

Origin in der chemischen Analytik

Ausgangssituation

Die elektronische Verarbeitung experimenteller Daten, z. B. aus der HPLC, MS, NMR-Spektroskopie, wird häufig erschwert, da weder der mit dem Labormessgerät verbundene PC-Arbeitsplatz noch die Auswertesoftware des Geräts den weiteren Aufgabenstellungen, die von der Analyse bis hin zur Erstellung eines druckreifen Reports gewachsen ist.

Fragestellung

Neben dem Einlesen umfangreicher Datenmengen aus verschiedenen Quellen ist die Auswertung und die publikationsreife Darstellung gefordert.

Lösung

Mit Hilfe des Origin Importassistenten lassen sich sowohl ASCII als auch Binärdaten problemlos zur Auswertung einlesen. Die Anwendung ist über eine eingängige Benutzerschnittstelle auch von Einsteigern leicht zu bedienen und bietet neben fortgeschrittenen mathematischen Funktionen eine umfangreiche Bibliothek an Diagrammtypen und Formatierungsoptionen.

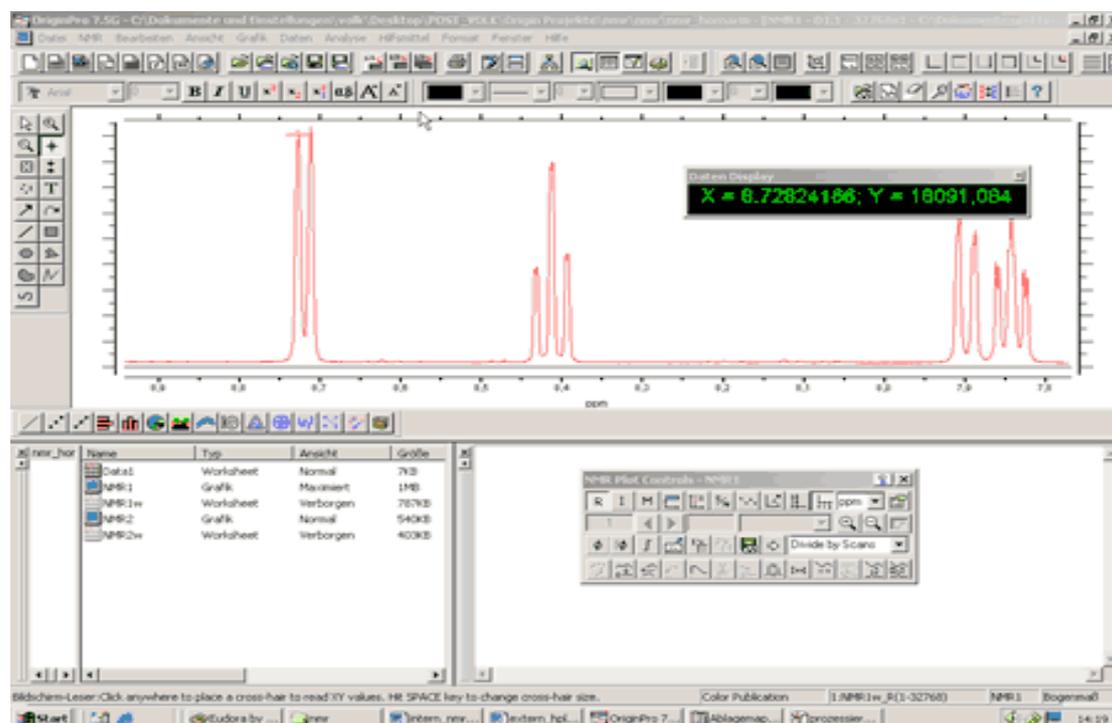


Abb. Visualisierung der Daten

Verfasser:
ADDITIVE GmbH
Max-Planck-Straße 22b
61381 Friedrichsdorf



ADDITIVE Whitepaper

Anforderungen

Viele Naturwissenschaftler stehen vor dem Problem, dass sie für Veröffentlichungen, Vorträge und Berichte Abbildungen erstellen müssen. Besonders schwierig gestaltet sich die elektronische Verarbeitung experimenteller Daten, da die Software des Messgerätes (z.B. HPLC, MS, NMR, ...) zwar die Auswertung gestattet, aber nicht für die Erstellung von Abbildungen geeignet ist. Ein weiteres Problem liegt darin, dass der Rechner des Messgerätes mit der Datenaufnahme beschäftigt ist und nicht als Arbeitsplatz zur Verfügung steht. Origin kann, aufgrund seiner Funktionalität, einfachen Bedienung und Leistungsfähigkeit, fast alle anfallenden Daten verarbeiten, auswerten und

Importassistenten, Diagramme, Datenanalyse, Statistik, Beschriftungen und maßgeschneiderte Anwendungen

Mit dem Importassistent erlangt der Anwender in Origin intuitiven Zugriff auf ASCII, Binär und anwenderspezifische Daten. Der Importassistent wertet den Dateikopf aus und speichert Werte zur späteren Verwendung. Mit der Datenvorschau und -reduktion werden unbekannte Dateiformate transparent. Mit dem Speichern dieser Einstellungen im Importassistent geschieht die Erzeugung individueller Filter, die beim Datenimport per Drag&Drop automatisch auf die Dateien angewandt werden. Mit dem NLSF (Nonlinear Least Squares Fit) Assistent kann auch der ungeübte Anwender schnelle und einfache nichtlineare Kurvenanpassungen durchführen. Der Assistent initialisiert automatisch alle Parameter der Modellfunktion. Mit nur einem Mausklick wird die Analyse auf einen Datensatz angewandt. Ebenso intuitiv bedienbar sind Origins Funktionen zur FFT, zum Filtern und Glätten, für die Basislinien- und Impulsanalyse und verschiedene vordefinierte Fit-Funktionen. Für Anwender statistischer Analysen stehen neben den Funktionen der beschreibenden Statistik der t-Test und die erweiterte Ein-Wege ANOVA bereit, die Zwei-Wege ANOVA und Lebensdaueranalysen (Kaplan-Meier Schätzer und Cox Proportional Hazards

publikationsreife Abbildungen erstellen. Die graphische Aufbereitung großer Datenmengen ist eine der großen Stärken von Origin. Die Daten können einfach über Importassistenten eingelesen werden. Zahlreiche Diagrammtypen und mathematische Funktionen (Integration, Fehlerbalken, Basislinienkorrektur, ...) übernehmen die Darstellung und Auswertung der Daten. Die Ergebnisse lassen sich anschließend in verschiedenen Formaten z.B. als pdf-Format exportieren. Diese Arbeitsschritte können manuell durchgeführt werden, oder über Template in Origin automatisiert werden, sodass aus den Rohdaten fertige Berichte auf Knopfdruck erstellt werden.

Model) runden Origins Statistik-Funktionalität ab.

Mit Origins Zeichenwerkzeugen reduziert sich der Aufwand bei einer grafischen Nachbearbeitung der Diagramme. Texte, Polygone, Freiformen, Kreise und Linien bzw. Linienzüge lassen sich in jedes Origin Diagramm einfügen und platzieren sowie in Größe, Drehwinkel oder Skalierung verändern.

In OriginPro finden Sie eine Entwicklungsumgebung für eigene Anwendungen auf der Basis von Origin. Anwender und Entwickler können eigene Symbolleisten, Dialoge und Assistenten ergänzen und beliebige zusätzliche Analysefunktionen, Importfilter etc. hinzufügen. Mit der integrierten Programmiersprache Origin C werden der Import und die Manipulation auch von großen Dateien gesteuert. Zur anschließenden Analyse der Daten stehen die bewährten numerischen NAG Routinen zur Verfügung. Benutzerfreundlich und komfortabel werden individuelle Anwendungen durch graphische Benutzerschnittstellen mit Standard Windows Steuerelementen – bis hin zu Assistenten mit Origin Vorschaufenstern. Diese unterstützen Anwender in der Erledigung von Routinearbeiten.



ADDITIVE Whitepaper

Chemische Analytik im Detail

Stellvertretend für die Vielzahl an instrumentellen Analysemethoden soll hier am Beispiel der HPLC und

der NMR-Spektroskopie ausführlicher die Einsatzmöglichkeiten von Origin in der chemischen Analytik aufgezeigt werden.

HPLC

Die gängigen chromatographischen Methoden, die in der chemischen und pharmazeutischen Industrie zum Einsatz kommen, sind Gas- und Hochleistungs-Flüssigkeits-Chromatographie. Den Anwender interessieren drei Probleme: Was ist in der Probe enthalten? Wie viel ist in der Probe enthalten? Wie können

die Daten anschaulich dargestellt werden? Viele Abbildungen, die Messgeräte generieren, reichen für die tägliche Arbeit im Labor aus und enthalten alle relevanten Informationen. Die Qualität der Darstellung reicht aber nicht für Präsentationen, Veröffentlichungen und Berichte aus.

typische Zusammenstellung chromatographischer Daten in einem Word-Dokument

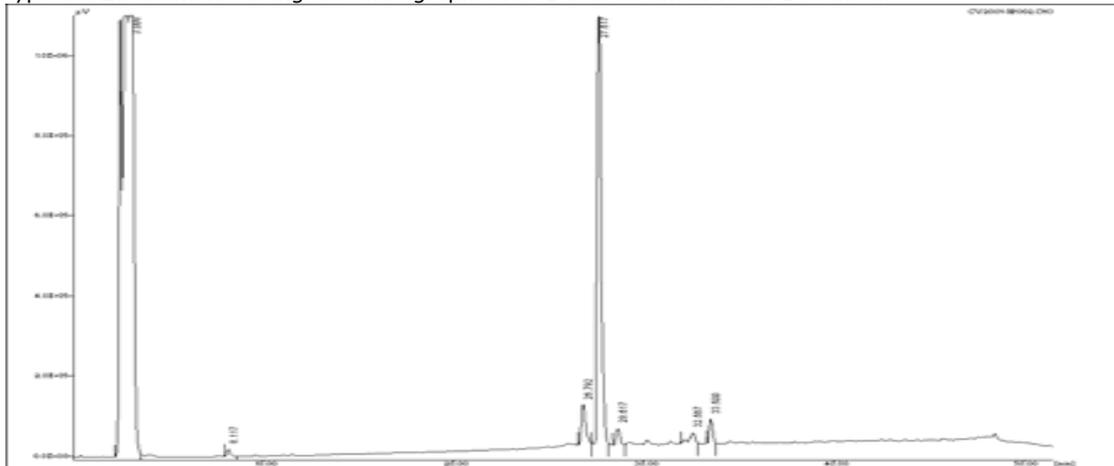


Abb. Chromatogramm

relevante Daten

File name : CV2001-RP002.CH3

Info :

CV 2001 (2) haliclona viscosa (Schleimschwamm)

Kromasil RP18 4,6x250mm 5µm 1ml/min (okt 01)

Gr:ja-tern 0-80%B/A 40min, 45min 100%B, 50min 50%B/C, 55min 100%C bis 65min

A:H2O+0,1%TFA, B:ACN+0,1%TFA, C:MeOH

Sedex 75 40°C gain10

Vial # = 22 Rack # = 1

Injection Date :29-Jan-2002 16:42:46

Curr. Date : 19-Jun-2003 17:18:24

User : EL

Group : SCHWÄMME

Control Method :JA-TERN

#	RT	Height[µV]	Area[µV,Sec]	%Area
1	3,00	1098985	45282150,46	74,16
2	8,11	17851	156267,79	0,26
3	26,79	98357	1328546,23	2,18
4	27,61	1068758	12759132,25	20,90
5	28,61	39984	432983,90	0,71
6	32,56	26428	497983,75	0,82
7	33,50	59183	602417,55	0,99

Total Area of Peak = 61059481.93 [µV.Sec]



ADDITIVE Whitepaper

Da experimentelle Daten oft im ASCII-Format gespeichert werden, oder das Messgerät die Ergebnisse als ASCII-Datei exportieren kann, bietet sich Origin zur weiteren Aufbereitung der Daten an. Der Anwender erhält von der HPLC-Anlage bzw. von der HPLC-Service-Einrichtung die Dateien der Chromatogramme. Diese

bestehen aus der Zusammenstellung des Chromatogramms und relevanter Daten (wird von der HPLC-Software generiert) und einer ASCII-Datei (wird von der HPLC-Software generiert) mit den gemessenen Rohdaten. Die ASCII-Datei enthält nur - durch Komma getrennte - Zeitdaten vom Detektorsignal.

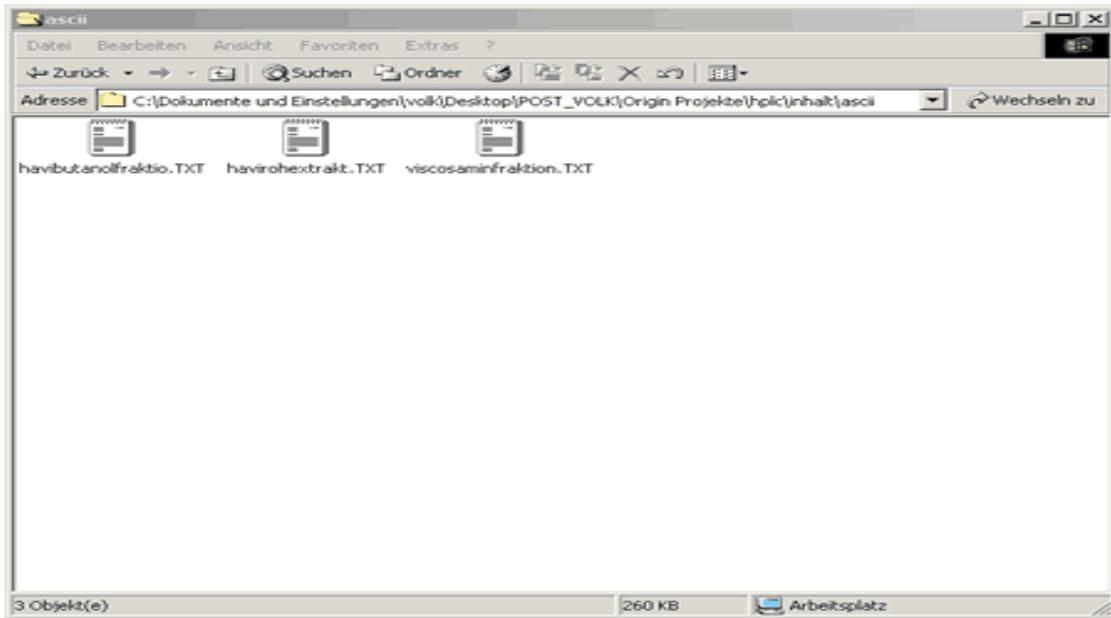


Abb. Einfügen der Daten durch den Origin ASCII-Importassistenten

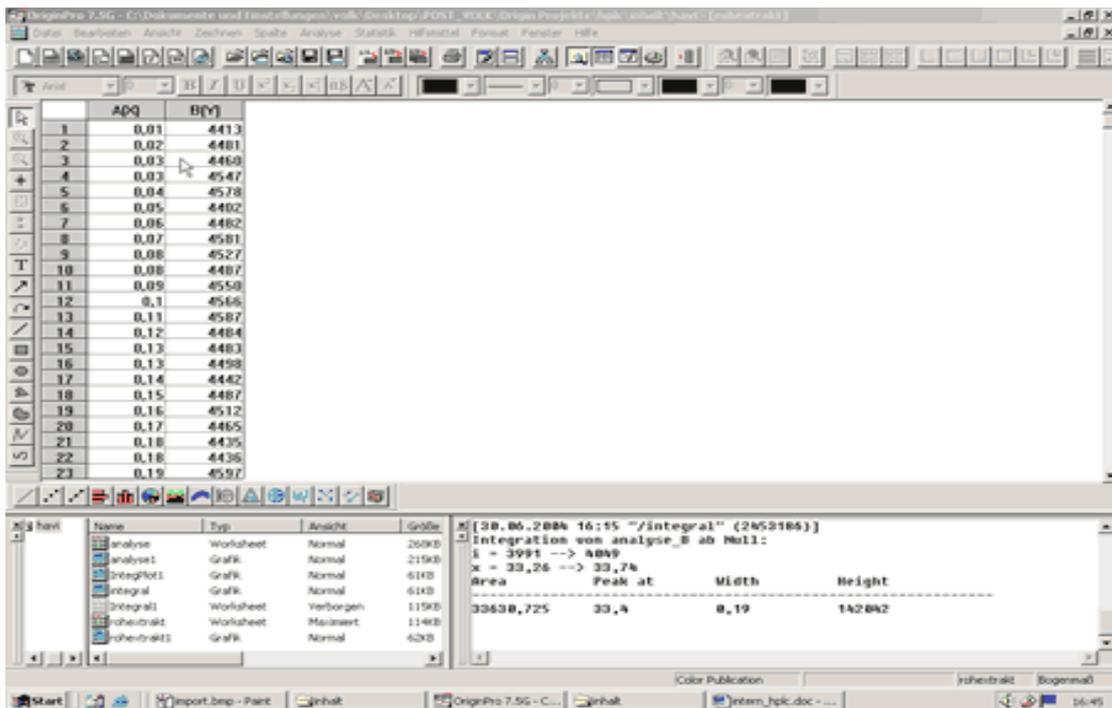


Abb. Erstellen eines Liniendiagramms



ADDITIVE Whitepaper

Das Chromatogramm wird durch die in Origin implementierte Diagrammart „Liniendiagramm“ erstellt. Nachträglich wird die Beschriftung der Achsen z.B.

Retentionszeit und Intensität, Farben, Pfeilmarkierungen und Legenden durchgeführt.

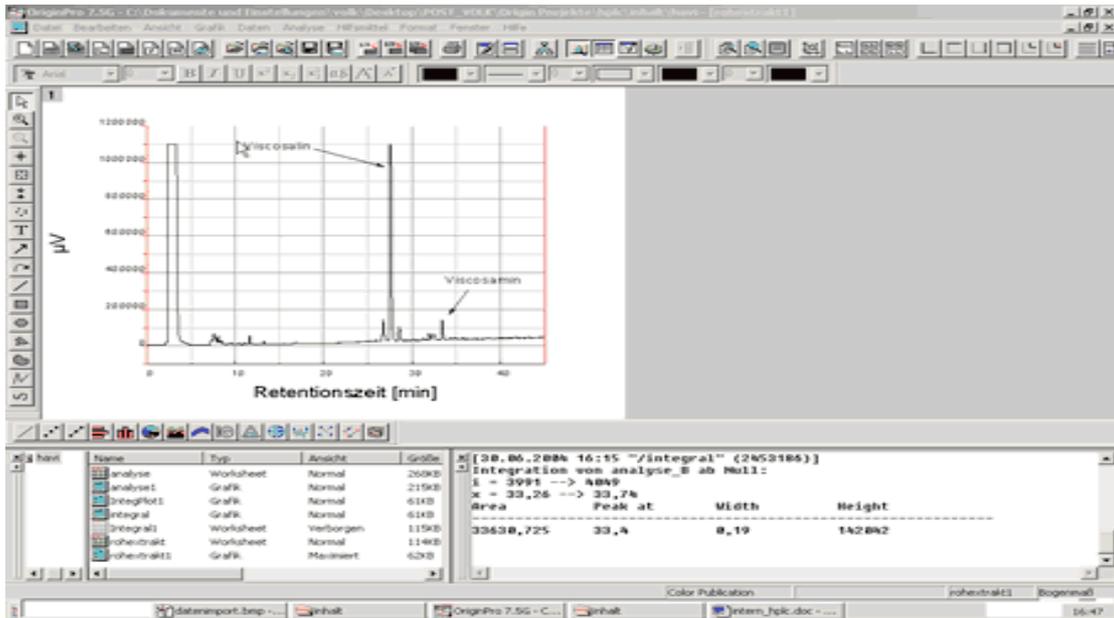


Abb. Bestimmung der Retentionszeit

Die Retentionszeit lässt sich über die Option Bildschirmkoordinaten bestimmen und auslesen. Das Integral des Signals ist in wenigen Schritten bestimmbar. Die Intervallgrenzen werden mit der Option

Datenbereich gesetzt. Über das Menü/Analyse/Analysis/Integrieren bestimmt Origin automatisch das Integral (Area) sowie die genaue Retentionszeit (Peak at).

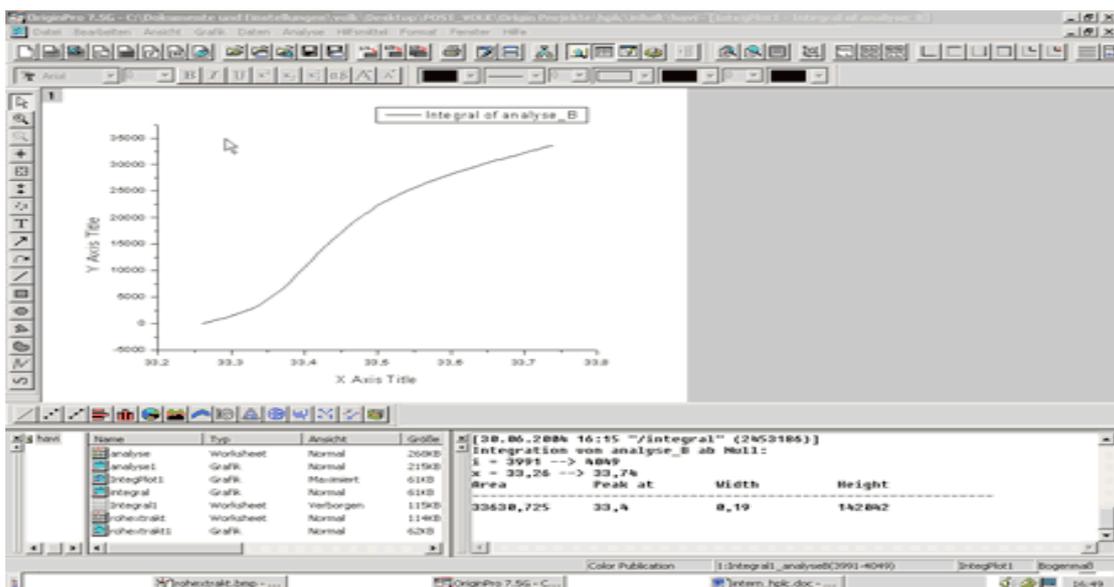


Abb. Vergleich mehrerer Chromatogramme



ADDITIVE Whitepaper

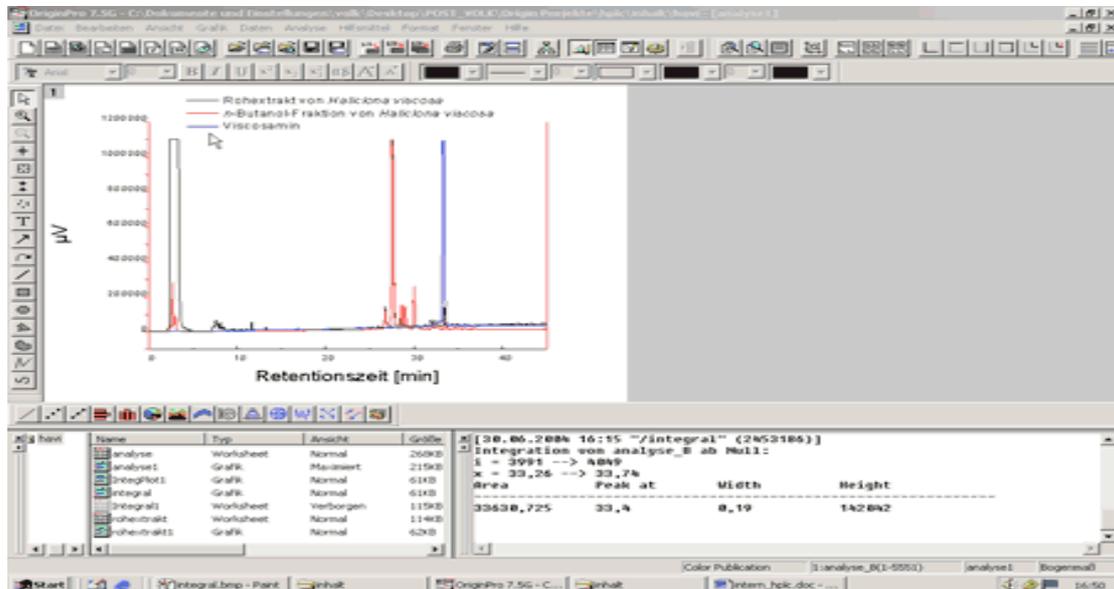
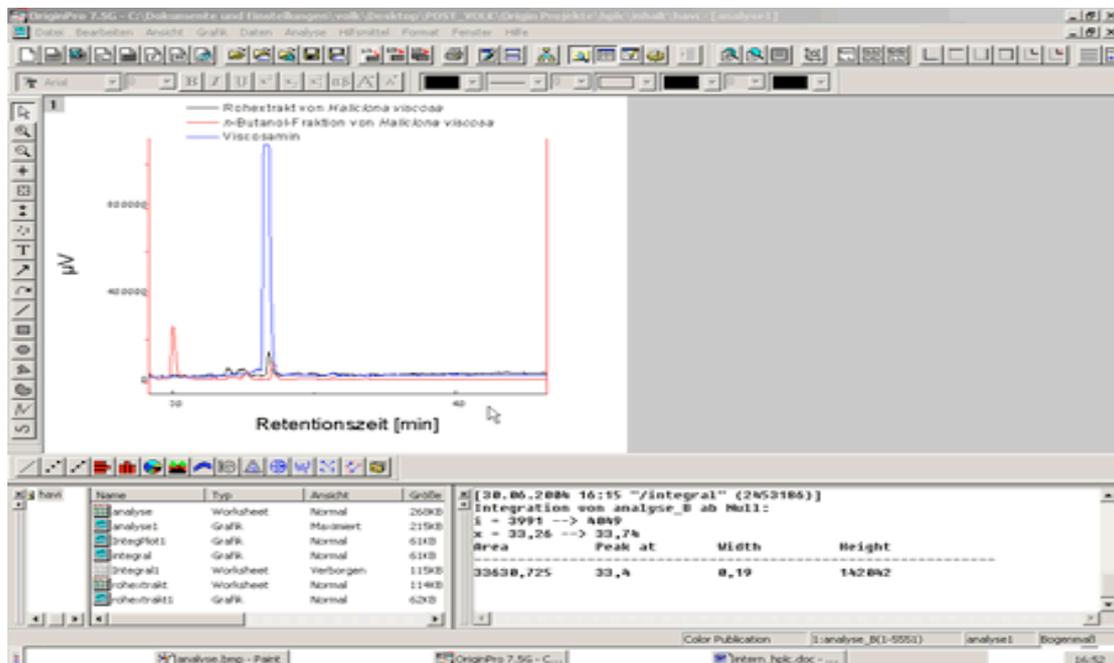


Abb. Zusätzliche Layer im Diagramm für den direkten grafischen Vergleich

Ein weiterer Vorteil von Origin ist der einfache Vergleich mehrerer Chromatogramme.
Die ASCII-Daten werden importiert und das zu vergleichende Chromatogramm

wird als zusätzliche Layer im Graphen eingefügt.
Die erfolgten chromatographischen Aufreinigungen können damit sehr gut verfolgt und dargestellt werden





ADDITIVE Whitepaper

Neben den Auswertemöglichkeiten bietet Origin sehr viele graphische Funktionen zum Aufbereiten der Daten an. Chromatographische Daten aus Gas-, Niederdruck- und Hochleistungs-Flüssigkeits-Chromatographie lassen sich mit Origin einfach verarbeiten und auswerten. Zusätzlich können die

erstellten Diagramme als Bild-Datei exportiert werden und so einfach in andere Anwendungen z.B. Microsoft Office eingefügt werden. Abbildungen für Veröffentlichungen, Präsentationen und Berichte lassen sich in entsprechender Qualität und von jedem leicht erstellen.

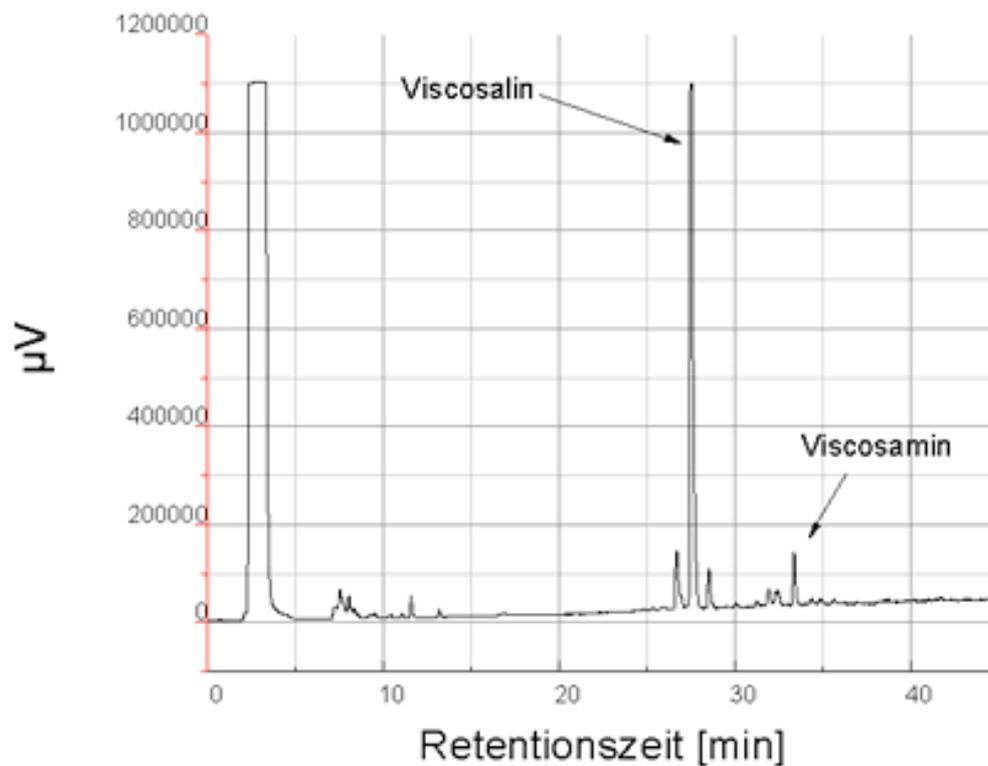
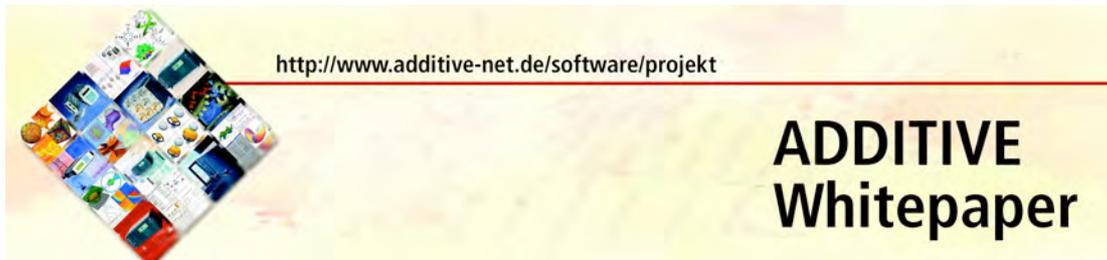


Abb. Weitere grafische Bearbeitung der Daten



NMR-Spektroskopie

Aber nicht nur „einfache“ Diagramme lassen sich mit Origin darstellen, auch komplexe NMR-Experimente können publikationsreif visualisiert werden. NMR (nuclear magnetic resonance) bezeichnet eine spektroskopische Methode, die in der Chemie und benachbarten Wissenschaften eine wichtige Rolle einnimmt. Aus den NMR-Spektren lassen sich wichtige Informationen über Moleküle entnehmen. Hier interessieren den Anwender spektrale Daten z.B. Feinstruktur, Kopplungskonstanten, Integrale und chemische Verschiebung, sowie die entsprechende Qualität der abgebildeten Spektren. Die erhaltenen Ausdrücke der Service-Abteilungen

genügen zwar für die normale Arbeit im Labor, aber Abbildungen in hoher Qualität für Berichte und Präsentationen sind nicht einfach verfügbar. Hier schafft Origin schnell Abhilfe. Ein weiteres Problem liegt darin, dass der Rechner des Messgerätes mit der Datenaufnahme beschäftigt ist und nicht als Arbeitsplatz zur Verfügung steht. Über die Internetseiten des Herstellers findet man schnell die NMR-Tools für Origin. Download und Installation lassen sich leicht durchführen. Der Anwender braucht nur in elektronischer Form den gemessenen Datensatz der Probe, der von jedem Spektrometer generiert wird.

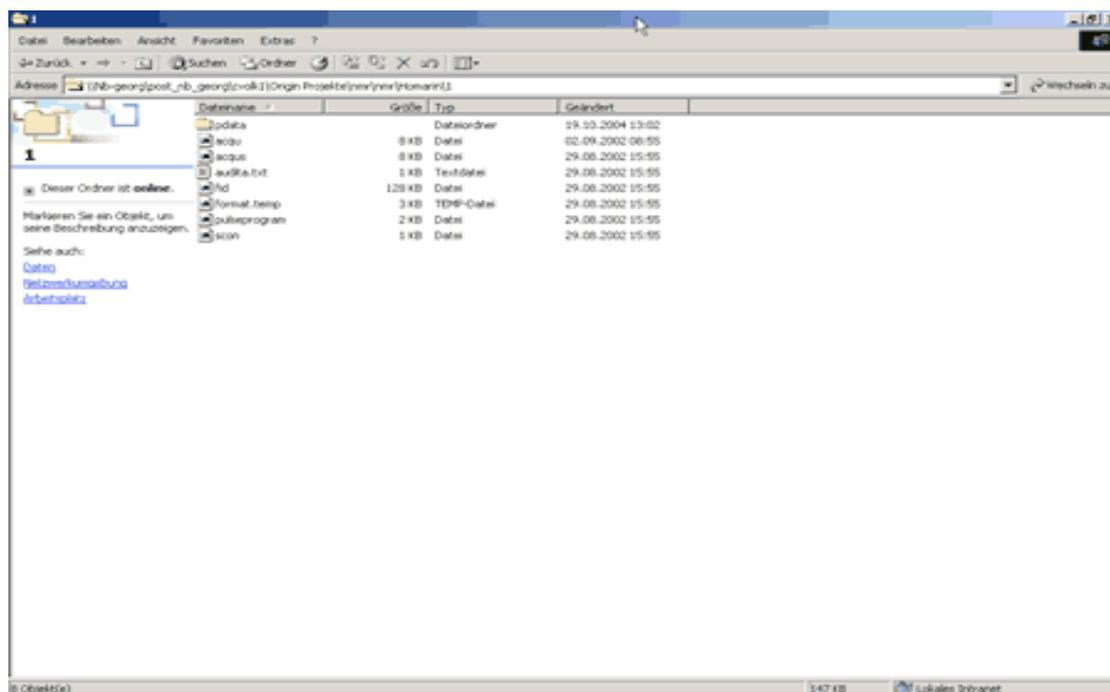


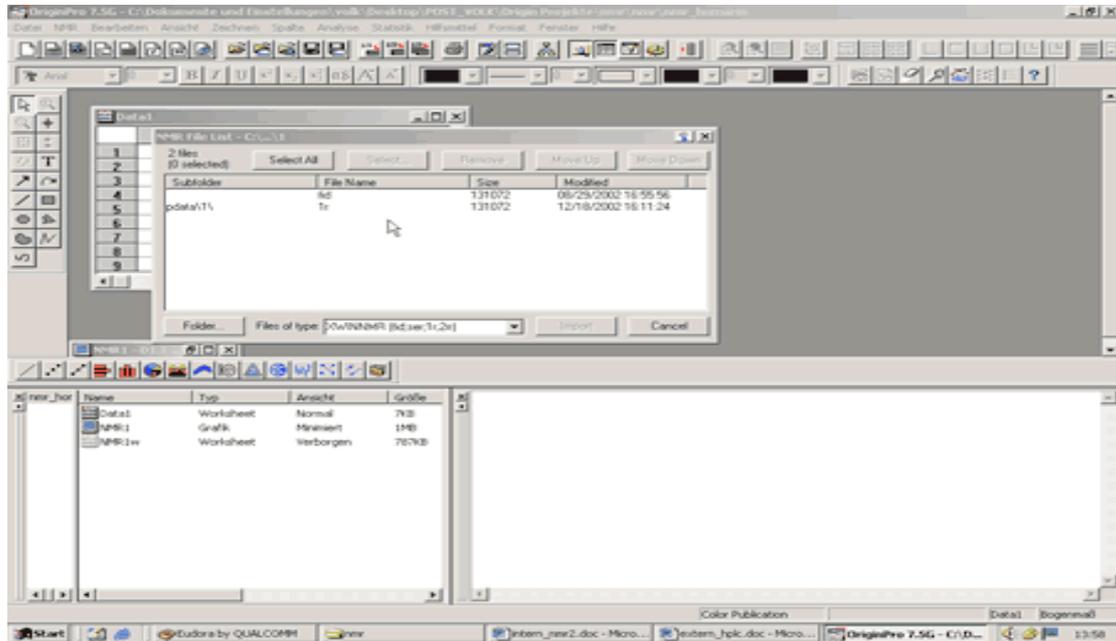
Abb. Import einer NMR-Spektroskopie-Analyse



ADDITIVE Whitepaper

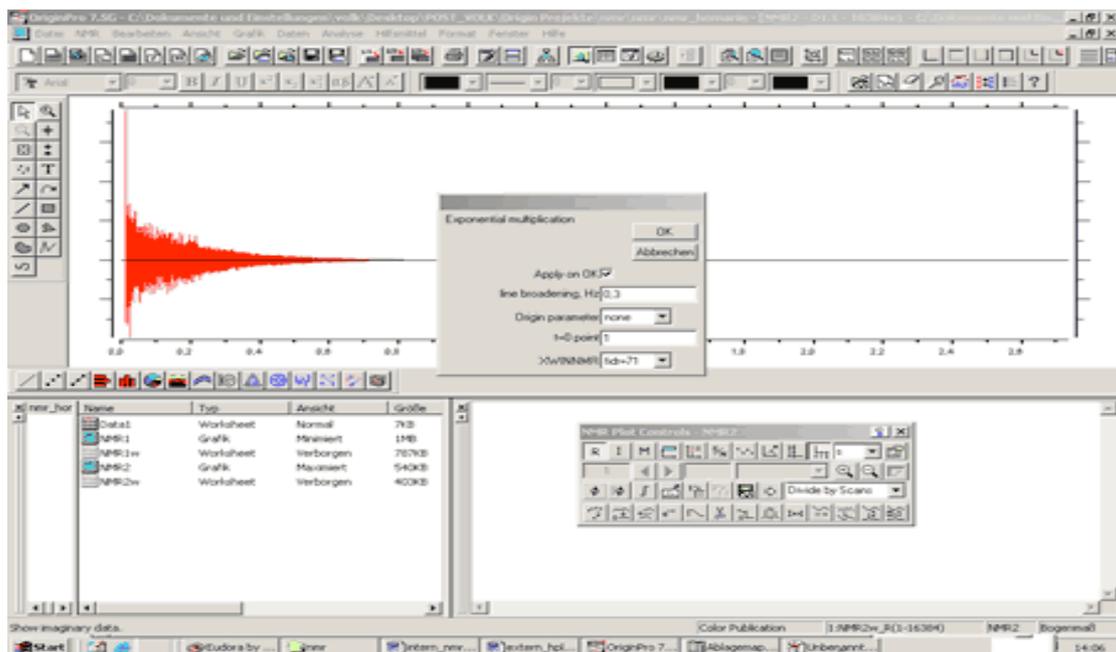
Der Anwender importiert die Daten des gemessenen NMR-Experimentes

(fid.datei) über die Import-Funktion der Origin NMR-Tools.



Der FID wird verschiedenen Prozessierungen unterworfen z.B.

Fourier-Transformation, Exponential-Multiplikation usw.



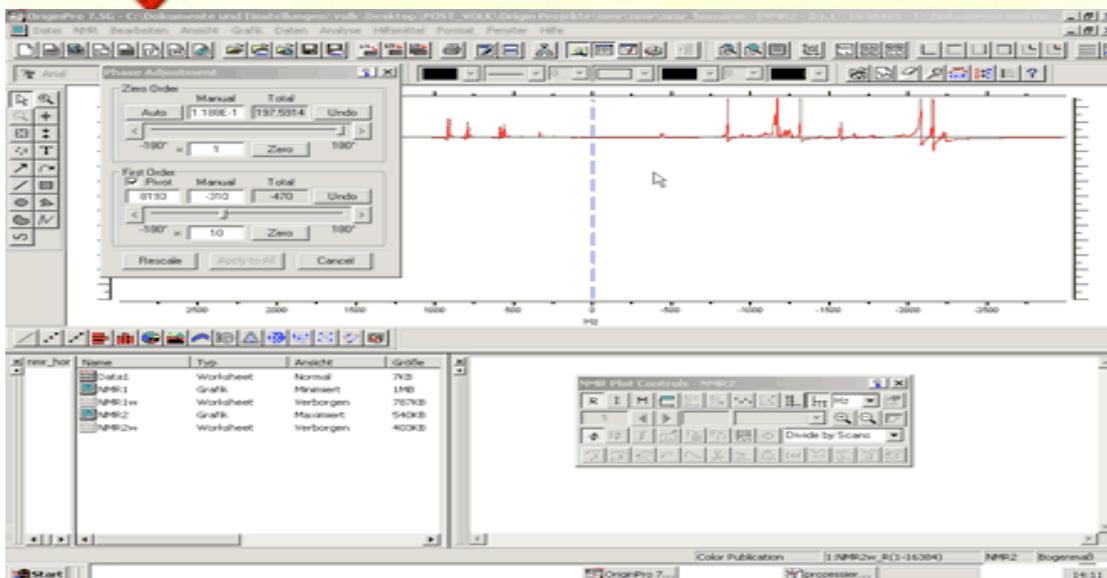


Abb. Datenanalyse

Nun erfolgt die Phasen-Korrektur und das Spektrum wird in der üblichen Art und Weise dargestellt. Nachdem die Prozessierung abgeschlossen ist, kann der Anwender, über die gewohnten Funktionen in Origin,

die im Spektrum enthaltenen Informationen (Feinstruktur der Signale, chemische Verschiebung, Integrale und Kopplungskonstanten) extrahieren..

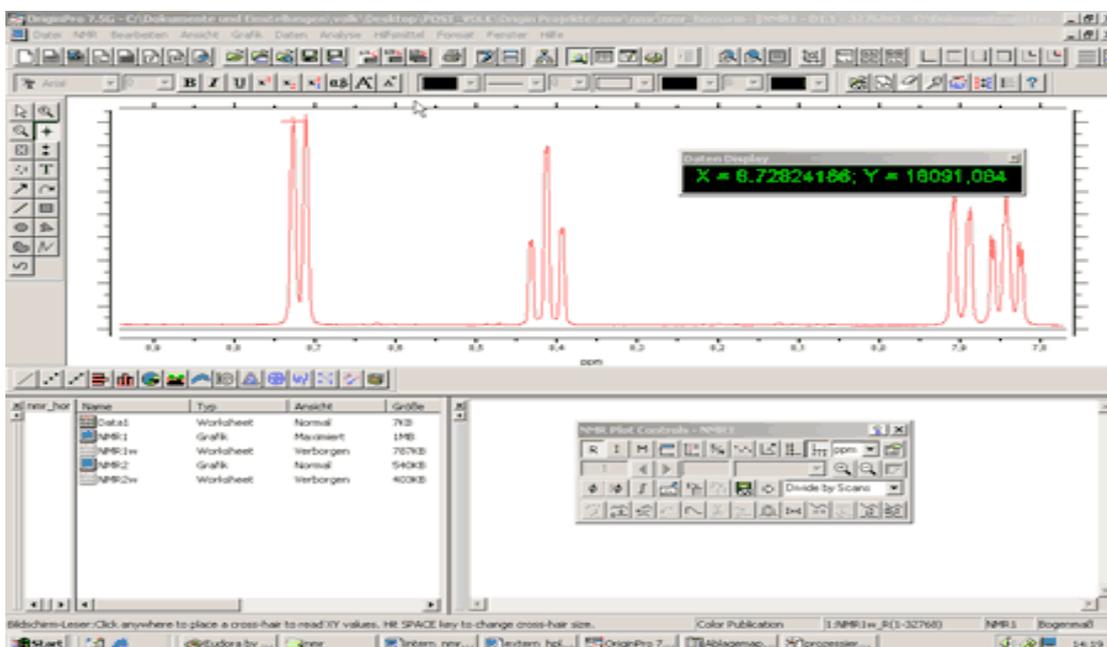
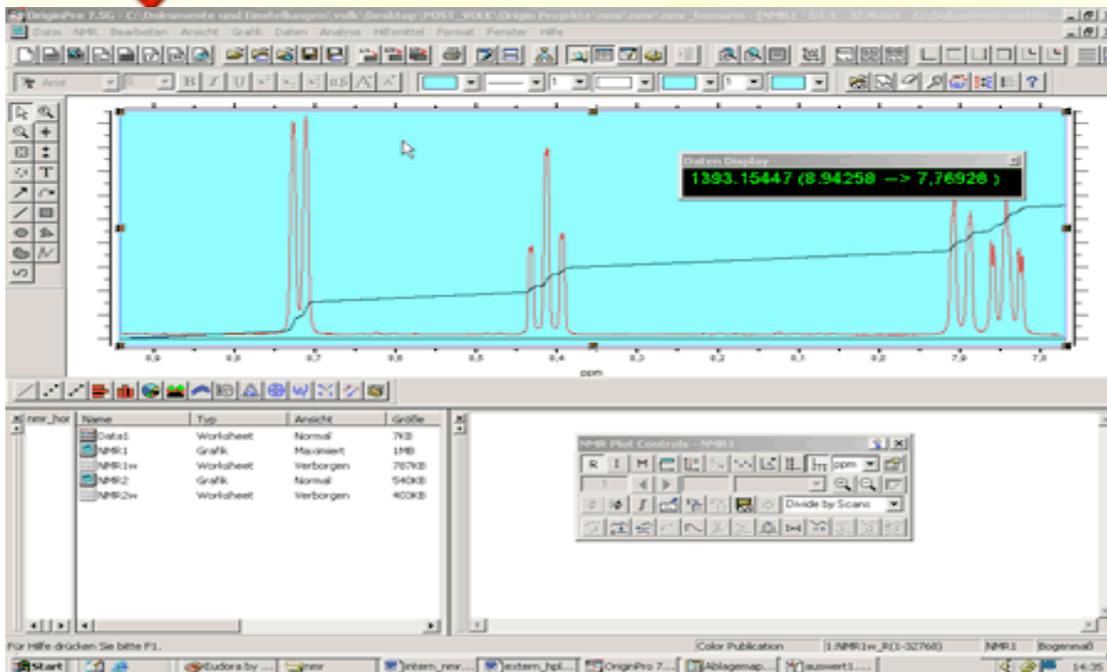
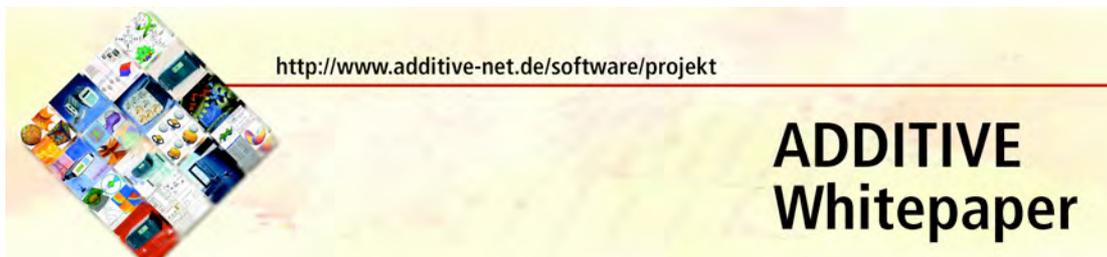


Abb. Visualisierung der Daten



Neben den Auswertemöglichkeiten bietet Origin sehr viele graphische Funktionen zum Aufbereiten der Daten an. Zusätzlich können die erstellten Diagramme als Bild-Datei exportiert werden und so einfach in andere Anwendungen z.B.

Microsoft Office eingefügt werden. Abbildungen für Veröffentlichungen, Präsentationen und Berichte lassen sich in entsprechender Qualität und von jedem leicht erstellen.

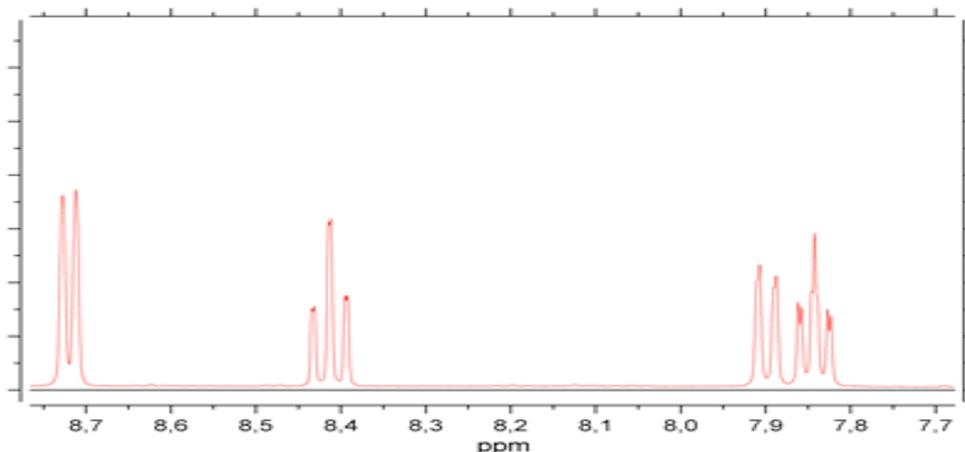


Abb. Grafikexport für andere Anwendungen, z. B. Desktop-Publishing

Diese Anwendungsbeispiele zeigen, dass Origin aufgrund seiner Funktionalität, einfachen Bedienung und Leistungsfähigkeit, fast alle anfallenden

Daten aus der chemischen Analytik verarbeiten, auswerten und publikationsreife Abbildungen erstellen kann.



ADDITIVE Whitepaper

IR- und UV/VIS-Spektroskopie

Andere spektroskopische Daten lassen sich genauso einfach verarbeiten und auswerten. Ähnlich wie bei den NMR-

Spektren gezeigt, können UV/VIS- bzw. IR-Daten bearbeitet werden. Origin übernimmt Import, Darstellung, Auswertung und Export der Ergebnisse.

IR-Spektroskopie

Figure 15. IR Spectra of H-SSZ-35 (#41783)

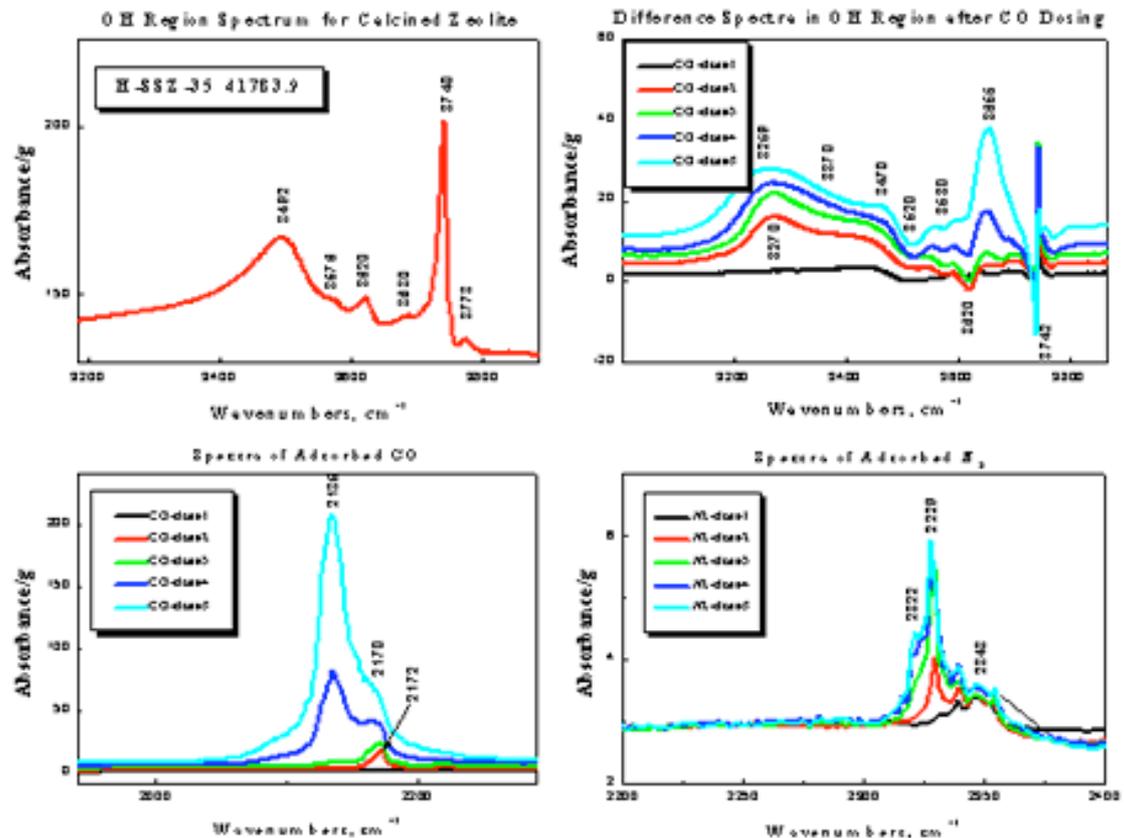


Abb. Visualisierung von IR- oder UV/VIS-Spektrogrammen



ADDITIVE Whitepaper

MS-Spektrometrie

Daten aus der Massenspektrometrie können ebenfalls schnell und einfach bearbeitet werden.

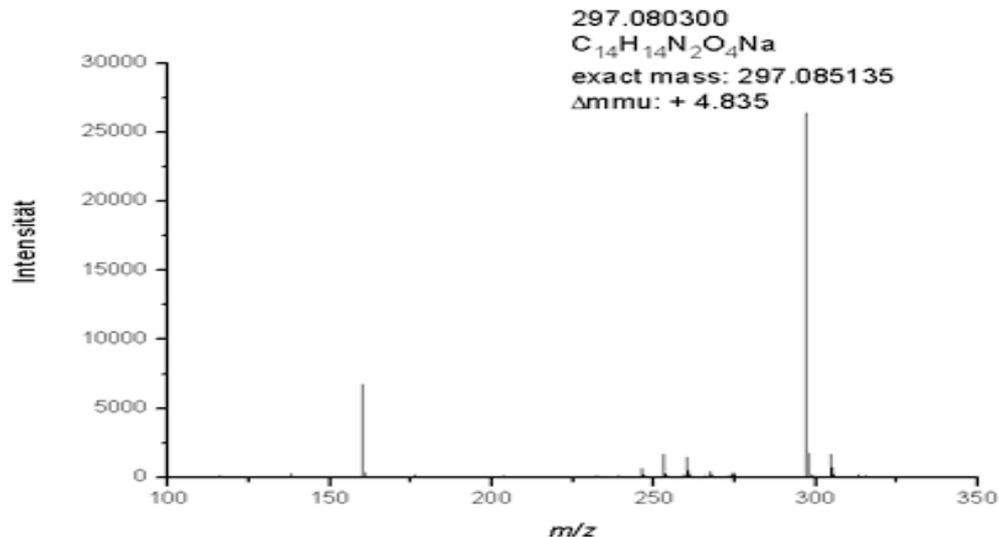


Abb. Darstellung eines MS-Spektrogramms

Pulverdiffraktogramme

Origin kann, aufgrund seiner Funktionalität, einfachen Bedienung und

Leistungsfähigkeit auch bei Röntgen-Experimenten eingesetzt werden.

Automatisierte Auswertung mit Origin in der chemischen Analytik

Die in diesem Dokument gezeigten Beispiele geben einen Einblick in die Leistungsfähigkeit von Origin auf dem Gebiet der Auswertung und Darstellung chemischer Analysedaten. Mit Hilfe der ORIGIN eigenen Programmiersprache C ist eine kundenspezifische und automatisierte Anpassung der Datenauswertung „auf Knopfdruck“ möglich. Unsere hauseigenen Programmierer und Chemiker können

ORIGIN nach Ihren Vorgaben auf spezielle Anwendungen zuschneiden.

Wenn Sie Fragen haben oder über den Einsatz von ORIGIN in der chemischen Analytik nachdenken, dann nehmen Sie doch einfach unverbindlich Kontakt mit uns auf.

„Wenn Sie es sich vorstellen können, kann Origin es zeichnen.“ Analytical Chemistry, Review

Kontakt

Gerne beraten wir Sie zu Ihrer individuellen Projektlösung, rufen Sie uns an unter Tel.: 06172-5905-30 oder kontaktieren Sie uns per E-Mail unter solutions@additive-net.de
Weitere Informationen zu Origin: <http://www.additive-origin.de/>
E-Mail: origin@additive-net.de