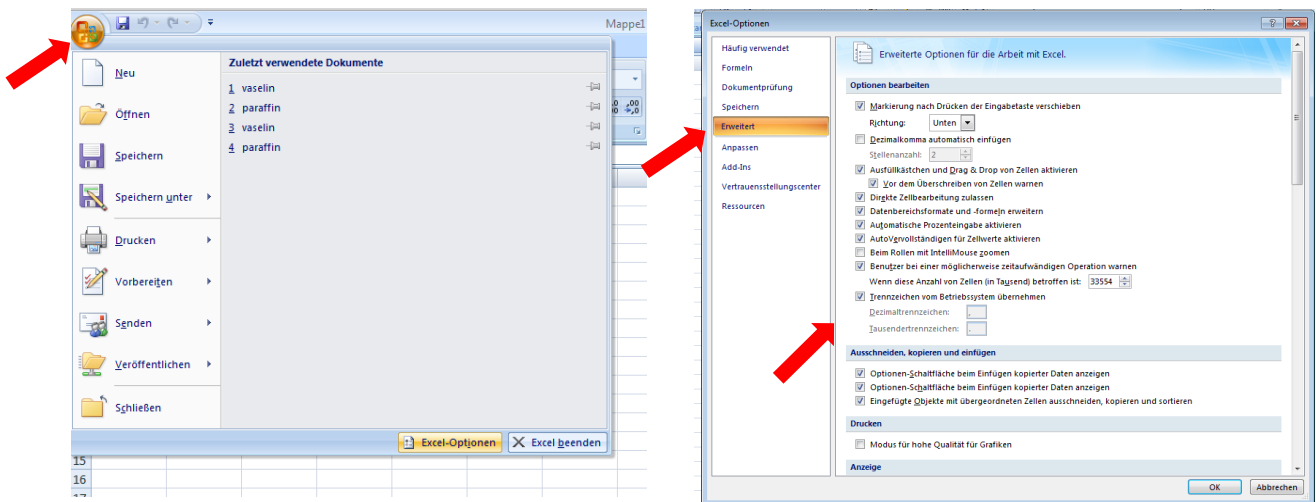


## Auswertung von Analyse Nr. 1 (Prüfung auf Identität mit NIR)

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

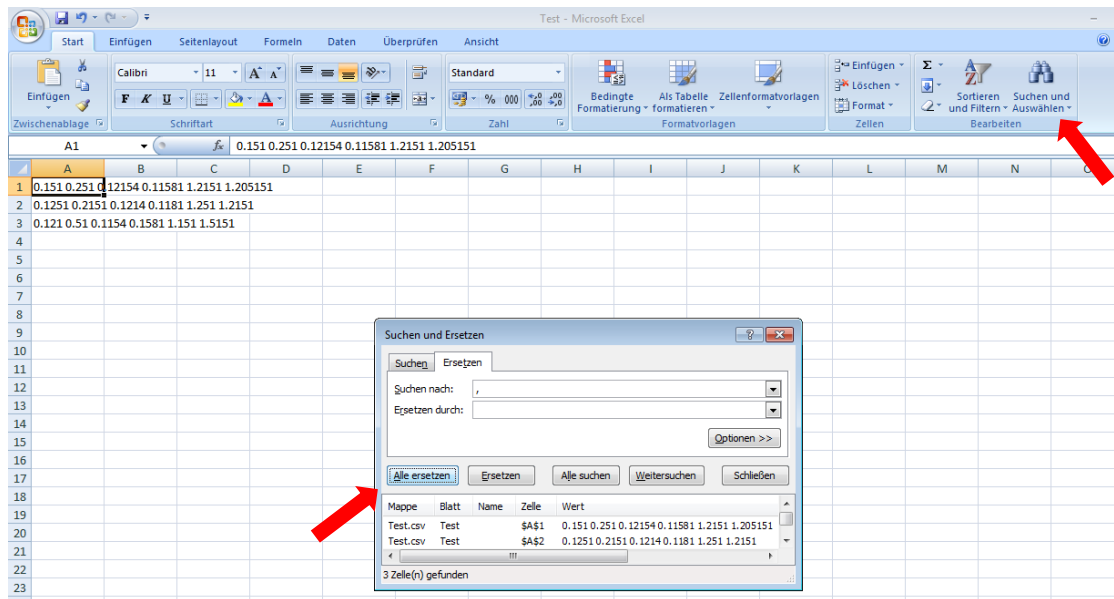
Um den USB-Stick unter Windows zu finden: Über Start-Menü -> Computer -> das Laufwerk *media* auswählen -> eigene y-Nummer -> dort erscheint der USB-Stick dann als Ordner

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!

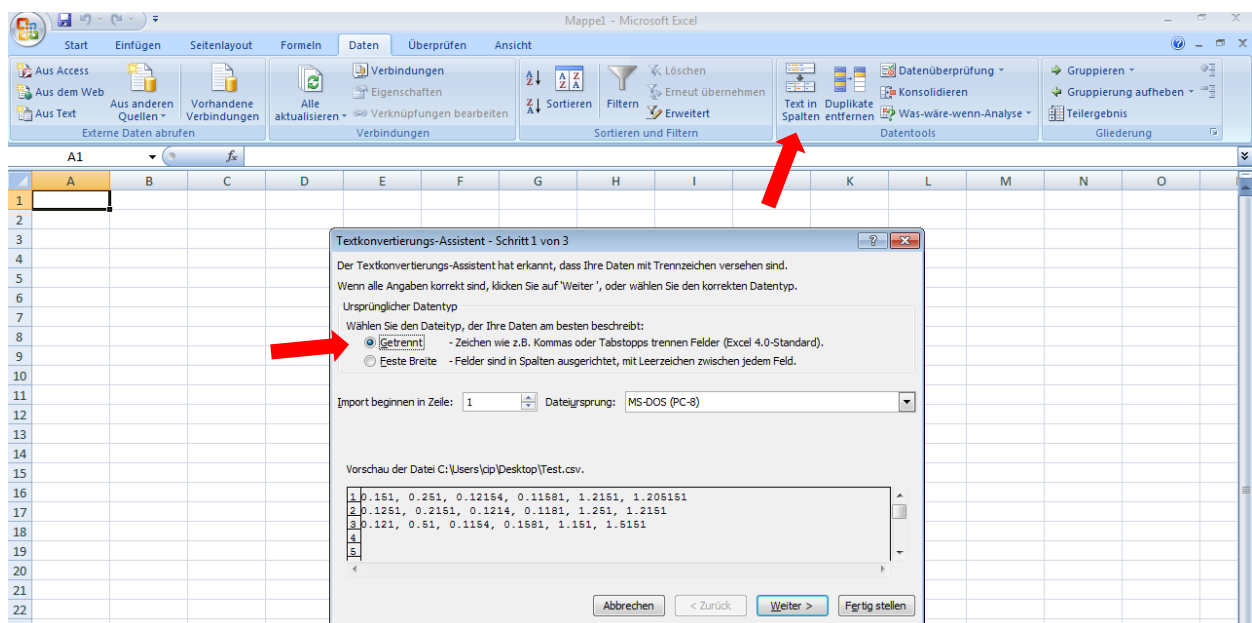


3. Die CSV-Datei mit den Werten in Excel öffnen/laden. Jetzt ist sich jedes Spektrum in einer eigenen Zeile. Die einzelnen Werte befinden sich aber noch in der ersten Zelle und sind durch Kommata getrennt. Diese wird nun bearbeitet, da dort Punkte als Trennzeichen für Dezimalzahlen verwendet werden (z.B. 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 Kommata als Trennzeichen gelöscht.



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.



	A	B	C	D	E	F	G
1	0.151	0.251	0.12154	0.11581	1.2151	1.205151	
2	0.1251	0.2151	0.1214	0.1181	1.251	1.2151	
3	0.121	0.51	0.1154	0.1581	1.151	1.5151	

Jetzt hat jeder Wert seine eigene Zelle, die Dezimaltrennzeichen sind richtig eingestellt und das Spektrum kann in die Datenbank eingegeben werden.

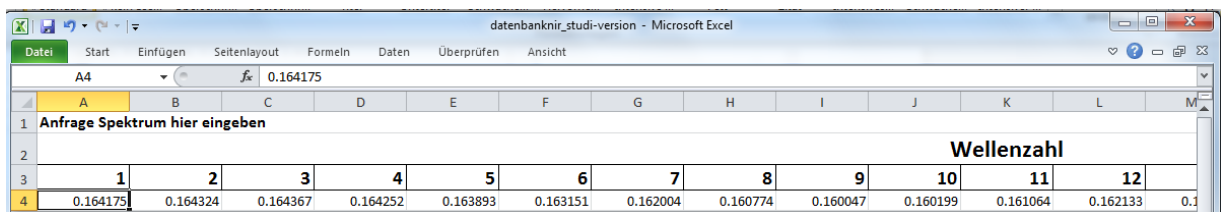
6. Die aktuelle Version der Datenbank ist auf der Institutswebseite unter Studium -> Lehrveranstaltungen -> 5. Semester -> Seminare & Praktika zu finden.

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

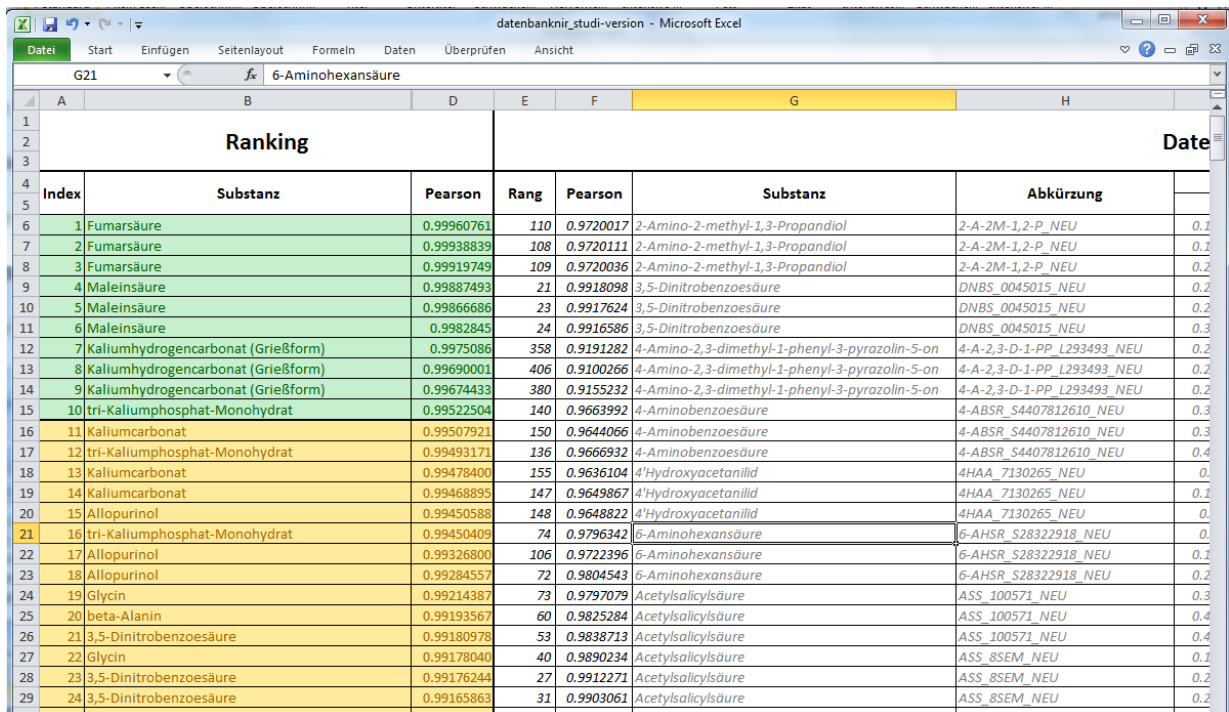


Wellenzahl											
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
0.164175	0.164324	0.164367	0.164252	0.163893	0.163151	0.162004	0.160774	0.160047	0.160199	0.161064	0.162133

dann mit **Strg + V** die kopierte Zeile einfügen.

Auswertung:

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



Index	Substanz	Pearson	Rang	Abkürzung
1	Fumarsäure	0.99960761	110	2-Amino-2-methyl-1,3-Propandiol
2	Fumarsäure	0.99938839	108	2-Amino-2-methyl-1,3-Propandiol
3	Fumarsäure	0.99919749	109	2-Amino-2-methyl-1,3-Propandiol
4	Maleinsäure	0.99887493	21	3,5-Dinitrobenzoesäure
5	Maleinsäure	0.99866686	23	3,5-Dinitrobenzoesäure
6	Maleinsäure	0.9982845	24	3,5-Dinitrobenzoesäure
7	Kaliumhydrogencarbonat (Grießform)	0.9975086	358	4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-on
8	Kaliumhydrogencarbonat (Grießform)	0.99690001	406	4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-on
9	Kaliumhydrogencarbonat (Grießform)	0.99674433	380	4-Amino-2,3-dimethyl-1-phenyl-3-pyrazolin-5-on
10	tri-Kaliumphosphat-Monohydrat	0.99522504	140	4-Aminobenzoessäure
11	Kaliumcarbonat	0.99507921	150	4-Aminobenzoessäure
12	tri-Kaliumphosphat-Monohydrat	0.99493171	136	4-Aminobenzoessäure
13	Kaliumcarbonat	0.99478400	155	4-Hydroxyacetanilid
14	Kaliumcarbonat	0.99468895	147	4-Hydroxyacetanilid
15	Allopurinol	0.99450588	148	4-Hydroxyacetanilid
16	tri-Kaliumphosphat-Monohydrat	0.99450409	74	6-Aminohexansäure
17	Allopurinol	0.99326800	106	6-Aminohexansäure
18	Allopurinol	0.99284557	72	6-Aminohexansäure
19	Glycin	0.99214387	73	Acetylsalicylsäure
20	beta-Alanin	0.99193567	60	Acetylsalicylsäure
21	3,5-Dinitrobenzoesäure	0.99180978	53	Acetylsalicylsäure
22	Glycin	0.99178040	40	Acetylsalicylsäure
23	3,5-Dinitrobenzoesäure	0.99176244	27	Acetylsalicylsäure
24	3,5-Dinitrobenzoesäure	0.99165863	31	Acetylsalicylsäure

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.