

Postup při měření spekter na UV/VIS spektrometru UNICAM 8625 s PC

1. Zapneme spektrometr síťovým vypínačem (pravý bok) a PC (pravý bok), *Pozn.: spektrometr by měl být před zahájením měření nejméně 30 minut zapnutý pro stabilizaci světelného toku.*
 2. Na stavové řádce Norton Commanderu napíšeme příkaz **SPEKTRA** (proběhne inicializace potřebných programů), na monitoru se objeví základní menu ovládání spektrometru.
 3. Potvrdíme volbu **SCAN**.
 4. Funkční klávesou **F8** inicializujeme propojení spektrometru s PC.
 5. Potvrdíme volbu **SCAN**.
 6. Vyplníme tabulku „**SCAN**“ podle následujícího schématu
- | | |
|---------------------------------------|---|
| • SCAN TYPE | pomocí šipky → a Enter zvolíme BACKGROUND při měření referenčního vzorku, např. destilovaná voda, nebo SAMPLE při měření vzorku |
| • START | z klávesnice zadáme počáteční vlnovou délku (pro úlohu 6a = 350 nm) |
| • STOP | z klávesnice zadáme konečnou vlnovou délku (pro úlohu 6a = 720 nm) |
| • DATA INTERVAL | šipkou → získáme nabídku 1,2,5,10 nm, (pro úlohu 6a = 5 nm) |
| • HIGH-LOW (rozměr grafu) | obvykle 1,5 Abs – 0 Abs |
| • OVERLAY, PEAK LIST, DATA, PRINT OUT | nedostupné -OFF |
| • OPERATOR | nepovinné, lze vyplnit z klávesnice bez diakritiky |
7. Do držáku spektrometru vložíme kyvetu s referenčním vzorkem (obvykle destilovaná voda), (v tabulce SCAN musí být předvoleno „SAMPLE BACKGROUND“.
 8. Po ukončení vyplňování tabulky SCAN pomocí **F8** odstartujeme dialog pro měření.
 9. **Tlačítkem ENTER na panelu spektrometru odstartujeme měření.**
 10. Po skončení měření spektra referenčního vzorku tuto kyvetu zaměníme za kyvetu se vzorkem.
 11. Pomocí **F5** se vrátíme do **SCAN MENU**, v tabulce SCAN zvolíme **SCAN TYPE – SAMPLE** a s jinak stejnými parametry opět odstartujeme měření spektra vzorku (**F8-F8-Enter** na panelu spektrometru).
 12. Každé naměřené spektrum uložíme na disketu (viz ukládání).

Manipulace s daty, postup pro export a ukládání naměřených spekter (spektrum referenčního vzorku není nutno pro účely předepsaného vyhodnocení) ukládat.

Všechna naměřená spektra lze ukládat ve specifickém formátu ovládacího programu (přípona DAT) nebo exportovat a ukládat v ASCII tvaru (přípona ASP) na přiložené, speciálně naformátované disketě v disketové mechanice **A**. S takto exportovanými daty lze pracovat a vizualizovat např. pomocí EXCELU. *Pozn: Export dat do ASCII je možný pouze po předcházejícím uložení spektra na disketu.*

Ukládání naměřených spekter

1. Po skončení měření spektra vzorku se pomocí klávesy **HOME** vrátíme do základního menu a označíme položku **LIBRARY**, poté zmáčkneme klávesnici **Enter**.
2. Z nabídky funkcí pomocí kurzorové šipky najedeme na **SAVE SPECTRUM** a potvrzením **Enter** otevřeme **SAVE DIALOG**,
3. Z klávesnice doplníme požadované údaje

NAME - Jméno souboru	Max. 5, systém doplní pořadové číslo a příponu automaticky
MEMO	Volný text – komentář, v rozsahu rezervovaného prostoru v dialogu
OPERATOR	Volné v rozsahu prostoru v dialogu

Pozn.: vše je třeba vyplňovat abecedou bez diakritiky

4. Klávesou F8 se soubor uloží.

Export naměřených spekter do ASCII tvaru

Spektra uložená na disketě je možné exportovat do ASCII tvaru pro další zpracování.

POSTUP:

1. Ze základní nabídky (pomocí **HOME**) zvolíme **LIBRARY MENU**.
2. Zvolíme **SPECTRAL INDEX** (disketa musí již být zasunutá v disketové mechanice).
3. Pomocí kurzorových šipek si vybereme hledaný soubor, přečteme jej klávesou **Enter** potvrdíme položku **Current Area** klávesou **Enter**.
4. Klávesou **F7 FULL DETAILS** zobrazíme údaje o souboru.
5. Klávesou **F7 SAVE AS ASCII** provedeme vlastní export požadovaného souboru, spektrum pak bude uloženo ve tvaru **NAME.ASP** oproti původnímu **NAME.DAT**.
6. Návrat do modu měření klávesou „Home“, další měření dle návodu „Postup...“ od bodu 8, str. 1.

Konec měření a vypnutí spektrometru

1. Návrat do hlavního menu pomocí klávesy **HOME**.
2. **F3** –konec programu a návrat do **DOSu**.
3. Případně síťovými vypínači vypnout dle potřeby spektrometr a/nebo PC.

Struktura souboru NAME.ASP

1.ř	pracovní údaj
2.ř.	počáteční vlnová délka
3.ř	konečná vlnová délka
4. a 5. ř.	pracovní údaje
6. ř.	zvolený interval vlnových délek, krok měření absorbancí
7. ř. a další	hodnoty absorbancí při vlnových délkách daných mezemi a zvoleným intervalem, např. 5 nm

Pozn.: S obsahem diskety lze manipulovat pomocí běžných programových prostředků, např. pomocí Norton Commanderu, po ukončení činnosti spektrometru. Po exportu do Excelu (*oddělovač je čárka, začátek importu od ř. 1, typ souboru Windows ANSI, textový kvalifikátor – žádný, formát dat ve sloupcích - obecný*) je vhodné ke sloupci hodnot absorbancí vygenerovat sloupec vlnových délek pomocí známé počáteční a konečné hodnoty vlnových délek pomocí funkce **Úpravy-Vyplnit-Řady** a pak hlavičku souboru vymazat.