

## Software OPUS Lizenzvereinbarung

**Dieser Lizenzvertrag ist eine rechtsverbindliche Vereinbarung zwischen Ihnen (nachfolgend LIZENZNEHMER genannt) und der Bruker Optics GmbH & Co. KG, Rudolf-Plank-Straße 27, 76275 Ettlingen, eingetragen im Handelsregister des Amtsgericht Mannheim unter HRA 710333 (nachfolgend LIZENZGEBER genannt). Bitte lesen Sie diesen Vertrag sorgfältig durch. Mit dem Öffnen der versiegelten Datenträgerhülle erklären Sie sich mit den folgenden Bedingungen und Konditionen des Lizenzvertrages einverstanden. Wenn Sie mit den Bedingungen und Konditionen des Lizenzvertrages nicht einverstanden sind, schicken Sie die ungeöffnete Datenträgerhülle zurück an Bruker Optics GmbH & Co. KG.**

### **1. Gegenstand des Vertrages**

Gegenstand des Vertrages sind das auf dem mitgelieferten Datenträger befindliche Programm OPUS, die Softwareerweiterungen von OPUS (nachfolgend SOFTWARE genannt) bzw. urheberrechtlich geschützte Bibliotheken oder digitale Daten (nachfolgend DATEN genannt) sowie die dazugehörige Begleitdokumentation. Der LIZENZGEBER macht darauf aufmerksam, dass es nach dem Stand der Technik nicht möglich ist, SOFTWARE und DATEN so zu erstellen, dass sie in allen Anwendungen und Kombinationen fehlerfrei arbeiten. Gegenstand des Vertrages sind daher nur die SOFTWARE und/oder DATEN, die im Sinne der Produktbeschreibung und der Benutzeranleitung grundsätzlich brauchbar sind.

### **2. Nutzung und Beschränkung**

Der LIZENZNEHMER ist berechtigt, die auf dem mitgelieferten Datenträger befindliche SOFTWARE und/oder DATEN auf einem (1) Rechner zu installieren, auszuführen und/oder zu nutzen. Sollte der LIZENZNEHMER die SOFTWARE und/oder DATEN auf weiteren Rechnern installieren, ausführen und/oder nutzen, muss er weitere zusätzliche Lizenzen erwerben.

Der LIZENZNEHMER ist berechtigt, Kopien der SOFTWARE und/oder DATEN auf Netzwerkservern zu speichern bzw. zu installieren, unter der Bedingung, dass diese Kopie ausschließlich zur Installation oder Ausführung der SOFTWARE und/oder zum Lesen der DATEN über ein Netzwerk auf einem (1) lokalen Rechner verwendet wird. Die Aufteilung einer Lizenz oder die gleichzeitige Verwendung einer einzigen Lizenz für mehrere Rechner ist streng untersagt. Wenn der LIZENZNEHMER OPUS in Kombination mit dem OPUS/DLL Paket verwendet, darf OPUS zur Konfi-

guration und Wartung der OPUS/DLL Installation auf einem zweiten Computer installiert werden.

### **3. Übertragung der Lizenz**

Der LIZENZNEHMER ist nicht berechtigt, die SOFTWARE und/oder DATEN oder Auszüge davon kostenlos oder gegen Entgelt an Dritte weiterzugeben, zu verleihen, zu vermieten, zu verpachten oder zu verkaufen. Ist eine Weitergabe der SOFTWARE und/oder DATEN unumgänglich (z. B. durch den Verkauf eines Spektrometers), darf diese Weitergabe nur durch den LIZENZGEBER erfolgen. Der LIZENZNEHMER ist verpflichtet, den LIZENZGEBER rechtzeitig und schriftlich über die beabsichtigte Weitergabe zu informieren.

### **4. Sonstige Einschränkungen**

Der LIZENZNEHMER ist nicht berechtigt, die SOFTWARE abzuändern, anzupassen, zu übersetzen, zurückzuentwickeln (Reverse Engineering), zu dekompileieren oder zu disassemblieren oder auf andere Weise den Quellcode der Software herauszufinden. Der LIZENZNEHMER ist nicht berechtigt, die DATEN in einer anderen als der in den Produkthandbüchern beschriebenen Weise zu nutzen und Informationen, gleich in welcher Form, aus den DATEN zu extrahieren. Ausdrucke oder andere Abbildungen der Daten oder Teile davon müssen mit einem Copyrightvermerk versehen werden.

### **5. Eigentums- und Urheberrechte**

Die SOFTWARE, die DATEN und die Begleitdokumentation sowie jede Kopie davon sind Eigentum des LIZENZGEBERS und durch Urheberrechte, internationale Vertragsbestimmungen und andere anwendbare nationale Rechtsvorschriften geschützt. Der LIZENZNEHMER ist daher verpflichtet, die SOFTWARE und/oder DATEN sowie das Begleitmaterial wie jedes andere urheberrechtlich geschützte Material zu behandeln. Ausgenommen hiervon sind (a) eine Kopie der SOFTWARE und/oder DATEN ausschließlich für Sicherungs- und Archivierungszwecke bzw. (b) das Transferieren der SOFTWARE und/oder der DATEN auf eine (1) Festplatte, vorausgesetzt, das Original wird ausschließlich für Sicherungs- und Archivierungszwecke aufbewahrt. Ein Vervielfältigen der Begleitdokumentation für die SOFTWARE und/oder DATEN ist untersagt. Der LIZENZGEBER macht darauf aufmerksam, dass der LIZENZNEHMER für alle Schäden aufgrund Urheberrechtsverletzungen haftet, die dem LIZENZGEBER aus einer Verletzung dieser Vertragsbestimmungen durch den LIZENZNEHMER entstehen.


## 6. Gewährleistung und Haftungsbeschränkung

Der LIZENZGEBER gewährleistet für einen Zeitraum von 24 Monaten ab dem Empfangsdatum der SOFTWARE und/oder DATEN, dass diese im Wesentlichen gemäß den beigelegten Produkthandbüchern verwendet werden können und dass der Datenträger, auf dem die SOFTWARE und/oder DATEN geliefert wurden, bei normaler und vertragsgerechter Benutzung und Instandhaltung frei von Material- oder Verarbeitungsfehlern ist. Sollte das Speichermedium, auf dem die SOFTWARE und/oder DATEN geliefert werden, Material- oder Verarbeitungsfehler aufweisen, erhält der LIZENZNEHMER bei Einsendung des defekten Datenträgers einen kostenlosen Ersatz.

Aus den vorstehend unter 1. genannten Gründen übernimmt der LIZENZGEBER keine Haftung für die Fehlerfreiheit der SOFTWARE, DATEN und der Begleitdokumentation. Es wird weder ausdrücklich noch stillschweigend eine Gewährleistung übernommen, die Folgendes einschließt, aber nicht darauf beschränkt ist, dass die SOFTWARE und/oder DATEN den Anforderungen und Zwecken des LIZENZNEHMERS genügen oder zusammen mit anderen Programmen oder Hardwarekomponenten funktionieren. Die Verantwortung für die richtige Auswahl und die Folgen der Benutzung der Software, sowie der damit beabsichtigten oder erzielten Ergebnisse trägt der LIZENZNEHMER selbst. Die Haftung des LIZENZGEBERS ist auf Vorsatz und grobe Fahrlässigkeit beschränkt.

Der LIZENZGEBER kann auf keinen Fall für besondere, zufällig entstandene oder indirekte Schäden oder Folgeschäden gleich welcher Art (einschließlich, aber nicht beschränkt auf Schäden aus entgangenem Gewinn, Betriebsunterbrechung, Verlust von Betriebsdaten oder andere finanzieller Verluste) haftbar gemacht werden, die aufgrund des Einsatzes bzw. Nichteinsatzes der SOFTWARE und/oder der DATEN entstanden sind. Dies gilt auch dann, wenn der LIZENZGEBER zuvor auf die Möglichkeit solcher Schäden hingewiesen wurde. In jedem Fall beschränkt sich die Haftung des LIZENZGEBERS auf die Rückerstattung des Kaufpreises für SOFTWARE und/oder DATEN. Da einige Staaten und Rechtsordnungen einen Ausschluss oder eine Beschränkung der Gewährleistung für Folgeschäden oder zufällig entstandene Schäden nicht gestatten, gilt die obige Beschränkung möglicherweise nicht in jedem Fall.

Die SOFTWARE ist so vorkonfiguriert, dass der LIZENZNEHMER diese datenschutzkonform nutzen kann. Für die tatsächliche Umsetzung einer datenschutzkonformen Nutzung ist der LIZENZNEHMER jedoch selbst verantwortlich. Der



LIZENZGEBER gewährleistet in diesem Zusammenhang nicht, dass der LIZENZNEHMER mit der Nutzung der Software sämtliche datenschutzrechtlichen Anforderungen der EU-Datenschutz-Grundverordnung (DSGVO) umgesetzt hat. Ansprüche gegen den LIZENZGEBER aufgrund der Verletzung datenschutzrechtlicher Pflichten des Lizenznehmers sind ausgeschlossen.

### **7. Dauer des Vertrages**

Der Vertrag läuft auf unbestimmte Zeit. Das Recht des LIZENZNEHMERS zur Nutzung der SOFTWARE und/oder DATEN erlischt automatisch ohne Kündigung, wenn er eine Bedingung dieses Vertrages verletzt. In diesem Fall ist der LIZENZNEHMER verpflichtet, den Originaldatenträger sowie alle angefertigten Kopien der SOFTWARE und/oder DATEN, einschließlich etwaiger abgeänderter Exemplare, sowie das Begleitmaterial dem LIZENZGEBER zurückzugeben.

### **8. Schlussbestimmung**

Gerichtsstand für alle aus diesem Vertrag ergebenden Streitigkeiten ist Karlsruhe. Sollten einzelne Bestimmungen des Lizenzvertrages ganz oder teilweise rechtsunwirksam oder lückenhaft sein oder werden, so hat das keinen Einfluss auf die Gültigkeit des restlichen Lizenzvertrages.

Stand: Dezember 2021



# OPUS

## Eine Einführung

1003197, Version 8

© 2021 Bruker Optics GmbH & Co. KG, Rudolf-Plank-Straße 27, D-76275 Ettlingen,  
[www.bruker.com](http://www.bruker.com)

Alle Rechte vorbehalten. Das Benutzerhandbuch darf weder vollständig noch auszugsweise ohne unsere vorherige schriftliche Genehmigung in irgendeiner Form oder durch irgendein Verfahren (Druck, Fotokopie, Mikrofilm etc.) reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden. Die Wiedergabe von Warennamen, eingetragenen Warenzeichen usw. in diesem Benutzerhandbuch berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutzgesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften. Sie sind Eigentum des jeweiligen Inhabers der Namens- und/oder Warenzeichenrechte.

Den Ausführungen in diesem Benutzerhandbuch liegen die technischen Spezifikationen und die technische Ausführung zugrunde, die zum Publikationsdatum gültig waren. Technische Spezifikationen und technische Ausführung können sich ändern.

Dieses Handbuch ist die Originaldokumentation zur Spektroskopiesoftware OPUS.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Übersicht.....</b>	<b>5</b>
1.1	Informationen zum Handbuch.....	5
1.2	Terminus .....	5
1.3	Geschlechtsneutrale Form .....	5
1.4	Fragen und Anliegen.....	6
<b>2</b>	<b>Installationshinweise .....</b>	<b>7</b>
2.1	Systemvoraussetzungen der Software .....	7
2.2	Zugriffsrechte .....	8
2.3	Sonstiges .....	9
2.4	OPUS unter Windows 10 installieren.....	9
2.5	Programmfeatures von OPUS ändern, reparieren, entfernen .....	10
<b>3</b>	<b>OPUS installieren .....</b>	<b>11</b>
3.1	Installationsablauf.....	11
3.2	In OPUS anmelden .....	13
3.2.1	Kennwort ändern im Validierungsmodus.....	13
3.3	Benutzeroberfläche von OPUS .....	14
3.4	Zugangskontrolle .....	17
3.4.1	Benutzereintrag .....	17
3.4.2	OPUS Arbeitsumgebung .....	18
3.4.3	Aufzeichnung von Daten .....	18

<b>4</b>	<b>Arbeiten mit OPUS</b> .....	<b>19</b>
<b>4.1</b>	<b>Spektrum messen</b> .....	<b>19</b>
4.1.1	Verbindung zum Spektrometer herstellen .....	19
4.1.2	Messparameter einstellen.....	21
4.1.3	Interferogrammpeak kalibrieren.....	24
4.1.4	Experimentdatei speichern .....	25
4.1.5	Hintergrundspektrum messen.....	27
4.1.6	Probenspektrum messen.....	27
<b>4.2</b>	<b>Grundlinienkorrektur</b> .....	<b>30</b>
4.2.1	Grundlinienkorrektur durchführen .....	31
<b>4.3</b>	<b>Historie der Spektrendateien</b> .....	<b>33</b>
<b>4.4</b>	<b>Globalen Audit Trail anzeigen</b> .....	<b>35</b>
4.4.1	Datenblock HISTORY aus globalem Audit Trail laden .....	36
<b>4.5</b>	<b>Spektrum speichern</b> .....	<b>36</b>
4.5.1	Speichern mit Überschreiben der Originaldatei .....	37
4.5.2	Speichern ohne Überschreiben der Originaldatei.....	37
<b>4.6</b>	<b>Spektrendatei laden</b> .....	<b>38</b>
4.6.1	Beschreibung des Dialogfensters Spektrum laden.....	39
<b>4.7</b>	<b>Spektrendatei drucken</b> .....	<b>41</b>
4.7.1	Über die Funktion Schnelldruck.....	41
4.7.2	Über die Funktion Spektren drucken .....	41
<b>5</b>	<b>Analysereport</b> .....	<b>43</b>
<b>5.1</b>	<b>Report erzeugen</b> .....	<b>43</b>
	<b>Index</b> .....	<b>47</b>



# 1 Übersicht

## 1.1 Informationen zum Handbuch

---

Dieses Handbuch ist eine Einführung über die Spektroskopiesoftware OPUS. Das Handbuch verwendet für wichtige Informationen folgendes Format:

---

**i** Das *i* gibt wichtige Informationen zur Handhabung der Softwarestruktur in bestimmten Anwendungsfällen.

---

## 1.2 Terminus

---

Das Handbuch verwendet für die Bezeichnung der Software den Begriff *OPUS*.

## 1.3 Geschlechtsneutrale Form

---

Das Benutzerhandbuch verwendet die männliche Form in einem neutralen Sinn und verzichtet auf die Unterscheidung zwischen männlichen, weiblichen oder diversen Benutzern. Wir bitten die Benutzer um Verständnis für die männliche Form, die ausschließlich dazu dient, das Erstellen dieses Handbuchs zu vereinfachen.

## 1.4 Fragen und Anliegen

---

Wenn Sie Fragen oder Anliegen hinsichtlich der Bedienung der Software haben, kontaktieren Sie unter den angegebenen Nummern die jeweiligen Ansprechpartner bei Bruker.

- Service Hotline: +49 (0) 72 43 504-2020
- Fax: +49 (0) 72 43 504-2100
- E-Mail: [service.bopt.de@bruker.com](mailto:service.bopt.de@bruker.com)  
[service.bopt.us@bruker.com](mailto:service.bopt.us@bruker.com)
- Internet: [www.bruker.com/optics](http://www.bruker.com/optics)
- Internationaler Service: [www.bruker.com/about-us/offices/offices/bruker-optics](http://www.bruker.com/about-us/offices/offices/bruker-optics)

# 2 Installationshinweise

## 2.1 Systemvoraussetzungen der Software

---

PC-Datensystem:	<ul style="list-style-type: none"><li>• serielle Schnittstelle<sup>a</sup></li><li>• Ethernet, RJ45, 10Base T (10 oder 10/100MHz)</li><li>• USB<sup>b</sup></li><li>• Maus, Tastatur</li><li>• PCIe-x1 interface<sup>c</sup></li></ul>
Prozessor:	64-Bit Prozessor
RAM:	4 GB
Festplatte:	250 GB, IDE
Grafikkarte:	XVGA, >128 MB RAM, 32-Bit Farbtiefe, OpenGL und Unterstützung von Direct-X, Version 9 oder höher (für OPUS/VIDEO, OPUS/3D)
Monitor:	<b>Mindestauflösung:</b> 1024 x 768  <b>Empfohlene Auflösung:</b> 1600 x 1200
Betriebssystem:	<b>Mindestens (OPUS 8 oder höher):</b> Windows 10 (Home Premium oder besser, 64 Bit)

Tabelle 2.1: Systemvoraussetzungen der Software

Ethernet:

**Windows 10 mit OPUS 8 oder höher:**

- Internet Explorer 11

**Allgemein (für jede OPUS Version):**

- TCP/IP muss konfiguriert sein
- Addressbereich der Rechner-Netzwerkkarte muss Spektrometer IP enthalten
- Port 80 zum Spektrometer via Netzwerkkarte muss verfügbar sein
- Kein Proxy erlaubt, um Kommunikation zur Optik nicht zu beeinträchtigen
- USB-Port muss verfügbar sein

Tabelle 2.1: Systemvoraussetzungen der Software

- a. Nur erforderlich beim Anschluss externer Geräte wie z. B. Temperaturkontroller, xy-Tischsteuerung etc.
- b. USB 2.0 ist zum Laden der Software OPUS und zum Betrieb der Digitalkameras von Ramanscope III und SENTERRA (2x) erforderlich. USB 3.0 ist zum Betrieb des IR-Mikroskops LUMOS erforderlich.
- c. Für manches Zubehör (z. B. A673-X, A750/x, S522-20, S522-200, Frame-Grabber etc.) muss das Datensystem eine oder mehrere Karten in voller Länge aufnehmen können.

## 2.2 Zugriffsrechte

---

- Administratorrechte in Windows zum Installieren und Registrieren von OPUS
- Kompletter Schreibzugriff auf Zielpfad
- Kompletter Zugriff auf USB-Ports, keine Einschränkung der Rechtevergabe z. B. durch Dienste wie *DeviceLock Service*

## 2.3 Sonstiges

---

Windows sollte so konfiguriert werden, dass Dateierweiterungen von bereits registrierten Dateitypen angezeigt werden.

1. Windows Explorer öffnen.
2. Im Menü *Extras* die Funktion *Ordneroptionen* wählen.
3. Die Karteikarte *Ansicht* klicken.
4. Das Häkchen vor der Option *Erweiterungen bei bekannten Dateitypen ausblenden* entfernen.
5. Eingaben mit *OK* bestätigen.

## 2.4 OPUS unter Windows 10 installieren

---

Unter Windows 10 reicht es nicht aus, sich als Benutzer mit Administratorrechten im Betriebssystem anzumelden. Die Installation muss explizit mit Administratorrechten durchgeführt werden (Kapitel 3.1).

### 2.5 Programmfeatures von OPUS ändern, reparieren, entfernen

---

**i** Aus technischen Gründen werden bei einer De-Installation nicht alle Dateien im OPUS Verzeichnis gelöscht. Um eine OPUS Version vollständig zu entfernen, muss das OPUS Verzeichnis nach der De-Installation manuell gelöscht werden. Zuvor müssen alle wichtigen Daten (z. B. Arbeitsumgebungen, Druckvorlagen, Makros usw.) anderweitig gespeichert werden.

---

1. Das Windows Startmenü öffnen.
2. Die Funktion *Systemsteuerung* wählen.
3. In der angezeigten Ansicht die Funktion *Programme und Funktionen* wählen.
4. Rechtsklick auf die aktuell installierte OPUS Version.
5. Im angezeigten Kontextmenü die Funktion *Ändern* wählen.
6. In der angezeigten Ansicht die betreffende Optionsschaltfläche aktivieren, je nach dem, ob Sie die Programmfeatures ändern, reparieren oder entfernen möchten.
7. Die Schaltfläche *Weiter* klicken.
8. Mithilfe des *InstallShield Wizard* die Einstellungen vornehmen.
9. Die Schaltfläche *Fertig stellen* klicken.

# 3 OPUS installieren

---

**i** Die Spektroskopiesoftware OPUS wird standardmäßig auf einem USB-Stick ausgeliefert.

---

## 3.1 Installationsablauf

---

**i** Für das Installieren von OPUS sind Benutzerrechte als Administrator erforderlich.

---

1. Den OPUS Stick in den USB-Port des Rechners stecken.
2. Wenn die Installation nach dem Einstecken des OPUS Sticks automatisch startet, die Installation abbrechen.
3. Im Installationsverzeichnis *OPUS\_<Version>* Rechtsklick auf die Datei *setup<nn>.exe*.
4. Im angezeigten Kontextmenü die Option *Als Administrator ausführen* wählen.
5. Die angezeigte Meldung bestätigen, um den Vorgang fortzusetzen.
6. Die Anweisungen auf dem Bildschirm befolgen und die OPUS Registrierungsdaten eingeben.<sup>1</sup>
  - *Die Registrierungsdaten liegen gedruckt dem OPUS Stick bei. Die Registrierung muss nur einmal erfolgen und gilt danach für alle Benutzer.*

---

1. Bei der Installation einer OPUS Testversion (30 Tage gültig) sind keine Registrierungsdaten erforderlich. In diesem Fall muss ein Häkchen für die Testoption gesetzt werden.

7. Wenn OPUS in der Betriebsart 21 CFR Part 11 (Validierungsmodus) betrieben werden soll, die betreffende Option aktivieren.<sup>1</sup>
  - *Wenn OPUS 8 oder höher im Validierungsmodus betrieben werden soll, ist es empfehlenswert mit einer Datenbank zu arbeiten. Die Option für eine Datenbankverbindung (OPUS Datenbank oder benutzereigene Datenbank) kann während der Installation aktiviert werden. Wenn erforderlich, kann zu einem späteren Zeitpunkt die Einstellung nur von einem Anwender mit Benutzerrechten in Windows rückgängig gemacht werden.*
8. Die Sprache auswählen, die für OPUS verwendet werden soll.
9. Den Rechner am Ende der Installation neu starten.
  - *Wenn während der Installation anderer Programmkomponenten eine Aufforderungsmeldung zum Neustart des Rechners angezeigt wird, den Rechner nicht neu starten, solange die OPUS Installation nicht vollständig abgeschlossen ist.*

---

1. Die Option kann nur aktiviert werden, wenn die OPUS Registrierung das Softwarepaket OPUS/VALIDATION enthält. Das Aktivieren der Option kann nicht rückgängig gemacht werden und hat weitreichende Auswirkungen auf das Arbeiten mit OPUS. 21 CFR Part 11 ist eine von der United States Food and Drug Administration (FDA) gesetzlich erlassene Qualitätsverordnung, die u. a. auch Anforderungen an die Datenintegrität regelt. Wenn OPUS 8 oder höher im Validierungsmodus betrieben werden soll, ist es empfehlenswert mit einer Datenbank zu arbeiten. Die Option für eine Datenbankverbindung (OPUS Datenbank oder benutzereigene Datenbank) kann nur während der Installation aktiviert werden.



## 3.2 In OPUS anmelden

---

1. Nach der Installation im Windows Startmenü den Eintrag OPUS klicken.
2. Im angezeigten Dialogfenster die Benutzerkennung<sup>1</sup> aus der Auswahlliste wählen.
3. Als Kennwort *OPUS* eingeben.
  - *Das Kennwort unterscheidet Groß- und Kleinbuchstaben. Sobald in OPUS ein Benutzerkonto eingerichtet ist, kann eine individuelle Benutzerkennung und ein individuelles Kennwort definiert werden. Im Validierungsmodus wird der Anwender unmittelbar nach der ersten Anmeldung aufgefordert, das Kennwort zu ändern. Details sind im Kapitel 3.2.1 beschrieben.*
4. Eine Arbeitsumgebung wählen.
  - *Die Auswahlliste enthält immer die für die Benutzerkennung definierten Arbeitsumgebungen. Beim allerersten Start von OPUS, sollte die Arbeitsumgebung 'default.ows' gewählt werden.*
5. Die Schaltfläche *Login* klicken.
6. Im angezeigten Dialogfenster die Schaltfläche *OK* klicken.
  - *Die Benutzeroberfläche von OPUS wird angezeigt.*

### 3.2.1 Kennwort ändern im Validierungsmodus

---

1. Nach der allerersten OPUS Anmeldung wird der Benutzer aufgefordert, das Kennwort zu ändern. Die Aufforderung mit *OK* bestätigen.
2. Im angezeigten Dialogfenster das neue Kennwort eingeben und bestätigen.
  - *Gemäß der Betriebsart 21 CFR Part 11 (Validierungsmodus) muss das Kennwort bestimmten Komplexitätsanforderungen entsprechen und deshalb folgende Mindestvoraussetzungen erfüllen:*
    - *Mindestlänge: 8*
    - *Anzahl Ziffern: 1*

- 
1. Standardmäßig sind in OPUS folgende Benutzerkennungen verfügbar: Admin, LabManager und Operator. Ausführliche Informationen zur Benutzerkennung sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.

## OPUS installieren 3

- Anzahl Buchstaben: 1
  - Anzahl Kleinbuchstaben: 1
  - Anzahl Großbuchstaben: 1
  - Anzahl Sonderzeichen: 1
3. Die Schaltfläche *Kennwort ändern* klicken.
  4. Im Anmeldedialog das neue Kennwort eingeben und die Schaltfläche *Anmelden* klicken.

### 3.3 Benutzeroberfläche von OPUS

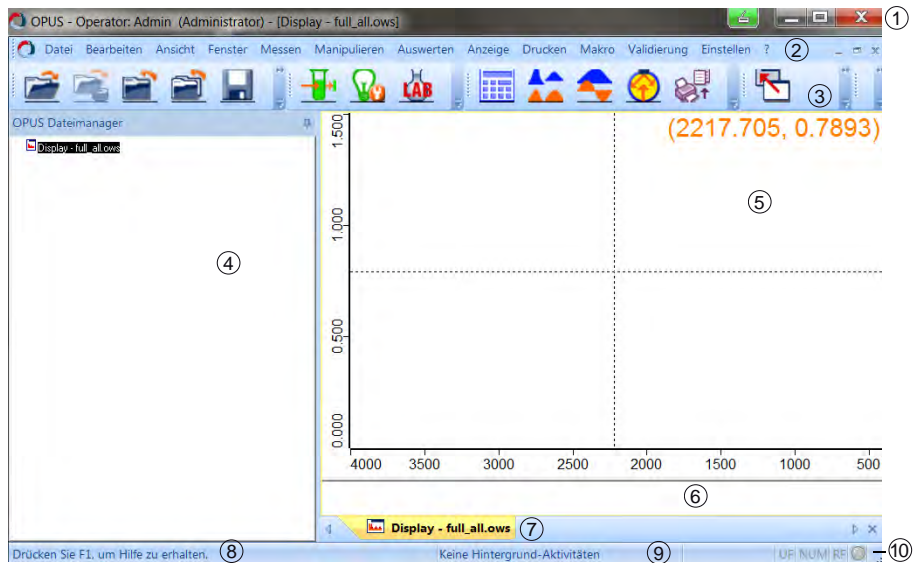


Abbildung 3.1: Benutzeroberfläche von OPUS

	<b>Element</b>	<b>Definition</b>
1	Titelleiste	Die Titelleiste enthält die Benutzerkennung und die dem Benutzer zugewiesene Arbeitsumgebung.
2	Menüzeile	Die Menüzeile enthält alle in OPUS verfügbaren Menüs. Die einzelnen Menüs ermöglichen den Zugang zu allen OPUS Funktionen.
3	Symbolleiste	In der Symbolleiste können häufig verwendete OPUS Funktionen mithilfe von Icons individuell angeordnet werden.
4	Dateimanager	Im OPUS Dateimanager werden die geladenen Spektrendateien mit den jeweiligen Datenblöcken angezeigt.
5	Spektrfenster	Das Spektrfenster zeigt das geladene Spektrum an. Standardmäßig wird ein Fadenkreuz eingeblendet. Die aktuelle Position des Fadenkreuzes (z. B. Wellenzahl und Intensität) wird oben rechts im Spektrfenster angezeigt. Dadurch können die x/y Messwerte direkt aus dem Spektrum ausgelesen werden. Mit einem Rechtsklick in das Spektrfenster wird das Fadenkreuz ausgeblendet.
6	Übersichtsfenster	Das Übersichtsfenster enthält den kompletten Frequenzbereich der geladenen Spektrendatei.

Tabelle 3.2: Elemente der Benutzeroberfläche von OPUS


	Element	Definition
7	OPUS Ansicht	Jede aktuell geöffnete OPUS Ansicht wird mithilfe einer Karteikarte angezeigt. Jede Karteikarte hat entsprechend der OPUS Ansicht eine andere Farbe. Bei mehreren gleichzeitig geöffneten OPUS Ansichten wechseln Sie zwischen den einzelnen OPUS Ansichten, in dem Sie die jeweilige Karteikarte oder die gefüllten Pfeile am linken und rechten Rand klicken.
8	Online Hilfe	Die Online-Hilfe in OPUS enthält ausführliche Informationen zu allen OPUS Funktionen und kann mithilfe der Taste F1 geöffnet werden.
9	Statusleiste	Die Statusleiste informiert über Hintergrundaktivitäten, die gerade in OPUS Einführung laufen und zeigt deren Status an.
10	Instrumentenstatus	Der Instrumentenstatus wird über die OPUS Statusanzeige (  ) wie folgt angezeigt: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Grau: kein Spektrometer angeschlossen</li> <li>• Grün: Spektrometer angeschlossen</li> <li>• Gelb: Warnung</li> <li>• Rot: Fehler</li> </ul>

Tabelle 3.2: Elemente der Benutzeroberfläche von OPUS

Alle Einstellungen (z. B. Menüs und Schaltflächen) sind individuell konfigurierbar und werden bei einem Neustart von OPUS wieder geladen. Weitere Details zur OPUS Benutzeroberfläche sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.

## 3.4 Zugangskontrolle

OPUS verfügt über ein Zugangskontrollsystem, das in Abbildung 3.2 dargestellt ist.



Abbildung 3.2: Zugangskontrolle in OPUS

### 3.4.1 Benutzereintrag

Die Benutzereinträge der OPUS Benutzerdatenbank bestehen aus:

- Benutzerkennung
- Passwort
- Namen des Benutzers
- Benutzergruppe (Administrator, LabManager, Operator)
- Signaturkategorien
- Zugewiesene Arbeitsumgebungen

## 3.4.2 OPUS Arbeitsumgebung

---

Die OPUS Arbeitsumgebung umfasst:

- Menüinhalte
- Werkzeugleiste
- Zugangsrechte innerhalb OPUS
- Andere Einstellungen (z. B. Dateianhang, Darstellungsgrenzen)

Weitere Details zur Benutzerverwaltung, wie z. B. Hinzufügen, Ändern oder Entfernen von Benutzern sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.

## 3.4.3 Aufzeichnung von Daten

---

In OPUS sind Details zu einzelnen Bearbeitungen und/oder Auswertungen der Spektrendatei im Datenblock HISTORY gespeichert (Kapitel 4.3).

Zusätzlich protokolliert der globale Audit Trail alle Aktionen, die in OPUS bezogen auf das Benutzer- und Signaturmanagement sowie die einzelne Spektrendatei innerhalb eines bestimmten Zeitraums durchgeführt wurden.

Im globalen Audit Trail wird neben der Art der Aktion die Kennung des Benutzers angezeigt, der für diese Aktion verantwortlich zeichnet. Details zum globalen Audit Trail sind im Kapitel 4.4 beschrieben.

# 4 Arbeiten mit OPUS

## 4.1 Spektrum messen


---

Im Kapitel 4.1 ff. sind die einzelnen Schritte beschrieben, die VOR, WÄHREND und NACH dem Messen von Spektren durchzuführen und zu beachten sind. Dabei muss die Reihenfolge der beschriebenen Schritte eingehalten werden.

Das Aussehen der einzelnen Dialogfenster hängt von der aktuell verwendeten Konfiguration des Spektrometers ab. Deshalb können die im Folgenden abgebildeten Dialogfenster im Vergleich zu denen auf Ihrem Bildschirm unterschiedlich aussehen.

### 4.1.1 Verbindung zum Spektrometer herstellen

---

1. Aus dem Menü *Messen* die Funktion *Optik Konfiguration, Service* wählen oder aus der Symbolleiste das Icon  klicken.
2. Im angezeigten Dialogfenster auf der Karteikarte *Optische Bank* prüfen, ob die Spektrometereinstellungen korrekt sind. Wenn ja, das Dialogfenster schließen. Wenn nicht, weiter mit Schritt 3.
3. Aus der Auswahlliste *Konfiguration* das betreffende Spektrometer wählen.
4. In das Eingabefeld *URL der optischen Bank* die IP-Adresse des Spektrometers eingeben.
5. Die Schaltfläche *Verbinde* klicken.
6. Warten bis die Verbindung zum Spektrometer hergestellt ist.
  - *Sobald die Bezeichnung des Spektrometers und die Firmwareversion angezeigt werden (Abbildung 4.3), ist die Verbindung zum Spektrometer hergestellt. Bei einer erfolgreichen Verbindung ist die Statusanzeige in OPUS grün.*

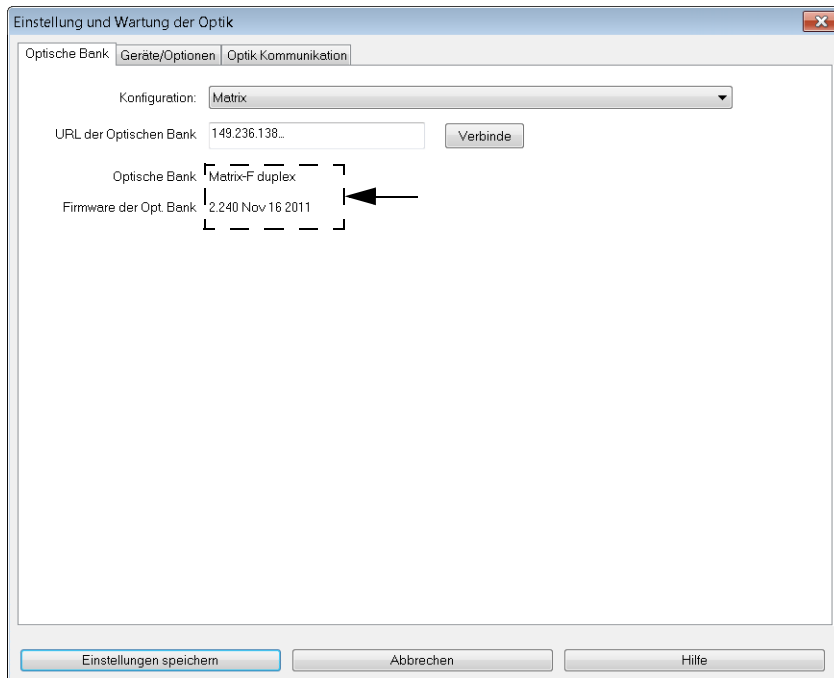



Abbildung 4.3: Verbindungsdaten des Spektrometers

7. Die Schaltfläche *Einstellungen speichern* klicken.




## 4.1.2 Messparameter einstellen

---

1. Im Menü *Messen* die Funktion *Erweiterte Messung* wählen oder in der Symbolleiste das Icon  klicken.
2. Im angezeigten Dialogfenster die Messparameter auf den einzelnen Karteikarten einstellen.
  - *Wie Fehler oder Warnungen beim Einstellen der Messparameter in OPUS dargestellt werden, sind im Kapitel 4.1.2.1 beschrieben. Einzelheiten zu den Einstelloptionen sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.*
3. Die Schaltfläche *Übernehmen & schließen* klicken.

## 4.1.2.1 Fehlerdiagnose beim Einstellen von Messparametern

Anzeige in OPUS	Bedeutung
	Das gelbe Ausrufezeichen zeigt an, dass auf der betreffenden Karteikarte zu einem oder mehreren Messparametern ein Warnhinweis vorliegt. <hr/> <b>i</b> Messung weiterhin möglich.

### Beispiel:

- Gelbe Markierung vor der Auswahlliste oder im Eingabefeld eines Messparameters.

Resultatspektrum Absorbance      Daten speichern von: 3100      cm-1 bis: 1000      cm-1

- ☞ Wenn Sie den Cursor auf die Auswahlliste oder das Eingabefeld positionieren, erklärt ein Tooltip, warum für diesen Messparameter ein Warnhinweis vorliegt.

Resultatspektrum Absorbance      cm-1 bis: 1000      cm-1  
Kein Hintergrundspektrum vorhanden!      BMS,DTC, limitiert den Spectralbereich auf > 4000 cm-1

Tabelle 4.3: Fehlerdiagnose beim Einstellen von Messparametern

## Anzeige in OPUS



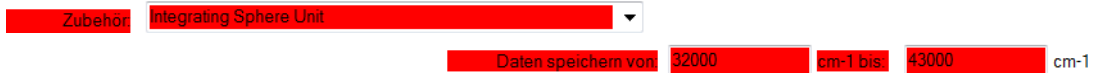
## Bedeutung

Die Warnsymbole zeigen an, dass auf der betreffenden Karteikarte ein oder mehrere Messparameter fehlen oder falsch definiert wurden, da sie nicht mit der Optikkonfiguration übereinstimmen<sup>a</sup>.

**i** Messung nicht möglich.

### Beispiel:

➤ Rote Markierung vor der Auswahlliste oder im Eingabefeld eines Messparameters.



☞ Wenn Sie den Cursor auf die Auswahlliste oder in das Eingabefeld positionieren, erklärt ein Tooltip den fehlenden oder falsch definierten Messparameter.



Tabelle 4.3: Fehlerdiagnose beim Einstellen von Messparametern

- Manche Messparameter stehen in Abhängigkeit zueinander, d. h., wenn ein Messparameter korrigiert wird, kann es sein, dass die Warnung für andere von dieser Korrektur betroffenen Messparameter aufgehoben wird.

## 4.1.3 Interferogrammpeak kalibrieren

**i** Die Position des Interferogrammpeaks muss VOR der ersten Messung exakt bestimmt und gespeichert werden. Ansonsten muss die Position des Interferogrammpeaks nur bestimmt werden, wenn Änderungen in der Hardware vorgenommen wurden.

1. Im Menü *Messen* die Funktion *Erweiterte Messung* wählen.
2. Die Karteikarte *Justiermodus* klicken.
3. Im angezeigten Dialogfenster die Optionsschaltfläche *Interferogramm* aktivieren.
4. Den Scanbereich mithilfe der Pfeile (Abbildung 4.4) nach rechts oder links verschieben, wenn im Anzeigenfenster kein Interferogrammpeak zu sehen ist.

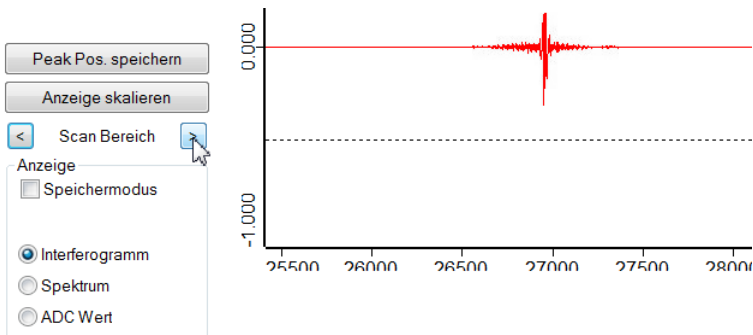


Abbildung 4.4: Scanbereich verschieben

5. Die Schaltfläche *PeakPos. speichern* klicken und den Interferogrammpeak speichern.
  - Die genaue Position des Interferogrammpeaks ist für die spätere Fourier Transformation erforderlich.
6. Die Schaltfläche *Übernehmen & schließen* klicken.

#### 4.1.4 Experimentdatei speichern

1. Im Menü *Messen* die Funktion *Erweiterte Messung* wählen.
2. Die Karteikarte *Erweitert* klicken.
3. Im angezeigten Dialogfenster in den Eingabefeldern *Messzeit Probe/Hintergrund* (Abbildung 4.5) die Anzahl der gewünschten Scans festlegen.

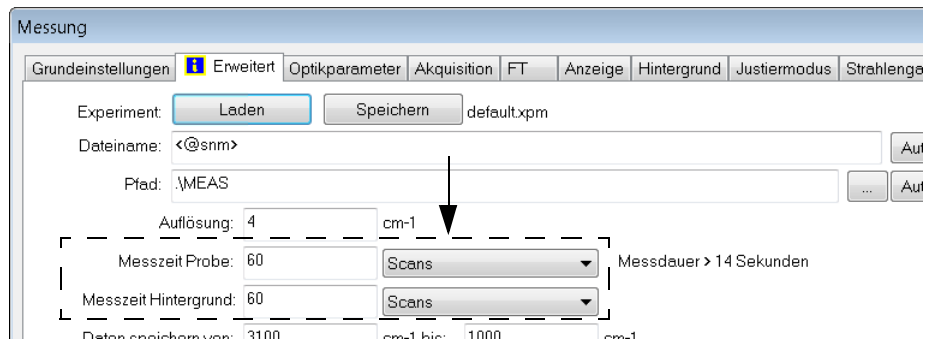



Abbildung 4.5: Anzahl der Scans festlegen

4. Den Pfad für die automatische Speicherung der Messung festlegen, z. B. \*\\MEAS.
  - Mithilfe der Schaltfläche  kann der Speicherpfad exakt ausgewählt werden. Wenn OPUS im Validierungsmodus betrieben wird, müssen bestimmte Anforderungen an den Speicherpfad erfüllt sein. Details sind im Kapitel 4.1.4.1 beschrieben.
5. Den Datentyp für das Resultatspektrum festlegen.
  - Es ist empfehlenswert, 'Absorbance' als Datentyp für das Resultatspektrum festzulegen. Abbildung 4.6 zeigt mögliche Datentypen für das Resultatspektrum.

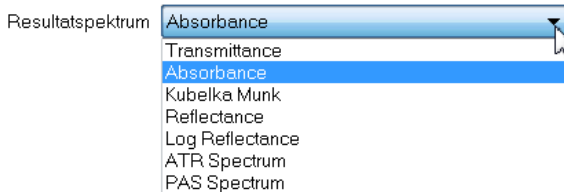


Abbildung 4.6: Datentypen für das Resultatspektrum

- *Die Einstellung für das Resultatspektrum kann jederzeit wieder geändert werden.*
- 6. Die Schaltfläche *Speichern* klicken.
- 7. Im angezeigten Dialogfenster einen Namen für die Experimentdatei eingeben und diesen speichern.
  - *Es ist empfehlenswert, die Experimentdatei mehrfach zu verwenden. Für das Arbeiten mit Makros sind Experimentdateien zwingend erforderlich.*

## 4.1.4.1 Speicherpfad im Validierungsmodus

---

Im Validierungsmodus müssen Dateien in einen geschützten Datenpool gespeichert werden. Der Begriff geschützter Datenpool<sup>1</sup> referenziert auf öffentliche Verzeichnisse und Unterordner im Pfad `C:\Benutzer\Öffentlich\Öffentliche Dokumente\Bruker\OPUS_<Version>`.

Pfade, die nicht ausschließlich öffentliche Verzeichnisse und/oder Unterordner verwenden, werden von OPUS nicht akzeptiert und dem Anwender ist es nicht erlaubt, Spektrendateien in diese Pfade zu speichern.

---

1. Im geschützten Datenpool können Dateien geändert, jedoch weder gelöscht noch überschrieben werden. Andere Programme außer OPUS haben keinen Zugriff auf die im geschützten Datenpool gespeicherten Dateien.

### 4.1.5 Hintergrundspektrum messen

---

Für ein Hintergrundspektrum wird ein Leerkanalspektrum ohne Probe im Strahlengang gemessen. Ein Hintergrundspektrum wird deshalb auch als Einkanalreferenzspektrum bezeichnet. Vor einer Probenmessung muss ein Hintergrundspektrum gemessen werden, sofern noch keines vorhanden ist.

Anhand des Hintergrundspektrums werden die Einflüsse berücksichtigt, die das Spektrometer an sich auf die gemessenen Spektren hat. Beispielsweise ist die Leistung der Quelle nicht bei allen Frequenzen gleich oder das Spiegelmaterial absorbiert die Strahlung bei verschiedenen Frequenzen unterschiedlich.

1. Darauf achten, dass die Statusanzeige in OPUS grün ist.
2. Darauf achten, dass sich keine Probe im Probenraum befindet.
3. Im Menü *Messen* die Funktion *Erweiterte Messung* wählen.
4. Die Karteikarte *Optikparameter* klicken.
5. Im angezeigten Dialogfenster aus der Auswahlliste *Apertur* den gleichen Wert wählen wie für die Messung des Probenspektrums.
6. Die Karteikarte *Grundeinstellungen* klicken.
7. Im angezeigten Dialogfenster die Schaltfläche *Hintergrundmessung* klicken.
  - *Die Statusleiste unterhalb des Spektrenfensters zeigt den Fortschritt der Hintergrundmessung an, z. B. wie viele Scans bereits gemessen wurden. Die Hintergrundmessung ist beendet, wenn die Statusleiste den Status 'Keine Hintergrund-Aktivitäten' anzeigt.*
8. Warten bis die Hintergrundmessung beendet ist und anschließend das Probenspektrum messen (Kapitel 4.1.6).

### 4.1.6 Probenspektrum messen

---

1. Nach der Hintergrundmessung (Kapitel 4.1.5) die Probe in den Strahlengang des Spektrometers einsetzen.
  - *Die Art und Weise hängt von der jeweiligen Spektrometerkonfiguration ab.*
2. Im Menü *Messen* die Funktion *Erweiterte Messung* wählen.
3. Die Karteikarte *Grundeinstellungen* klicken.

4. Im angezeigten Dialogfenster den Probennamen und die Probenform in das entsprechende Eingabefeld eingeben.
  - Diese Information wird dann zusammen mit dem Spektrum gespeichert.
5. Die Schaltfläche *Probenmessung* klicken, um die Messung zu starten.
  - Das Dialogfenster 'Messung' wird geschlossen und das Spektrenfenster öffnet sich. Die Statusleiste unterhalb des Spektrenfensters zeigt den Fortschritt der Probenmessung an. Die Probenmessung ist beendet, wenn das gemessene Spektrum im Spektrenfenster dargestellt wird (Abbildung 4.7).

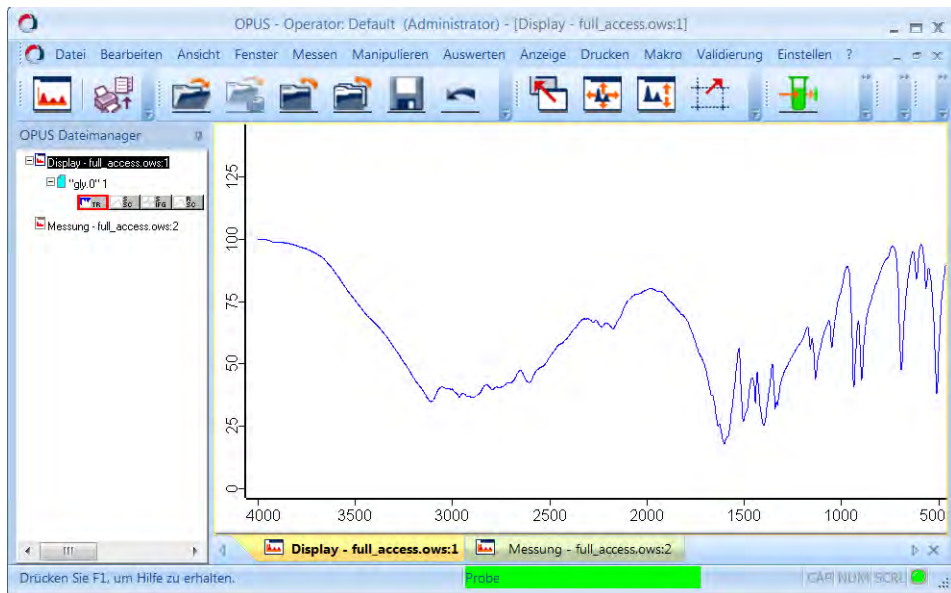


Abbildung 4.7: Gemessenes Probenspektrum im Spektrenfenster

Genau genommen, misst das Spektrometer kein Spektrum, sondern ein Interferogramm. Dieses wird dann mithilfe der Fourier Transformation in ein Einkanalspektrum umgewandelt. Aus diesem Einkanalspektrum und dem vorher gemessenen Hintergrundspektrum wird das Resultatspektrum in Transmission berechnet. Dieser Vorgang läuft automatisch im Hintergrund ab.



Um den Zusammenhang der verschiedenen Spektren zu verdeutlichen, zeigt Abbildung 4.8 das Einkanal-, Hintergrund- und Resultatspektrum in Transmission. Die jeweiligen Datenblöcke sind im Dateimanager dargestellt.

Weitere Details zu den Datenblöcken sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.

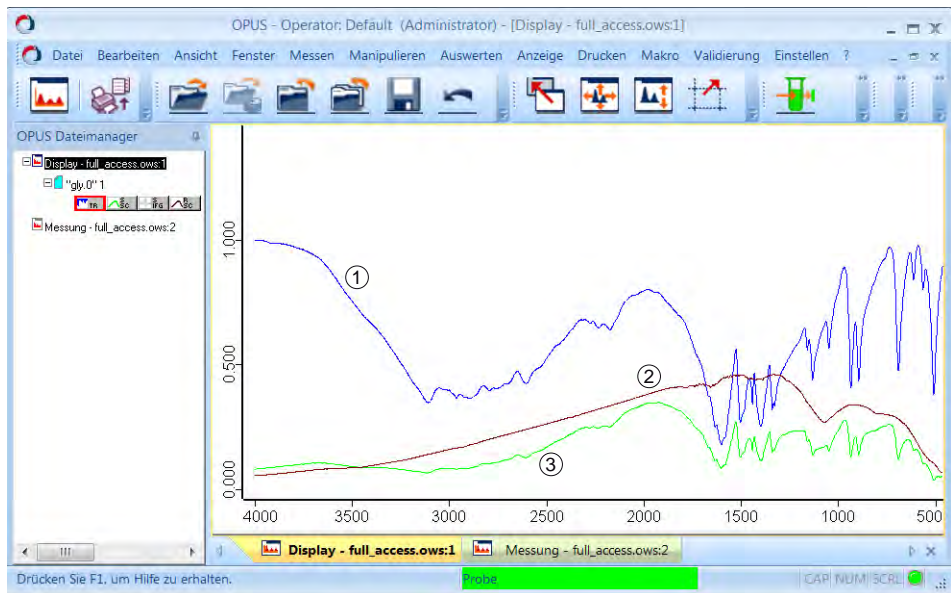


Abbildung 4.8: Alle Spektrentypen eines gemessenen Probenspektrums

	<b>Definition</b>	<b>Datenblock im Dateimanager</b>
1	Transmissionsspektrum	TR
2	Hintergrundspektrum (Einkanal)	RSC
3	Probenspektrum (Einkanal)	SSC

Tabelle 4.4: Definition der Spektrentypen

## 4.2 Grundlinienkorrektur

Direkt nach Beendigung der Probenmessung (Kapitel 4.1.6) ist die Grundlinienkorrektur eine hilfreiche Funktion zum Manipulieren von Spektren, die z. B. aufgrund des vorhandenen Probenmaterials nicht optimal gemessen werden konnten.

Wenn die Grundlinie des Spektrums geneigt oder kurvig ist oder deutlich unter 100 % Transmission liegt, war vermutlich die Probenvorbereitung nicht optimal. Anstatt die Probe nochmals zu messen, kann eine Grundlinienkorrektur durchgeführt werden. In vielen Fällen ist das Problem dadurch gelöst.

Für das Messen von Spektren sollten die Proben jedoch so vorbereitet sein, dass optimale Ergebnisse erzielt werden können und die Spektren nach dem Messen nicht mehr korrigiert werden müssen.

Abbildung 4.9 zeigt ein Beispiel für eine Grundlinienkorrektur. Das obere Spektrum ist das Originalspektrum, das untere Spektrum wurde korrigiert.

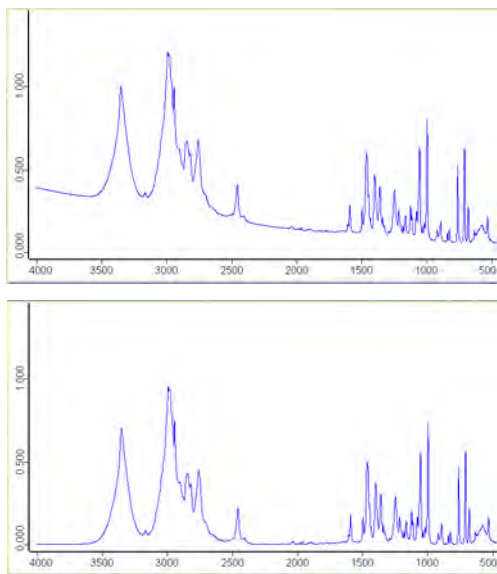



Abbildung 4.9: Spektrum vor (oben) und nach (unten) Grundlinienkorrektur

### 4.2.1 Grundlinienkorrektur durchführen

1. Im Menü *Manipulieren* die Funktion *Grundlinienkorrektur* wählen oder in der Symbolleiste das Icon  klicken.
2. Im Dateimanager auf den Spektrenblock (AB oder TR) des gemessenen Probenspektrums doppelklicken.
  - *Die Spektrendatei wird im Auswahlfenster 'Datei(en) für die Grundlinienkorrektur' angezeigt.*
3. Die Karteikarte *Methode wählen* klicken.
4. Im angezeigten Dialogfenster eine Methode für die Grundlinienkorrektur wählen (Abbildung 4.10).
  - *Details zu den einzelnen Methoden sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.*

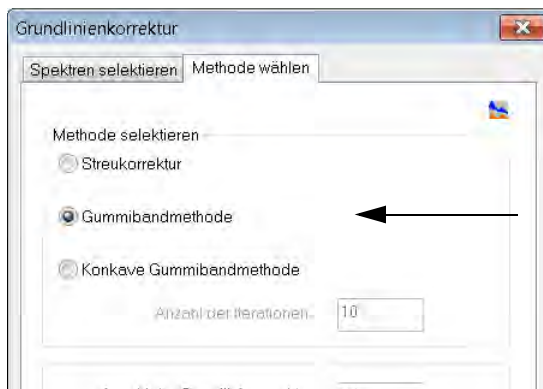


Abbildung 4.10: Grundlinienkorrektur - Methode wählen

5. Die Anzahl der Grundlinienpunkte manuell eingeben.
  - *Es ist empfehlenswert, den Wert von 64 zu belassen.*
6. Das Kontrollkästchen *CO<sub>2</sub> Banden ausschließen* aktivieren, damit der Bereich der CO<sub>2</sub>-Banden bei der Grundlinienkorrektur ausgeschlossen wird.

- Die Schaltfläche *Korrigieren* klicken.
  - Die *Grundlinienkorrektur* wird sofort ausgeführt.

Im Dateimanager wird ein rotes Dokumentsymbol über dem blauen (Originaldaten) Dokumentsymbol angezeigt (Abbildung 4.11). Das rote Dokumentsymbol weist auf eine manipulierte Spektrendatei hin.



Abbildung 4.11: Dateianzeige nach Grundlinienkorrektur

## 4.2.1.1 Nach der Grundlinienkorrektur

---

Nach Beendigung der Grundlinienkorrektur ist das Spektrum noch nicht auf der Festplatte gespeichert und existiert nur als temporäre Datei. Speichern Sie die Datei unter einem anderen Dateinamen, damit die Originaldatei nicht überschrieben wird (Kapitel 4.5.2).

## 4.2.1.2 Grundlinienkorrektur rückgängig machen

---

- Im Dateimanager Rechtsklick auf das rote Dokumentsymbol.
- Aus dem angezeigten Kontextmenü die Funktion *Änderungen rückgängig machen* wählen.
- Im angezeigten Dialogfenster die Schaltfläche *Wiederherstellen* klicken (Abbildung 4.12).

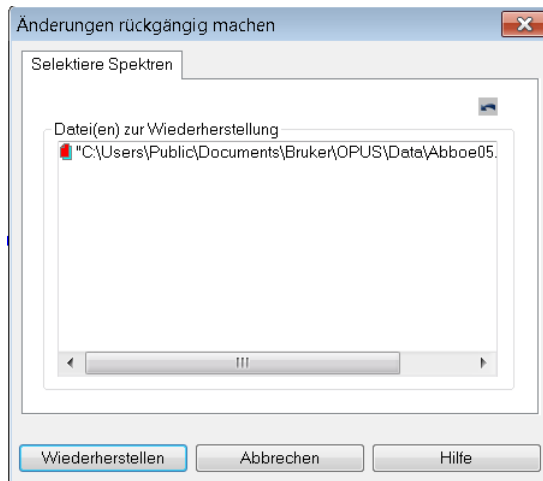


Abbildung 4.12: Originaldaten nach Grundlinienkorrektur wieder herstellen

- *Im Dateimanager wird das rote Dokumentsymbol nicht mehr angezeigt und die Originaldaten stehen wieder zur Verfügung.*

### 4.3 Historie der Spektrendateien

Wenn eine geladene Spektrendatei bearbeitet oder geändert wird oder globale Messeinstellungen geändert werden, können diese Aktionen über den nicht editierbaren und nicht löschbaren Datenblock (HISTORY) angezeigt werden.<sup>1</sup>

Abbildung 4.13 enthält Parameter aus dem Datenblock HISTORY einer Spektrendatei, an der bereits einige Bearbeitungen durchgeführt wurden.

1. Zusätzlich werden Messungen, Bearbeitungen und/oder Auswertungen von Spektrendateien sowie Änderungen bestimmter Einstelloptionen in OPUS im globalen Audit Trail dokumentiert und protokolliert (Kapitel 4.4).

- ☞ Zum Anzeigen der Parameter Rechtsklick auf den Datenblock HISTORY und die Funktion *Report-Fenster* wählen.

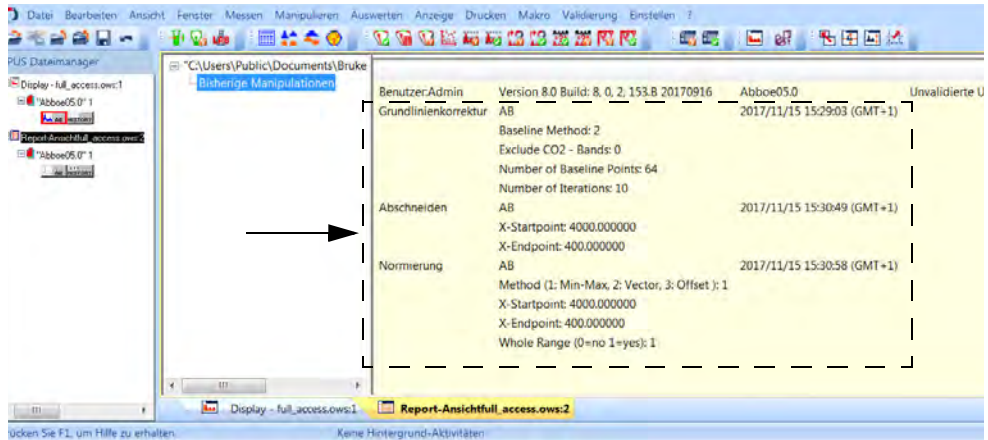


Abbildung 4.13: Parameter aus dem Datenblock HISTORY

Der Datenblock HISTORY enthält folgende Parameter:

- Benutzerkennung
- Versionsnummer von OPUS
- Name der Spektrendatei
- alle bisherigen Bearbeitungen (der Reihenfolge nach)

Die Parameter werden im Datenblock zusammen mit dem bearbeiteten Spektrum in einer einzigen Spektrendatei gespeichert. Dadurch werden alle Datenbearbeitungen aufgezeichnet, z. B. Art der Datenbearbeitung, Zeitpunkt etc.

## 4.4 Globalen Audit Trail anzeigen

**i** Der globale Audit Trail zeichnet alle Aktionen in chronologischer Reihenfolge auf, die jemals in OPUS durchgeführt wurden. Details zum globalen Audit Trails sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.

1. Im Menü *Validierung* die Funktion *Globaler Audit Trail anzeigen* wählen.
2. In der angezeigten Ansicht ein Anfangs- und Enddatum für den Suchzeitraum festlegen.
3. Die Schaltfläche *Anfragen* klicken.
  - *Das Anfrageergebnis wird chronologisch in Form einer Tabelle angezeigt (Abbildung 4.14).*

Aktivität	Objekt ID	Objekt Schnappschuss	Zeitstempel	Benutzer ID	Vollständiger Name
<call>	<call>	<call>	<call>	<call>	<call>
Anmelden	32a60100-1289-4...	Admin	2017/11/21 10:16:53...	Admin	Admin
Abmelden	32a60100-1289-4...	Admin	2017/11/21 10:29:02...	Admin	Admin
Anmelden	32a60100-1289-4...	Admin	2017/11/21 10:29:12...	Admin	Admin
Messung durchführen	538cdb24-496d-4...	Test.3	2017/11/21 10:29:55...	Admin	Admin
Datei ändern	538cdb24-496d-4...	Test.3	2017/11/21 10:37:35...	Admin	Admin
Messung durchführen	409e4391-d4ca-4...	EC_MPA-TU_Sphere.0	2017/11/21 10:41:09...	Admin	Admin
Messung durchführen	9cb6f684-4ef5-45...	Papier_123_20171121_114112.0	2017/11/21 10:41:22...	Admin	Admin
Datei ändern	9cb6f684-4ef5-45...	Papier_123_20171121_114112.0	2017/11/21 10:41:23...	Admin	Admin
Datei ändern	9cb6f684-4ef5-45...	Papier_123_20171121_114112.0	2017/11/21 10:41:25...	Admin	Admin
Messung durchführen	e197486f-17da-4...	Papier_123_20171121_134554.0	2017/11/21 12:45:58...	Admin	Admin
Datei ändern	e197486f-17da-4...	Papier_123_20171121_134554.0	2017/11/21 12:45:59...	Admin	Admin
Datei ändern	e197486f-17da-4...	Papier_123_20171121_134554.0	2017/11/21 12:46:01...	Admin	Admin
Abmelden	32a60100-1289-4...	Admin	2017/11/21 14:40:44...	Admin	Admin
Anmelden	32a60100-1289-4...	Admin	2017/11/22 08:30:50...	Admin	Admin
Abmelden	32a60100-1289-4...	Admin	2017/11/22 08:31:20...	Admin	Admin

Abbildung 4.14: Beispiel für die Ergebnisansicht im globalen Audit Trail

### 4.4.1 Datenblock HISTORY aus globalem Audit Trail laden

---

**i** Änderungen an einer gemessenen Spektrendatei werden im Datenblock HISTORY gespeichert, welcher der Spektrendatei hinzugefügt wird. Der Datenblock HISTORY kann für eine bestimmte Spektrendatei direkt aus dem globalen Audit Trail geladen werden.

---

1. In der Ergebnisansicht des globalen Audit Trail (Abbildung 4.14) die geänderte Spektrendatei suchen.
2. Den Namen der geänderten Spektrendatei in der Spalte *Objekt Schnappschuss* doppelklicken.
  - *Die Parameter des Datenblocks HISTORY werden in einer separaten Reportansicht angezeigt.*

### 4.5 Spektrum speichern


---

**i** Das gemessene Probenspektrum (Originaldatei) wird standardmäßig in dem Pfad gespeichert, der im Kapitel 4.1.4 definiert wurde. Wenn die Originaldatei bearbeitet wurde, sollte diese unter einem anderen Dateinamen gespeichert werden, damit ein Überschreiben der Originaldatei vermieden wird (Kapitel 4.5.2). Nach dem Überschreiben ist ein Wiederherstellen der Originaldatei nicht mehr möglich.


---



#### 4.5.1 Speichern mit Überschreiben der Originaldatei

1. Im Menü *Datei* die Funktion *Datei speichern* wählen oder in der Symbolleiste das Icon  klicken.
2. Im angezeigten Dialogfenster die Spektrendatei aus dem Dateimanager in das Auswahlfeld *Datei(en) zum Speichern* ziehen.
3. Die Schaltfläche *Speichern* klicken.
  - *Die Originaldatei wird überschrieben. Ein Wiederherstellen der Originaldatei ist nicht mehr möglich.*

#### 4.5.2 Speichern ohne Überschreiben der Originaldatei

1. Im Menü *Datei* die Funktion *Datei speichern unter* wählen oder in der Symbolleiste das Icon  klicken.
2. Im angezeigten Dialogfenster die Spektrendatei aus dem Dateimanager in das Auswahlfeld *Datei zum Speichern (OPUS Format)* ziehen (Abbildung 4.15).

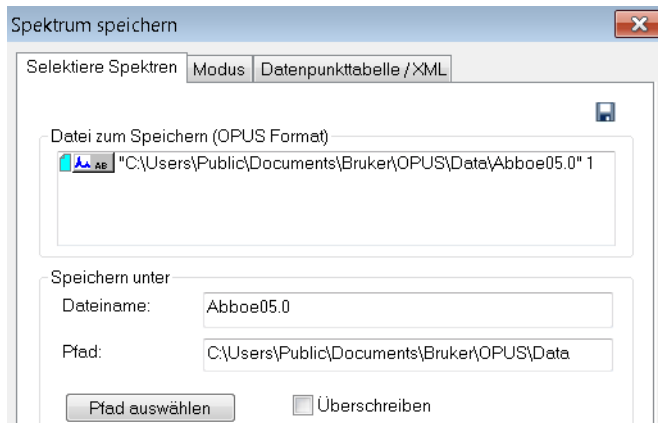



Abbildung 4.15: Datei speichern unter

3. Den Dateinamen festlegen.
  - *OPUS schlägt standardmäßig einen Dateinamen vor, der geändert werden kann.*
4. Den Pfad festlegen.
  - *Mithilfe der Schaltfläche 'Pfad auswählen' kann der Speicherort exakt ausgewählt werden.*
5. Das Kontrollkästchen *Überschreiben* aktivieren, wenn eine vorhandene Datei überschrieben werden soll.
  - *Wenn das Kontrollkästchen deaktiviert ist, erhält der Dateiname eine Inkrementierung. Sind die Spektren im Validierungsmodus gemessen worden, ist das Kontrollkästchen 'Überschreiben' nicht verfügbar.*
6. Einstellungen auf den Karteikarten *Modus* und *Datenpunkttable* vornehmen.
  - *Die Spektrendatei wird normalerweise im OPUS Format gespeichert. Mit den Karteikarten 'Modus' und 'Datenpunkttable' kann die Datei auch in anderen Formaten gespeichert werden, z. B. im JCAMP-DX Format, als X-Y-Datenpunkttable, im Pirouette (DAT) oder GALACTIC Format (SPC). Details zu den Karteikarten sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.*
7. Die Schaltfläche *Speichern* klicken.

### 4.6 Spektrendatei laden

---

1. Im Menü *Datei* die Funktion *Datei laden* wählen oder in der Symbolleiste das Icon  klicken.
2. Im angezeigten Dialogfenster die betreffende Spektrendatei markieren.
  - *Das Dialogfenster ist im Kapitel 4.6.1 beschrieben.*
3. Die Schaltfläche *Öffnen* klicken.
  - *Das Spektrum wird im Spektrenfenster angezeigt.*

### 4.6.1 Beschreibung des Dialogfensters *Spektrum laden*

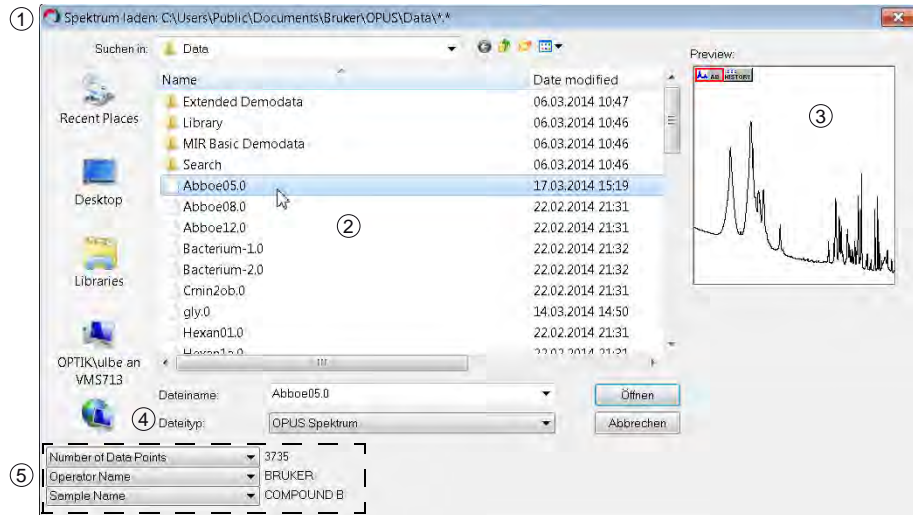


Abbildung 4.16: Dialogfenster *Spektrum laden*

	Element	Definition
1	Titelleiste	Die Titelleiste zeigt das Verzeichnis, in dem die Spektrendateien gespeichert sind.
2	Spektrendateien	Je nach eingestelltem Dateityp (4) werden alle verfügbaren Spektrendateien aus dem betreffenden Verzeichnis angezeigt.
3	Vorschaufenster	Das Vorschaufenster (Preview) zeigt das Spektrum ohne Achsen sowie die Datenblöcke der ausgewählten Spektrendatei.

Tabelle 4.5: Elemente des Dialogfensters *Spektrum laden*

	Element	Definition
4	Dateityp	Die Auswahlliste enthält unterschiedliche Dateitypen. In OPUS gemessene Spektren erhalten den Dateityp <i>OPUS Spektrum</i> .
5	Parameter	Standardmäßig werden 3 Parameter pro Spektrendatei angezeigt. Die Auswahllisten enthalten unterschiedliche Parametertypen. Wenn eine Spektrendatei ausgewählt ist, werden die Werte rechts vom Parametertyp angezeigt (Abbildung 4.16). Da nicht alle Parameter in einem Spektrum definiert sein müssen, werden u. U. bei einigen Parametern auch nach dem Auswählen der Spektrendatei keine Werte angezeigt.

Tabelle 4.5: Elemente des Dialogfensters *Spektrum laden*

## 4.7 Spektrendatei drucken

---

### 4.7.1 Über die Funktion *Schnelldruck*

---

☞ Im Menü *Drucken* die Funktion *Schnelldruck* wählen oder in der Symbolleiste


das Icon  klicken.

➤ *OPUS wählt in Abhängigkeit des aktuellen Fenstertyps eine geeignete Druckformatvorlage. Wenn Sie in einem Spektrenfenster arbeiten, wird das Spektrum in einem Rahmen gedruckt. Durchsuchen Sie gerade eine Spektrenbibliothek, werden die Ergebnisse der Suche sowie eine Hitliste der besten Treffer, die Struktur der Substanz und das entsprechende Spektrum gedruckt. Weitere Details zu bereits vordefinierten Formatvorlagen sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.*

### 4.7.2 Über die Funktion *Spektren drucken*

---

1. Im Menü *Drucken* die Funktion *Spektren drucken* wählen oder in der

Symbolleiste das Icon  klicken.

2. Im angezeigten Dialogfenster (Abbildung 4.17) die Grundeinstellungen für den Ausdruck individuell festlegen.

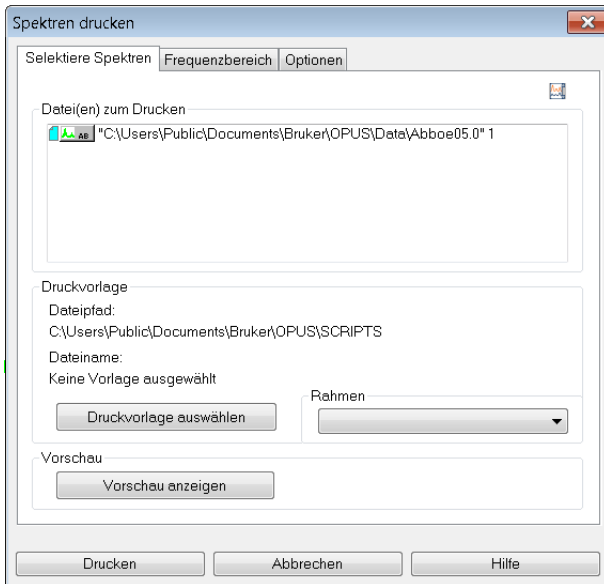


Abbildung 4.17: Dialogfenster *Spektren drucken*

3. Eine Druckvorlage auswählen.
4. Wenn erforderlich, auf der Karteikarte *Frequenzbereich* und *Optionen* weitere Einstellungen vornehmen.
  - *Weitere Details zu den einzelnen Karteikarten sind im OPUS Referenzhandbuch beschrieben.*
5. Die Schaltfläche *Drucken* klicken.

# 5 Analysereport

Probenparameter und Auswertergebnisse für eine oder mehrere Spektrendateien lassen sich in OPUS in einem Analysereport darstellen. Dabei muss die Spektrendatei den Datenblock für die entsprechende Auswertung enthalten. Datenblöcke einer Auswertung sind z. B. INTEG, PEAK, QUANT, IDENT, SEARCH, CT.

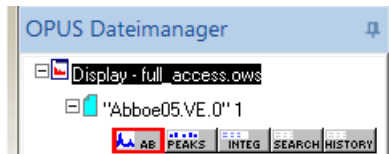



Abbildung 5.18: Spektrendatei mit Datenblöcken verschiedener Auswertungen

## 5.1 Report erzeugen

1. Im Menü *Drucken* die Funktion *Analysereport erzeugen* wählen oder aus der Symbolleiste das Icon  klicken.
2. Im angezeigten Dialogfenster die Schaltfläche *Laden* klicken.
3. Die betreffende Spektrendatei markieren und die Schaltfläche *Öffnen* klicken.
  - Die Spektrendatei wird jetzt im Auswahlfeld 'Datei(en) für die Reporterzeugung' (Abbildung 5.19) angezeigt.

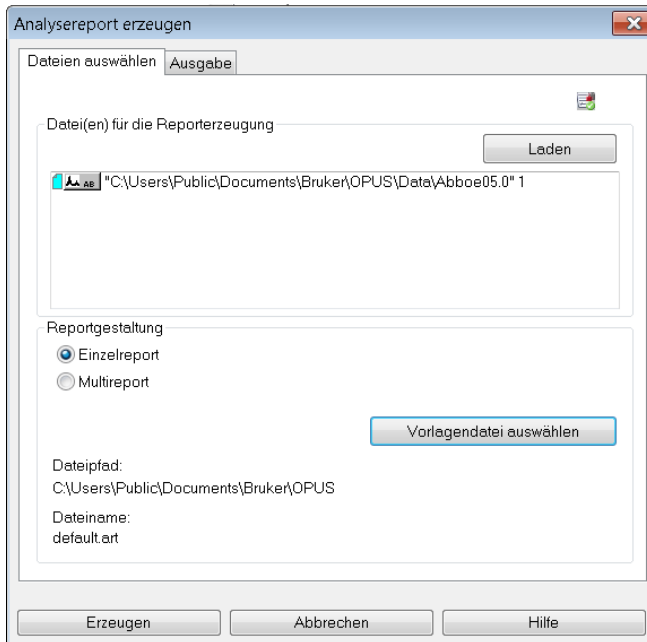


Abbildung 5.19: Analysereport erzeugen

4. Die Reportgestaltung festlegen.
  - *Einzelreport*<sup>1</sup>: ein Report für jede einzelne Spektrendatei
  - *Multireport*<sup>2</sup>: ein Report für mehrere Spektrendateien
5. Die Vorlagendatei auswählen.
  - *Standardmäßig sind in OPUS mehrere Vorlagendateien verfügbar. Vorlagendateien haben die Endung \*.art und sind im Verzeichnis C:\Benutzer\Öffentlich\Öffentliche Dokumente\Bruker\OPUS\_<Version> gespeichert.*

- 
1. Beim Erstellen eines Einzelreports können auch mehrere Spektrendateien gleichzeitig geladen werden. Für jede Spektrendatei wird ein separater Report erstellt.
  2. Beim Multireport werden alle Spektrendateien mit den dazugehörigen Daten in einem Report aufgelistet.



6. Die Karteikarte *Ausgabe* klicken und festlegen, wie der Report gedruckt werden soll.
  - *Wenn der Report als PDF oder csv-Datei gedruckt werden soll, muss der Dateiname des Reports und der Speicherpfad festgelegt werden.*
7. Die Schaltfläche *Erzeugen* klicken.



# Index

---

## A

Analysereport .....	43
Anmelden .....	13
Audit Trail .....	18, 33
Datenblock HISTORY laden .....	36

## B

Benutzereintrag .....	17
Benutzeroberfläche .....	14

## D

Datenblock HISTORY .....	33, 34
--------------------------	--------

## E

Einzelreport .....	44
Experimentdatei .....	25

## F

Fadenkreuz .....	15
------------------	----

## G

Grundlinienkorrektur .....	30, 31
----------------------------	--------

## H

Hintergrundspektrum .....	27, 29
---------------------------	--------

## I

Installieren .....	11
Instrumentenstatus .....	16
Interferogrammpeak kalibrieren .....	24

## M

Menüzeile .....	15
Messparameter .....	21
Multireport .....	44

## O

Online-Hilfe .....	16
OPUS Ansicht .....	16

## P

Probenmessung .....	28
Probenspektrum .....	27, 29

## R

Resultatspektrum .....	26, 28
------------------------	--------

## S

Service Hotline .....	6
Spektralfenster .....	15, 28
Spektrum	
Drucken .....	41
Laden .....	38
Speichern .....	36
Statusleiste .....	16

## T

Titelleiste .....	15
-------------------	----

## U

Übersichtsfenster .....	15
-------------------------	----

## V

Validierungsmodus .....	12, 13
Vorschaufenster .....	39

## Z

Zugangskontrolle .....	17
------------------------	----

