



Agilent 8453 UV-Vis Spektroskopie-System



Bedienungshandbuch



Agilent Technologies

Hinweise

© Agilent Technologies, Inc. 2002, 2003

Die Vervielfältigung, elektronische Speicherung, Anpassung oder Übersetzung dieses Handbuchs ist gemäß den Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes ohne vorherige schriftliche Genehmigung durch Agilent Technologies verboten.

Handbuch-Teilenummer

G1115-92021

Ausgabe

10/2003

Gedruckt in Deutschland

Agilent Technologies Deutschland GmbH
Hewlett-Packard-Straße 8
76377 Waldbronn

Microsoft® ist ein in den USA eingetragenes Warenzeichen der Microsoft Corporation.

Softwareversion

Dieses Handbuch gilt für die Versionen A.10.xx der Software Agilent ChemStation, wobei xx eine Zahl zwischen 00 und 99 ist, die sich auf kleinere Versionsänderungen der Software bezieht, die nicht die technische Genauigkeit dieses Handbuchs betreffen.

Gewährleistung

Agilent Technologies behält sich vor, die in diesem Handbuch enthaltenen Informationen jederzeit ohne Vorankündigung zu ändern. Agilent Technologies übernimmt keinerlei Gewährleistung für die in diesem Handbuch enthaltenen Informationen, insbesondere nicht für deren Eignung oder Tauglichkeit für einen bestimmten Zweck. Agilent Technologies übernimmt keine Haftung für Fehler, die in diesem Handbuch enthalten sind, und für zufällige Schäden oder Folgeschäden im Zusammenhang mit der Lieferung, Ingebrauchnahme oder Benutzung dieses Handbuchs. Falls zwischen Agilent und dem Benutzer eine schriftliche Vereinbarung mit abweichenden Gewährleistungsbedingungen hinsichtlich der in diesem Dokument enthaltenen Informationen existiert, so gelten diese schriftlich vereinbarten Bedingungen.

Technologielizenzen

Die in diesem Dokument beschriebene Hardware und/oder Software wird/werden unter einer Lizenz geliefert und dürfen nur entsprechend den Lizenzbedingungen genutzt oder kopiert werden.

Nutzungsbeschränkungen

Wenn Software für den Gebrauch durch die US-Regierung bestimmt ist, wird sie als "kommerzielle Computer-Software" gemäß der Definition in DFAR 252.227-7014 (Juni 1955), als "kommerzielle Komponente" gemäß der Definition in FAR 2.101(a), als "nutzungsbeschränkte Computer-Software" gemäß der Definition in FAR 52.227-19 (Juni 1987) (oder einer vergleichbaren Agentur- oder Vertragsregelung) ausgeliefert und lizenziert. Nutzung, Vervielfältigung oder Weitergabe von Software unterliegt den standardmäßigen Bestimmungen für kommerzielle Lizenzen von Agilent Technologies. US-Regierung und -Behörden

(außer Verteidigungsministerium) erhalten keine Rechte, die über die Rechte an "nutzungsbeschränkter Computer-Software" gemäß FAR 52.227-19(c)(1-2) (Juni 1987) hinausgehen. Zur US-Regierung zählende Benutzer erhalten keine Rechte, die über die Rechte an "nutzungsbeschränkter Computer-Software" gemäß FAR 52.227-14 (Juni 1987) oder DFAR 252.227-7015 (b)(2) (November 1995) hinausgehen, soweit in irgendwelchen technischen Daten anwendbar.

Sicherheitshinweise

VORSICHT

Ein **VORSICHT**-Hinweis macht auf Arbeitsweisen, Anwendungen o. ä. aufmerksam, die bei falscher Ausführung zur Beschädigung des Produkts oder zum Verlust wichtiger Daten führen können. Wenn eine Prozedur mit dem Hinweis **VORSICHT** gekennzeichnet ist, dürfen Sie erst fortfahren, wenn Sie alle angeführten Bedingungen verstanden haben und diese erfüllt sind.

WARNUNG

Ein **WARNUNG**-Hinweis macht auf Arbeitsweisen, Anwendungen o. ä. aufmerksam, die bei falscher Ausführung zu Personenschäden, u. U. mit Todesfolge, führen können. Wenn eine Prozedur mit dem Hinweis **WARNUNG** gekennzeichnet ist, dürfen Sie erst fortfahren, wenn Sie alle angeführten Bedingungen verstanden haben und diese erfüllt sind.

In diesem Handbuch ...

Damit Sie sich mit Ihrem neuen 8453 System für die UV-Vis-Spektroskopie schnell zurechtfinden, enthält dieses Handbuch schrittweise Arbeitsweisen und Beispiele für den Einsatz in der Praxis.

Dieses Buch ersetzt nicht die ausführlichen Handbücher zur Installation: *Installation Ihres UV-Vis Spektrofotometers* und Bedienung der Software *Informationen zu Ihrem UV-Vis Spektrofotometer* noch das *Agilent 8453 Servicehandbuch*.

1 Einführung in das System

Dieses Kapitel enthält eine Einführung zu Ihrem Agilent 8453 Spektrofotometer. Außerdem wird die prinzipielle Funktionsweise Ihrer Agilent ChemStation Software erläutert.

2 Installation und Inbetriebnahme

In diesem Kapitel finden Sie eine Zusammenfassung der Systeminstallation. Weiterhin wird auch der Beginn einer Messung erläutert.

3 Ratschläge für eine erfolgreiche Messung

In diesem Kapitel finden Sie praktische Hinweise für den täglichen Gebrauch.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

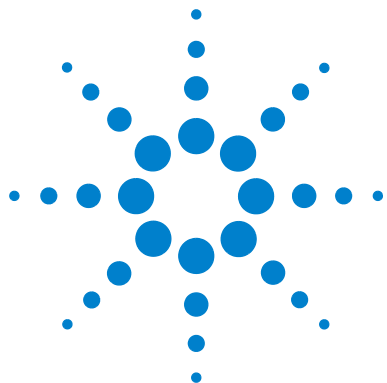
Dieses Kapitel enthält schrittweise nachzuvollziehende Beispiele für grundlegende Messungen und damit verbundene Aufgaben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung in das System	9
	Agilent 8453 Spektrofotometer — Überblick	10
	Überblick über das optische System	10
	Beschreibung des Spektrofotometers	13
	Allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie — Überblick	18
	Bestandteile der Benutzeroberfläche	19
	Software-Struktur	23
	Aufgabenstellungen im Standardmodus	25
	Datenverarbeitung im Standardmodus	29
2	Installation und Inbetriebnahme	35
	Zusammenfassung der Installation des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie	36
	Allgemeines	36
	Spektrofotometer	36
	PC	37
	Starten einer Messung	38
3	Ratschläge für eine erfolgreiche Messung	39
	Allgemeine Hinweise	40
	Konzept des Spektrofotometers	40
	Durchführung von Messungen	40
	Material der Probenküvette	41
	Optische Spezifikationen der Küvetten	41
	Küvetten mit Aperturen	42
	Durchflussküvetten	44

Umgang mit und Pflege von Küvetten	44
Lösungsmittel	46
Vorbereiten der Probe	48
Lichtempfindliche Proben	49
Überwachen des Rührvorgangs und der Temperatur	49
Checkliste für optimale Ergebnisse	50
Einsetzen einer Küvette	53
4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie	55
Start der ersten Messung	56
Starten der UV-Vis-Spektroskopie-Software	58
Messen der Absorption von Koffein bei 273 nm	59
Speichern der Parameter in einer Methode	62
Abrufen und Drucken einer Methode	64
Speichern und Abrufen von Daten	68
Speichern Ihrer Proben	68
Speichern eines ausgewählten Spektrums	70
Abrufen von Spektren	72
Löschen der aktuellen Spektren	73
Reportvorschau drucken	74
Ermitteln des Absorptionsmaximums von Koffein	77
Eingeben der Küvetten-Schichtdicke	81
Steuern des Sippersystems	83
Verwenden des Mehrfachküvettenwechslers	85
Quantitative Analyse unter Verwendung einer Kalibrierung mit Standards	88
Einrichtung	88
Kalibrierung	91
Analyse	93

Wie man sicherstellt, dass das Agilent 8453 korrekt funktioniert	96
Agilent 8453 Selbsttest	96
Wie man weitergehende Informationen zur UV-Vis Spektroskopie erhält	99
Wann ist eine Leerprobe zu messen?	101
Index	103



1

Einführung in das System

Agilent 8453 Spektrofotometer — Überblick 10

Allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die
UV-Vis-Spektroskopie — Überblick 18

Der Einsatz des Systems gestaltet sich bei Kenntnis der generellen Software-Struktur sehr einfach. Mit Hilfe der Speichermodelle für Datenerfassung, Datenauswertung und Datenbearbeitung können Sie das System erfolgreich einsetzen.

Ihr Spektroskopiesystem basiert auf einem Agilent 8453 Spektrofotometer und der allgemein verwendbaren Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie. Die Software wird auf einem PC mit dem Microsoft Betriebssystem eingesetzt. Diese beiden Komponenten sind über eine Netzwerkverbindung miteinander verbunden. Diese Verbindungsart bietet äußerst flexible Möglichkeiten: sie kann sowohl für eine direkte Verbindung zwischen dem Spektrofotometer und dem PC als auch für die Integration in einem firmeninternen Netzwerk verwendet werden, bei dem dann der Zugriff auf das Spektrofotometer über einen PC erfolgt.

Die Aufgaben sind zwischen diesen Geräten entsprechend aufgeteilt. Das Spektrofotometer erfasst die Absorptionsdaten, die dann von der Anwendungs-Software des PC verarbeitet werden. Anzeige, Auswertung und dauerhafte Speicherung der Daten erfolgt über die Software am PC.



Agilent 8453 Spektrofotometer — Überblick

Dieser Abschnitt gibt einen Überblick über das optische System und erklärt die Vorder- und Rückseite des Spektrofotometers. Außerdem werden der Aufbau und die Konstruktion des Spektrofotometers beschrieben, einschließlich der elektronischen und mechanischen Baugruppen im Spektrofotometer.

Überblick über das optische System

Das optische System

In [Abbildung 1](#) ist das optische System des Spektrofotometers dargestellt. Seine Strahlungsquelle ist eine Kombination aus einer Deuteriumlampe für den ultravioletten (UV) Wellenlängenbereich und einer Wolframglühlampe für den sichtbaren und den nahen infraroten (Short Wave Near Infrared) Wellenlängenbereich. Das Abbild der Wendel der Wolframglühlampe wird auf die Apertur der Deuteriumlampe fokussiert. Dies erfolgt über eine spezielle von der Rückseite zugängliche Lampenkonstruktion, die es ermöglicht, dass beide Lichtquellen optisch gebündelt werden und eine gemeinsame Achse zur Quellenlinse bilden. Die Quellenlinse erzeugt einen einzelnen, gebündelten Lichtstrahl. Der Strahl durchläuft den Bereich des Verschlusses/Streulichtkorrekturfilters und dann die Probe sowie die Linsen und den Spalt des Spektrometers. Im Spektrometer wird Licht mittels eines holografischen Gitters auf das Diodenarray zerlegt. Somit kann auf alle Wellenlängeninformationen gleichzeitig zugegriffen werden. Dadurch wird die Geschwindigkeit, mit der Spektren erfasst werden können, erheblich gesteigert.

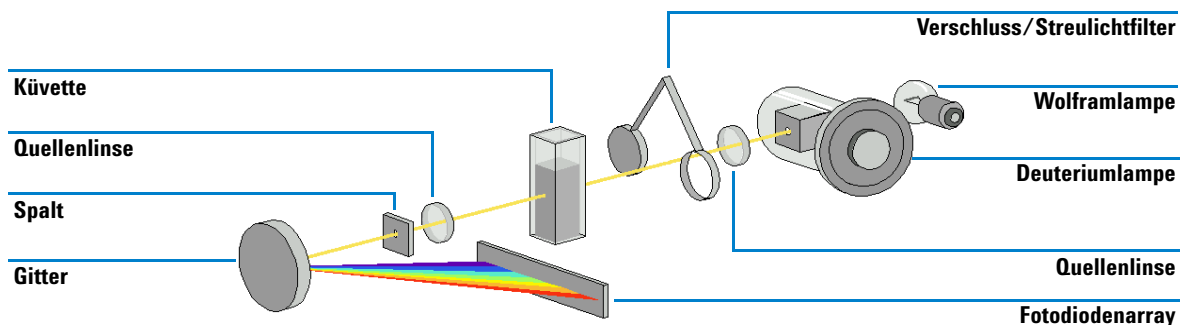


Abbildung 1 Optisches System eines Spektrofotometers

- Lampen

Als Lichtquelle für den UV-Wellenlängenbereich wird eine Deuteriumlampe mit einer transparenten Apertur verwendet. Aufgrund der Plasmaentladung in einem Niederdruckdeuteriumgas strahlt die Lampe ein Licht im Wellenlängenbereich zwischen 190 nm bis ca. 800 nm ab. Für den sichtbaren und den nahen infraroten Wellenlängenbereich wird als Lichtquelle eine rauscharme Wolframglühlampe verwendet. Diese Lampe strahlt ein Licht im Wellenlängenbereich zwischen 370 nm und 1.100 nm ab.

- Quellenlinse

Die Lichtstrahlen von beiden Lampen treffen auf die Quellenlinse auf und werden gebündelt. Der gebündelte Lichtstrahl durchläuft die Probe (sofern vorhanden) im Probenraum.

- Verschluss

Der Verschluss wird elektromechanisch gesteuert. Er öffnet sich und lässt so für Messzwecke den Lichtstrahl durch die Probe passieren. Zwischen den einzelnen Messvorgängen schließt er wieder, um so die Probe nicht zu sehr dem Licht auszusetzen. Bei sehr hohen Messgeschwindigkeiten können Sie den Verschluss so einstellen, dass er permanent offen bleibt (mit der Agilent ChemStation Software einstellbar) oder dass er automatisch offen bleibt (Fernbedienungs-Software).

- Streulichtkorrekturfilter

Bei einer üblichen Messfolge werden Referenz- oder Probenintensitätsspektren zuerst ohne und dann mit Streulichtfilter im Lichtstrahl gemessen. Ohne Filter wird das Intensitätsspektrum im gesamten Wellenlängenbereich zwischen 190 und 1100 nm gemessen. Beim Streulichtfilter handelt es sich um ein Sperrfilter mit einer 50 %-igen Sperre bei 420 nm.

Wenn dieses Filter eingesetzt ist, handelt es sich bei dem jedem Licht, das unter 400 nm gemessen wird, um Streulicht. Diese Streulichtintensität wird dann vom ersten Spektrum abgezogen, um ein Streulicht-korrigiertes Spektrum zu ermitteln. Abhängig von der Software können Sie die Streulichtkorrektur manuell ausschalten (bei Agilent ChemStation Software möglich), wenn sich extrem schnell wiederholende Messungen durchgeführt werden sollen, oder die Streulichtkorrektur wird automatisch ausgeschaltet (Fernbedienungs-Software).

- Probenraum

Das Spektrofotometer besitzt einen offenen Probenraum, der den Zugang zu den Probenküvetten erleichtert. Aufgrund der optischen Konstruktion ist für den Probenbereich keine Abdeckung erforderlich. Werkseitig ist beim Spektrofotometer im Probenraum bereits ein Einzelküvettenhalter installiert. Dieser kann ersetzt werden durch die Peltier-Temperatursteuerung, den thermostatisierbaren Küvettenhalter, den einstellbaren Küvettenhalter, den Küvettenhalter für große Schichtdicken oder den Mehrfachküvettenhalter. Alle diese optischen Küvettenhalter werden im Probenraum mit der gleichen schnellen sowie einfachen Befestigungsvorrichtung befestigt. Außerdem ist ein optisches Filterrad verfügbar, das für das Spektrofotometer und für die meisten Zubehörteile verwendet werden kann.

- Spektrograf

Das Spektrometergehäuse besteht aus Keramik, um so die thermischen Auswirkungen auf ein Minimum zu reduzieren. Die Hauptkomponenten des Spektrometers sind die Linse, der Spalt, das Beugungsgitter und die Fotodiodenarray mit Frontend-Elektronikbauteilen. Das Haupterfassungsintervall der Diodenarrays beträgt 0,9 nm im Wellenlängenbereich zwischen 190 nm und 1100 nm. Die nominelle spektrale Spaltbreite beträgt 1 nm.

- Spektrograflinse

Die Spektrometerlinse ist das erste Bauteil, aus dem sich der Spektrograf zusammensetzt. Sie ist im Gehäuse des Spektrometer installiert. Die Spektrometerlinse refokussiert den gebündelten Lichtstrahl, nachdem dieser die Probe durchlaufen hat.

- Spalt

Beim Spalt handelt es sich um eine schmale Öffnung in einer Platte, die in der Mitte der Spektrometerlinse angeordnet ist. Der Schlitz ist exakt so groß, wie eine der Fotodioden im Fotodiodenarray. Indem die Größe des eintreffenden Lichtstrahls begrenzt wird, stellt der Spalt sicher, dass jedes Band der Wellenlängen nur auf die entsprechende Fotodiode projiziert wird.

- Beugungsgitter

Die Kombination aus Beugung und spektraler Abbildung wird durch den Einsatz eines konkaven, holografischen Beugungsgitters erzielt. Das Beugungsgitter lenkt das Licht auf die Diodenarray mit einem Winkel proportional zur Wellenlänge.

- Diodenarray

Die Fotodiodenarray ist das wichtigste Bauteil des Spektrometers. Es setzt sich aus 1.024 einzelnen Fotozellen und Steuerschaltungen zusammen, die auf eine Halbleiterplatine geätzt sind. Bei einem Wellenlängenbereich zwischen 190 nm und 1.100 nm beträgt das Ausleseintervall nominell 0,9 nm.

Beschreibung des Spektrofotometers

Die Bedienung des Spektrofotometers ist äußerst einfach. Es besitzt eine Netzanzeige, eine Statusanzeige und einige Drucktasten. Alle elektrischen Verbindungen erfolgen über die Rückseite des Spektrofotometers.

Vorderansicht

In [Abbildung 2](#) ist die Vorderansicht des Spektrofotometers dargestellt. Beachten Sie, dass der Probenraum offen ist. Im Gegensatz zu herkömmlichen Spektrofotometern wird das Agilent 8453 nicht durch Fremdlicht beeinträchtigt. Der offene Probenbereich ermöglicht einen leichteren Zugang zur Handhabung der Küvette und zum Anschließen von Schläuchen an eine Durchflussküvette oder einem thermostatisierbaren Küvettenhalter. Das

Spektrofotometer wird werkseitig mit dem standardmäßigen Einzelküvettenhalter geliefert. Der standardmäßige Küvettenhalter und die als Zubehör erhältlichen Küvettenhalter können binnen weniger Sekunden ohne oder mit nur wenig Werkzeug entfernt und ausgetauscht werden.

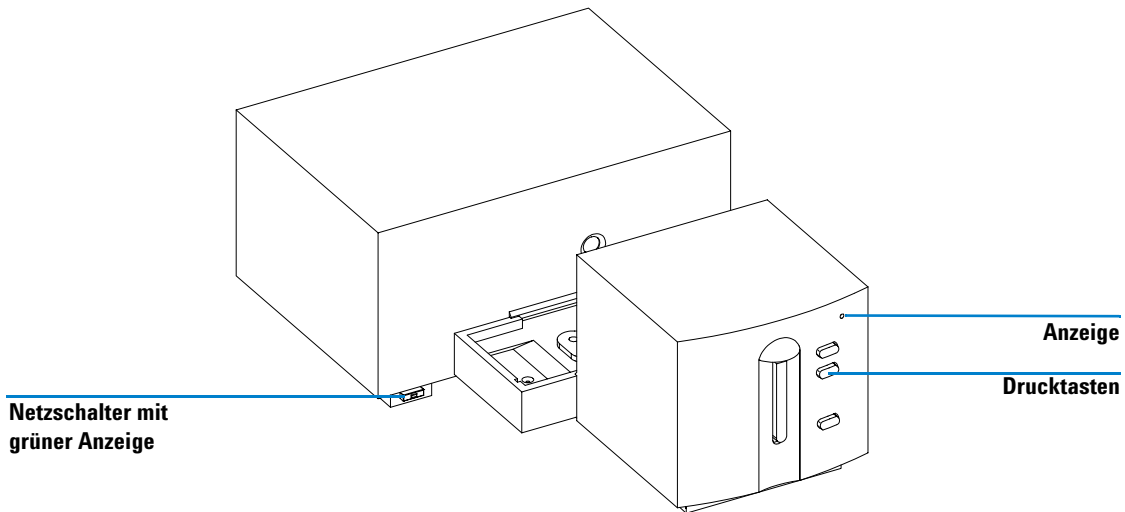


Abbildung 2 Vorderansicht des Spektrofotometers

Der Netzschalter befindet sich im unteren linken Bereich des Spektrofotometers. Wenn Sie diesen Netzschalter drücken, wird das Spektrofotometer eingeschaltet. Der Schalter bleibt in gedrückter Position, und eine grüne Anzeige leuchtet, solange das Spektrofotometer eingeschaltet ist. Wenn der Netzschalter heraussteht und die grüne Anzeige nicht leuchtet, ist das Spektrofotometer ausgeschaltet.

Auf der Frontplatte des Spektrofotometers befindet sich eine Statusanzeige, die abhängig vom aktuellen Zustand des Spektrofotometers in einer anderen Farbe leuchtet.

- Grün – Das Spektrofotometer ist betriebsbereit.
- Grün blinkend – Das Spektrofotometer führt eine Messung durch.
- Gelb – Das Spektrofotometer ist nicht betriebsbereit; wenn beispielsweise eine der Lampen soeben eingeschaltet wird oder wenn beide Lampen ausgeschaltet sind.

- Rot – Fehlerzustand; d.h., dass das Spektrofotometer einen der Selbsttests, die beim Einschalten des Spektrofotometers durchgeführt werden, nicht bestanden hat oder dass während des Betriebs ein Fehler aufgetreten ist. In diesem Fall zeigt die UV-Vis-Software eine detaillierte Fehlermeldung an. Mögliche Erläuterungen hierzu finden Sie im Online-Hilfesystem und in Ihrem *Service-Handbuch* in Kapitel 3 “Diagnose und Fehlerbehebung”.
- Rot blinkend – Fehlerzustand des Prozessorsystems im Spektrofotometer. Da in diesem Fall keine Kommunikation mit dem Computer möglich ist, erscheint keine Fehlermeldung. Weitere Informationen zur Behebung des Problems finden Sie in Ihrem *Service-Handbuch* in Kapitel 3 “Diagnose und Fehlerbehebung”.

Die vier Drucktasten zur Messung auf der Frontplatte führen die folgenden Funktionen aus. Die aus den Funktionen resultierenden Daten werden an den Computer gesendet.

- BLANK – Das Spektrofotometer führt eine Leerprobenmessung durch. Dies umfasst eine Referenzmessung, die bei allen nachfolgenden Probenmessungen verwendet wird, bis eine neue Leerprobenmessung erfolgt. Nach der Referenzmessung wird das Grundlinienspektrum gemessen und am PC angezeigt.
- SAMPLE – Das Spektrofotometer führt eine Probenmessung durch oder beginnt mit einer Messfolge. Dies ist von den in Ihrer Software eingestellten Parametern abhängig.
- STANDARD – Das Spektrofotometer misst einen Standard. Weitere Informationen, wie Konzentration usw., müssen in der Anwender-Software eingegeben werden.
- STOP – Das Spektrofotometer und/oder die Software bricht die laufende Aktivität ab und kehrt in einen betriebsbereiten Zustand zurück.

Rückansicht

Alle elektrischen Verbindungen erfolgen über die Rückseite des Spektrofotometers. Siehe [Abbildung 3](#).

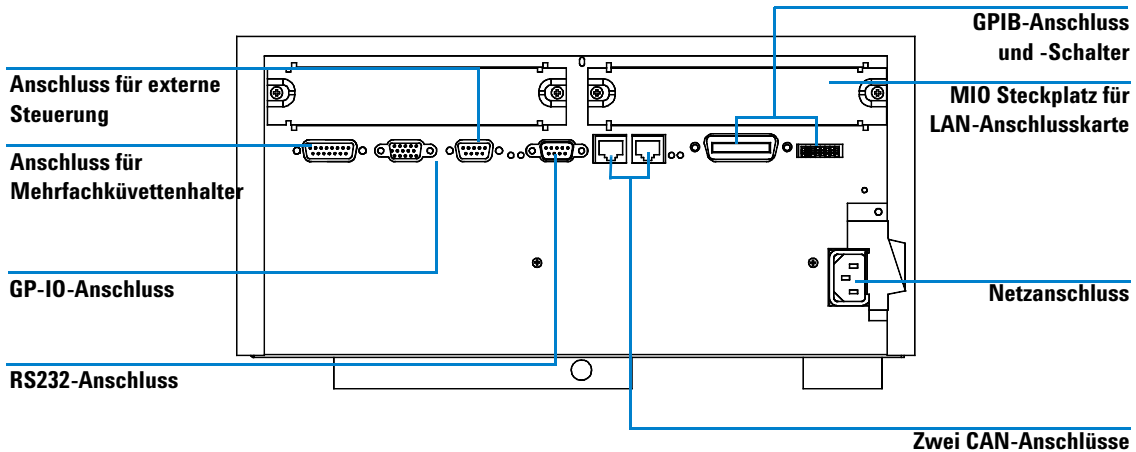


Abbildung 3 Rückansicht des Spektrofotometers

- Am Anschluss für den Mehrfachküvettenhalter kann das Kabel angeschlossen werden, das dem Mehrfachküvettenhalter beiliegt.
- Am GPIO- (General-Purpose Input/Output) Anschluss kann ein Sipper, ein automatischer Probengeber oder anderes Zubehör angeschlossen werden. Dies ist von der verwendeten Software abhängig.
- Der Anschluss für die externe Steuerung kann in Verbindung mit anderen analytischen Spektrofotometern von Agilent Technologies verwendet werden, wenn Sie beispielsweise Geräte gleichzeitig ausschalten möchten.
- Über den RS232C-Anschluss kann das Spektrofotometer von einem Computer aus über eine RS232-Verbindung unter Verwendung der entsprechenden Software gesteuert werden (zukünftig geplant). Dieser Anschluss muss über den Konfigurationsschalter neben dem GPIB-Anschluss definiert werden. Für die Software werden die entsprechenden Treiber benötigt, damit diese Kommunikation unterstützt wird (zukünftig geplant).

Der RS232C-Anschluss wird als Druckeranschluss verwendet, über den mit einem seriellen/parallelen Kabel ein Drucker am Agilent 8453E System für die UV-Vis-Spektroskopie angeschlossen werden kann.

- Über den rechten CAN-Bus wird die Fernbedienung des Agilent 8453E Systems am Spektrofotometer angeschlossen.
- Über den GPIB-Anschluss wird das Spektrofotometer mit einem Computer verbunden. Über den 8-Bit-Konfigurationsschalter neben dem GPIB-Anschluss wird die GPIB-Adresse des Spektrofotometers eingestellt. Die Schalter sind auf eine standardmäßige Adresse voreingestellt, die von der Agilent Anwender-Software erkannt wird.

Der GPIB-Anschluss wird nicht verwendet, wenn die Fernbedienung des Agilent 8453E Systems für die UV-Vis-Spektroskopie am Spektrofotometer angeschlossen ist. Jedoch muss der 8-Bit-Konfigurationsschalter des Anschlusses für die GPIB-Kommunikation entsprechend eingestellt sein.

- Der Steckplatz für die MIO-Karte ist für eine Netzwerkkarte reserviert.
- Der Steckplatz für die Zubehörkarte ist für zukünftige Zwecke vorgesehen.
- Am Netzanschluss befindet sich kein Spannungswähler, da das Netzteil mit einem großen Spannungsbereich arbeiten kann. Weitere Informationen hierzu finden Sie im *Service-Handbuch* in Kapitel 1 "Spezifikationen". Es gibt keine von außen zugänglichen Sicherungen, da das Netzteil mit automatischen elektronischen Sicherungen ausgestattet ist. Der Sicherungshebel am Netzanschlussockel verhindert, dass die Abdeckung vom Spektrofotometer abgenommen werden kann, wenn am Spektrofotometer Strom anliegt.

Seitenansicht des Spektrofotometers

Auf der rechten Seite des Spektrofotometers befindet sich eine Tür zum Austauschen der Lampen. Hinter dieser Plastiktür befindet sich eine weitere Metalltür. Es sind zwei voneinander unabhängige Sicherheitsschalter implementiert. Sie schalten die Lampen automatisch aus, sobald die Metalltür geöffnet wird.

Allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie — Überblick

Dieser Abschnitt vermittelt einen Überblick über die Elemente der Benutzeroberfläche der Agilent ChemStation Software und der dahinterstehenden Datenanalyse und Datenverarbeitung. Hier wird erklärt, wie die Daten ausgewertet werden und was dabei aus praktischer Sicht die Vorteile sind.

Bestandteile der Benutzeroberfläche

Die allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie vereinfacht den Einsatz des Diodenarray-basierten Spektrofotometers in der täglichen Praxis. Hauptziel dieser Software ist die einfache Anwendung und schnelle Inbetriebnahme. Auf einer grafischen Benutzeroberfläche werden der Betrieb und die Nutzung des Spektrofotometers visuell dargestellt. Diese Benutzeroberfläche umfasst mehrere Bestandteile, die in den nachfolgenden Abschnitten näher erläutert werden.

Modusauswahl

Methodenname

Menüleiste

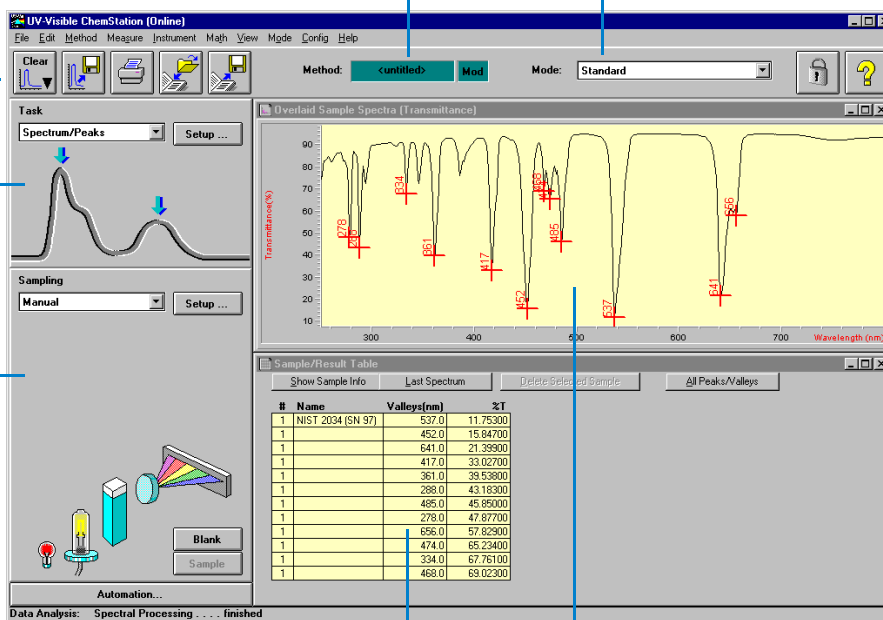
Symbolleiste

Analysenanzeige

Geräteanzeige

Ergebnisse in Tabellenform

Spektren

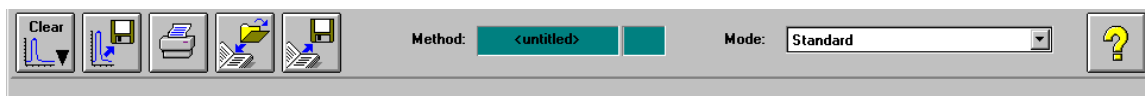


Menüleiste



Über die herkömmliche Menüleiste im oberen Bereich des Agilent ChemStation Fensters können alle Funktionen aufgerufen werden. Wenn Sie eine Option in der Menüleiste anklicken, erscheint eine Liste mit Befehlen und Untermenüs. Um eine Funktion auszuführen, wählen Sie einen Befehl aus (durch Klicken mit der Maus oder durch Drücken der EINGABETASTE).

Symbolleiste



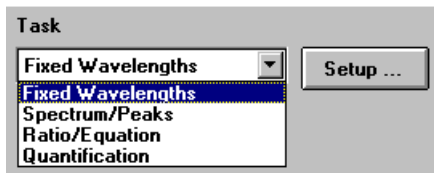
Die unter der Menüleiste angeordnete Symbolleiste enthält Schaltflächen mit Symbolen, mit denen Standardfunktionen direkt aufgerufen werden können (wie z.B. Drucken von Ergebnisberichten, Laden von Methoden und Speichern von Methoden und Daten).

Seitlich angeordnete Anzeigen

Die Anzeigen im linken Fensterabschnitt umfassen die Analysenanzeige und die Geräteanzeige. Größe und Position dieser Anzeigen sind fest vorgegeben. Sie sind jedoch von der Auflösung Ihres Bildschirms abhängig. Die Mindestauflösung beträgt 600 × 800 Pixel.

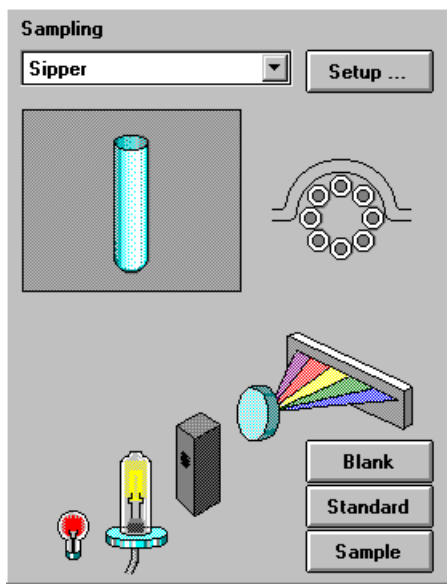
Analysenanzeige

Die Analysenanzeige bietet Ihnen eine grafische Darstellung der aktuellen Aufgabenstellung, mit der Sie derzeit arbeiten. Außerdem können Sie über die Schaltfläche "Setup" das Dialogfenster "Setup" für Ihre eigentliche Aufgabe aufrufen.



Geräteanzeige

Die Geräteanzeige befindet sich unmittelbar unter der Analysenanzeige. In ihr wird Ihr Probengerät und Spektrofotometer grafisch dargestellt und gesteuert. Einige der in dieser Anzeige grafisch dargestellten Elemente können direkt Funktionen ausführen, um beispielsweise Lampen ein- oder auszuschalten oder um eine Schlauchpumpe zu bedienen.



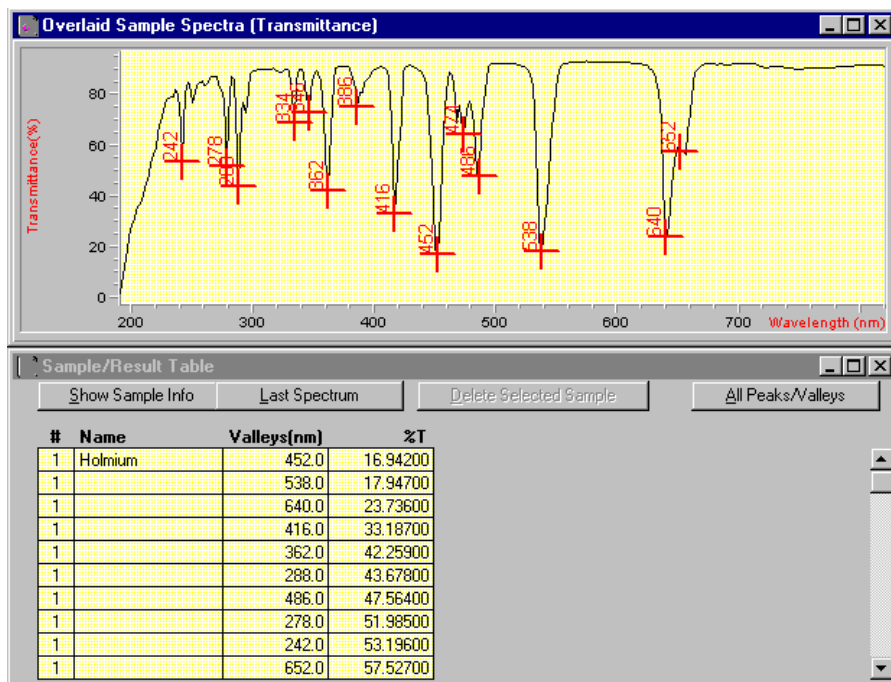
1 Einführung in das System

Allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie — Überblick

Wenn Sie den Mauszeiger über einen aktiven Bereich bewegen, mit dem Funktionen direkt ausgeführt werden können, ändert der Mauszeiger sein Aussehen. Wenn Sie in einen solchen aktiven Bereich mit der Maus anklicken, erscheint ein kleines Menü mit Optionen, oder es wird eine Funktion ausgeführt.

Außerdem können Sie ein Probensystem aus der Liste der verfügbaren Systeme auswählen. Dessen Parameter können über die Schaltfläche "Setup" modifiziert werden.

Ansicht



Im Fensterabschnitt rechts neben der Analysen- und der Geräteanzeige befindet sich eine Ansicht Ihrer aktuellen Aufgabenstellung. Eine Ansicht setzt sich aus einem oder mehreren separaten Fenstern zusammen. Diese Fenster enthalten Informationen, die hauptsächlich grafisch oder in

Tabellenform dargestellt werden. Sie können ein Diagramm, das Ihre gemessenen Probenspektren darstellt, und eine Tabelle mit den errechneten Ergebnissen betrachten.

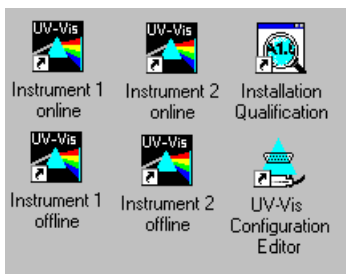
Ansichten werden üblicherweise automatisch von der ausgeführten Funktion berücksichtigt. Sie können jedoch auch die Befehle im Menü "View" verwenden, um die von Ihnen gewünschte Ansicht auszuwählen.

Software-Struktur

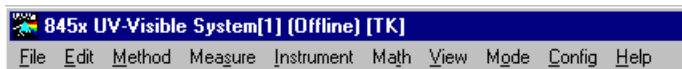
Für einen einfachen Überblick ist die Software in spezifische Anwendungen unterteilt, die als "Modi" bezeichnet werden. Außerdem gibt es Funktionsebenen (Manager und Operator Level). Die Auswertung von Daten ist auch ohne aktives Spektrofotometer in getrennten Sitzungen möglich.

Agilent ChemStation Sitzungen

Die Agilent ChemStation ist Bestandteil der Agilent ChemStation Familie für Gerätesteuerungs-Software. Eine installierte Agilent ChemStation Software kann bis zu vier verschiedene UV-Vis-Geräte von einem PC steuern. Jedes dieser Geräte hat seine eigene Sitzung.



Wenn Sie eine Sitzung starten, erscheint deren Namen in der Titelleiste der Hauptanwendung. Beispiel: Agilent 845x UV-visible System[1].



Jede Gerätesitzung steht für eine Datenanalyse und eine Gerätesteuerung zur Verfügung. Eine Gerätesteuerungssitzung trägt den Zusatz (Online) und kann nur einmal an Ihrem PC gestartet werden. Es können jedoch mehrere Datenanalysesitzungen mit dem Zusatz (Offline) gestartet werden. Bei den Offline-Sitzungen können mit den gespeicherten Daten Neuberechnungen durchgeführt werden. Außerdem sind Offline-Sitzungen bei der Entwicklung von Analyseverfahren hilfreich.

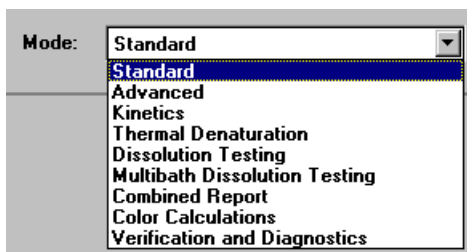
Funktionsebenen

Die Funktionsebenen "Manager Level" und "Operator Level" betreffen alle Modi und ermöglichen die Verwaltung einer Anwendung und das Ausführen einer einzelnen Anwendung. Im "Manager Level" einer Anwendung wird normalerweise eine Methode entwickelt und auf Datenträger gespeichert. Diese Ebene ist durch ein Kennwort geschützt. Hierdurch wird die Integrität von vordefinierten Methoden und Funktionsabläufen sichergestellt.

Im "Operator Level" steht nur eine begrenzte Anzahl an Funktionen zur Verfügung. Spezielle Funktionen, die die Integrität einer Analyseprozedur beeinträchtigen könnten, sind nicht verfügbar. Jedoch kann ein "Operator" seine eigenen Einstellungen verwenden. Dies ist in der Symbolleiste ersichtlich und wird auf gedruckten Berichten angegeben.

Agilent ChemStation Modi

Die Agilent ChemStation Modi richten sich nach der Anwendung. Jeder Modus verfügt über eigene Menüs, Anzeigen, Funktionen und Ansichten. Ihre allgemein verwendbare Software für die UV-Vis-Spektroskopie ist die Plattform für alle Modi. Sie ist unterteilt in die Modi *Standard*, *Execute Advanced Method (Ausführung erweiterter Methoden)* und *Verification and Diagnostics (Überprüfung und Diagnose)*.



Entsprechend Ihren Anforderungen können Sie unter Modi für folgende Bereiche wählen: *Erweiterte Anwendungen*, *Freisetzungstests*, *Mehrstufigen Freisetzungstests*, *Kombinierte Reportentwicklung*, *Kinetischen Messungen*, *Thermische Abbaustudien* und *Farbberechnungen*.

Diese Betriebsmodi können während einer aktiven Agilent ChemStation Sitzung gewechselt werden. Alle aktuellen Rohdaten bleiben während eines solchen Wechsels erhalten. So können Sie Ihre Daten mit Schwerpunkt auf verschiedenen Aspekten betrachten.

Mit den meisten Modi können Sie Ihre Analyseaufgabe über verschiedene Parameter und ggf. Daten definieren. Der Satz mit Parametern und Daten kann als Methode auf Datenträger gespeichert werden. So können Sie Ihre Analyseaufgabe unter vordefinierten Bedingungen wiederholen, indem Sie hierfür lediglich eine Methode laden und Ihre Probendurchläufe ausführen.

Aufgabenstellungen im Standardmodus

Der Agilent ChemStation Modus ermöglicht es auch, sich auf einen Aspekt zu konzentrieren. Es müssen viele Parameter verwaltet werden, um einen Modus für eine bestimmte Anwendung anzupassen. Um die Komplexizität zu mindern, verfügt der Standardmodus über eine zusätzliche Fokussierung auf Aufgabenstellungen.

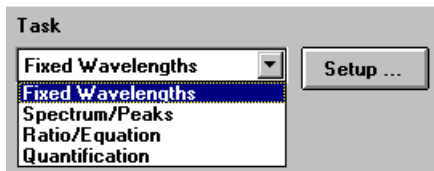
Der Standardmodus der allgemein verwendbaren Software für die UV-Vis-Spektroskopie orientiert sich an den üblichen Aufgabenstellungen, die in einem Analyselabor am häufigsten durchgeführt werden. Vier Aufgabenstellungen sind verfügbar:

- Fixed Wavelength (feste Wellenlänge)
- Spectrum/Peaks (Spektrum/Maxima)
- Ratio/Equation (Verhältnis/Gleichung)
- Quantification (Quantifizierung)

Die Aufgabenstellung wird im Auswahlfeld in der Analysenanzeige ausgewählt und aktiviert.

1 Einführung in das System

Allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie — Überblick

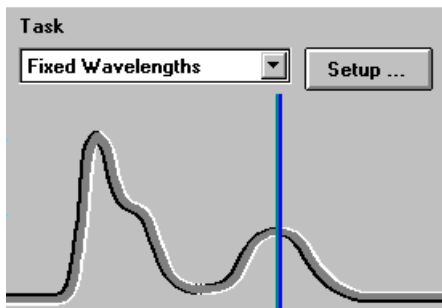


Mit Hilfe dieser Aufgabenorientierung können Sie die Software schnell so anpassen, dass Sie basierend auf Ihren Daten die richtigen Ansichten und Ergebnisse erhalten. Diese vier in der Praxis am häufigsten durchgeführten Aufgabenstellungen wurden anhand einer Umfrage in Analyselabors festgelegt. Üblicherweise wurden diese Aufgabenstellungen an Filterfotometern oder registrierenden Spektrofotometern entwickelt.

Ihr Spektrofotometer bietet Ihnen die Möglichkeit, standardmäßig das gesamte UV-Vis-Spektrum Ihrer Proben zu ermitteln. Somit stellen die vier Aufgaben nur unterschiedliche Ansichten Ihrer Messwerte dar.

Ein Aufgabenwechsel innerhalb des Standardmodus ist wesentlich einfacher als ein kompletter Moduswechsel. Ein weiterer Vorteil dieser Aufgabenstellung ist, dass die Definition einer Methode in einem einzigen Dialogfenster erfolgt.

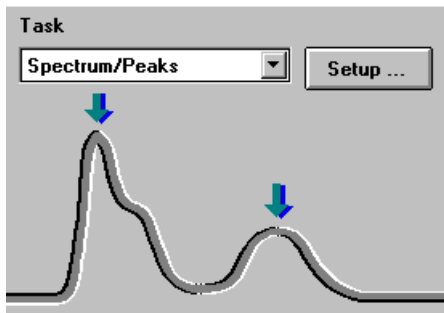
Fixed Wavelength (feste Wellenlänge)



Die Aufgabenstellung "Fixed Wavelength" wird verwendet, um gemessene Probendaten bei bis zu sechs verschiedenen Wellenlängen zu betrachten. Diese Daten sind verfügbar als Absorption, Transmission und als erste bis vierte Ableitung.

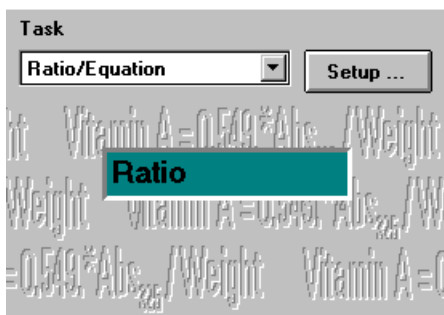
Aufgrund der spektralen Erfassung können weitere Techniken, wie interne Referenz oder Untergrundkorrekturen mit Dreipunkt-Basisliniensenkrechte angewendet werden.

Spectrum/Peaks (Spektrum/Maxima)



In der Aufgabenstellung “Spectrum/Peaks” suchen Sie nach dem Minimalwert und Maximalwert für die Absorption. Hier liegt der Schwerpunkt mehr im Wellenlängenbereich. Jedoch erhalten Sie auch die entsprechenden Messwerte für die Absorption.

Ratio/Equation (Verhältnis/Gleichung)



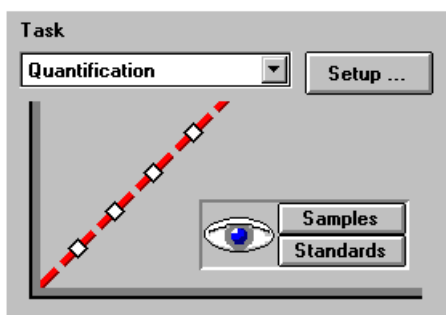
Mit der Aufgabenstellung “Ratio/Equation” wird eine benutzerdefinierbare Gleichung, basierend auf Messdaten und Probeninformationen, gelöst. Um eine Gleichung aufzustellen, können Probandaten von bis zu sechs

1 Einführung in das System

Allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie — Überblick

Wellenlängen sowie Gewichts- und Volumendaten, die mit den Messproben eingegeben wurden, verwendet werden. Mit Hilfe einer Gleichung können beispielsweise Analysenergebnisse basierend auf chemischen Testsätzen automatisch berechnet und ausgegeben werden. Eine weitere Anwendung ist die Verwendung eines Verhältnisses von Datenwerten, um die Identität oder Reinheit einer Probe zu überprüfen.

Quantification (Quantifizierung)



Mit der Aufgabenstellung "Quantification" können, basierend auf vier verschiedenen Arten von Kalibrierungskurven und einer Gruppe von Standards, einzelne Komponenten analysiert werden. Aufgrund der spektralen Erfassung können auf Ihre Daten zusätzlich Untergrundkorrekturen angewendet werden.

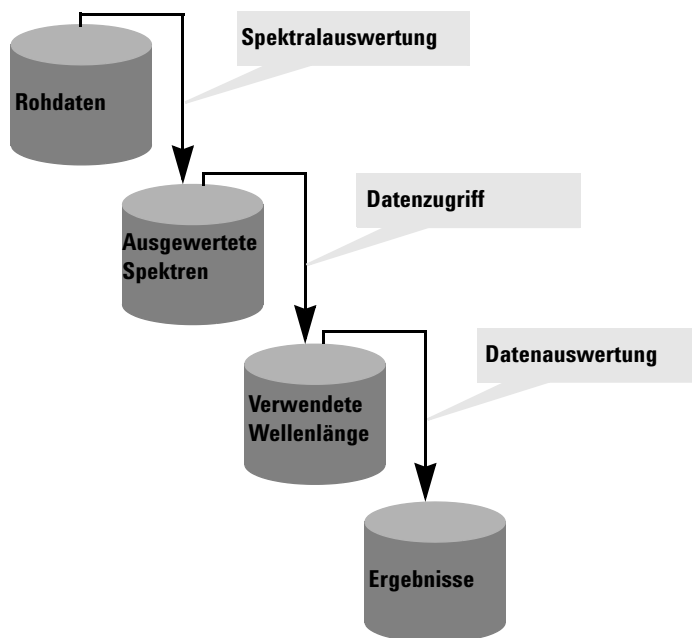
Die Kalibrierung kann für Ihren Konzentrationsbereich noch optimiert werden. Wechseln Sie hierfür die für die Kalibrierung verwendete Wellenlänge. Basierend auf Ihren aktuellen Standarddaten wird automatisch eine neue Kalibrierung und eine neue Analyse durchgeführt.

Datenverarbeitung im Standardmodus

Allgemeine Datenverarbeitung

Auch wenn für die Verwendung der Agilent ChemStation Software keine Kenntnisse über den internen Aufbau des Datenflusses und der Datenverarbeitung erforderlich sind, kann mit diesen Kenntnissen dennoch besser verstanden werden, wie die Agilent ChemStation Ihre Daten verarbeitet und wie diese Verarbeitung über Ihre Methodenparameter gesteuert wird.

Die Datenbearbeitung kann am besten anhand eines Modells mit Datenbehältern und Operationen in einem Flussdiagramm erläutert werden.



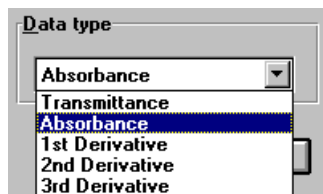
Alle Ausgangsdaten werden in einem Behälter *Rohdaten* zusammengefasst. Dieser Behälter ist zu Beginn Ihrer Agilent ChemStation Sitzung leer und füllt sich, wenn Daten gemessen oder aus einer Datei geladen werden.

1 Einführung in das System

Allgemein verwendbare Agilent ChemStation Software für die UV-Vis-Spektroskopie — Überblick

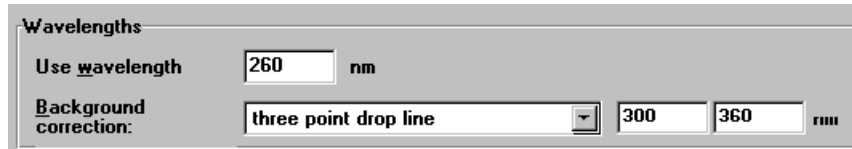
Der Behälter *Rohdaten* enthält die ursprünglich aufgenommenen Daten, gemäß den Einstellungen der Erfassungsparameter und beispielsweise zusammen mit Datum und Uhrzeit der Erfassung sowie dem Namen des Benutzers, der die Erfassung durchgeführt hat.

Auswertung spektraler Daten



Ihre Methode definiert, wie diese Daten analysiert werden. Der erste Verarbeitungsschritt ist die spektrale Auswertung. Die auszuwertenden Rohdatenspektren werden automatisch in einen zweiten Behälter für *ausgewertete Spektren* übertragen. Aufgrund dieser Vorgehensweise können Sie die Ergebnisse dieses Verarbeitungsschrittes anzeigen, indem Sie den Inhalt des Behälters *ausgewertete Spektren* betrachten. Wenn Sie beispielsweise als Datentyp die erste Ableitung spezifiziert haben, befinden sich nach der Analyse im Behälter *ausgewertete Spektren* die Spektren der ersten Ableitung von all Ihren Rohdaten. Die Art der spektralen Bearbeitung wird in Ihren Einstellungen der Methode definiert.

Verwendete Wellenlänge



Als nächster Schritt in der Datenanalyse erfolgt der Zugriff auf Daten für die weitere Auswertung in Form von Wellenlängen- und Untergrundkorrekturen, wie z.B. eine interne Referenzberechnung oder Dreipunkt-Basisliniensenkrechte-Berechnung.

Diese Daten werden im Behälter *verwendete Wellenlänge* gespeichert. Beispielsweise werden in der Aufgabenstellung "Fixed Wavelength" diese Daten im Fenster "Sample/Results Table" in einer Tabelle angezeigt.

Ergebnisse Ein weiterer Schritt ist die Auswertung der aufgerufenen Daten.

Calculation

Name: Caffeine

Equation (WL1,...,WL6, Wt, V): = WL1*0.05

Unit: mg/l

☐ Use Weight (Wt), Volume (V)

Weight: [] Volume: [] Unit: []

In der Aufgabenstellung “Ratio/Equation” erfolgt beispielsweise die Bearbeitung dieser *verwendeten Wellenlängendaten*, indem die spezifizierte Gleichung ausgewertet wird. Mit dieser zusätzlichen Operation werden die Ergebnisse berechnet. Diese errechneten Ergebniswerte werden in den Behälter *Ergebnisse* aufgenommen.

Die Ergebnisse sind in der Tabelle “Sample/Results Table” verfügbar.

#	Name	Dilut. Factor	Caffeine(mg/L)	Abs<273nm>
1	Caffeine	1.00000	0.26527	0.53053

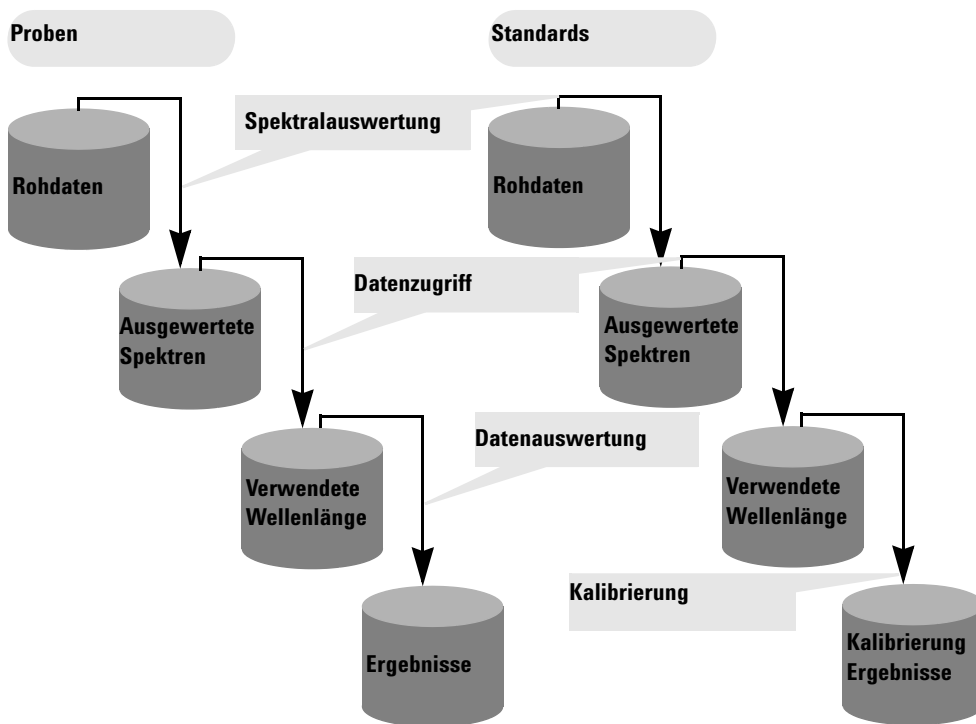
Zusammenfassung Die allgemeine, grundlegende Datenbearbeitung ist in drei Schritte unterteilt.

- 1 Spektrale Bearbeitung
- 2 Datenzugriff
- 3 Datenauswertung

Diese Schritte werden für alle Spektren im Behälter *Rohdaten* in der vorgenannten Reihenfolge durchgeführt. Die Ergebnisse werden im Behälter *Ergebnisse* abgelegt. Der alte Inhalt der Behälter *verarbeitete Spektren*, *verwendete Wellenlänge* und *Ergebnisse* wird ersetzt.

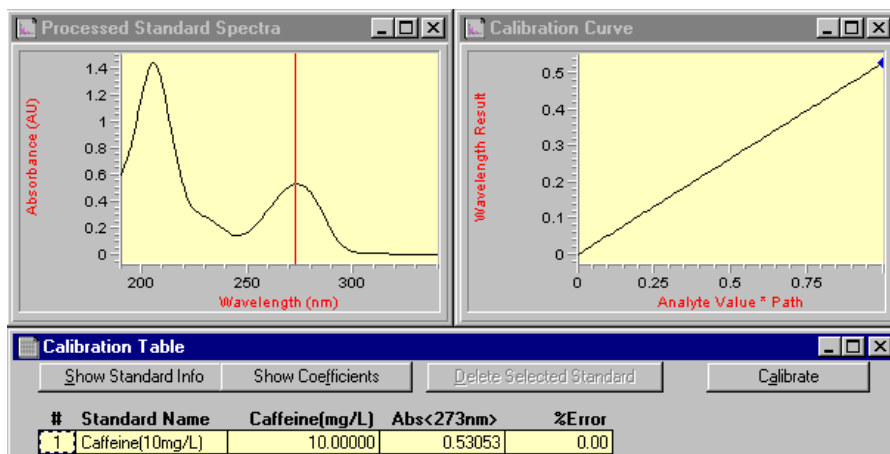
Auswertung von Standards

In der vierten Aufgabenstellung werden zusätzlich zu Ihren Probandaten noch Standards verwendet. Die in den vorherigen Absätzen erläuterte Vorgehensweise ist für die Verarbeitung von Standards entsprechend zu erweitern. Es wurden zwei unabhängige Behältergruppen implementiert, eine für Standards und die andere für Proben. Alle Verarbeitungsbehälter sind ebenfalls doppelt vorhanden. Wie bei der reinen Probenverarbeitung werden sämtliche Auswertungen parallel an den Proben und an den Standards durchgeführt.



Die Auswertung bei der Quantifizierung ist jetzt eine Kalibrierung unter der Verwendung von Standards. Die Koeffizienten werden basierend auf den Einstellungen der Methode und den aktuellen Standards im

Agilent ChemStation Speicher berechnet. Dies bedeutet, dass jetzt die Ergebnisse eine Funktion aus den gemessenen Standardgruppen und den spezifizierten Standardkonzentrationen sind.



Diese Koeffizienten werden dann für die Berechnung der Konzentrationsergebnisse für die derzeit im Speicher vorhandenen Proben verwendet. Die gleichen Verarbeitungsschritte, die auf Proben- und Standarddaten angewendet werden, führen zu den genauesten Ergebnissen.

Vorteile

Der Einsatz eines Diodenarray-basierenden Spektrofotometers in Verbindung mit leistungsfähigen Auswertungen mit der Agilent ChemStation bietet viele Vorteile gegenüber herkömmlichen Spektrofotometersystemen. Einige dieser Vorteile, die sich hieraus in der Praxis ergeben, sind nachfolgend kurz beschrieben.

- Virtuell unbegrenzte Anzahl an Standards

Aufgrund dieses Datenanalyseverfahrens können Sie Ihre Standards vor oder nach Ihren Proben messen. Abgesehen von der benötigten Mindestanzahl an Standards können Sie so viele Standards verwenden, wie Sie in Verbindung mit Ihrer Kalibrierung benutzen möchten.

- Einfache Optimierung

Die Verfügbarkeit von allen Rohdaten - Proben und Standards - bedeutet, dass Sie die Einstellungen Ihrer Methoden auf einfache Weise optimieren können, indem Sie eine andere Kalibrierungswellenlänge wählen und Ihr System neu kalibrieren. Sie können in Ihrer Kalibrierung stark abweichende Messwerte eliminieren, indem Sie diesen Standard aus Ihrer Standarddatengruppe entfernen.

- Kalibrierte Methode

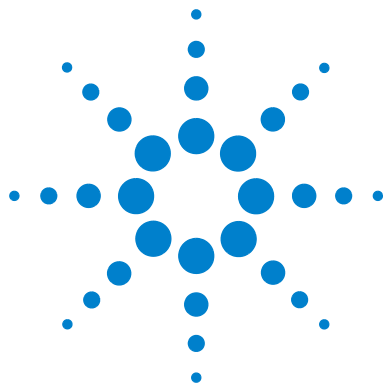
Wenn Sie Ihre Methode speichern, werden die zu diesem Zeitpunkt im Speicher vorhandenen Standards zusammen mit der Methode gespeichert. Nachdem eine Methode geladen wurde, können Sie Ihre Proben direkt analysieren.

- Optimierung einer speziellen Probe

Sie können Ihre Einstellungen für die Wellenlänge bei einer Probe außerhalb des linearen Bereichs Ihrer eigentlichen Kalibrierung optimieren. Aufgrund der hervorragenden Möglichkeit Ihres Spektrofotometers, die Wellenlänge zu reproduzieren, können Sie zu einer anderen Wellenlänge mit einem niedrigeren Extinktionskoeffizienten wechseln, um eine derartige Probe exakt analysieren zu können.

- Zusammenfassung

Die Verfügbarkeit von spektralen Rohdaten bietet Ihnen eine Fülle von zusätzlichen Vorteilen, um Ihre Kalibrierung und Analyse zu optimieren, um so die besten Ergebnisse erzielen zu können. Diese Optimierung kann schnell erfolgen, indem neue Methodenparameter eingestellt werden. Die Antworten erhalten Sie sofort. Das angewendete Datenanalyseverfahren gewährleistet konsistente und zuverlässige Ergebnisse.



2 Installation und Inbetriebnahme

Zusammenfassung der Installation des Agilent 8453 Systems für die
UV-Vis-Spektroskopie 36

Starten einer Messung 38

Dieses Kapitel ersetzt nicht die Informationen im Handbuch *Installation Ihres UV-Vis-Spektroskopiesystems*. Es dient als Zusammenfassung der wichtigsten Schritte für die Installation und Inbetriebnahme des Systems.



Zusammenfassung der Installation des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Allgemeines

Eine detaillierte Beschreibung des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie finden Sie im Handbuch *Installation Ihres UV-Vis-Spektroskopiesystems*. Die Zusammenfassung umfasst die wichtigsten Schritte der Installation.

Spektrofotometer

- ✓ Vergewissern Sie sich, dass die JetDirect-Karte im Spektrofotometer installiert ist.
- ✓ Überprüfen Sie, ob das Spektrofotometer entweder direkt mit Ihrem PC mittels „Twisted pair“ LAN-Kabel oder direkt mit dem lokalen Netzwerk verbunden ist.

VORSICHT

Verbinden Sie nicht den Netzwerkadapter Ihres PC mit der CAN-Schnittstelle des Agilent 8453 Spektrofotometers, da sonst der Netzwerkadapter des PC ernsthaft beschädigt werden kann. Der Grund hierfür ist, dass die Betriebsspannung der CAN-Schnittstelle (12 V) über der Betriebsspannung des Netzwerkadapters (5 V) liegt.

- ✓ Prüfen Sie, ob Ihr Spektrofotometer mit dem Netzanschluss verbunden ist.

WARNUNG

Betreiben Sie Ihr Gerät ausschließlich an einer geerdeten Steckdose. Verwenden Sie stets das für Ihr Land vorgesehene Netzkabel.

- ✓ Bevor Sie Ihr Spektrofotometer einschalten, vergewissern Sie sich, dass der CAG Bootp Server an Ihrem PC gestartet ist oder dass Ihr Netzwerkverwalter Ihrem Spektrofotometer eine IP-Adresse zugeordnet hat. Details hierzu finden Sie im Kapitel “LAN Kommunikation, Installation, Anschlüsse und Konfiguration” in Ihrem Handbuch *Installation Ihres UV-Vis Spektroskopiesystems*.

PC

- ✓ Prüfen Sie, ob alle PC-Komponenten an der Stromversorgung angeschlossen sind.
- ✓ Vergewissern Sie sich, dass die allgemein verwendbare Software für die UV-Vis-Spektroskopie installiert ist.
- ✓ An Ihrem PC muss ein Drucker konfiguriert sein.
 - Stellen Sie die Papiergröße ein (z.B. DIN A4).
 - Stellen Sie die Ausrichtung auf “Hochformat” ein.
- ✓ Das TCP/IP-Protokoll muss auf Ihrem PC installiert und konfiguriert sein.
- ✓ Ihr Spektrofotometer muss mit seiner IP-Adresse konfiguriert sein.
- ✓ Wenn Sie Ihr Spektrofotometer direkt an Ihrem PC anschließen, vergewissern Sie sich, dass die Anwendung CAG Bootp Server installiert ist und beim Systemstart Ihres PC automatisch gestartet wird. Wenn Sie Ihr Spektrofotometer an ein Netzwerk anschließen, vergewissern Sie sich, dass Ihr Netzwerkadministrator Ihrem Spektrofotometer eine IP-Adresse zugeordnet hat.

Starten einer Messung

Bei einer Netzwerkverbindung Ihres Spektrofotometers ist es wichtig, dass Ihr Spektrofotometer von der Software erkannt wird. Hierfür muss Ihrem Spektrofotometer beim Einschalten eine eindeutige IP-Adresse zugeordnet werden. Die Zuordnung erfolgt bei einer direkten Verbindung des Spektrofotometers mit Ihrem PC über die CAG Bootp Server-Anwendung, die auf Ihrem PC aktiv ist, oder beim Anschluss an das lokale Netzwerk über eine Server-Anwendung in Ihrem lokalen Netzwerk. Deshalb ist es wichtig, dass eine dieser Anwendungen aktiv ist, bevor Sie Ihr Spektrofotometer einschalten.

- ✓ Schalten Sie Ihren PC ein, und starten Sie Ihr Betriebssystem auf dem PC. Wenn an Ihrem System ein Drucker angeschlossen ist, schalten Sie diesen ein.
- ✓ Vergewissern Sie sich, dass der CAG Bootp Server aktiv ist oder dass Sie bei Ihrem lokalen Netzwerk angemeldet sind.
- ✓ Schalten Sie Ihr Spektrofotometer ein, und warten Sie, bis die Anzeige am Spektrofotometer grün leuchtet. Dieser Vorgang umfasst den Selbsttest des Spektrofotometers und dauert ca. eine Minute. Details zur Startroutine finden Sie im Kapitel "Installation und Inbetriebnahme" in Ihrem Handbuch *Installation Ihres UV-Vis Spektroskopiesystems*.
- ✓ Starten Sie Ihre Messung, indem Sie bei Ihrem Betriebssystem auf die Schaltfläche "Start" klicken, und dann "Programme", "Agilent UV-Visible ChemStations", "spectrophotometer 1 online" auswählen.
- ✓ Ihr System ist einsatzbereit, wenn die blaue *Aktivitätsanzeige* in der unteren Meldungszeile des Systems aufhört zu leuchten.
- ✓ Als erste Messung müssen Sie eine Referenzmessung durchführen. Nach diesem Abgleich können Sie Absorptionsdaten und Spektren messen.

HINWEIS

Bis die Lampen einen stabilen Betriebszustand erreicht haben, vergehen ca. 15 Minuten. Um optimale Ergebnisse zu erzielen, sollten Sie erst nach Ablauf dieses Zeitraums Ihre Messungen durchführen.



3 Ratschläge für eine erfolgreiche Messung

Allgemeine Hinweise 40

Einsetzen einer Küvette 53

Dieses Kapitel beinhaltet folgende Themen:

- Durchführung von Messungen
- Materialauswahl, optische Spezifikationen und Küvettenarten
- Umgang mit und Pflege von Küvetten
- Checkliste, um optimale Ergebnisse zu erzielen
- Lösungsmittelauswahl
- Vorbereitung der Proben
- Verwendung von Filtern
- Überwachung des Rührvorgangs und der Temperatur einer Probe
- Einsetzen einer Küvette in den Küvettenhalter



Allgemeine Hinweise

Messergebnisse werden durch eine Vielzahl von Faktoren beeinflusst. In diesem Abschnitt werden kurz einige der wichtigsten Faktoren erläutert.

Konzept des Spektrofotometers

Der Probenraum des Agilent 8453 Spektrofotometers ist offen. Im Gegensatz zu herkömmlichen Spektrofotometern wird das Agilent 8453 nicht durch Fremdlicht beeinträchtigt. Der offene Probenbereich ist dadurch besser zugänglich, wodurch Schläuche zu einer Durchflussküvette oder einem thermostatisierten Küvettenhalter leichter angeschlossen werden können.

Durchführung von Messungen

Blind- (Referenz-) und Probenmessungen

Ihr Spektrofotometer ist ein Einstrahlgerät. Somit müssen Sie eine Leerprobenmessung vornehmen, bevor Sie eine Probe messen. Um Messungen mit möglichst hoher Genauigkeit zu erzielen, sollte die Leerprobenmessung zeitlich unmittelbar vor der Probenmessung durchgeführt werden.

Allgemein sollte eine Leerprobenmessung so oft wiederholt werden, wie es beim Einsatz in der Praxis sinnvoll erscheint. Auch in einer Umgebung mit konstanten Temperaturbedingungen sollte nach jeweils 30 Minuten eine Leerprobenmessung durchgeführt werden, um so genaue Messergebnisse zu gewährleisten.

Aus chemischer Sicht betrachtet ist der einzige Unterschied zwischen einer Leerprobenmessung und einer Probenmessung die Anwesenheit des Analyten. Bei Messungen mit flüssigen Proben sollte die Leerprobenmessung mit einer Probenküvette erfolgen, die mit dem Lösungsmittel gefüllt ist, das Sie bei der Messung verwenden möchten.

Material der Probenküvette

Quarzprobenküvetten oder Probenküvetten mit Quarzfenstern werden dann benötigt, wenn Sie den gesamten Wellenlängenbereich Ihres Spektrofotometers von 190 bis 1100 nm verwenden möchten.

Wenn Sie nur im sichtbaren und/oder im nahen infraroten (SWNIR = Short Wave Near Infrared) Bereich zwischen 350 und 1100 nm arbeiten möchten, können Sie Glasküvetten von guter Qualität verwenden.

Es sind auch **Kunststoffküvetten** für die einmalige Verwendung für Messungen im Bereich von 400 bis 1100 nm erhältlich. Die Qualität dieser Küvetten ist unterschiedlich und können daher nicht generell empfohlen werden.

Optische Spezifikationen der Küvetten

Die Genauigkeit der Messwerte eines Diodenarray-Spektrofotometers ist im großen Maße von der räumlichen Verschiebung des Lichtstrahls abhängig. Küvetten mit Flächen, die nicht exakt parallel zueinander verlaufen oder sogenannte Keilstreifenküvetten führen zu einer räumlichen Verschiebung des Lichtstrahls (siehe [Abbildung 4](#)). Deshalb müssen die gegenüberliegenden Küvettenwände, auf die der Lichtstrahl fällt, exakt parallel zueinander verlaufen. Die Parallelität wird als *Winkel zwischen zwei gegenüberliegenden Küvettenwänden gemessen*. Wir empfehlen die Verwendung von Küvetten mit 10 mm Schichtdicke und *einem Winkel unter 0,1 Grad im Bogenmaß*.

3 Ratschläge für eine erfolgreiche Messung

Allgemeine Hinweise

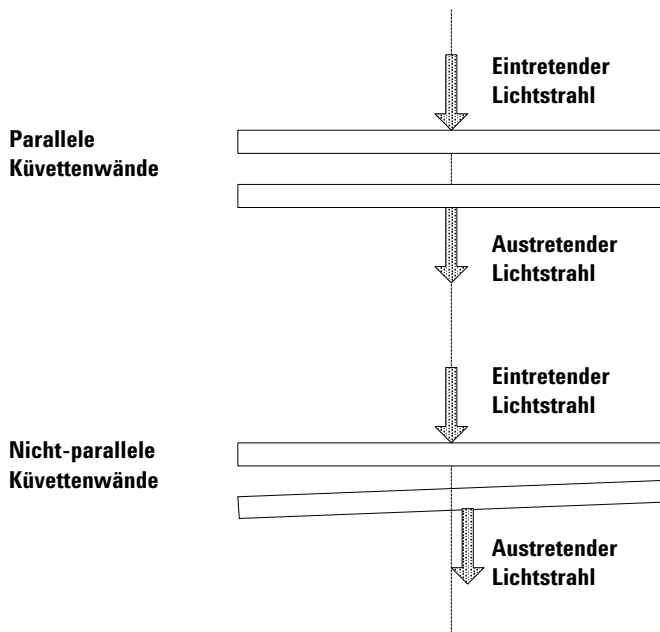


Abbildung 4 Verschiebung des Lichtstrahls des Spektrofotometers aufgrund nicht parallel verlaufender Küvettenwände

Küvetten mit Aperturen

Bei Anwendungen mit beschränktem Probenvolumen werden Küvetten *mit Aperturen* oder Mikroküvetten verwendet. Die Küvetten haben eine verringerte Breite, um das Volumen zu reduzieren. Der *nicht verwendete Teil der Küvette muss schwarz eingefärbt sein*, um unerwünschte Übertragungen und Reflexionen durch die Seitenwände zu verhindern. Wenn die Seitenwände nicht schwarz sind, weisen die Ergebnisse eine schlechte fotometrische Genauigkeit und beim Messen von unterschiedlichen Konzentrationen eine schlechte Linearität auf.

Der Nachteil von Küvetten mit einer Apertur oder von Mikrozellen liegt darin, dass ein Teil des Lichtstrahles ausgeblendet wird. Es wird nicht alles Licht durch die Probe geleitet, wodurch ein Verlust bei der Empfindlichkeit

auftreten kann. In [Abbildung 5](#) sind empfohlene Küvetten abgebildet. In [Abbildung 6](#) sind Küvetten abgebildet, die Sie nicht in Verbindung mit Ihrem Gerät verwenden sollten.

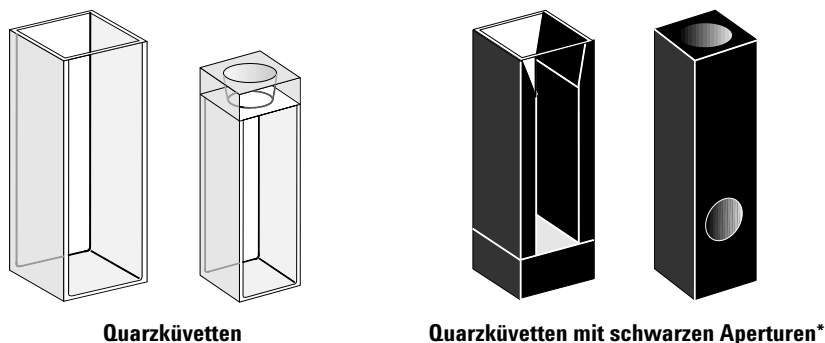
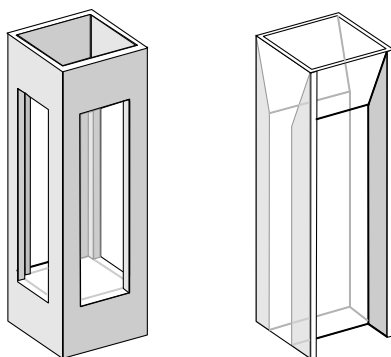


Abbildung 5 Empfohlene Küvetten

VORSICHT

* Wenn Quarzküvetten mit geschwärzten Öffnungen kleiner als 2 mm in Verbindung mit einem Mehrfachküvettenwechsler verwendet werden, kann bei den Messungen eine schlechte Reproduzierbarkeit eintreten.



**Quarzküvetten mit transparenten Aperturen,
Fluoreszenzküvetten, Kunststoffküvetten**

Abbildung 6 Küvetten, die Sie in Verbindung mit Ihrem Gerät nicht verwenden sollten

Durchflussküvetten

Bei hochpräzisen Messungen wird eine Durchflussvorrichtung (Sipper) mit einer Durchflussküvette empfohlen. Bei Verwendung einer Durchflussküvette ist es nicht mehr erforderlich, die Küvette zwischen einer Leerprobenmessung und einer Probenmessung zu wechseln. Außerdem kann die Küvette mit der zu messenden Lösung gründlich gespült werden.

Die Durchflussküvette ist so konstruiert, dass kaum Luftblasen eingeschlossen werden können und sich der *Fluss* auf ein Minimum reduziert, um so höchstzuverlässige Ergebnisse zu erzielen.

Umgang mit und Pflege von Küvetten

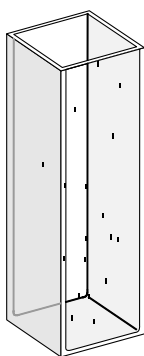
Passivieren von neuen Küvetten

Wenn Sie eine neue, nicht-passivierte Küvette mit Ihrer Probe füllen, können Sie beobachten, wie sich an den Küvettenfenstern Luftblasen bilden und dort anhaften. Um anhaftende Luftblasen zu verhindern, spülen Sie die Küvette mit einem Reinigungs- und Passivierungsflüssigkeit (Bestellnummer 5062-8529). Die entsprechende Reinigungsprozedur ist auf dem Aufkleber auf dem Behälter mit der Reinigungsflüssigkeit angegeben.

Reinigen von Küvetten

Fettrückstände durch Fingerabdrücke haben im UV-Bereich eine große absorbierende Wirkung. Auf optischen Oberflächen führen sie zu verfälschten Messergebnissen. Entfernen Sie alle Fingerabdrücke und Verunreinigungen, bevor Sie eine Probenküvette verwenden.

Verwenden Sie ausschließlich qualitativ hochwertige Linsenreinigungstücher (Bestell-Nr. 9300-0761) und reinigen Sie den Innenbereich einer Küvette niemals mit einem Linsenreinigungstuch. Der Innenbereich der Küvette ist mit ölfreier Druckluft zu reinigen. Dadurch wird verhindert, dass die Küvette durch Partikel des Reinigungstuches verunreinigt wird. Sie können die Küvette auch mit einer Testlösung oder Probenlösung spülen. Schwebstoffe in der Küvette lenken den Lichtstrahl ab und führen so zu einer äußerst schlechten Qualität des gemessenen Spektrums.



Schwebstoffe lenken den
Lichtstrahl ab und streuen
den Lichtstrahl

Abbildung 7 Schwebstoffe in einer Küvette

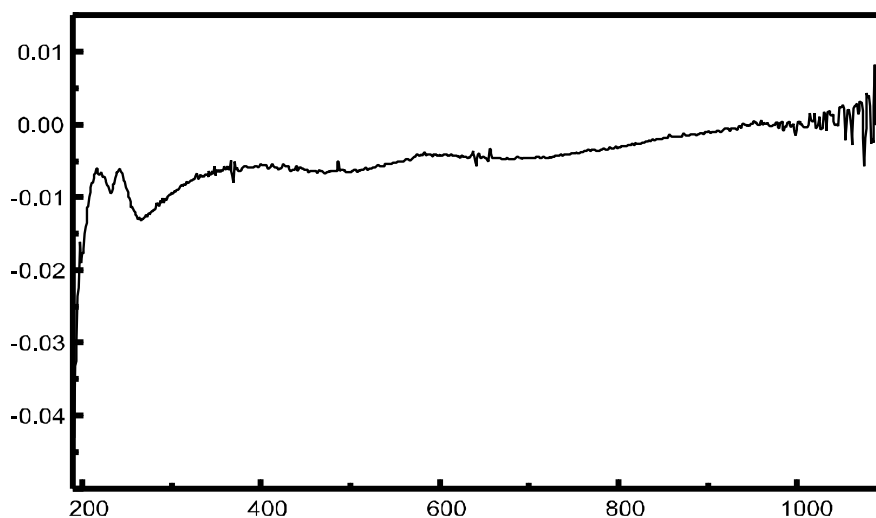


Abbildung 8 Spektrum mit Schwebstoffen im Lichtstrahl

Reinigungstücher für Brillen oder andere Zwecke enthalten häufig Reinigungsmittel oder Gleitmittel, die sich auf Ihre Messungen auswirken können. Vermeiden Sie es nach Möglichkeit, die Oberflächen Ihrer Küvette zwischen einer Blindmessung und einer Probenmessung zu reinigen.

3 Ratschläge für eine erfolgreiche Messung

Allgemeine Hinweise

Umgang mit Küvetten

Installieren Sie eine Küvette so, dass sie immer in die gleiche Richtung zeigt, um Probleme durch Ungleichförmigkeiten der Küvette zu minimieren. Um mit Mikroküvetten optimale Ergebnisse zu erzielen, lassen Sie Ihre Probenküvette während der gesamten Messreihe eingesetzt. Die Lösungen sollten mit einer Pipette entnommen und eingefüllt werden. Es können jedoch auch Durchflussküvetten verwendet werden.

VORSICHT

Wenn Sie Glaspipetten verwenden, sollten Sie darauf achten, dass Sie mit der Pipette nicht die optischen Fenster der Küvette berühren oder gar zerkratzen.

Lösungsmittel

Sie sollten die Lösungsmittel in erster Linie nach folgenden Kriterien auswählen: die Absorptionseigenschaften der Lösungsmittel im gewünschten Wellenlängenbereich, die Eignung der Lösungsmittel für den zu bestimmenden Stoff und die experimentellen Bedingungen. In [Tabelle 1](#) sind herkömmliche Lösungsmittel zusammen mit dem unteren Grenzwert ihrer nutzbaren Wellenlängenbereiche aufgelistet.

Tabelle 1 Unterer Grenzwert bei UV-Durchlässigkeit für einige herkömmliche Lösungsmittel

Unterer Grenzwert	Lösungsmittel
180 -195 nm	Schwefelsäure (96%) Wasser Azetonitril
200 -210 nm	Cyklopentan n-Hexan Glycerin 2,2,4-Trimethylpentan Methanol
210 -220 nm	n-Butanol Isopropanol Cyklohexan Ethylether
245 -260 nm	Chloroform Ethylacetat Methylformiat
265 -275 nm	Tetrachlorkohlenstoff Dimethylsulfoxid Dimethylformamid Essigsäure
280 – 290 nm	Benzol Toluol m-Xylen
Über 300 nm	Pyridin Azeton Schwefelkohlenstoff

WARNUNG

Viele der in **Tabelle 1** angegebenen Lösungsmittel sind gefährlich. Bevor Sie diese verwenden, müssen Sie mit deren Eigenschaften vollständig vertraut sein.

Bei der Verwendung von flüchtigen Lösungsmitteln, wie Azeton oder Dichlormethan, vergewissern Sie sich, dass die Probenküvette verschlossen ist. Durch das Verdunsten eines Lösungsmittels kann sich die Konzentration des gelösten Stoffes verändern oder zu einem *Lösungsrauschen* führen, das durch die Konvektionsströme des gelösten Stoffes verursacht wird. Beide Beeinträchtigungen wirken sich auf die Genauigkeit Ihrer Messungen aus. Bei der Arbeit mit flüchtigen Lösungsmitteln sollten außerdem der Rührvorgang und die Temperatur überwacht werden.

Bei der Verwendung von Wasser als Lösungsmittel sollte UV-reines oder LC-reines Wasser verwendet werden, um unerwünschte Absorptionen zu verringern. Wenn Sie das Sipper-/Probengebersystem verwenden, sollte das Wasser entgast sein, um die Bildung von Luftblasen in der Durchflussküvette zu verhindern. Darauf ist besonders dann zu achten, wenn eine Druckwasserversorgung verwendet wird.

Vorbereiten der Probe

Die Probenküvette muss 3 bis 5 Mal mit dem vorgesehenen Lösungsmittel gespült werden, bevor Sie diese mit dem reinen Lösungsmittel, das während der Messung verwendet wird, füllen. Wenn Sie die Küvette mit der Öffnung nach unten auf einen kleinen Stoß Tücher aus aufsaugendem Material stellen, kann die Küvette von Lösungsmittelresten befreit werden. Durch diese Vorgehensweise wird die Gefahr einer Verunreinigung durch vorherige Messungen auf ein Minimum reduziert.

Proben mit kolloiddispersen Systemen, Staub oder anderen Schwebstoffen sollten gefiltert oder zentrifugiert werden, oder man wartet, bis sich die Partikel abgesetzt haben. Wenn dies nicht beachtet wird, werden aufgrund der Lichtstreuung und/oder Reflexion die Spektralinformationen des zu bestimmenden Stoffes durch die Abschwächung des Transmissionsvermögens verdeckt.

Lichtempfindliche Proben

Einige Substanzen sind äußerst lichtempfindlich. Wenn sie Licht ausgesetzt werden, erfolgt ein Abbau oder eine fotochemische Reaktion. Dies kann leicht erkannt werden, wenn sich im Laufe der Zeit die Probenabsorption verringert.

Verwenden von Filtern

Kurzwelliges UV-Licht mit höherer Energie kann lichtempfindliche Proben schnell beeinträchtigen. Wenn Probleme auftreten, können Sie Teile des UV-Spektrums mit einem UV-Cutoff-Filter ausgrenzen. Für das Spektrofotometer ist ein optisches Filterrad mit drei Cutoff-Filtern verfügbar. Die von Ihnen gewählte Grenzwellenlänge des Filters sollte so niedrig sein, dass keine wichtigen spektralen Informationen verloren gehen, jedoch auch so hoch sein, dass das Licht ausgegrenzt wird, das Ihre Probe beeinträchtigen könnte. Wenn Sie für Ihre Proben ein Filter verwenden, müssen Sie bei Ihrer Blindmessung genau das gleiche Filter verwenden.

Ausschalten der D₂-Lampe

Die kurzwellige Strahlung, die zu einem Fotoabbau führt, wird durch das Licht der D₂-Lampe verursacht. Bei Anwendungen mit Wellenlängen über 400 nm, kann die D₂-Lampe ausgeschaltet werden. Die Lichtintensität der Wolframlampe ist ausreichend für ein gutes Signal-Rausch-Verhältnis im Wellenlängenbereich von 400 bis 1100 nm. Wenn Sie Küvetten mit einer engen Apertur verwenden, sollten Sie das Signal-Rausch-Verhältnis testen, indem Sie Probemessungen unter Messbedingung durchführen.

Überwachen des Rührvorgangs und der Temperatur

Die Homogenität der Lösung kann ein Problem darstellen, dies trifft besonders bei viskosen Lösungen zu. In bestimmten Fällen, die durch Konvektion induzierte Gradienten hervorgerufen werden, können schnelle Veränderungen der Absorption zu nicht reproduzierbaren Daten führen. Diese Änderungen können spektroskopisch erkannt werden, indem Messungen mit kurzen Integrationszeiten durchgeführt werden. Um die Auswirkungen der Konvektion zu minimieren, achten Sie darauf, dass Ihre Probe konstant die gleiche Temperatur hat wie der Küvettenhalter bzw. die Umgebung. Probleme wie diese können auch durch die Verwendung eines thermostatisierbaren Küvettenhalters und/oder eines Rührmoduls minimiert werden.

Ein ähnlicher Effekt kann auftreten, wenn ein Mischvorgang nicht vollständig durchgeführt wurde. Dies trifft besonders dann zu, wenn die Schwerkraft oder Mischbarkeit der Lösung und des zu bestimmenden Stoffes sehr unterschiedlich sind. Auch hier können derartige Probleme durch Rührvorgänge verhindert werden.

In einer Küvette ohne Rührung kann gelegentlich beobachtet werden, dass bei sensitiven zu bestimmenden Stoffen ein lokaler Fotoabbau auftritt. Da das tatsächliche Volumen der Probe im Lichtweg sehr klein ist, verringert sich durch das Rühren der Probe die Zeit, in der sich ein zu bestimmendes Molekül im Lichtweg befindet. Hierdurch wird der Fotoabbau minimiert und die Homogenität gesteigert. Durch die Verwendung einer Durchflussküvette mit permanentem Fluss können ähnliche Ergebnisse erzielt werden.

Checkliste für optimale Ergebnisse

Küvette:

- ✓ Küvette aus Quarz oder Glas
- ✓ Küvetten mit Aperturen haben schwarze Seiten
- ✓ Küvetten mit Aperturen haben eine Apertur größer oder gleich 3 mm
- ✓ Keine Fingerabdrücke und andere Verunreinigungen auf den Küvettenfenstern
- ✓ Durchflussküvette anstelle einer Standardküvette mit Apertur

Messungen:

- ✓ Lösung in der Küvette ist frei von losen Partikeln
- ✓ Lösung in der Küvette und Küvettenwände ist frei von Luftblasen
- ✓ Lösung in der Küvette ist homogen gemischt
- ✓ Leerprobenmessung wurde mit gleichem Lösungsmittel wie Probe durchgeführt

- ✓ Blindmessung weist eine flache Grundlinie auf ([Abbildung 9](#) und [Abbildung 10](#) auf Seite 52 zeigen eine korrekte und eine schlechte Grundlinie)
- ✓ Küvette ist bei Leerproben- und Probenmessungen identisch ausgerichtet
- ✓ Die Küvette wird im Idealfall nicht zwischen den Messungen entfernt. Dies bedeutet, dass die Küvette mit einer Pipette gefüllt/gespült wird oder eine Durchflussküvette verwendet wird.
- ✓ Zeit zwischen Leerproben- und Probenmessung sollte so kurz wie möglich sein

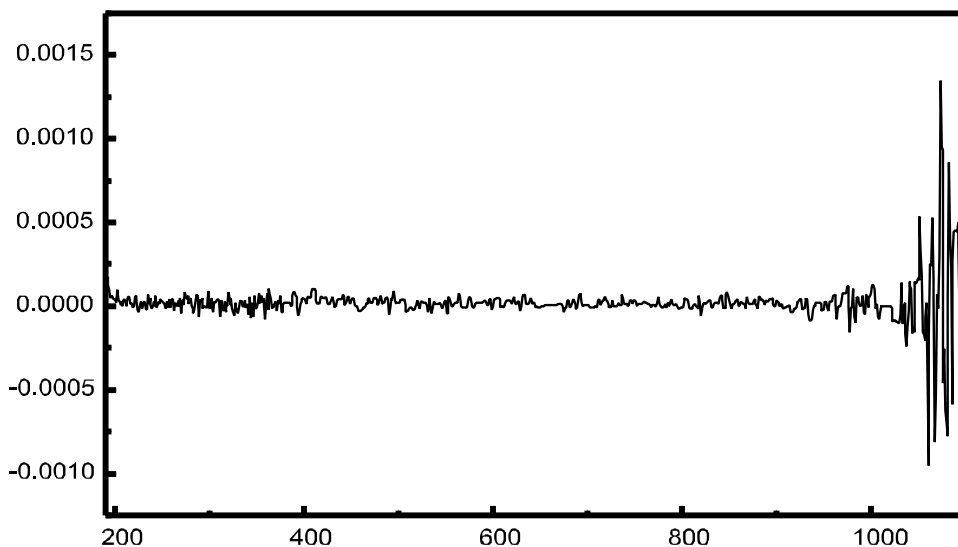


Abbildung 9 Beispiel einer Leerprobenmessung mit Wasser mit einer korrekten Grundlinie

3 Ratschläge für eine erfolgreiche Messung

Allgemeine Hinweise

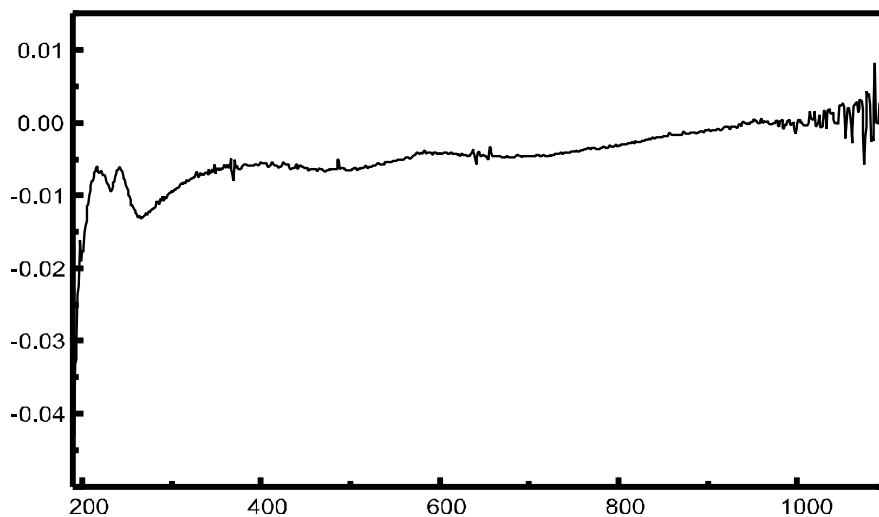


Abbildung 10 Beispiel einer Leerprobenmessung mit Wasser mit Luftblasen, die zu einer schlechten Grundlinie führen

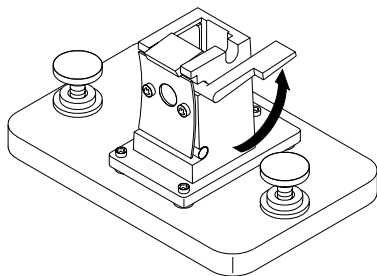
HINWEIS

Wenn Ihre Leerprobenmessung oder Ihre Spektren Artefakte wie in [Abbildung 10](#) aufweisen, schauen Sie unter "[Lösungsmittel](#)" auf Seite 46, um den Messvorgang zu optimieren.

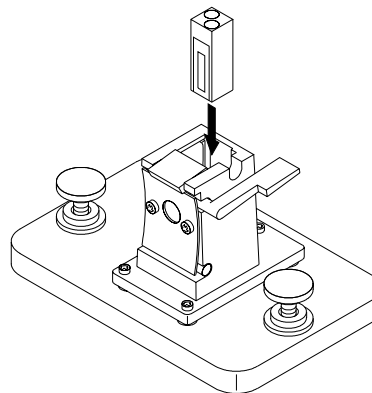
Einsetzen einer Küvette

Ihr Spektrofotometer wird mit dem standardmäßigen Einzelküvettenhalter geliefert, den Sie im Probenraum installieren. Dieser Küvettenhalter kann Standardküvetten oder Durchflussküvetten aufnehmen. Gehen Sie wie folgt vor, um eine Probenküvette im Küvettenhalter einzusetzen:

1 Klappen Sie die Verriegelung nach oben.



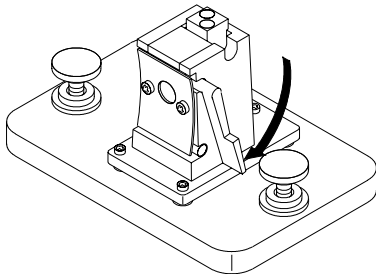
2 Setzen Sie die Probenküvette ein. Vergewissern Sie sich, dass sie korrekt ausgerichtet ist. Die matten (undurchsichtigen) Seiten der Probenküvette *dürfen sich nicht* im Wege des Lichtstrahls befinden.



3 Ratschläge für eine erfolgreiche Messung

Einsetzen einer Küvette

3 Befestigen Sie die Probenküvette, indem Sie die Verriegelung nach unten drücken.



Bei Durchflussküvetten und besonders bei Küvetten mit Aperturen kleiner als 2 mm muss ggf. der optionale, einstellbare Küvettenhalter verwendet werden. Der einstellbare Küvettenhalter stellt sicher, dass die Küvetten korrekt im Lichtweg zentriert positioniert sind.



4

Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Start der ersten Messung	56
Starten der UV-Vis-Spektroskopie-Software	58
Messen der Absorption von Koffein bei 273 nm	59
Speichern der Parameter in einer Methode	62
Abrufen und Drucken einer Methode	64
Speichern und Abrufen von Daten	68
Reportvorschau drucken	74
Ermitteln des Absorptionsmaximums von Koffein	77
Eingeben der Küvetten-Schichtdicke	81
Steuern des Sippersystems	83
Verwenden des Mehrfachküvettenwechslers	85
Quantitative Analyse unter Verwendung einer Kalibrierung mit Standards	88
Wie man sicherstellt, dass das Agilent 8453 korrekt funktioniert	96
Wie man weitergehende Informationen zur UV-Vis Spektroskopie erhält	99
Wann ist eine Leerprobe zu messen?	101



Start der ersten Messung

- 1 Vergewissern Sie sich, dass Ihr Agilent 8453 System für die UV-Vis-Spektroskopie korrekt installiert ist.

Details zur Installation finden Sie im Handbuch *Installation des UV-Vis Spektroskopiesystems*.

- 2 Schalten Sie PC, Bildschirm und Drucker ein.
- 3 Melden Sie sich beim Betriebssystem Ihres PC an.

Vergewissern Sie sich, dass Ihr Bootp Server in der Taskleiste Ihres Systems als Eintrag angezeigt wird, oder vergewissern Sie sich, dass Ihr Netzwerkverwalter Ihr Agilent 8453 Spektrofotometer in Ihr lokales Netzwerk integriert hat.



- 4 Schalten Sie Ihr Agilent 8453 Spektrofotometer ein.

Ein aktiver DHCP-Server wird jetzt Ihrem Spektrofotometer die konfigurierte IP-Adresse zuordnen. Bei der Standardinstallation wird dies vom CAG Bootp Server vorgenommen.

- 5 Starten Sie Ihre Messungen, indem Sie im Menü "Instrument 1 online" auswählen.

In der Geräteanzeige wird der aktuelle Zustand des Spektrofotometers angezeigt. Außerdem ist die Schaltfläche "Blank" aktiviert.

- 6 Zuerst müssen Sie einen Referenzwert messen. Üblicherweise wird die Küvette mit dem Lösungsmittel, welches Sie mit Ihren Proben verwenden, in die Messposition gebracht und eine Leerprobenmessung durchgeführt. Um diese Messung zu starten, klicken Sie in der Geräteanzeige auf die Schaltfläche "Blank", oder drücken Sie am Spektrofotometer die Taste "Blank".

Eine Leerprobenmessung ist eine Referenzmessung kombiniert mit der Messung eines Grundlinienspektrums. Ein Grundlinienspektrum gibt weiteren Aufschluss über die Absorption der Küvettenfenster und der Lösung. Bereiche mit hohem Rauschanteil weisen indirekt auf eine hohe Absorption hin.

HINWEIS

Bei hochpräzisen Messungen warten Sie bitte, bis das Spektrofotometer und die Lampen thermisch ausreichend stabilisiert sind. Die hierfür benötigte Zeit ist von den Umgebungsbedingungen abhängig. Ihr Spektrofotometer sollte nach 45 Minuten betriebsbereit sein.

- 7 Als nächste Messung nehmen Sie Ihre Probenmessung vor. Um Ergebnisse mit der höchstmöglichen Genauigkeit zu erzielen, verwenden Sie dieselbe Küvette in derselben Ausrichtung zum Messstrahl. Spülen Sie Ihre Küvette dreimal mit Ihrer Probenlösung. Starten Sie die Messung, indem Sie in der Geräteanzeige auf die Schaltfläche "Sample" klicken, oder drücken Sie am Spektrofotometer die Taste "Sample".

HINWEIS

Details zum Einsetzen Ihrer Küvette finden Sie im Abschnitt "[Einsetzen einer Küvette](#)" auf Seite 53.

Starten der UV-Vis-Spektroskopie-Software

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie Sie eine Agilent ChemStation Sitzung an Ihrem PC starten. Wenn Sie Messungen durchführen wollen, können Sie eine Online-Sitzung oder eine Offline-Sitzung starten. Bei einer Offline-Sitzung können Sie die Analysenparameter einer Methode optimieren, Ergebnisse erneut berechnen oder Berichte drucken.

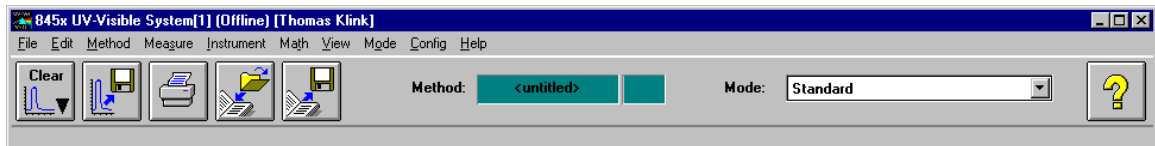
An Ihrem PC kann jeweils nur eine Online-Sitzung gestartet werden. Es können jedoch mehrere Offline-Sitzungen gleichzeitig laufen. Dies ermöglicht die Optimierung Ihrer Methodeneinstellungen durch direkten Vergleich mit Hilfe von identischen Datengruppen.

- 1** Schalten Sie PC, Bildschirm und Drucker ein.
- 2** Melden Sie sich am Betriebssystem Ihres PC an.
- 3** Starten Sie Ihre Agilent ChemStation Sitzung, indem Sie im Menü “Instrument 1 online” für eine Messsitzung oder “Instrument 1 offline” zum Optimieren der Methode und Berechnen von Daten auswählen.
- 4** Geben Sie Ihren Namen ein, um sich bei Ihrer Agilent ChemStation Sitzung anzumelden. Wenn Sie die Verwalterebene durch ein Kennwort geschützt haben, müssen Sie das korrekte Kennwort eingeben. Das System wird dann mit dem zuletzt verwendeten Modus und der zuletzt verwendeten Methode aufgerufen.

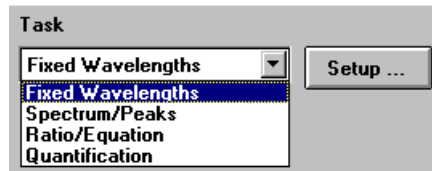
Messen der Absorption von Koffein bei 273 nm

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie Sie die Koffeinprobe messen, die im Lieferumfang Ihres Spektrofotometer enthalten ist. Die Messung dieser Koffeinprobe wird auch für die IQ (Installationsqualifikation) der Agilent 8453 Spektrofotometer verwendet.

- 1 Vergewissern Sie sich, dass Sie sich im Standardmodus befinden. Der Modus wird in der Symbolleiste der Agilent ChemStation Sitzung angezeigt.



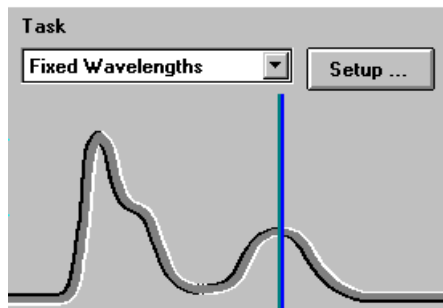
- 2 Wählen Sie im entsprechenden Auswahlfeld des Analysefensters die Aufgabenstellung "Fixed Wavelength" aus.



- 3 Klicken Sie im Analysefenster auf die Schaltfläche "Setup", um das Dialogfenster mit den Parametern zu öffnen.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

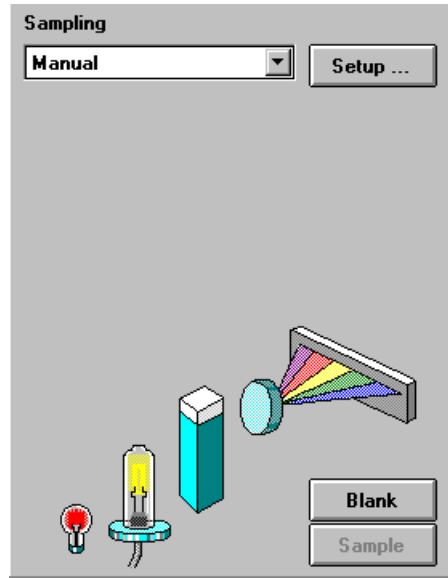
Messen der Absorption von Koffein bei 273 nm



- 4 Geben Sie im Dialogfenster “Fixed Wavelength(s) Parameters” im Abschnitt “Wavelengths” die gewünschte Wellenlänge ein. Stellen Sie im Abschnitt “Display spectrum” die Spektrenanzeige auf einen Wellenlängenbereich von 190 nm bis 400 nm ein. Klicken Sie auf OK, um Ihre Parameter einzustellen.

- 5 Füllen Sie Ihre Quarzküvette mit 1 cm Schichtdicke mit destilliertem Wasser. Klappen Sie die Verriegelung auf der linken Seite des Küvettenhalters nach oben. Setzen Sie die Küvette im Küvettenhalter ein, und vergewissern Sie sich, dass die durchsichtigen Fenster in Richtung Vorder- und Rückseite des Spektrofotometers zeigen. Drücken Sie die Verriegelung nach unten, um so die Küvette im Küvettenhalter zu sichern.

- 6 Drücken Sie auf der Vorderseite des Spektrofotometers die Taste “Blank”, oder klicken Sie in der Geräteanzeige auf “Blank”, um die Messung zu starten.



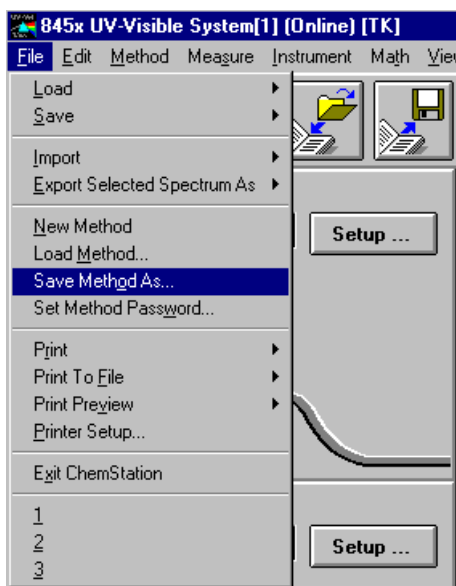
- 7 Merken Sie sich die Ausrichtung der Küvette im Küvettenhalter. Klappen Sie die Verriegelung nach oben, um die Küvette freizugeben. Entfernen Sie die Küvette, und spülen Sie diese dreimal mit ca. 1 ml Ihrer Koffeinprobe. Füllen Sie dann die Küvette mit ca. 3 ml der Koffeinprobe. Vergewissern Sie sich, dass die Küvettenfenster sauber sind. Setzen Sie die Küvette wieder in der gleichen Ausrichtung wie bei der Referenzmessung im Küvettenhalter ein. Schließen Sie die Verriegelung am Küvettenhalter.
- 8 Drücken Sie auf der Vorderseite des Spektrofotometers die Taste “Sample”, oder klicken Sie in der Geräteanzeige auf “Sample”, um die Messung zu starten.
- 9 In der Ansicht erscheint das Spektrum der Koffeinprobe mit einer vertikalen Linie, die die gewünschte Wellenlänge angibt. Unter dem Spektrum finden Sie die Tabelle “Sample/Result Table”, in der der Absorptionsmesswert bei 273 nm angegeben wird.

Speichern der Parameter in einer Methode

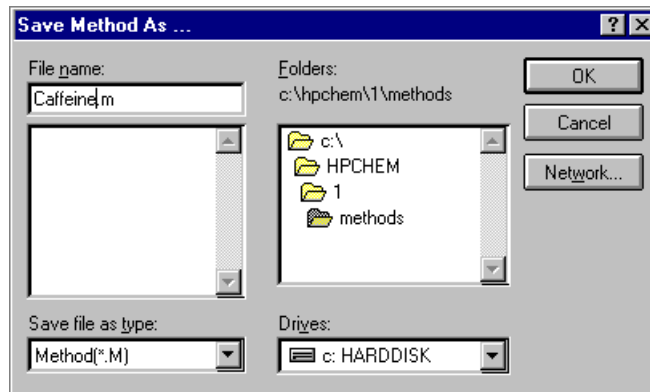
In diesem Abschnitt wird erläutert, wie Sie Ihre Einstellungen zur Verwendung bei einer zukünftigen Agilent ChemStation Sitzung speichern können. Die Einstellungen an Ihrer Agilent ChemStation können durch einfaches Laden Ihrer Methode vorgenommen werden, um so eine Messung wiederholen zu können. Die tägliche Arbeit im Labor wird durch eine Methodenbibliothek stark vereinfacht.

Beispielsweise ist durch Ihre aktuellen Einstellungen die Methode so definiert, dass eine Koffeinprobe analysiert wird. Damit eine solche Analyse wiederholt werden kann, können alle eingestellten Parameter dauerhaft auf Datenträger gespeichert werden. Dadurch kann eine Methode in Ihr System geladen oder auch eine Methode an eine Kollegin/einen Kollegen mit einem Agilent ChemStation System weitergeleitet werden.

- 1 Wählen Sie im Menü "File" die Option "Save Method As..." (Methode speichern unter..) aus, oder klicken Sie auf das entsprechende Symbol.

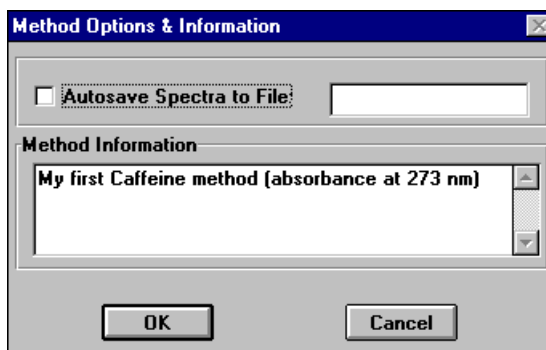


- 2 Jetzt erscheint das Dialogfenster "Save Method As...". Geben Sie im Feld "File name" den Namen der Methode ein - beispielsweise "Koffein.m" (Caffeine.m). Klicken Sie auf OK, um Ihre Methode zu speichern.



HINWEIS

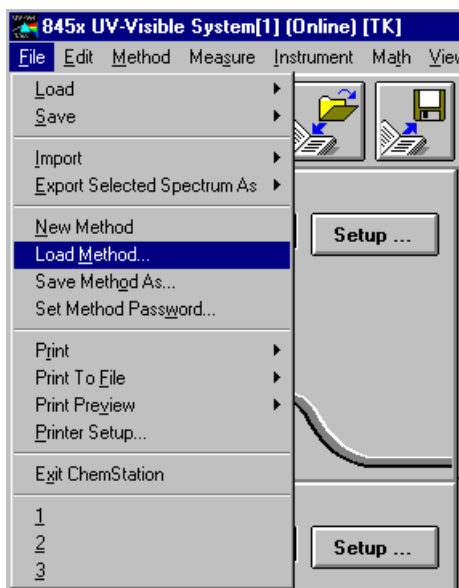
Wenn Sie viele Methoden erstellen, können Sie über die Option "Options & Infos..." im Menü "Method" Text für Dokumentationszwecke hinzufügen und um das Aufrufen von Methoden zu vereinfachen. Jetzt erscheint das Dialogfenster "Method Options & Information". Im Abschnitt "Method Information" können Sie eine kurze Beschreibung eingeben, die dann mit Ihrer Methode gespeichert wird.



Abrufen und Drucken einer Methode

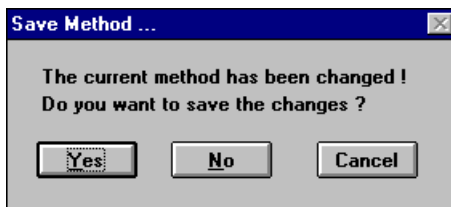
In diesem Abschnitt wird erläutert, wie Methoden aufgerufen werden und ein Methodenbericht gedruckt wird.

- 1 Wählen Sie im Menü "File" die Option "Load Method..." aus, oder klicken Sie in der Symbolleiste auf das entsprechende Symbol.

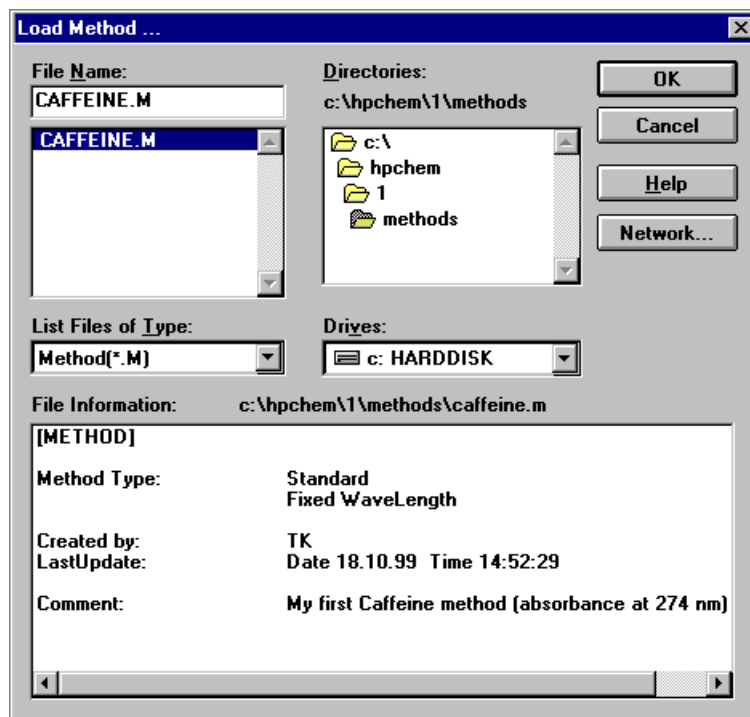


HINWEIS

Wenn Ihre aktuelle Methode modifiziert wurde, werden Sie in einem Dialogfenster gefragt, ob diese Änderungen gespeichert oder verworfen werden sollen.



- 2 Jetzt erscheint das Dialogfenster "Load Method...". Die Informationen zur ausgewählten Methode werden im Dialogfenster im Abschnitt "File Information" angezeigt.



4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Abrufen und Drucken einer Methode

3 Wenn Sie diese Methode laden wollen, klicken Sie auf OK.

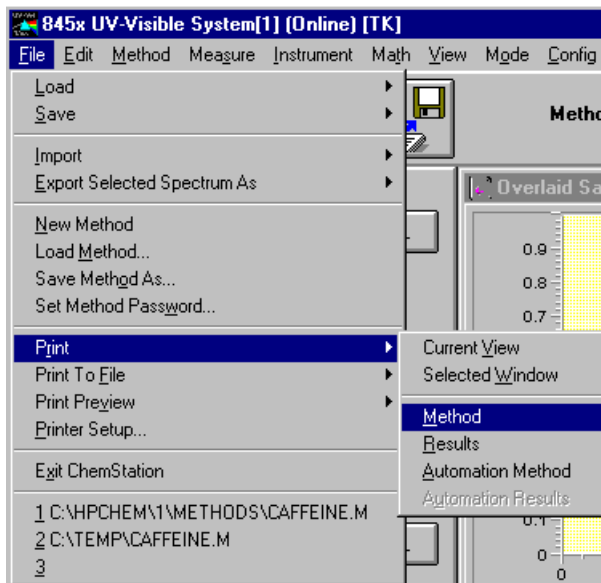
HINWEIS

Immer dann, wenn Sie einen Parameter der aktuellen Methode ändern, wird dies im Modifikationsfeld der Symbolleiste angezeigt.



Hierdurch wird automatisch das zuvor erwähnte Dialogfenster mit der entsprechenden Frage aufgerufen.

4 Um eine Methode zu drucken, wählen Sie im Menü "File" die Option "Print" und dann "Method" aus.



HINWEIS

Um Ihren Methodenbericht zu drucken, muss Ihr Drucker korrekt konfiguriert und online sein. Wenn Ihr Drucker derzeit nicht online ist, können Sie alternativ die Druckvorschau am Bildschirm betrachten.

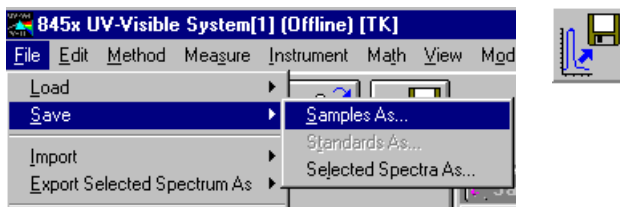
Speichern und Abrufen von Daten

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie Sie Messdaten speichern und abrufen können. Diese Daten können für die Archivierung, für die Entwicklung von Methoden in einem späteren Stadium oder für den Austausch mit anderen Agilent ChemStations verwendet werden.

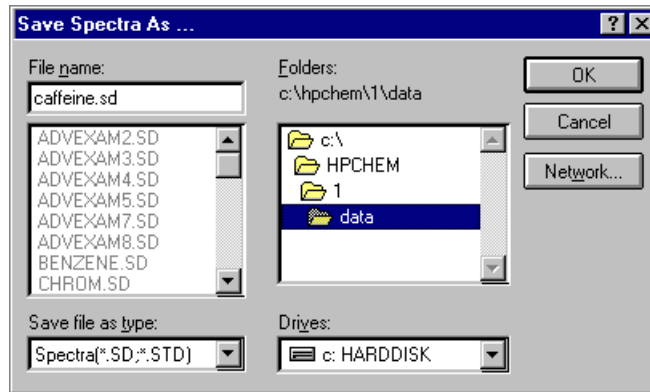
Die Agilent ChemStation kann Ihre Daten in einem binären, durch eine Prüfsumme geschützten Datenformat (mit der Dateierweiterung *.sd, *.std) speichern und abrufen. Alle aktuellen Spektren (Proben und Standards) können auf Datenträger zur dauerhaften Speicherung gespeichert werden. Das Speichern und Laden von Daten kann über lokale Laufwerke und über Netzwerklaufwerke erfolgen. Außerdem kann ein einzelnes Spektrum zum Speichern ausgewählt werden.

Speichern Ihrer Proben

- 1 Wählen Sie "Save, Samples As..." aus dem Menü "File" oder klicken Sie auf das Symbol in der Symbolleiste.



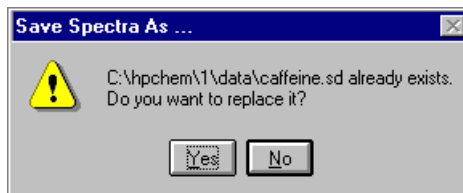
- 2 Im Dialogfenster "Save Spectra As..." wählen Sie im Auswahlfeld "File name" eine der bereits vorhandenen Datendateien aus, oder geben Sie im Feld "File name" einen gültigen Dateinamen ein.



HINWEIS

Ein gültiger Dateiname besteht aus acht alphanumerischen Zeichen und der Dateierweiterung .sd oder .std. Normalerweise wird die Erweiterung .std nur bei Standards verwendet.

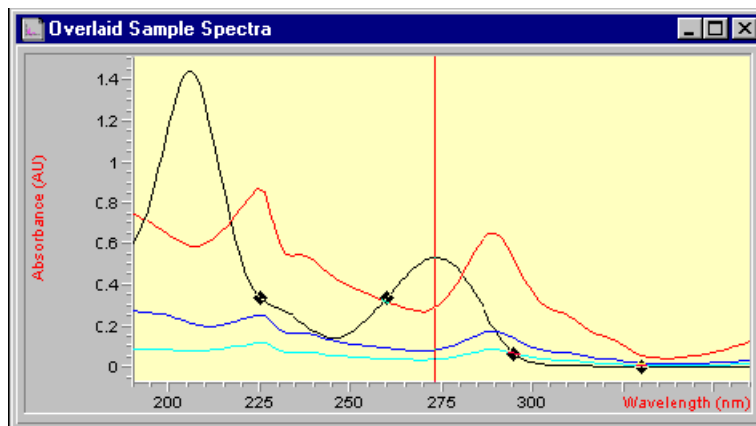
Wenn der Dateiname bereits vorhanden ist, erscheint ein Meldungsfenster, in dem Sie den Vorgang abbrechen oder bestätigen können.



3 Klicken Sie auf OK, um den Vorgang zu starten.

Speichern eines ausgewählten Spektrums

- 1 Wählen Sie im Grafikfenster das gewünschte Spektrum aus.



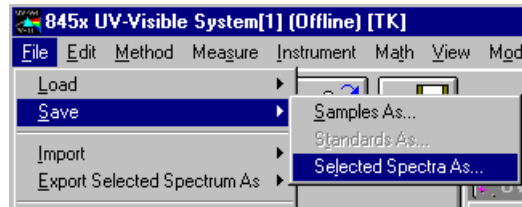
Sie können jedoch das Spektrum auch im Tabellenfenster "Sample/Results Table" auswählen.

The figure shows a software window titled "Sample/Result Table". It contains a table with the following data:

#	Name	Dilut. Factor	Caffeine(mg/L)	Abs<273nm>
1	Caffeine	1.00000	0.26527	0.53053

Buttons at the top: Show Sample Info, Last Spectrum, Delete Selected Sample, Analyze.

- 2 Wählen Sie im Menü "File" die Option "Save" und dann "Selected Spectra As..." aus.

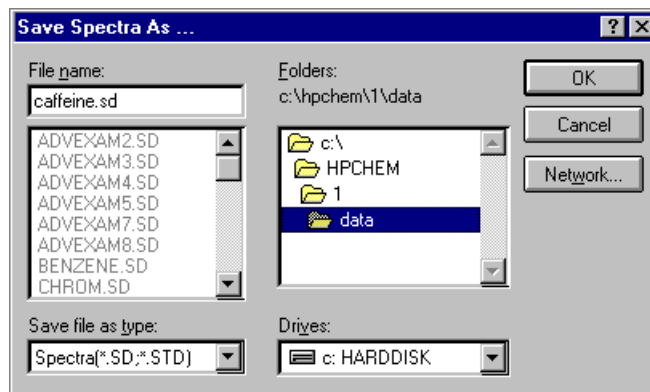


HINWEIS

Wenn Sie weder das Fenster "Overlaid Sample Spectra" (Überlagerte Probenspektren) noch das Fenster "Sample/Results Table" (Probe/Ergebnistabelle) ausgewählt haben, erscheint in der Meldungszeile die Warnung "Select/activate a window!" (Wählen oder aktivieren Sie ein Fenster).

Select/activate a window!

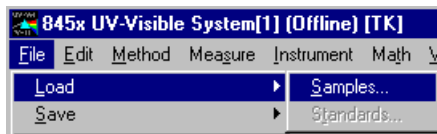
- Im Dialogfenster "Save Spectra As..." wählen Sie im Auswahlfeld "File name" eine der bereits vorhandenen Datendateien aus, oder geben Sie im Feld "File name" einen gültigen Dateinamen ein.



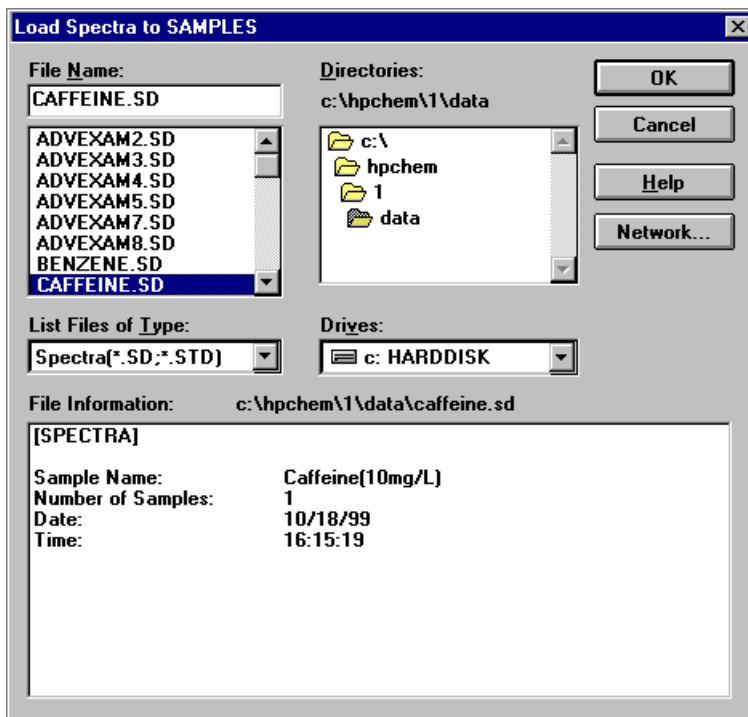
- Klicken Sie auf OK, um den Vorgang zu starten.

Abrufen von Spektren

- 1 Wählen Sie im Menü “File” die Option “Load” und dann “Samples...” aus.



- 2 Im Dialogfenster “Load Spectra to SAMPLES” wählen Sie im Auswahlfeld “File name” die Datendatei aus.



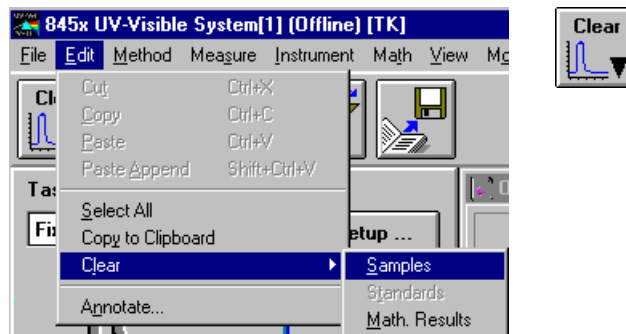
HINWEIS

Während Sie den Auswahlbalken im Auswahlfeld “File name” zwischen den Dateinamen bewegen, können Sie den Inhalt im Feld “File Information” betrachten. Der Inhalt dieses Feldes wird entsprechend der ausgewählten Datei aktualisiert.

- 3 Klicken Sie auf OK, um den Vorgang zu starten. Die in der Datendatei vorhandenen Spektren werden den Dateien, die sich derzeit im Probenbehälter der Agilent ChemStation befinden, hinzugefügt.

Löschen der aktuellen Spektren

- 1 Wählen Sie im Menü "Edit" die Option "Clear" und dann "Samples" aus, oder klicken Sie in der Symbolleiste auf das entsprechende Symbol.



HINWEIS

Clear, Standards und Clear, Math. Results können die aktuellen Standards bzw. die aktuellen berechneten Ergebnisspektren im Agilent ChemStation Speicher überschreiben.

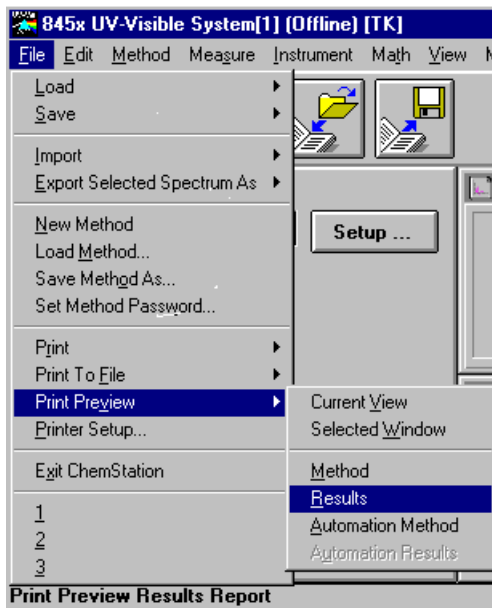
Reportvorschau drucken

Mit Hilfe der Druckvorschau können Sie den Bericht, basierend auf dem derzeit konfigurierten Drucker, in einem separaten Fenster der Agilent ChemStation betrachten. Alle verfügbaren Berichtarten können im Fenster mit der Vorschau seitenweise betrachtet werden. Die Anzahl der generierten Seiten und das Layout können ebenfalls überprüft werden. Außerdem kann der derzeit angezeigte Bericht gedruckt werden.

Druckvorschau eines Ergebnisberichtes

Die Funktionen in der Druckvorschau sind bei allen Berichtarten gleich. Im nachfolgenden Beispiel ist die Voransicht eines Ergebnisberichtes dargestellt.

- 1 Wählen Sie im Menü "File" die Option "Print Preview" und dann "Results" aus.

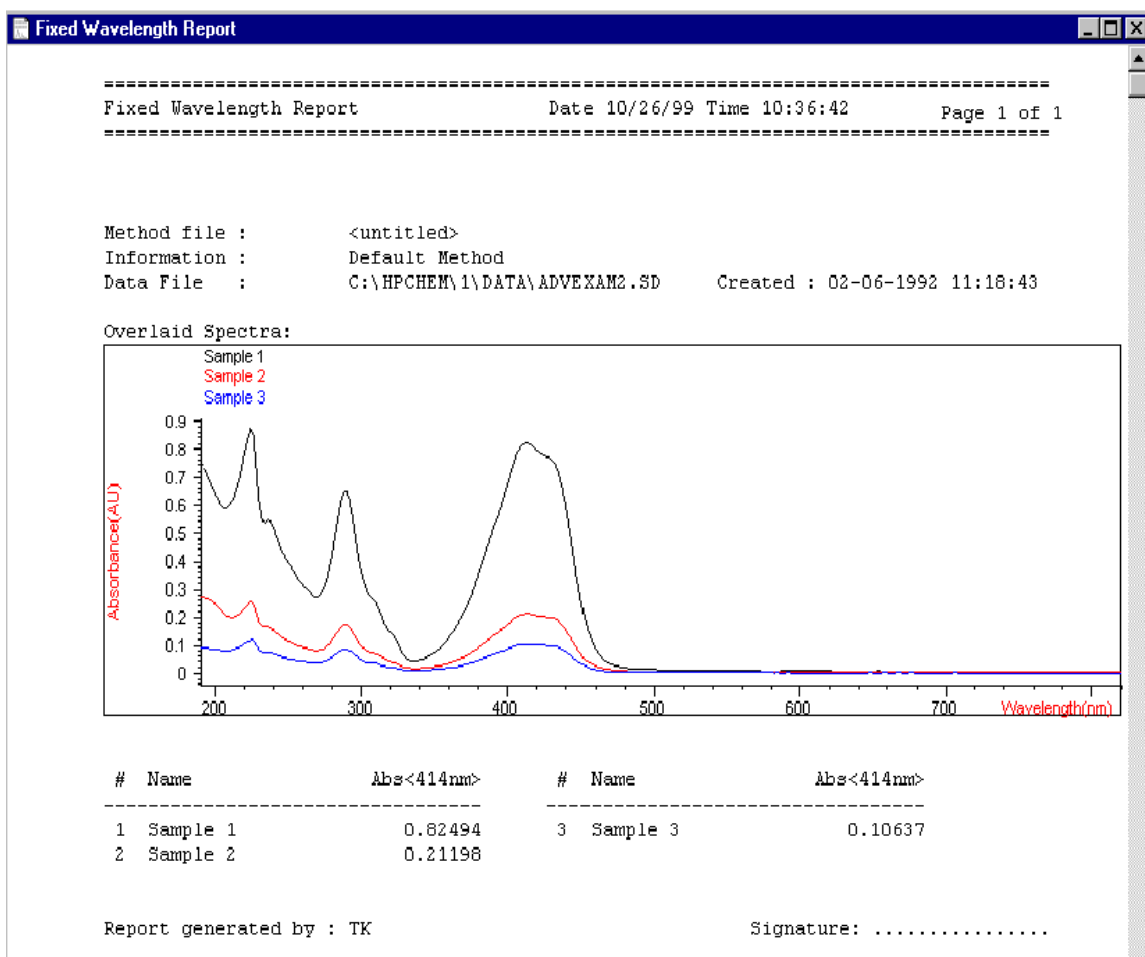


HINWEIS

Um einen Ergebnisbericht zu drucken, müssen alle Parameter korrekt eingestellt und die Daten für die Auswertung verfügbar sein. Wenn keine Daten vorliegen, erscheint ggf. in der Meldungszeile die Meldung *No results present!*.

No results present !

2 Im Fenster mit der Vorschau wird der generierte Bericht angezeigt.



4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Reportvorschau drucken

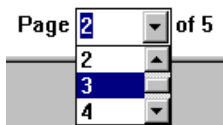
In diesem Fenster können Sie Ihren Bericht seitenweise betrachten. Wenn ein Bericht im Fenster für die Voransicht nicht komplett dargestellt werden kann, werden Bildlaufleisten angezeigt.

Außerdem können Sie eine andere Größe für die Voransicht verwenden. Im Auswahlfeld für die Größe sind drei Einstellungen möglich. Wählen Sie entsprechend Ihrer Bildschirmauflösung die Einstellung aus, die für Ihre Anforderungen am besten geeignet ist.

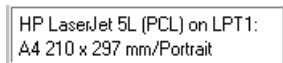


Im Fenster für die Druckvorschau sind folgende Funktionen vorhanden:

- Mit den Schaltflächen “Prev” und “Next” können Sie den Bericht seitenweise durchblättern.
- Mit einem Auswahlfeld können Sie direkt eine Seite auswählen.



- Wenn Sie auf die Schaltfläche “Print” klicken, wird der Bericht an den Drucker gesendet, der in der unteren linken Ecke des Fensters für die Druckvoransicht angegeben wird.



- Wenn Sie auf die Schaltfläche “Close” klicken, wird das Fenster für die Druckvorschau geschlossen und der angezeigte Bericht verworfen.

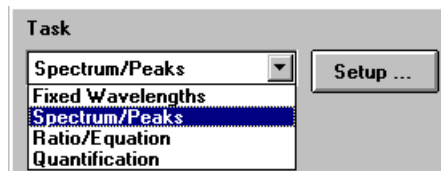
Ermitteln des Absorptionsmaximums von Koffein

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie Sie das Absorptionsmaximum Ihrer Koffein-IQ-Probe ermitteln können.

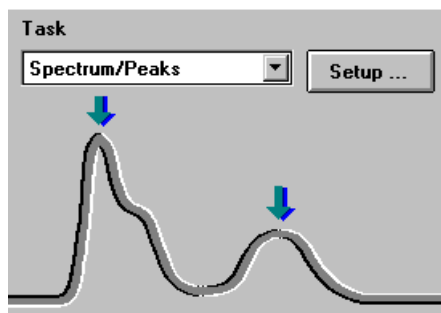
- 1 Prüfen Sie, ob Sie sich im Standard Modus befinden. Der Modus wird in der Symbolleiste Ihrer Agilent ChemStation Sitzung angezeigt.



- 2 Wählen Sie in dem Analysefenster im Auswahlfeld die Aufgabe "Spectrum/Peaks" aus.



- 3 Klicken Sie in dem Analysefenster auf die Schaltfläche "Setup", um das Dialogfenster mit den Parametern aufzurufen.



4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Ermitteln des Absorptionsmaximums von Koffein

- 4 Geben Sie "2" für die Anzahl der zu ermittelnden Maxima (Peaks) ein und deaktivieren Sie die Option zum Ermitteln der Minima (Valleys). Wählen Sie den Datentyp für die Absorption, und stellen Sie im Abschnitt "Display spectrum" Ihre spektrale Anzeige auf einen Wellenlängenbereich zwischen 190 nm und 400 nm ein. Klicken Sie auf OK, um Ihre Parameter einzustellen.

Spectrum/Peaks Parameters

Peak/Valley find

☒ Find and annotate up to peaks

☐ Find and annotate up to valleys

☐ Prompt for sample information

Data type

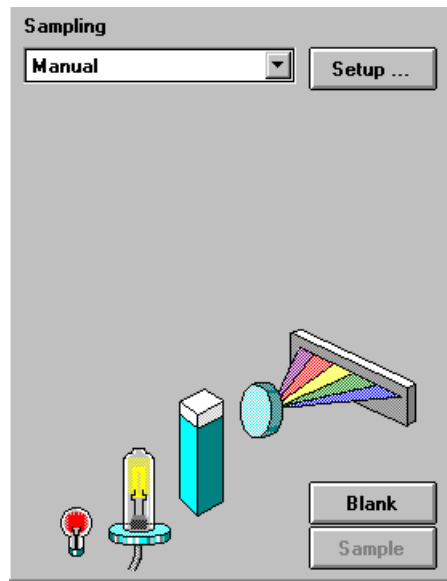
Absorbance

Display spectrum

From: nm To: nm

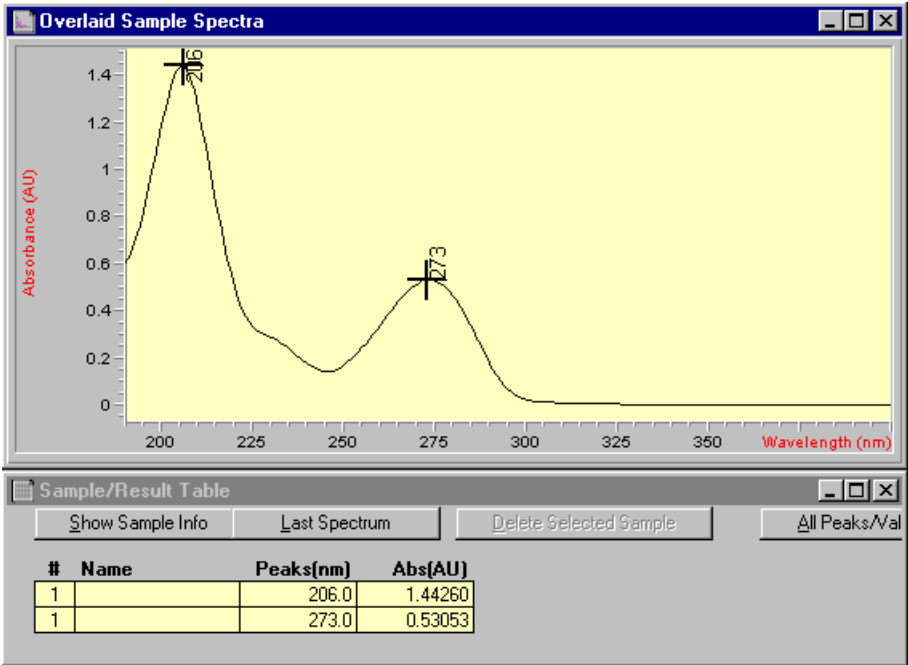
OK Cancel

- 5 Füllen Sie Ihre Quarzküvette mit 1 cm Schichtdicke mit destilliertem Wasser. Klappen Sie die Verriegelung auf der linken Seite des Küvettenhalters nach oben. Setzen Sie die Küvette im Küvettenhalter ein, und vergewissern Sie sich, dass die durchsichtigen Fenster in Richtung Vorder- und Rückseite des Spektrofotometers zeigen. Drücken Sie die Verriegelung nach unten, um so die Küvette im Küvettenhalter zu sichern.
- 6 Drücken Sie auf der Vorderseite des Spektrofotometers die Taste "Blank", oder klicken Sie in der Geräteanzeige auf "Blank", um die Messung zu starten.



- 7 Merken Sie sich die Ausrichtung der Küvette im Küvettenhalter. Klappen Sie die Verriegelung nach oben, um die Küvette freizugeben. Entfernen Sie die Küvette, und spülen Sie diese dreimal mit ca. 1 ml Ihrer Koffeinprobe. Füllen Sie dann die Küvette mit ca. 3 ml der Koffeinprobe. Vergewissern Sie sich, dass die Küvettenfenster sauber sind. Setzen Sie die Küvette wieder in der gleichen Ausrichtung wie bei der Referenzmessung im Küvettenhalter ein. Schließen Sie die Verriegelung am Küvettenhalter.
- 8 Drücken Sie auf der Vorderseite des Spektrofotometers die Taste "Sample", oder klicken Sie in der Geräteanzeige auf "Sample", um die Messung zu starten.
- 9 In der Ansicht erscheint das Spektrum Ihrer Koffeinprobe. Zwei Maxima wurden ermittelt und sind markiert. Daneben wird die Wellenlänge angegeben. Unter der Spektrenanzeige werden in der Tabelle "Sample/Result Table" die Wellenlänge der ermittelten Maxima und die gemessenen Absorptionswerte angegeben.

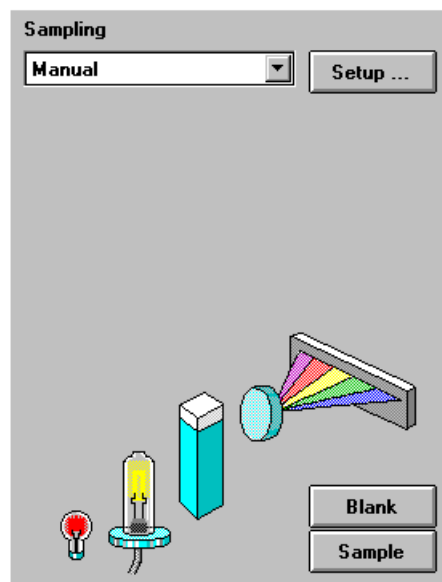
4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie
Ermitteln des Absorptionsmaximums von Koffein



Eingeben der Küvetten-Schichtdicke

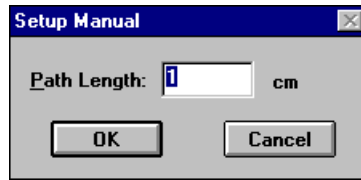
Die bei Ihren Messungen verwendeten Küvetten werden bei den Parametern des Probennahmesystems spezifiziert. Bei quantitativen Berechnungen werden diese Parameter bei der Ergebnisberechnung verwendet. Aufgrund der Wahlmöglichkeiten für die Küvette-Schichtdicke müssen Sie den korrekten Wert mit der Schichtdickeneinstellung festlegen. Normalerweise erhalten Sie diese Information vom Hersteller der Küvetten. Die Schichtdicke wird dann im manuellen Modus (Manual) wie folgt eingestellt.

- 1 Klicken Sie in der Geräteanzeige auf die Schaltfläche "Setup".



- 2 Geben Sie im Dialogfenster "Setup Manual" die Schichtdicke in cm ein.

4 **Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie** Eingeben der Küvetten-Schichtdicke



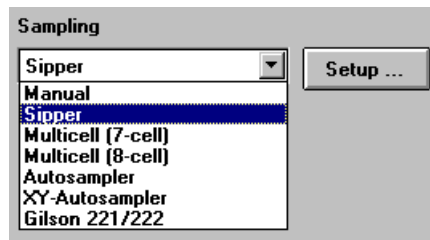
- 3 Klicken Sie auf OK, um die angegebene Schichtdicke zu bestätigen.

Steuern des Sippersystems

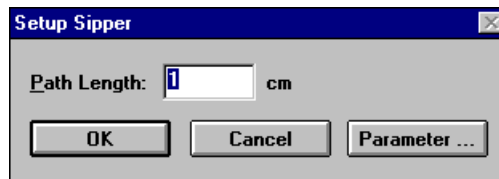
Ein Sippersystem leitet die Probe zur Messung mittels einer Schlauchpumpe in die Durchflusssküvette. Um das Durchflusssystem über die Agilent ChemStation Software zu steuern, müssen Sie Ihr derzeitiges Probennahmesystem auf Sipper einstellen.

Bei der Einstellung der Sipper-Parameter werden folgende Punkte berücksichtigt: Länge des Schlauches, Totvolumen der Durchflusssküvette und Flussrate der Pumpe. Details hierzu finden Sie im Handbuch *Installation des Sippersystems*.

- 1 Wählen Sie in der Geräteanzeige im Auswahlfeld die Option “Sipper” aus.



- 2 Klicken Sie in der Geräteanzeige auf die Schaltfläche “Setup”. Geben Sie die Schichtdicke der Durchflusssküvette in cm ein, und klicken Sie auf OK.



- 3 Klicken Sie nochmals auf die Schaltfläche “Setup”. Klicken Sie jetzt auf die Schaltfläche “Parameter”, um das Dialogfenster “Sipper Parameter” aufzurufen. Die erforderlichen Parameter können mit der Aufgabe “Flow Test” im Modus “Verification and Diagnostics” (Überprüfung und Diagnose) ermittelt werden.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie Steuern des Sippersystems

Pump	20	s	Pump Direction:	CW	
Wait Time:	3	s	Sample Return:	0	%
Wash Time:	0	s	Air Segment:	0	s

OK Cancel

- 4 Klicken Sie im Dialogfenster "Sipper Parameter" auf OK. Klicken Sie im Dialogfenster "Sipper" auf OK, um die Parameter zu bestätigen.

HINWEIS

Bei jeder Messung, die Sie durch Klicken auf eine der Messschaltflächen in der Geräteanzeige oder durch Drücken einer Taste am Spektrofotometer starten, wird das Sipper-System für die Probeneinführung verwendet. Dieses Verfahren wird auch bei einer automatisierten Messfolge angewendet.

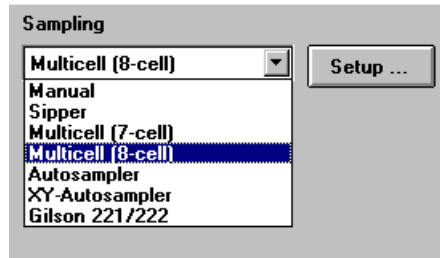
Verwenden des Mehrfachküvettenwechslers

Beim Mehrfachküvettenwechsler handelt es sich um einen Küvettenwechsler, mit dessen Hilfe bis zu 8 Küvetten automatisch in Messpositionen positioniert werden können. Sie können in den Messpositionen unterschiedliche Küvetten verwenden. Die Schichtdicke kann individuell für jede Küvettenposition festgelegt werden.

HINWEIS

Details zum Mehrfachküvettenwechsler finden Sie im Handbuch *Installation und Gebrauch des Mehrfachküvettenwechslers*.

- 1 Wählen Sie in der Geräteanzeige im Auswahlfeld die Option “Multicell (8-cell)” aus.



- 2 Klicken Sie in der Geräteanzeige auf die Schaltfläche “Setup”. Geben Sie die Schichtdicken aller Küvetten in cm ein, und klicken Sie auf OK.

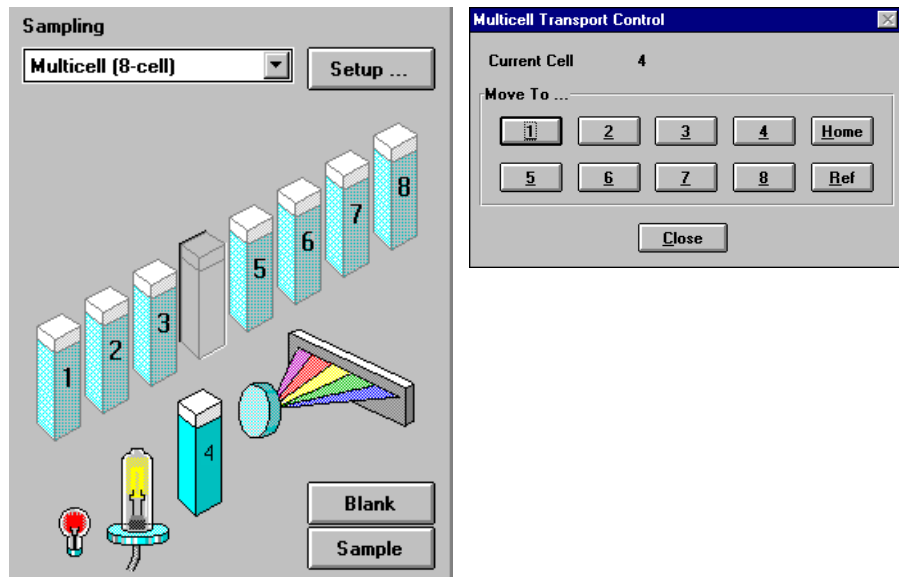
4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Verwenden des Mehrfachküvettenwechslers

Cell	Path Length	
1	1	cm
2	1	cm
3	1	cm
4	1	cm
5	1	cm
6	1	cm
7	1	cm
8	1	cm

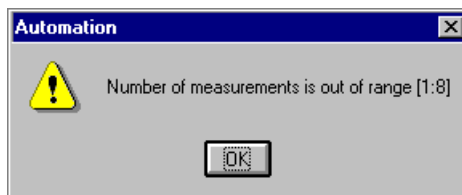
OK Cancel

- 3 Um die Küvette für die nächste Messung in die Messposition zu bringen, klicken Sie in der Geräteanzeige auf die Küvette, oder wählen Sie im Menü "Spectrophotometer" die Option "Multicell Transport Position" aus, um das Dialogfenster "Multicell Transport Control" aufzurufen. Klicken Sie im Dialogfenster "Multicell Transport Control" auf eine der Positionsschaltflächen, um den Mehrfachtransport zu verschieben.



HINWEIS

Bei einem automatisierten Ablauf kann der Mehrfachtransport für eine automatische Probeneinführung verwendet werden. Es können maximal 8 Proben eingeführt werden. Wenn Sie mehr als 8 Messungen spezifizieren, erscheint die folgende Warnmeldung:



Sie können auch einen vorhandenen Mehrfachwechsler mit 7 Positionen steuern. Die wichtigsten Unterschiede sind, dass keine separate Referenzposition und eine Küvettenposition weniger vorhanden ist.

Quantitative Analyse unter Verwendung einer Kalibrierung mit Standards

Ihre quantitative Analyseaufgabe basiert auf einer Kalibrierung mit Standards. Nach einer erfolgreichen Kalibrierung können die gemessenen Standards als Bestandteil Ihrer Methode aufgenommen werden. Eine solche Methode kann direkt für quantitative Analysen von Proben verwendet werden.

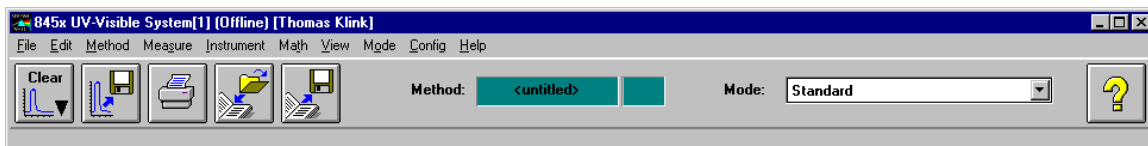
Nachdem Sie Ihre Methode eingerichtet haben, können Sie kalibrierte Proben analysieren. Mehrere Ansichten von Ihren Standards und der Kalibrierung sowie von Ihren Proben und Ergebnissen stehen zur Verfügung.

Als kurze Einführung wird eine Kalibrierung nach dem Beerschen Gesetz der Lichtabsorption in Flüssigkeiten mit einem einzelnen Standard und der Analyse einer Probe beschrieben. Die Anzahl der Proben und Standards wird ausschließlich durch die Speicherkapazität Ihrer Agilent ChemStation begrenzt.

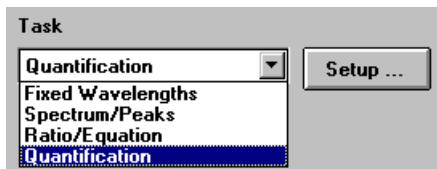
Bei dem Experiment wird die IQ-Koffeinprobe als Standard und eine mit destilliertem Wasser im Verhältnis 1:1 verdünnte Lösung als Probe verwendet. Bei der Kalibrierung werden die Absorptionsdaten bei 273 nm verwendet.

Einrichtung

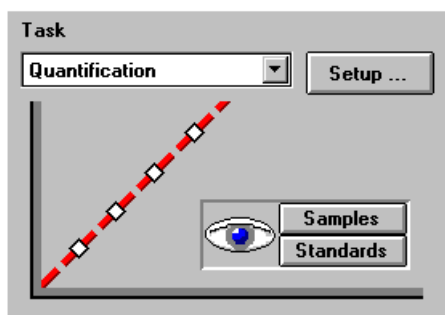
- 1 Prüfen Sie, ob Sie sich im Standard Modus befinden. Der Modus wird in der Symbolleiste Ihrer Agilent ChemStation Sitzung angezeigt.



- 2 Wählen Sie in der Analysenanzeige im Auswahlfeld die Option "Quantification" aus.



- 3 Es erscheint eine neue “Task”-Anzeige, und das Dialogfenster “Quantification Parameters” wird automatisch aufgerufen.



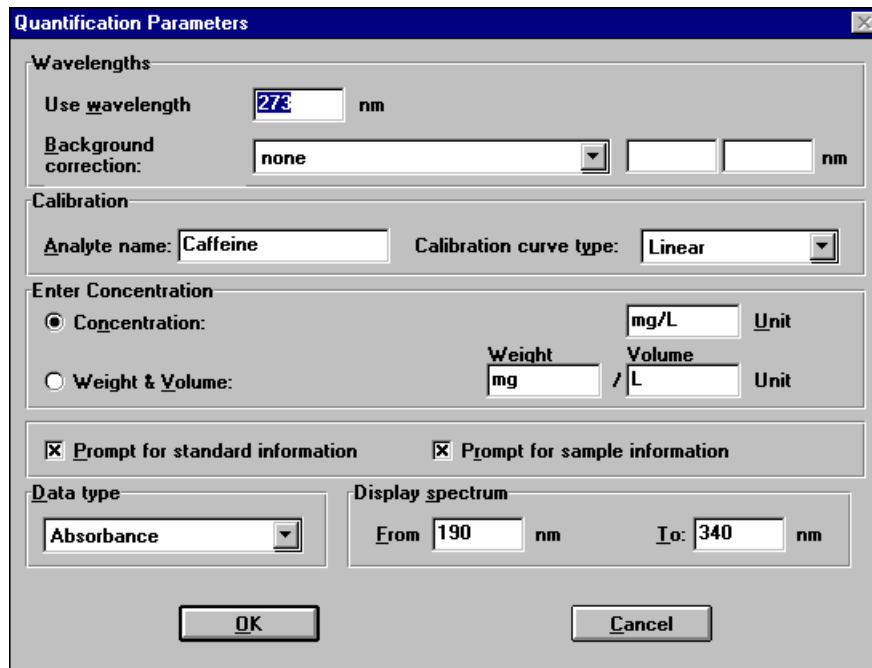
HINWEIS

Wenn Sie sich bereits in der Aufgabe “Quantification” befinden, klicken Sie in der Analysenanzeige auf die Schaltfläche “Setup”, um das Dialogfenster mit den Parametern aufzurufen.

- 4 Richten Sie Ihre Analysewellenlänge mit 273 nm ein (unter “Wavelength”), geben Sie “Koffein” (Caffeine) unter “Analyte name” ein, stellen Sie “Calibration curve type” auf “Linear” ein, markieren Sie die Option “Concentration”, und wählen Sie unter “Unit” die Option “mg/L”. Markieren Sie die Optionen “Prompt for standard information” (Nach Angaben zum Standard fragen) und “Prompt for sample information” (Nach Angaben zur Probe fragen). Stellen Sie Datentyp auf “Absorbance” ein, und geben Sie unter “Display spectrum” die Werte “From 190 nm” und “To 340 nm” ein.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Quantitative Analyse unter Verwendung einer Kalibrierung mit Standards



The image shows a 'Quantification Parameters' dialog box with the following sections and controls:

- Wavelengths:**
 - 'Use wavelength' is set to 273 nm.
 - 'Background correction' is set to 'none'.
- Calibration:**
 - 'Analyte name' is 'Caffeine'.
 - 'Calibration curve type' is 'Linear'.
- Enter Concentration:**
 - 'Concentration' is selected with a radio button, with 'mg/L' and 'Unit' fields.
 - 'Weight & Volume' is unselected, with 'mg' and 'L' fields.
- Prompt options:**
 - 'Prompt for standard information' is checked.
 - 'Prompt for sample information' is checked.
- Data type:**
 - 'Absorbance' is selected in the dropdown.
- Display spectrum:**
 - 'From' is 190 nm and 'To' is 340 nm.
- Buttons:** 'OK' and 'Cancel' are at the bottom.

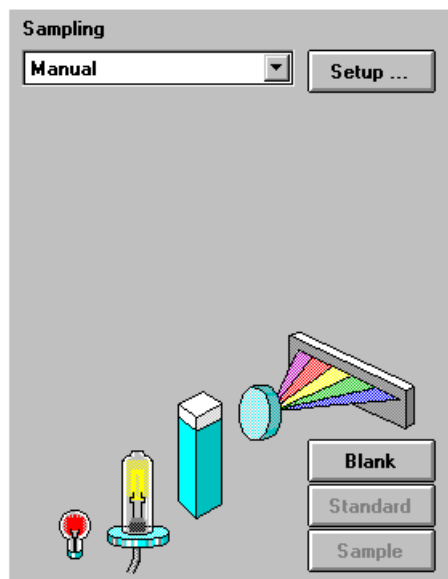
5 Klicken Sie auf OK, um Ihre Parameter einzustellen.

HINWEIS

Sie können jetzt Ihre Messungen durchführen.

Kalibrierung

- 1 Füllen Sie Ihre Quarzküvette mit 1 cm Schichtdicke mit destilliertem Wasser. Klappen Sie die Verriegelung auf der linken Seite des Küvettenhalters nach oben. Setzen Sie die Küvette im Küvettenhalter ein, und vergewissern Sie sich, dass die durchsichtigen Fenster in Richtung Vorder- und Rückseite des Spektrofotometers zeigen. Drücken Sie die Verriegelung nach unten, um so die Küvette im Küvettenhalter zu sichern.
- 2 Drücken Sie auf der Vorderseite des Spektrofotometers die Taste "Blank", oder klicken Sie in der Geräteanzeige auf "Blank", um die Messung zu starten.

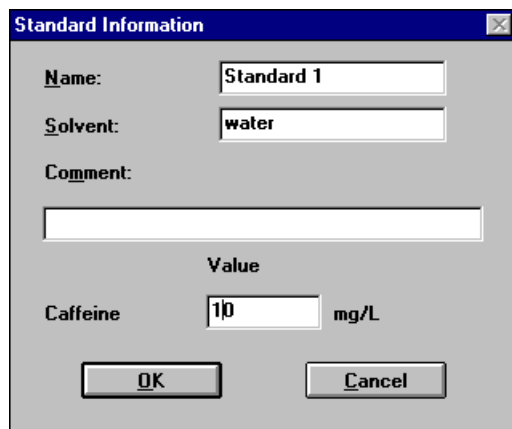


- 3 Merken Sie sich die Ausrichtung der Küvette im Küvettenhalter. Klappen Sie die Verriegelung nach oben, um die Küvette freizugeben. Entfernen Sie die Küvette, und spülen Sie diese dreimal mit ca. 1 ml Ihrer Koffeinprobe. Füllen Sie dann die Küvette mit ca. 3 ml der Koffeinprobe. Vergewissern Sie sich, dass die Küvettenfenster sauber sind. Setzen Sie die Küvette wieder in der gleichen Ausrichtung wie bei der Referenzmessung im Küvettenhalter ein. Schließen Sie die Verriegelung am Küvettenhalter.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Quantitative Analyse unter Verwendung einer Kalibrierung mit Standards

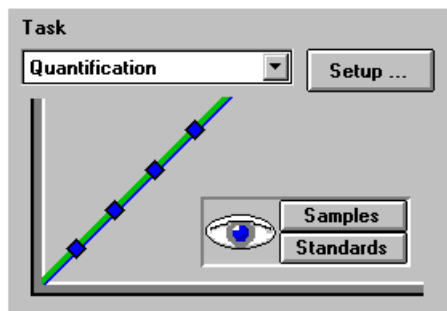
- 4 Drücken Sie auf der Vorderseite des Spektrofotometers die Taste "Standard", oder klicken Sie in der Geräteanzeige auf "Standard", um die Messung zu starten.



The image shows a software dialog box titled "Standard Information". It contains the following fields and controls:

- Name:** A text box containing "Standard 1".
- Solvent:** A text box containing "water".
- Comment:** An empty text box.
- Value:** A section header for the concentration field.
- Caffeine:** A label for the concentration field.
- 10 mg/L:** A text box containing "10" followed by the unit "mg/L".
- OK:** A button to confirm the information.
- Cancel:** A button to cancel the operation.

- 5 Geben Sie im Dialogfenster "Standard Information" die Informationen zu Ihrem Standard ein, und klicken Sie auf OK.
- 6 Ihre Agilent ChemStation Software führt die Kalibrierung automatisch durch und zeigt die Kalibrierungsergebnisse an. Nach einer erfolgreichen Kalibrierung wird die Kalibrierungskurve in der "Task"-Anzeige grün dargestellt. Hierdurch werden Sie darüber informiert, dass Ihre Methode für die Analyse vorbereitet ist.



HINWEIS

Mit den Schaltflächen "Samples" und "Standards" in der "Task"-Anzeige kann zwischen der Proben- und Standardanzeige gewechselt werden.

An dieser Stelle können Sie auch Ihre Methode speichern, um sie zukünftig wieder verwenden zu können. Weitere Informationen hierzu finden Sie im Abschnitt ["Speichern der Parameter in einer Methode"](#) auf Seite 62.

Analyse

- 1 Merken Sie sich die Ausrichtung der Küvette im Küvettenhalter. Klappen Sie die Verriegelung nach oben, um die Küvette freizugeben. Entfernen Sie die Küvette, und spülen Sie diese dreimal mit ca. 1 ml Ihrer Koffeinprobe (mit destilliertem Wasser im Verhältnis 1:1 verdünnte Lösung). Füllen Sie dann die Küvette mit ca. 3 ml der Koffeinprobe. Vergewissern Sie sich, dass die Küvettenfenster sauber sind. Setzen Sie die Küvette wieder in der gleichen Ausrichtung wie bei der Standardmessung im Küvettenhalter ein. Schließen Sie die Verriegelung am Küvettenhalter.
- 2 Drücken Sie auf der Vorderseite des Spektrofotometers die Taste "Sample", oder klicken Sie in der Geräteanzeige auf "Sample", um die Messung zu starten.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Quantitative Analyse unter Verwendung einer Kalibrierung mit Standards

Sample Information

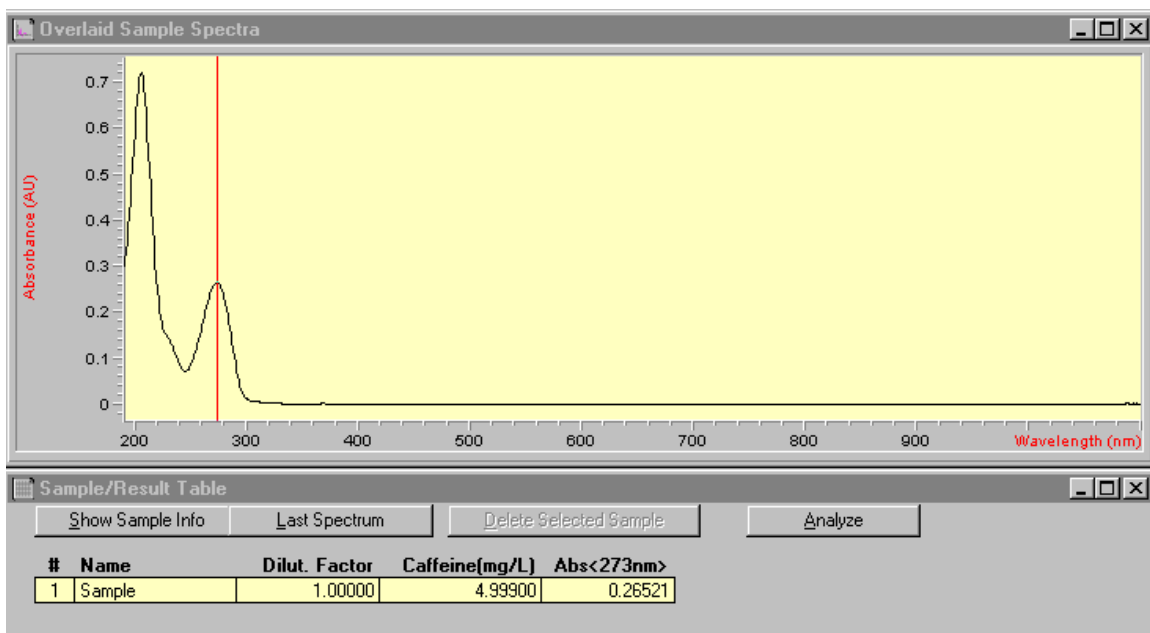
Name:

Solvent:

Dilution Factor:

Comment:

- 3 Geben Sie im Dialogfenster "Sample Information" die Informationen zu Ihrer Probe ein, und klicken Sie auf OK. In der Ansicht erscheinen die Proben, und Ihre quantitativen Ergebnisse werden in der Tabelle "Sample/Result Table" angezeigt.



HINWEIS

Weitere Informationen zum Speichern Ihrer Daten zur zukünftigen Verwendung oder für Dokumentationszwecke finden Sie im Abschnitt "[Speichern und Abrufen von Daten](#)" auf Seite 68.

Wie man sicherstellt, dass das Agilent 8453 korrekt funktioniert

Die Qualität Ihrer Messdaten ist von der Leistung Ihres Spektrofotometers abhängig. Für eine umfassende Leistungskontrolle werden externe Standards benötigt. Diese Prozeduren werden im Handbuch *Funktionsqualifizierung / Leistungskontrolle beim Agilent 8453 UV-Vis Spektroskopiesystem* erläutert.

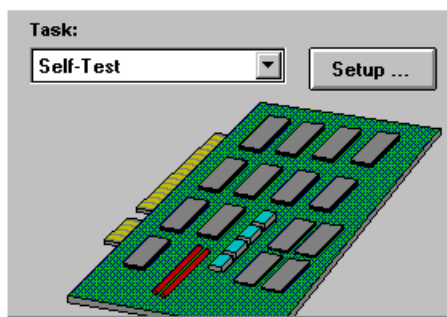
Eine schnelle Kontrolle ohne Standards kann mit dem Selbsttest im Modus "Verification and Diagnostics" vorgenommen werden. Dieser Test kann immer nach dem Starten des Spektrofotometers durchgeführt werden.

Agilent 8453 Selbsttest

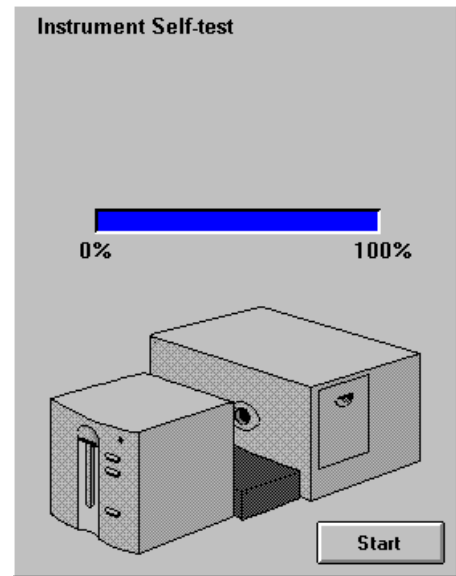
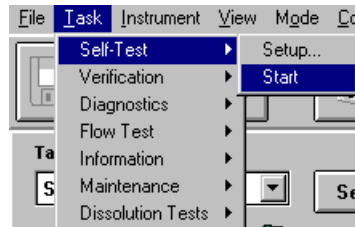
- 1 Vergewissern Sie sich, dass Sie sich im Modus "Verification and Diagnostics" befinden. Der Modus wird in der Symbolleiste Ihrer Agilent ChemStation Sitzung angezeigt.



- 2 Wählen Sie in der Analysenanzeige im Auswahlfeld die Aufgabe "Self-Test" aus.

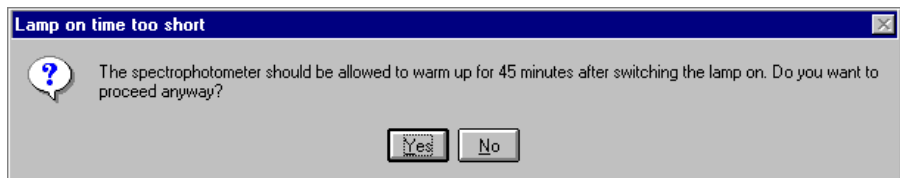


- 3 Wählen Sie im Menü “Task” die Option “Self-Test” und dann “Start” aus, oder klicken Sie auf die Schaltfläche “Start”, um den Selbsttest zu starten.



HINWEIS

Vor Beginn des Tests muss sich das Spektrofotometer in einem stabilen Betriebszustand befinden. Wenn dieser Zustand nicht erreicht ist, erscheint ggf. eine Warnmeldung.



- 4 Die Ergebnisse des Selbsttests werden mit den Kriterien “Passed” (bestanden) oder “Failed” (nicht bestanden) angegeben.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Wie man sicherstellt, dass das Agilent 8453 korrekt funktioniert

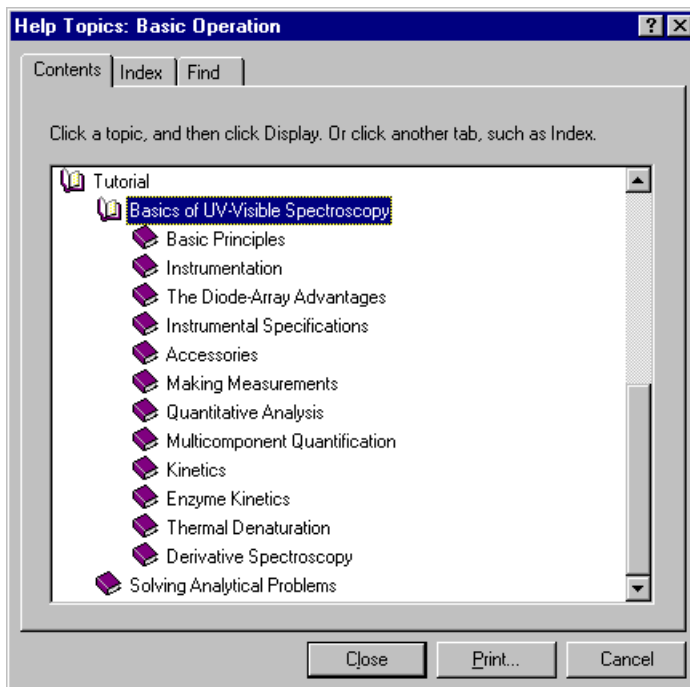
8453 Instrument Self Test Results			
		Save to Instrument	More INFO
	Specification	Measured	Result
Filter and shutter test	< 500 msec	200 msec	Passed
Dark current test	0..12000 cts	3042..3161 cts	Passed
Min. intensity (190nm - 220nm)	> 2000 cts	51301 cts	Passed
Min. intensity (220nm - 350nm)	> 5000 cts	47328 cts	Passed
Min. intensity (350nm - 500nm)	> 2000 cts	21867 cts	Passed
Min. intensity (500nm - 950nm)	> 4000 cts	31884 cts	Passed
Min. intensity (950nm - 1100nm)	> 200 cts	745 cts	Passed
Wavelength at 486.0nm	485.5..486.5 nm	486.323 nm	Passed
Wavelength at 656.1nm	655.6..656.6 nm	656.456 nm	Passed
RMS Noise	< 0.0002	0.000038	Passed
RMS Baseline flatness	< 0.001	0.000156	Passed

HINWEIS

Die Ergebnisse des Selbsttests können mit dem Spektrofotometer gespeichert werden. Hierdurch können Sie die Leistung über einen längeren Zeitraum überwachen. Die im Laufe der Zeit ermittelten Ergebnisse des Selbsttests können grafisch dargestellt werden.

Wie man weitergehende Informationen zur UV-Vis Spektroskopie erhält

Die Grundlagen der UV-Vis-Spektroskopie werden im Hilfesystem erläutert. Die unter dem Thema „Tutorial's Basics of UV-Visible Spectroscopy“ enthaltenen Informationen umfassen die grundlegende Prinzipien bis zu Details zu Ableitungen in der Spektroskopie.

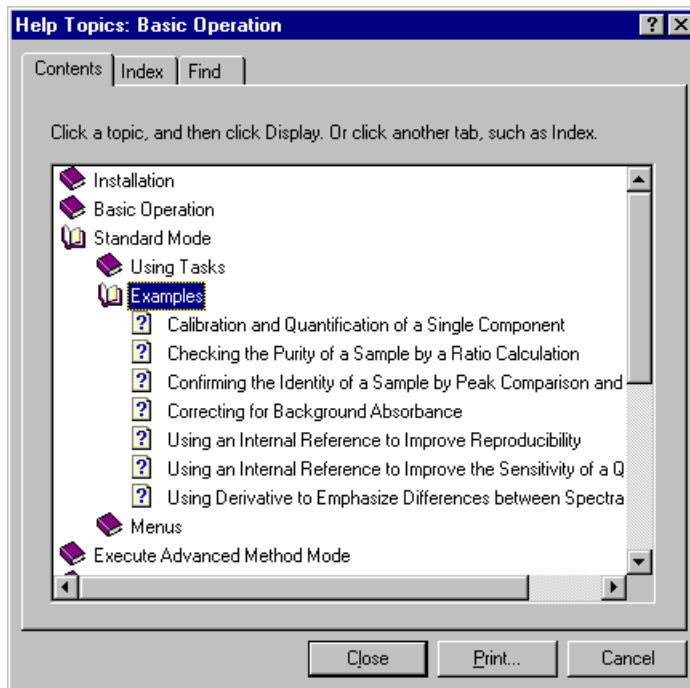


Außerdem werden Lösungen zu ausgewählten Bereichen in der UV-Vis-Analyse beschrieben. Hier finden Sie Hilfe zu Themen wie verbesserte Empfindlichkeit oder Reinheitskontrolle.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Wie man weitergehende Informationen zur UV-Vis Spektroskopie erhält

Weitere spezifische Beispiele, einschließlich Daten, finden Sie im Hilfesystem unter dem Thema "Standard Mode" im Abschnitt "Examples". Mit Hilfe dieser Beispiele kann die Agilent ChemStation Software für die beschriebenen speziellen Zwecke eingesetzt werden.



Wann ist eine Leerprobe zu messen?

Die von Ihrem Spektrofotometer erfassten Messdaten sind geräteunabhängig. Um diese Unabhängigkeit zu erreichen, ist eine Referenzmessung durchzuführen. Alle danach folgenden Messungen beziehen sich auf die zuletzt gemessene Referenz.

In der Agilent ChemStation Software wird die Referenzmessung mit einer Grundlinienmessung kombiniert. Die angezeigte Grundlinie informiert über die Qualität der aktuellen Referenz. Im Modus Absorption sollten die Daten nahe 0 AU liegen. Im Modus Transmission sollten die Daten nahe 100% liegen.

Typischerweise wird bei Referenzmessungen die Küvette mit dem verwendeten Lösungsmittel gefüllt. In diesem Fall werden die Referenzdaten durch die Absorptionseigenschaften der Küvette und der Lösung beeinflusst. In den Wellenlängenbereichen, in welchen Ihre Lösung oder Küvette Licht absorbiert, ist das Rauschen des Grundlinienspektrums besonders hoch. In solchen Bereichen sind keine zuverlässigen Probandaten zu erwarten.

Somit sind in folgenden Fällen neue Referenz- oder Leerproben zu messen:

- Wenn Sie Ihre Küvette austauschen oder deren Ausrichtung im Verhältnis zur Messposition ändern
- Wenn Sie ein anderes Lösungsmittel oder eine andere Charge des gleichen Lösungsmittels verwenden.
- Wenn der Zeitraum, der zwischen der Referenzmessung und der Probenmessung liegt, zu lang ist.
- Wenn die zeitlichen Bedingungen vom Alter der Lampen und von möglichen Veränderungen der Umgebungsbedingungen abhängig sind. Normalerweise sollte die letzte Blindmessung nicht mehr als eine halbe Stunde zurückliegen.

4 Betrieb des Agilent 8453 Systems für die UV-Vis-Spektroskopie

Wann ist eine Leerprobe zu messen?

Index

A

Ableitung, 26
Ableitungsspektroskopie, 99
Absorption, 26
 hohe, 57
Absorptionsmaximum, 77
Agilent 8453 allgemein verwendbares
 System für UV-Vis-Spektroskopie, 56
Agilent ChemStation
 Analysefenster, 59
 anmelden, 58
 Druckvorschau, 74, 76
 Familie, 23
 Grafikfenster, 70
 Kennwort, 58
 Messungen, 56
 Methode, 62
 Modus, 24
 Offline-Sitzung, 58
 Online-Sitzung, 57, 58
 Proben, 73
 Sitzung, 23
 Vorschaugrößen, 76
 Workstation, 33
Aktiver Bereich, 22
Aktuelle Aufgabenstellung, 20, 22
Analyse, 93
Analyseaufgabe, 25
Analysekonfiguration
 Anzeige, 89
 Datentyp, 89
 Frage nach Probeninformationen, 89
 Kalibrierung, 89
 Konzentrationseinheit, 89
 Wellenlänge, 89
Analysenanzeige, 20
Analysieren, 62

Analyt, 40
Anmeldung, 38
Anschluss
 CAN, 17
 externe Steuerung, 16
 GPIB, 17
 GPIO, 16
 Mehrfachküvettenhalter, 16
 RS232, 16
Anschluss für externe Steuerung, 16
Ansicht, 22, 26
 Ergebnisse, 88, 94
 Kalibrierung, 88
 Proben, 61, 79
 Standards, 88
Anwendung
 spezifische, 23
Anzeige, 14
Aperturen, 49
Aufgabe
 Feste Wellenlänge, 26
 feste Wellenlänge, 25, 59
 Orientierung, 26
 Quantifizierung, 25, 28, 88
 Quantitative Analyse, 88
 Spektrum/Maxima, 27
 Spektrum/Peaks, 25
 Verhältnis/Gleichung, 25, 27, 31
Ausgewertete Spektren, 30
Ausleseintervall, 12
Ausreißer, 34
Auswertung, 29
 spektrale, 30
 Standards, 32
Azeton, 47
Azetonitril, 47

B

Bedienerebene, 24
Beersches Gesetz, 88
Befehl, 20
Beispiele, 100
Benutzerdefinierte Gleichung, 27
Benutzername, 30
Benutzeroberfläche
 Bestandteile, 19
Benzol, 47
Berechnung, 33
 Ergebnisse, 81
Beschreibung
 des Gerätes, 13
Betriebssystem, 38
Blasenbildung, 48
Blindmessung, 40, 50
Bootp Server, 56
Breite des Spaltes, 12

C

CAG Bootp Server, 37, 38
CAN Anschluss, 17
Chloroform, 47
Cutoff-Filter, 49
Cutoff-Wellenlänge, 49
Cyklohexan, 47
Cyklopentan, 47

D

Daten, 29
abrufen, 68, 72
Absorption, 88
archivieren, 68
Austausch im Netz, 68
Auswertung, 31
Dateiauswahlfeld, 72
Dateienerweiterung, 69
Dateiinformationen, 72
Dateiname, 69
entfernen, 73
ersetzen, 69
Format, 68
laden, 68
lokale Speicherung, 68
löschen, 73
Löschen von mathematischen
Ergebnissen, 73
Proben speichern unter, 68
speichern, 68
Speichern von ausgewählten Daten, 70
Standard überschreiben, 73
Zugang, 30
Zugriff, 31
Deuteriumlampe, 10
Dialogfenster
Methodenoptionen &
-informationen, 63
Parameter bei fester Wellenlänge, 60
Dimethylformamid, 47
Dimethylsulfoxid, 47
Diodenarray, 13, 33
Dreipunkt-Basisliniensenkrechte, 27, 30
Drucker, 37, 38
konfigurierter, 74
Drucktaste, 15
Probe, 15
Standard, 15
Stop, 15
Drucktaste "Blank", 15
Drucktaste „Standard“, 15
Drucktaste „Stop“, 15
Drucktaste für Messungen, 15

Drucktaster
Leerprobenmessung, 15
Durchflussskivette, 44, 53
Durchflusstest, 83
Durchführung von Messungen, 40

E

Eignung eines Lösungsmittels, 46
Einschluss von Luftblasen, 44
Einstellungen, 62
Einstrahlgerät, 40
Empfindlichkeit, 42
Empfohlene Kivetten, 43
Entgast, 48
Entwicklung einer Analysemmethode, 24
Erfassung
Datum, 30
Uhrzeit, 30
Ergebnis, 33
Ergebnisse, 31
genaue, 57
Essigsäure, 47
Ethylacetat, 47
Ethylether, 47
Extinktionskoeffizient, 34

F

Fenster, 22
grafische Darstellung, 22
Proben-/Ergebnistabelle, 30
tabellarisch, 23
Feste Wellenlänge, 25, 59
feste Wellenlänge, 26
Filter für Streulichtkorrektur, 10, 11
Flüchtige Lösungsmittel, 48
Flüssige Proben, 40
Fotoabbau, 49
Fotochemische Reaktionen, 49
Fotodiodenarray, 13
Fremdlicht, 13, 40
Funktion, 20
Funktionen ausführen, 21

Funktionsebene, 23, 24

G

Gebündelter Lichtstrahl, 10
Genauere Ergebnisse, 40
Gerät
Aufbau, 10
Aufwärmphase, 57
Beschreibung, 13
elektronische Baugruppen, 10
Konstruktion, 10
mechanische Baugruppen, 10
Geräteanzeige, 21
Gerätesitzung, 24
Geringe Linearität, 42
Geringe photometrische Genauigkeit, 42
Gewicht, 28
Gitter, 10, 13
Glaskivetten, 41
Gleichung, 25, 31
Glycerin, 47
GPIO
Anschluss, 17
GPIO-Anschluss, 16

H

Hauptanwendungsfenster, 23
Herkömmliche Lösungsmittel, 46
Höchstmögliche Präzisionsmessung, 44
Holografisches Gitter, 10, 13
Homogenität, 50

I

Identität, 28
In Betrieb, 38
Installation, 36
Installationsqualifikation, 59
Interne Referenz, 27, 30
IP-Adresse, 37, 38, 56
Isopropanol, 47

J

JetDirect, 36

K

Kalibrierung, 28, 32, 88, 91
 Koeffizienten, 32
 Kurve, 28
 Keilförmige Zellen, 41
 Koffein, 59
 Kolloidale Dispersionen, 48
 Konvektion in der Lösung, 48
 Konzentration, 33
 Konzentrationsbereich, 28
 Korrektur
 für Streulicht, 10
 von Streulicht, 11
 Küvette
 Schichtdicke, 81, 83, 85
 Küvettenwechsler, 85

L

Lampen, 11
 Deuterium, 10
 Wolfram, 10
 Zugang über Tür, 17
 LAN, 36
 LC-reines Wasser, 48
 Leerprobenmessung, 40
 Leistungskontrolle, 96
 Lernprogramm
 Ableitungsspektroskopie, 99
 Grundlagen, 99
 Grundlagen der
 UV-Vis-Spektroskopie, 99
 Lichtempfindliche Substanzen, 49
 Lichtstrahl, 41, 44
 Linse, 10
 Linsenreinigungstücher, 44
 Lösung, 50
 Lösungen, 99
 Reinheitskontrolle, 99
 Lösungsmittel, 40, 46, 56

Lösungsrauschen, 48

M

Mauszeiger, 22
 Maxima suchen, 78
 Maximum, 25
 Mehrfachküvettenhalter
 Anschluss, 16
 Mehrfachküvettenwechsler, 85
 7 Küvetten, 87
 8 Küvetten, 85
 Meldungszeile, 38
 Menü, 20
 Messung
 Leerprobe, 56
 Probe, 57, 93
 Probeninformationen, 94
 Rauschen, 57
 Referenz, 56
 Standard, 92
 Standardinformationen, 92
 Metall
 Tür, 17
 Methanol, 47
 Methode, 25, 29, 32, 34, 62
 aktuelle, 66
 aufrufen, 64
 drucken, 64, 66
 Druckvorschau, 67
 geändert, 64
 Informationen, 65
 kalibriert, 34, 88
 laden, 64
 Methode laden, 64
 Name, 63
 Optionen & Informationen, 63
 Parameter, 29, 62
 Report, 64
 speichern, 62
 speichern unter, 62
 zuletzt verwendete, 58
 Methylformiat, 47
 Minima suchen, 78
 Minimum, 25

MIO-Karte

 Steckplatz, 17

Modus, 23

 Erweiterte Methode ausführen, 24
 erweiterter, 25
 Farbberechnung, 25
 Freisetzungstest, 25
 Kinetik, 25
 Kombinierter Report, 25
 Mehrstufiger Freisetzungstest, 25
 Standard, 24, 59, 77, 88
 thermischer Abbau, 25
 Verifizierung und Diagnose, 24, 96
 Wechseln, 25
 zuletzt verwendeter, 58

m-Xylol, 47

N

n-Butanol, 47

Netzwerk

 Administrator, 37
 lokales, 56
 Verbindung, 38

Neuberechnung, 24

n-Hexan, 47

Nominelle spektrale Spaltbreite, 12

Nutzbarer Wellenlängenbereich von
 Lösungsmitteln, 46

O

Offener Probenbereich, 40

Offline, 24

Online, 24

Optimierung, 34

Optische Oberflächen, 44

Optische Spezifikationen von Küvetten, 41

Optisches Filter, 49

Optisches System, 10

P

Papier
 Ausrichtung, 37
 Format, 37
Parallelität, 41
Parameter-Dialog, 77
Parametersatz, 25
Passivieren von neuen Küvetten, 44
PC, 38
Pipette, 46
Plasmaentladung, 11
Plastik
 Tür, 17
Plastikküvetten, 41
Probe, 40, 51
 Drucktaste, 15
 Raum, 12
Proben-/Ergebnistabelle, 61, 70, 79
Probendaten, 32
Probengerät, 21
Probeninformationen, 27
Probenküvette, 40, 48
Probennahmesystem, 81
 manuell, 81
 Sipper, 83
Pumpe
 Schlauch, 83
Pyridin, 47

Q

Quantifizierung, 25, 88
Quantitative Analyse
 bereit für die Analyse, 92
 der Proben, 88
Quarzprobenküvetten, 41
Quelle der Strahlung, 10
Quellenlinse, 10, 11

R

Ratio, 25
Raum für Probe, 12
Referenz, 38

Reinheit, 28
Reinheitskontrolle, 99
Reinigen von Küvetten, 44
Report
 Ergebnisse, 74
Rohdaten, 29
RS232C
 Anschluss, 16
Rückansicht des Spektrofotometers, 16
Rühren, 48
Rührmodul, 49

S

Schichtdicke
 Einrichtung, 81
Schnelle Absorptionsänderungen, 49
Schwebstoffe, 48
Schwefelkohlenstoff, 47
Schwefelsäure, 47
Seitliche Anzeigen, 20
Selbsttest, 96
 Betriebszustand, 97
 Ergebnisse, 98
 Rückblick, 98
 Start, 97
Setup-Dialog, 20
Signal-Rausch-Verhältnis, 49
Sipper, 83
 Durchflusstest, 83
 Parameter, 83
Sipper/Probengebersystem, 48
Sippersystem, 44
Sitzung
 Gerätesteuerung, 24
 nur Datenanalyse, 24
Software
 allgemein verwendbar, 9, 18
Spalt, 10, 13
Spaltbreite, 12
Spektralauswertung, 30, 31
Spektrale Erfassung, 28
Spektrale Rohdaten, 34

Spektrofotometer, 33, 36
 Rückansicht, 16
 Vorderansicht, 13
Spektrograf, 12
Spektrometer
 Linse, 10
 Spalt, 10
Spektroskopiesystem, 9
Spektrum, 25
Standard, 28, 32
 externer, 96
Standard-Einzelküvettenhalter, 53
Standardküvetten, 53
Standards, 88
 aktueller, 32
 Anzahl, 33
 minimal erforderliche Anzahl, 33
Status, 38
Statusanzeige, 14
Staub, 48
Steckplätze für MIO- und
 Zubehörkarten, 17
Strahlungsquelle, 10
Streulichtkorrektur, 10, 11
Stromversorgung, 37
 Netzanschluss, 17
 Wechseln, 14
Symbol, 20
Symbolleiste, 20

T

Tägliche Arbeit, 62
TCP/IP-Protokoll, 37
Temperatursteuerung, 48
Testsatz, 28
Tetrachlorkohlenstoff, 47
Thermostatisierbarer Küvettenhalter, 49
Toluol, 47
Transmission, 26
Transparente Apertur, 11
Trimethylpentan
 2,2,4-Trimethylpentan, 47
Tür für Zugang zu den Lampen, 17

U

Umgang mit Küvetten, 46
Umgebungslicht, 13
Untergrundkorrektur, 27, 28
UV-reines Wasser, 48
UV-Vis-Spektroskopie
 Grundlagen, 99

V

Verbindung
 Netzwerk, 9
Verriegelung, 17
Verschlossene Probenküvette, 48
Verschluss, 10, 11
Verständnis
 Agilent ChemStation Auswertung, 29
Verwalterebene, 24, 58
Verwendete Wellenlänge, 30
Viskose Lösungen, 49
Volumen, 28
Vorderansicht des Spektrofotometers, 13

W

WARNUNG
 keine Ergebnisse vorhanden, 75
Wasser, 47
Wellenlänge, 30
Wellenlängenreproduzierbarkeit, 34
Wolframlampe, 10

Z

Zellen oder Küvetten mit Apertur, 42
Zubehörsteckplatz, 17
Zugang zu Lampen, 17

www.agilent.com

In diesem Buch

Damit Sie sich mit Ihrem neuen 8453 System für die UV-Vis-Spektroskopie schnell zurechtfinden, enthält dieses Handbuch schrittweise Arbeitsweisen und Beispiele für den Einsatz in der Praxis.

© Agilent Technologies Deutschland GmbH 2002,
2003

Gedruckt in Deutschland
10/2003



G1115-92021



Agilent Technologies