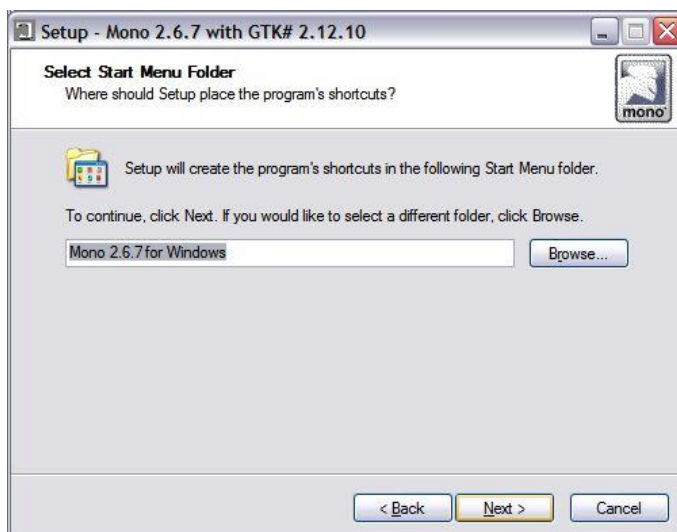
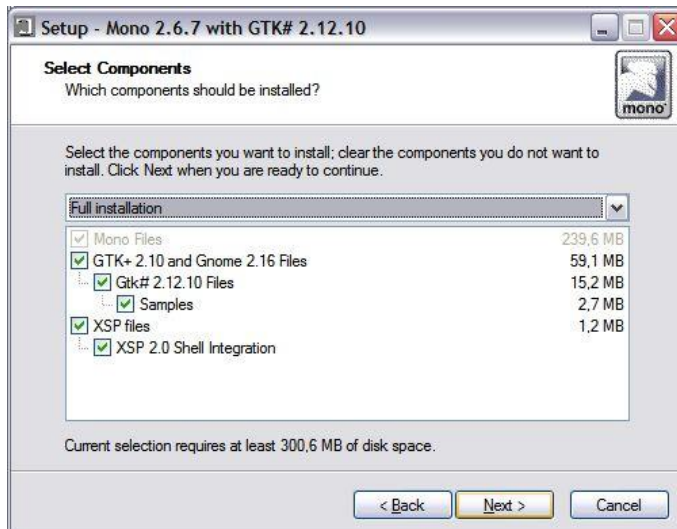


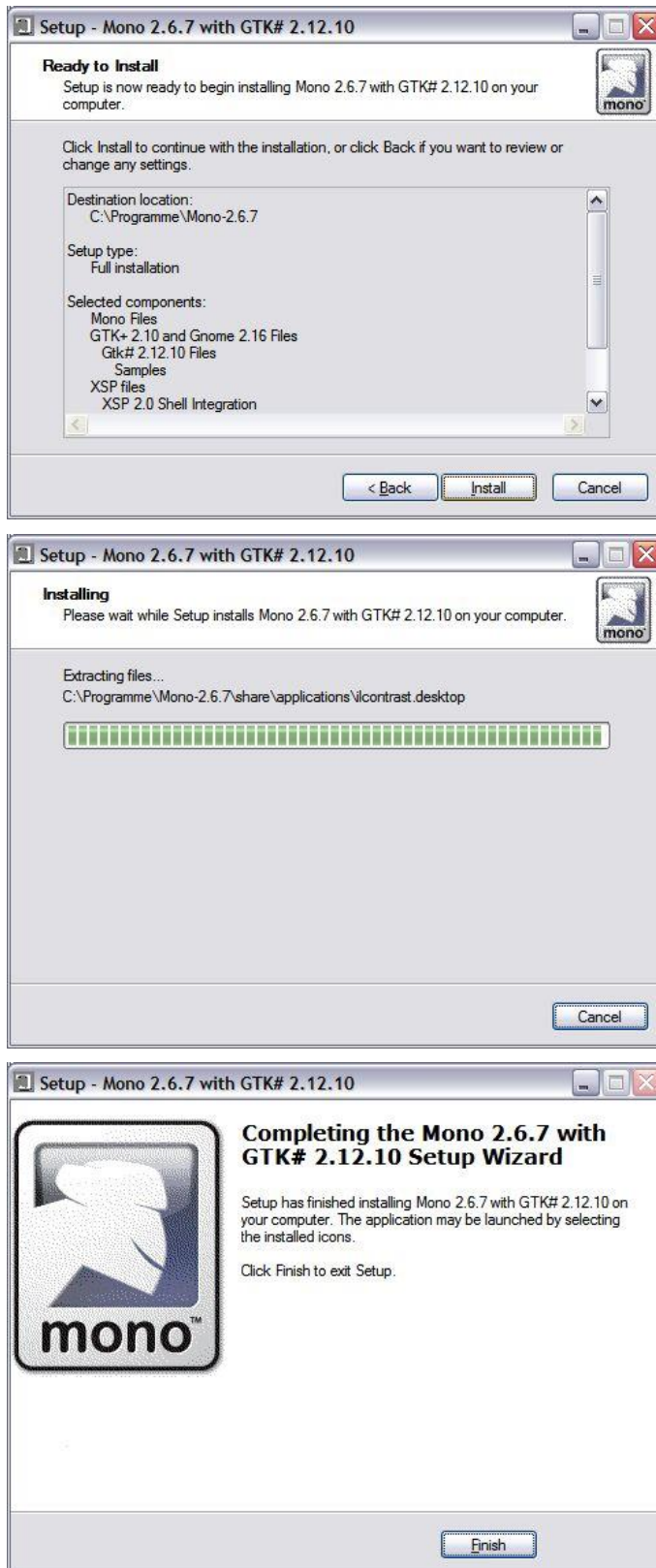


## Mono installieren



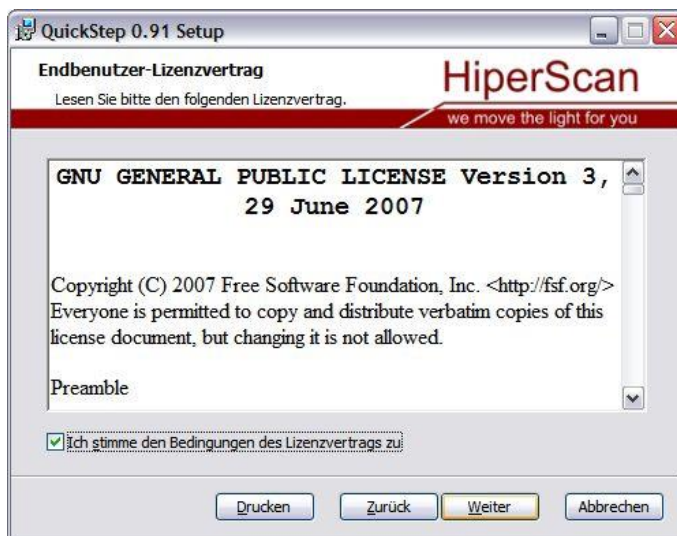






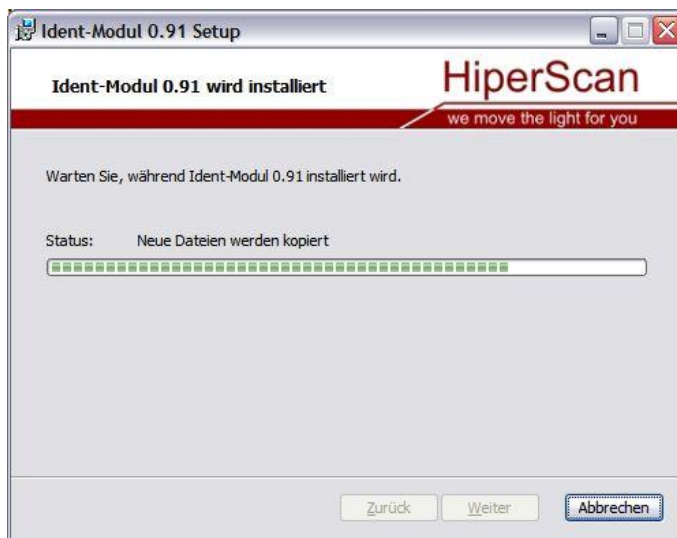
QuickStep installieren








IdentModul installieren



## 6.4. Erstellen eines PCA-Modells aus aufgenommenen Spektren

[nur mit HiperScan-interner Software durchführbar]

- A. Beim Einmessen von Rohstoffen für eine Datenbank entstehen die zwei Verzeichnisse `Rohdaten` und `Referenzierung`. Bei müssen in einem sonst leeren übergeordneten Verzeichnis stehen.
- B. Zuerst werden die Rohdaten mit den Referenzierungen zu prozessierten Spektren verarbeitet. Dazu wird dieses übergeordnete Verzeichnis mit den Maus über die Datei `Hier Verzeichnis loslassen Reapplied.cmd` im Verzeichnis `AbsorbanceTool` geschoben. Es öffnet sich eine Konsole und zeigt den Fortschritt der Berechnung an.
- C. Anschließend steht ein Verzeichnis `Processed_...` mit den prozessierten Spektren im Verzeichnis `AbsorbanceTool`. Von hier verschiebt man sie am besten in sein Arbeitsverzeichnis. In das `Processed_`-Verzeichnis müssen dann noch die Dateien `example.template`, `parameters.txt` und ggf. auch `identities.txt` und `names.txt` kopiert werden.
- D. Bis zum Erstellen des endgültigen Modells hat nur die Datei `example.template` wirklich Bedeutung. Darin stehen die Einstellungen für den PCA-Algorithmus.
- E. Das Verzeichnis `Processed_...` wird nun über `Hier Verzeichnis loslassen.cmd` im Verzeichnis `FactorAnalysis` geschoben. Es öffnet sich wieder eine Konsole, die den Fortschritt der PCA-Berechnung anzeigt.
- F. Anschließend steht die Datei `Ausgabe.pca` mit dem PCA-Modell im Verzeichnis `FactorAnalysis`.
- G. Um diese Datenbank (korrekt: dieses Modell) zu verwenden, den Identifier starten durch Klick auf  (oder im Menü `Erweiterungen>Identifier`) Der Identifier in QuickStep kann `Ausgabe.pca` einlesen und auf alle Spekten im aktuellen Diagramm anwenden.

`x` und `parameters.txt` in `Processed`-Ordner kopieren, ggf. auch `identities.txt` auch `Processed`-Ordner verschieben

`example.template` editieren:

- Solid/Fluid
  - Inputwavelength z.B. 1050-1400;1520-1850
  - Preconditioner aus QuickStep Pipette lernen: Vorverarbeitung (In QS nicht ändern)
  - SG\_PARAMETERS Polynom-Ordnung;Anzahl Punkte;Ableitung
- Rest (Bis auf PROJECTION DIMENSION) sind nur Default-Vorgaben für QS
- ALGORITHM aus QuickStep Pipette lernen: ID-Modell (In QS ruhig ändern)
  - PROJECTION DIMENSION Wieviele Hauptkomponenten berechnen?
  - PCA\_DIMENSION Wieviele Hauptkomponenten angewendet werden? In QS veränd.

Auf Factor-Analysis „Hier....cmd“ schieben → `Ausgabe.pca`

`Ausgabe.pca` in Identifier laden

Man kann auch names.txt ggDatei mit „Bezeichnung[Tab]neuerName“ laden