Auswertung von Analyse Nr. 1 (Prüfung auf Identität mit NIR)

1. Zunächst muss Windows in der Virtual Box gestartet werden. Dazu unten links im Start-Menü im Suchfeld einfach *Windows* eingeben und starten.

Um den USB-Stick unter Windows zu finden: Über Start-Menü -> Computer -> das Laufwerk *media* auswählen -> eigene y-Nummer -> dort erscheint der USB-Stick dann als Ordner

2. Sobald Windows hochgefahren ist, Excel öffnen. Dann unter oben links auf das Office-Symbol und dann auf *Optionen* klicken. Unter den Reitern links auf *Erweitert* klicken. Als *Dezimaltrennzeichen* ein "Punkt" einfügen und als *Tausendertrennzeichen* ein "Komma eingeben (dafür muss *Trennzeichen vom Betriebssystem übernehmen* inaktiviert sein). Dieser Schritt muss nur einmal an jedem Rechner erfolgen und wurde ggf. bereits vom Vorgänger erledigt!



3. Die CSV-Datei mit den Werten in Excel öffnen/laden. Jetzt ist sich jedes Spektrum in einer eigenen Zeile. Die einzelnen Werte befinden sich aber noch in der ersten Zelle und sind durch Kommata getrennt. Diese wird nun bearbeitet, da dort Punkte als Trennzeichen für Dezimalzahlen verwendet werden (z.B. 0.21581 statt 0,21581), womit die deutsche Version von Excel leider Probleme hat und die Abfrage in der Datenbank nicht funktionieren würde.

4. Unter *Suchen und Auswählen* (ganz rechts oben im Fenster unter Reiter *Start*) auf *Ersetzen* klicken. Unter *Suchen nach:* ein "Komma" einfügen, unter *Ersetzen durch:* wird nichts eingegeben (also ein leeres Feld). Auf den Button *Alle* ersetzen klicken. Damit werden alle Kommas als Trennzeichen gelöscht.

		(≌ -) ∓						Test -	Microsoft Ex	cel						
C	Start	Einfügen	Seitenlayout	Formeln	Daten Ül	berprüfen	Ansicht									🥥 –
	Einfügen 🛷	Calibri F K L	• 11 • (A [*] A [*] ≡	= <mark>-</mark> »·		Standard 9 ~ % 000	* ***	Bedingte Formatierur	Als Tab ag * formatio	elle Zellenfo eren *	rmatvorlagen	G™ Einfügen × S™ Löschen × Dormat ×	∑ • A J • Z ∠ • und Fi	ieren Suchen	und len *
Zw	schenablage 🕞		Schriftart	5	Ausrichtung	5	Zahl	5		Forma	itvorlagen		Zellen	В	earbeiten	
	A1	- (0	$f_x = 0.$	151 0.251 0.1	2154 0.11581 :	1.2151 1.20	5151									
	А	В	С	D	E	F	G		H	1	J	К	L	М	N	
1	0.151 0.251 0	12154 0.11	581 1.2151 1.20	5151												•
2	0.1251 0.2151	0.1214 0.1	1.251 1.215	1												
3	0.121 0.51 0.1	154 0.1581	1.151 1.5151													
4																
6																
7																
8					_											
9					S	uchen und E	rsetzen				-8	X				
10																
11					4	Suchen E	rsetzen									
12						Suchen nach	· ,					-				
13						Ersetzen dur	ch:					-				
14											Optionen	>>				
15																
17						Alle ersetzen	Ersetzen	A	le suchen	Weitersuche	n Schlie	:6en				
18																
19						lappe Bl	att Name	Zelle V	/ert			Â				
20						est.csv Te	ist int	\$A\$1 0	151 0.251 0.1	2154 0. 1158	1 1.2151 1.205	151				
21						estics/ Te	:st Ш	əmə2 U	.1251 0.2151	. 12 17 0. 110	1 1.231 1.2131	- F				
22					3	Zelle(n) gefur	nden									
23																

5. In Excel die Spalte A anklicken, sodass eine Markierung des Feldes erfolgt. Danach unter dem Reiter *Daten* das Feld *Text in Spalten* anklicken. Das Option *Getrennt* auswählen. *Weiter* klicken. Unter *Trennzeichen* nur das Feld *Leerzeichen* auswählen. Jetzt noch *Fertig stellen* anklicken.

	- 10 -	(°" ≁) ∓					Ma	ppe1 - Micr	osoft Excel								-		Х
	Start	Einfügen	Seitenlayout	Formeln	Daten	Überprüfen	Ansicht										۲		x
Aus Aus Aus Aus	Access dem Web Text Exter	Aus anderen Quellen * rne Daten abrut	Vorhandene Verbindungen en	Alle aktualisierer	D Verl C Eige C S Verl Verbin	bindungen enschaften knüpfungen bearbei dungen	ten	en Filtern Sortieren	i k Löschen i Erneut übern i Erweitert und Filtern	ehmen	Text in Spalter	Duplikate n entfernen	Dateni Konso Was-w Datentool	überprü lidieren räre-wei s	ifung * I nn-Analyse *	 Gruppiere Gruppiere Teilergebi Glie 	en ▼ ung aufheben nis derung	• "III • III •	
	A1	-	f_{x}																×
	А	В	С	D	E	F	G	н	I			К	L		М	N	0		
1]																	
2		Ī																	- 11
3					Textkonve	rtierungs-Assistent -	Schritt 1 von 3					?	×						-11
4					Der Textko	nvertierungs-Assisten	t hat erkannt, dass	Ihre Daten n	nit Trennzeichen ver	sehen sir	nd.								-11
5					Wenn alle A	Angaben korrekt sind,	klicken Sie auf 'Wei	ter ', oder wä	hlen Sie den korrek	ten Dater	ntyp.								-11
7					Ursprüngli	cher Datentyp													-11
2					Wählen S	ie den Dateityp, der Il	nre Daten am beste	en beschreibt				_							
9					O Ge	trennt - Zeichen	wie z.B. Kommas o	der Tabstopp	is trennen Felder (E	xcel 4.0-9	Standard).							-11
10				-	U Ee	ste breite - Heider s	ind in Sparten ausg	erichtet, mit L	eerzeichen zwische	n jedem r	-eid.								
11							A		200 (20 0)										
12					Import beg		Uateiur	sprung: MS	-DOS (PC-8)										
13																			
14																			
15					Vorschau	der Datei C: \Users \cip	Desktop\Test.csv	•											
16					10.15	1, 0.251, 0.121	54, 0.11581,	1.2151, 1	205151				~						
17					20.12	51, 0.2151, 0.1	214, 0.1181,	1.251, 1.	2151										
18					4	1, 0.51, 0.1154	, 0.1581, 1.1	51, 1.515.	1										_
19					5								-						
20					*)	N						
21																			
22								Abbreat	an 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1		Valles 7	Eastin - A							

		19 - (1	• •							
C	Sti	art Ei	infügen	Seitenlay	out	FormeIn	Daten Ül			
r K			Calibri • 11 • A A							
E	Einfügen T	a	FK U	· •	<u>ه</u> -	<u>A</u> • ≡	≡ ≡ ∉ ()			
Zwi	schenabl	age 🗟		Schriftart		G.	Ausrichtung			
A1 • fx										
	А	В	С	D	E	F	G			
1	0.151	0.251	0.12154	0.11581	12.151	1.205.151				
2	0.1251	0.2151	0.1214	0.1181	1.251	12.151				
3	0.121	0.51	0.1154	0.1581	1.151	15.151				
4										

Jetzt hat jeder Wert seine eigene Zelle, die Dezimaltrennzeichen sind richtig eingestellt und das Spektrum kann in die Datenbank eingegeben werden. 6. Die aktuelle Version der Datenbank ist auf der Institutswebseite unter Studium -> Lehrveranstaltungen -> 5. Semester -> Seminare & Praktika zu finden.

7. Jetzt kann man die Spektren zeilenweise in die Datenbank eingeben und auswerten

z.B. Zeile 1 auswählen -> klick auf die Zahl (1) vor dem ersten Wert -> die komplette Zeile ist markiert

Strg + C -> kopiert die gesamte Zeile in die Zwischenablage

Die Datei mit der Datenbank auswählen und auf der ersten Seite die Zelle A4 anklicken

	▼			da	tenbanknir_studi	-version - Micros	oft Excel					x
Da	tei Start	Einfügen	Seitenlayout	Formeln Daten	Überprüfen	Ansicht						♡ 😮	- 🗗 X
	A4	▼ (°	<i>f</i> _x 0.1641	75									*
	А	В	С	D	E	F	G	Н	I	J	К	L	M
1	Anfrage Spe	ktrum hier ei	ngeben										
2	Wellenzahl												
3	1	. 2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
4	0.164175	0.164324	0.164367	0.164252	0.163893	0.163151	0.162004	0.160774	0.160047	0.160199	0.161064	0.162133	0.1

dann mit Strg + V die kopierte Zeile einfügen.

Auswertung:

Nach der Eingabe des Spektrums kann man auf dem zweiten Tabellenblatt die Auswertung sehen.

👔 🔄 🖤 🖓 🐨 🖓 🖛 🖾 datenbanknir_studi-version - Microsoft Excel													
Datei Start Einfügen Seitenlayout Formeln Daten Überprüfen Ansicht 🗢 🗘 🗆 🗟													
G21 v 6-Aminohexansäure													
	A	В	D	E	F	G	н	=					
1					1								
2		Ranking						Date					
3													
4	Inde	ex Substanz	Pearson	Rang	Pearson	Substanz	Abkürzung						
5	_			-				+					
6	_	1 Fumarsaure	0.99960761	110	0.9720017	2-Amino-2-methyl-1,3-Propandiol	2-A-2M-1,2-P_NEU	0.1					
/		2 Fumarsaure	0.99938839	108	0.9/20111	2-Amino-2-methyl-1,3-Propandiol	2-A-2M-1,2-P_NEU	0.1					
8	_	3 Fumarsaure	0.99919749	109	0.9/20036	2-Amino-2-metnyi-1,3-Propanaioi	2-A-2M-1,2-P_NEU	0.2					
9		4 Maleinsaure	0.99887493	21	0.9918098	3,5-Dinitrobenzoesaure	DNBS_0045015_NEU	0.2					
10		5 Maleinsaure	0.99800080	23	0.991/024	3,5-Dinitrobenzoesäure	DNBS_0045015_NEU	0.2					
12		7 Kaliumbydrogoncarbonat (Grioßform)	0.9982843	24	0.9910380	3,5-Dimitropenzoesuure	UNBS_0045015_NEU	0.3					
12	-	Kaliumhydrogencarbonat (Grießform)	0.99590001	406	0.9100266	4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-on	4-A-2,3-D-1-PP_L233435_NEO	0.2					
1/		9 Kaliumhydrogencarbonat (Grießform)	0.99674/33	380	0.9155232	4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-on	4-A-2,3-D-1-PP_L233493_NEU	0.2					
15		10 tri-Kaliumphosphat-Monohydrat	0.99522504	140	0.9663992	4-Aminobenzoesäure	4-ABSR 54407812610 NEU	0.3					
16		11 Kaliumcarbonat	0 99507921	150	0.9644066	4-Aminobenzoesäure	4-4858 \$4407812610 NEU	0.3					
17		12 tri-Kaliumphosphat-Monohydrat	0.99493171	136	0.9666932	4-Aminobenzoesäure	4-ABSR_\$4407812610_NEU	0.4					
18		13 Kaliumcarbonat	0.99478400	155	0.9636104	4'Hvdroxvacetanilid	4HAA 7130265 NEU	0.					
19		14 Kaliumcarbonat	0.99468895	147	0.9649867	4'Hvdroxvacetanilid	4HAA 7130265 NEU	0.1					
20		15 Allopurinol	0.99450588	148	0.9648822	4'Hydroxyacetanilid	4HAA 7130265 NEU	0.					
21		16 tri-Kaliumphosphat-Monohydrat	0.99450409	74	0.9796342	6-Aminohexansäure	6-AHSR_\$28322918_NEU	0.					
22	1	17 Allopurinol	0.99326800	106	0.9722396	6-Aminohexansäure	6-AHSR_S28322918_NEU	0.1					
23		18 Allopurinol	0.99284557	72	0.9804543	6-Aminohexansäure	6-AHSR_S28322918_NEU	0.2					
24	+	19 Glycin	0.99214387	73	0.9797079	Acetylsalicylsäure	ASS_100571_NEU	0.3					
25		20 beta-Alanin	0.99193567	60	0.9825284	Acetylsalicylsäure	ASS_100571_NEU	0.4					
26		21 3,5-Dinitrobenzoesäure	0.99180978	53	0.9838713	Acetylsalicylsäure	ASS_100571_NEU	0.4					
27	1	22 Glycin	0.99178040	40	0.9890234	Acetylsalicylsäure	ASS_8SEM_NEU	0.1					
28		23 3,5-Dinitrobenzoesäure	0.99176244	27	0.9912271	Acetylsalicylsäure	ASS_8SEM_NEU	0.2					
29		24 3,5-Dinitrobenzoesäure	0.99165863	31	0.9903061	Acetylsalicylsäure	ASS_8SEM_NEU	0.2					
0.00			0.00161046	200	0.0051540	Allendein	AULA 0201A271 NEU	0.4					

Das Spektrum der Substanz, die im grünen Teil der Tabelle auf den ersten drei Stellen steht, stimmt am besten mit dem eingegebenen Spektrum überein und ist der gesuchte Arzneistoff.

PS: Diese Anleitung ist für die Windows- und Excel-Installation im CIP-Pool geschrieben. Prinzipiell funktioniert die Datenbank aber unter allen Excel-Versionen ab 2007 und die Auswertung kann auch zuhause erfolgen.