

Application Note:

Einfache und leistungsfähige Software für die Spektroskopie

Immer komplexere Geräte- und Softwarelandschaften im spektroskopischen Labor wecken den Bedarf nach Vereinheitlichung und Vereinfachung bei Routineaufgaben und bei der Spektrenidentifikation.

Moderne optische Spektrometer sind heute ohne Software nicht mehr vorstellbar. Software steuert die Spektrenakquisition, bearbeitet und prozessiert die Spektren und bietet zahlreiche Hilfsmittel zur Analyse der gemessenen Daten.

Dazu gehört auch die Identifikation unbekannter Proben mittels Suche in Referenzbibliotheken. Solche Spektrendatenbanken sind kommerziell erhältlich; außerdem können Labore mit der Zeit ihre eigenen Spektrensammlungen aufbauen.

Jeder Hersteller von Spektrometern bietet hierzu eigene Softwaretools an, die die jeweils eigenen Spektrometer steuern und zur Verarbeitung der Daten teils mächtige und spezialisierte Funktionalität bieten. Letzteres stellt oftmals ein Alleinstellungsmerkmal dar und kann auf dem Markt Wettbewerbsvorteile bieten, weil den Anwender:innen so Spezialanwendungen oft erst ermöglicht werden. Für einfache Routinetätigkeiten hingegen, insbesondere wenn in einem Labor Geräte und Software verschiedener Hersteller vorhanden sind, kann die Vielzahl der Softwareprogramme zum Hindernis werden. Die Anwender:innen müssen den Umgang mit den Prozessierungswerkzeugen in unterschiedlicher Software beherrschen, Algorithmen unterscheiden sich von Hersteller zu Hersteller, und oftmals wird fortgeschrittene Funktionalität im Alltag gar nicht benötigt und kann die Anwender:innen sogar überfordern.

„Kleinere“ Spektrometerhersteller, die ihre Software selbst erstellen, können manche Funktionalitäten oft auch gar nicht erst anbieten, so dass etwa eine Suchfunktion u.U. gar nicht zur Verfügung steht.

Da Datenbank- und Dateiformate nicht standardisiert sind, sind Bibliotheken und Spektren zudem nicht immer zwischen verschiedenen Softwarepaketen austauschbar. Ein Vergleich von Spektren von unterschiedlichen Instrumenten wird somit mindestens erschwert. Ansätze zur Schaffung übergreifender Datenformate gab es zwar mehrfach (etwa JCAMP, AnIML oder Allotrope, um nur einige zu nennen), aber diese haben sich bisher leider nicht flächendeckend durchsetzen können.

Die Machete im Softwareschunzel

Für Routineaufgaben zur Identifikation von Proben, insbesondere in Laboren mit diversem Instrumentenbestand, ist daher eine einheitliche Software wünschenswert, die die schnelle und einfache Bearbeitung und Vergleich von Spektren unterschiedlicher Dateiformate erlaubt und leistungsfähige Spektrensuchen sowohl in kommerziellen Spektrendatenbanken als auch in der eigenen Spektrensammlung unterstützt.

Diesen Bedarf abzudecken war der Leitgedanke bei der Konzeption von SpectraGenius durch S.T.Japan-Europe. Die S.T.Japan-Europe GmbH bietet seit über 20 Jahren weltweit hochwertige Spektrendatenbanken für ATR-FTIR, Transmissions-IR, NIR und Raman in verschiedenen Formaten an. Anwender:innen, die eine leicht zu bedienende, unkomplizierte Software zur routinemäßigen Bearbeitung und Identifikation von Spektren unterschiedlichster Formate suchen, sollten eine Lösung erhalten, die mit den Spektrendatenbanken von S.T.Japan funktioniert und schnell Ergebnisse liefert. Katja Holland-Moritz, CEO der S.T.Japan-Europe GmbH, erläutert dazu: „Wir wollen in keinsten Weise mit der Software von Spektrometerherstellern konkurrieren, sondern eine Ergänzung bieten, die auch und vor allem für kleinere Labore und Bildungseinrichtungen erschwinglich und attraktiv ist“.

Über 60 Spektrenformate

Die SpectraGenius-Software kann Spektren in mehr als 60 Dateiformaten unterschiedlicher Anbieter wie Thermo, Bruker, Perkin-Elmer, Shimadzu u.v.m. einlesen. Dabei erlaubt der Preview-Modus eine schnelle Vorschau der zu ladenden Daten, so dass nur diejenigen Spektren im Arbeitsbereich landen, die auch wirklich bearbeitet werden sollen.

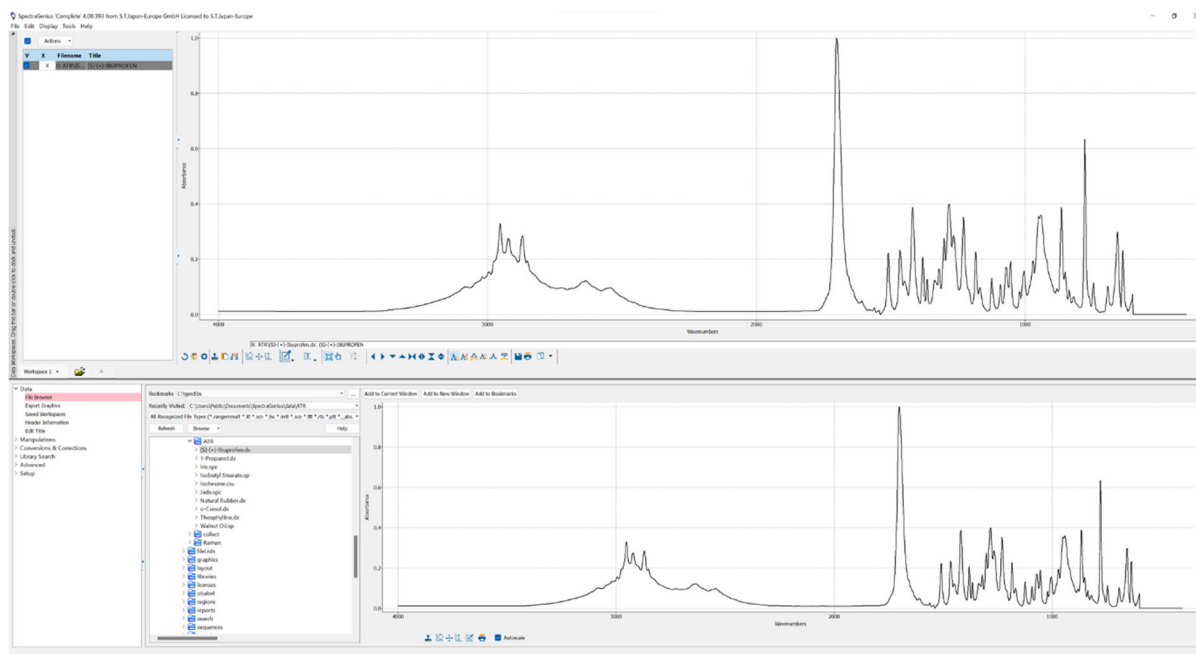


Bild 1: Die intuitive Benutzeroberfläche von SpectraGenius mit dem Preview Mode

Einmal geladen, können einzelne oder mehrere Spektren gleichzeitig bearbeitet werden. Neben verschiedenen Achsenkonvertierungen, Anpassungen des Spektrenbereichs und der Auflösung bietet SpectraGenius automatische und händische Korrekturen der Basislinie, Glättung, Offsetkorrektur, Normalisierung und mehr. Alle Operationen können dabei jederzeit und vollständig rückgängig gemacht werden. So lassen sich die Spektren schnell, transparent, effizient und vor allem einheitlich bearbeiten und für eine Spektrensuche vorbereiten, egal, auf welchem Spektrometer sie zuvor aufgenommen wurden.

Für Routineaufgaben lassen sich alle Operationen auch sehr einfach und ganz ohne Programmierkenntnisse im Batch Processing-Werkzeug automatisieren und dann mit wenigen Klicks auf zahlreiche Spektren gleichzeitig anwenden. Nur wenige Spektren müssen dann – wenn überhaupt – noch von Hand bearbeitet werden, was den Anwender:innen viel Zeit und Mühe erspart.

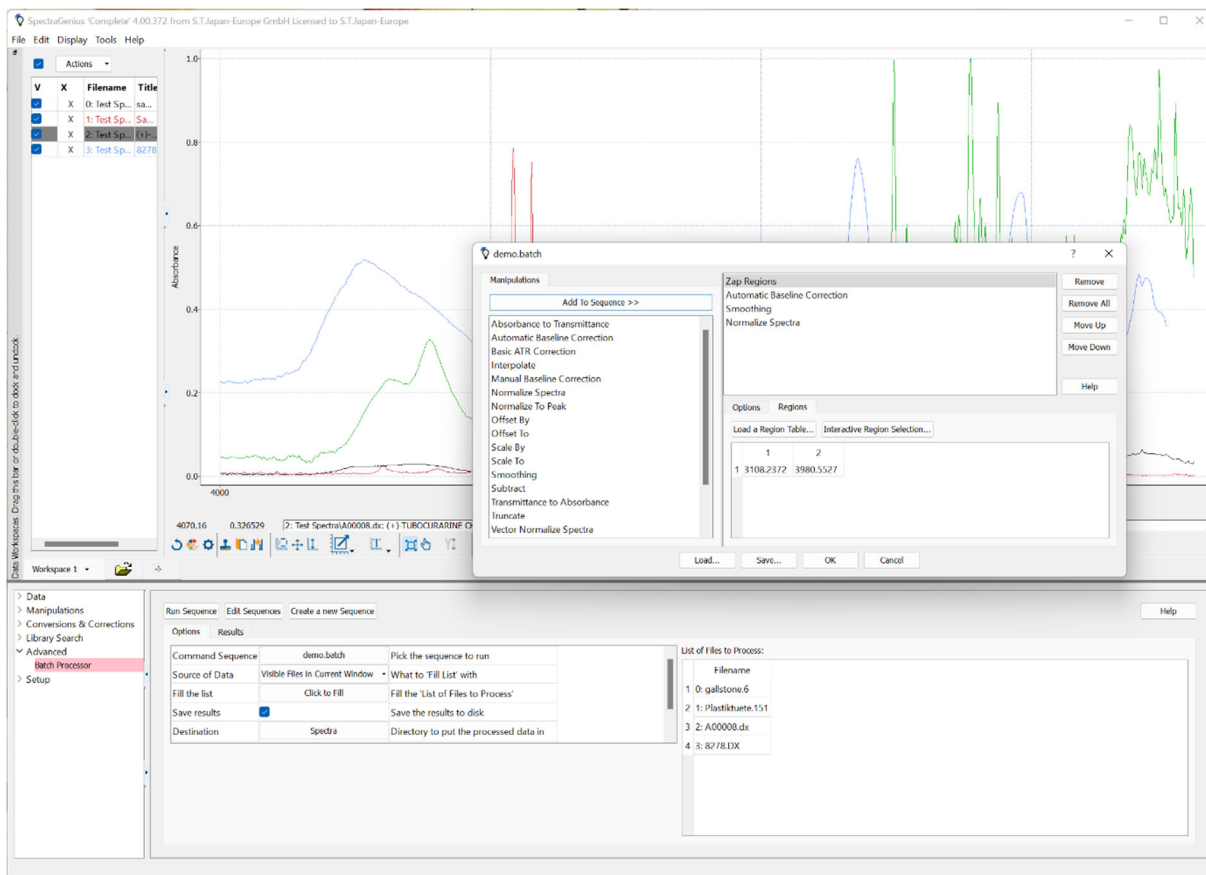


Bild 2: Der Batch Processing Mode erlaubt die einfache Automatisierung routinemäßiger Abläufe ganz ohne Programmierkenntnisse.

Für Übersicht bei der Arbeit an unterschiedlichen Projekten sorgt dabei die Möglichkeit, mehrere verschiedene Arbeitsbereiche in der Software anzulegen und sogar zur späteren Weiterverwendung abzuspeichern. So werden Daten nicht durcheinandergemischt.

Schnelle Suche in Spektrendatenbanken

Zur einfachen Identifikation unbekannter Proben oder der Wareneingangskontrolle bietet sich der Vergleich des gemessenen Spektrums mit einem Referenzspektrum an. Identität und Reinheit der Probe können so schnell überprüft werden. An die Stelle des händischen Vergleichs mit gedruckten Spektren aus dicken Spektrenatlanten ist im Zeitalter der Digitalisierung die automatisierte Spektrensuche in Referenzdatenbanken getreten. Mittels leistungsfähiger Vergleichsalgorithmen werden Spektren miteinander verglichen und der Grad der Übereinstimmung durch einen Zahlenwert angegeben. Die nach diesem Zahlenwert sortierten Ergebnisse werden dann auf dem Bildschirm angezeigt und können im Nachgang durch den:die Anwender:in überprüft werden.

SpectraGenius wartet hier mit einer besonders schnellen Suche auf, die auch zehntausende von Spektren binnen weniger Sekunden vergleicht und die Ergebnisse ausgibt. Die Liste der Treffer kann nicht nur betrachtet, sondern zur weiteren Verarbeitung z.B. nach Microsoft Excel oder Word exportiert oder aber als gedruckter Bericht oder PDF ausgegeben werden.

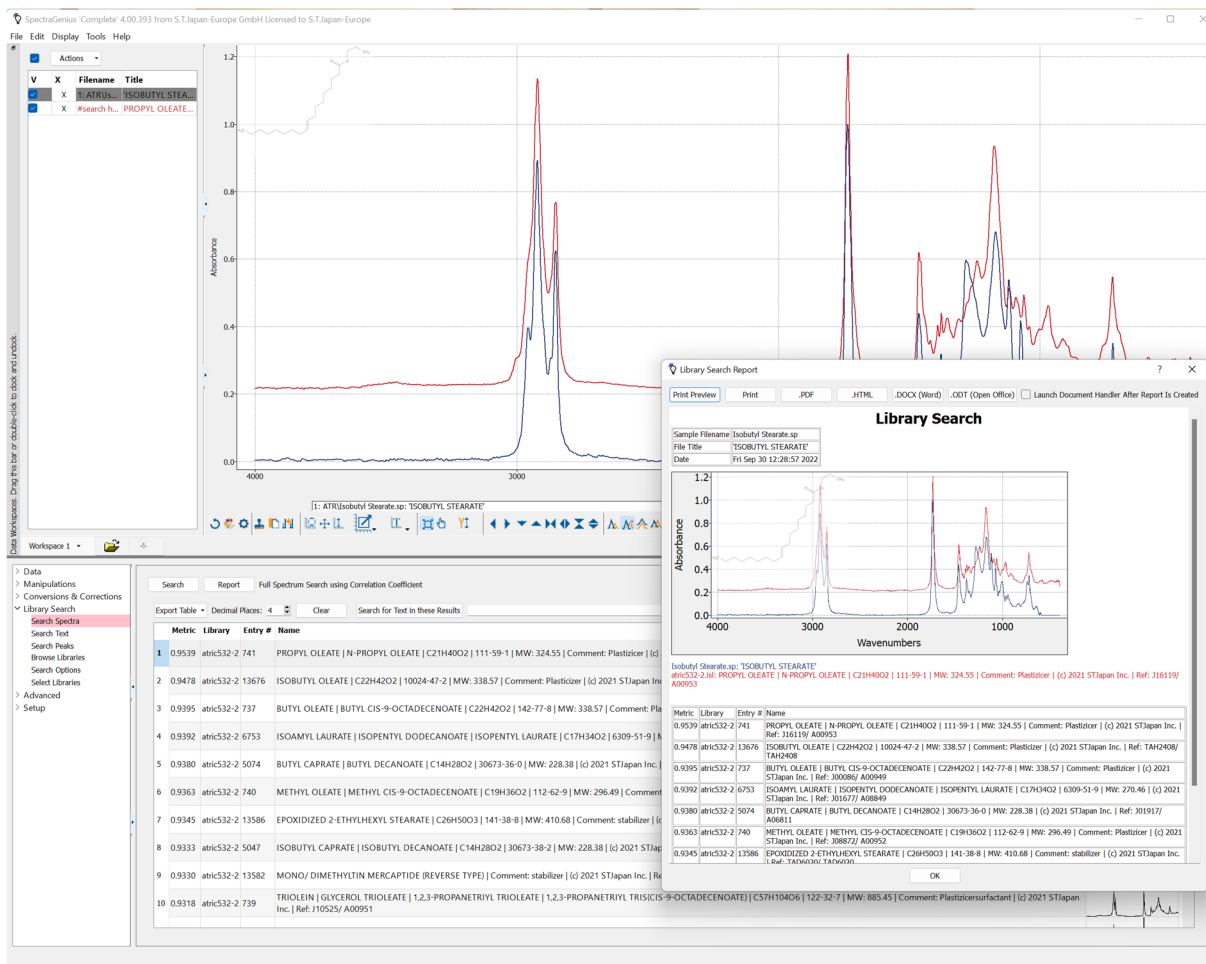


Bild 3: Die Spektrensuche in SpectraGenius ist schnell und erlaubt die einfache Ausgabe von Ergebnisberichten.

Hierfür können Spektrendatenbanken in einigen gängigen Formaten (Thermo Galactic, Thermo Nicolet, Perkin-Elmer SPL) verwendet werden; entweder bereits selbst erstellte aus der jeweiligen Herstellersoftware oder aber kommerziell erworbene wie beispielsweise die dutzenden Bibliotheken mit zigtausenden Spektren von S.T.Japan-Europe. Weiterhin ist es möglich, ein Verzeichnis auf dem Dateisystem als Basis für die Suche anzugeben, so dass auch die Suche in eigenen Spektrensammlungen ermöglicht wird.

Spektrensuchen in SpectraGenius können dabei auf dem vollen Spektrenbereich oder auf ausgewählten Spektrenregionen durchgeführt werden. Weiterhin ist die Suche nach bestimmten Peaks oder aber eine Suche nach Text in der Beschreibung der Spektren möglich. Ein Ergebnis einer Spektrensuche kann so auch durch eine nachfolgende Textsuche weiter eingegrenzt werden.

Einfache Weiterverarbeitung der Ergebnisse

Wie bereits erwähnt, können Ergebnislisten von Suchvorgängen auf einfache Art und Weise auf dem Drucker ausgegeben und nach z.B. PDF oder Microsoft Office exportiert werden. Ebenso ist es möglich, Daten in ausgewählten Formaten als Spektrum oder als Bild abzuspeichern und in anderer Software beispielsweise zur Berichtserstellung weiterzuverarbeiten. Für einfache gedruckte Berichte bietet SpectraGenius zudem einen Layout-Editor, so dass das Ausgabelayout nach eigenen Wünschen angepasst werden kann.

Vielfältige Möglichkeiten

SpectraGenius ist als 30-Tage-Demoversion sowie in verschiedenen Paketen mit speziell ausgewählten ATR- und/oder Ramandatenbanken erhältlich, wahlweise mit englischem oder japanischem Benutzerinterface und entsprechenden Datenbanken. Sämtliche S.T.Japan-Spektrendatenbanken sind ebenfalls für SpectraGenius verfügbar.

Frau Dr. Maren Fiege

CTO

S.T.Japan-Europe GmbH

www.stjapan.de