



# ADDITIVE Whitepaper

## **Die Analyse von Gemischen (mizellärer Systeme) in Chemie, Medizin und Biologie mit ORIGIN**

### **Ausgangssituation**

Daten aus der Ultrazentrifugation von Gemischen auswerten und visualisieren, Verteilungsverhältnisse flüssiger und fester Bestandteile festzustellen.

### **Fragestellung**

Zu den Anforderungen gehört eine automatisierte der verschiedenen Arbeitsschritte der Auswertung, der Visualisierung und eines Reports, alle Funktionen sollen über eine einfache grafische Benutzeroberfläche verfügbar sein.

### **Lösung**

Mit Funktionen zur Programmierung individueller Benutzeroberflächen und der Verfügbarkeit zahlreicher mathematischer Funktionen und Diagrammtypen lassen sich Origin und Origin Pro an die Bedürfnisse der Anwender flexibel anpassen.

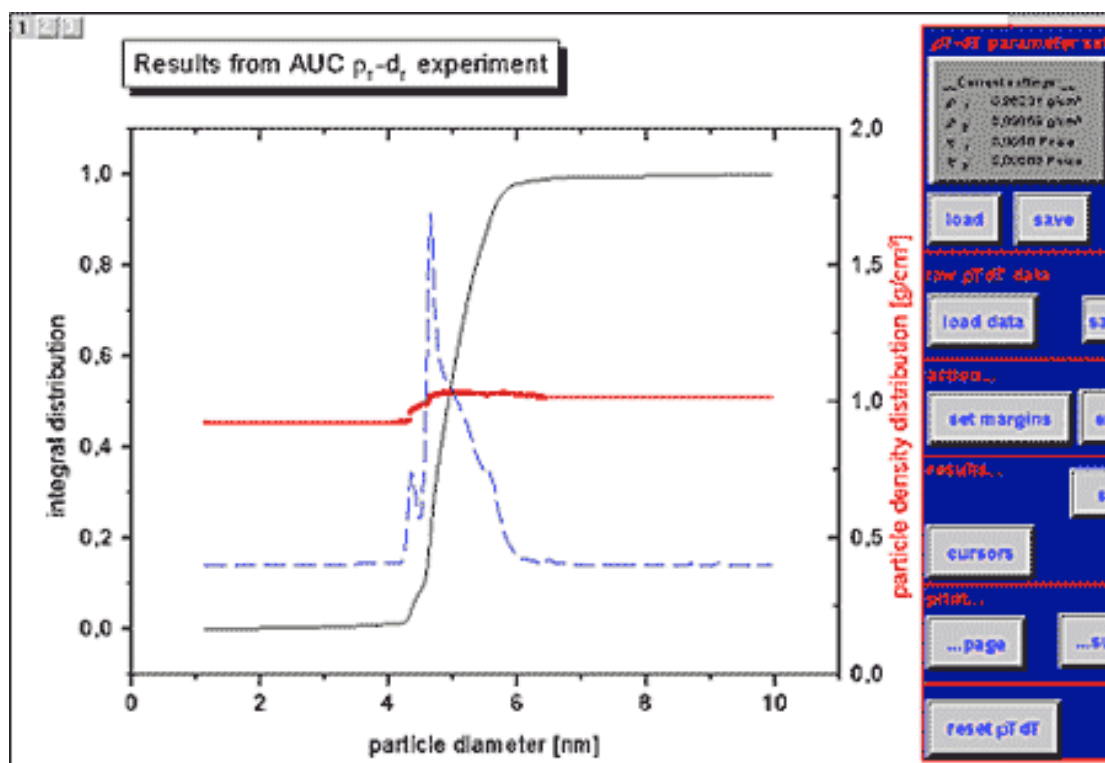


Abb. Darstellung eines Graphen



# ADDITIVE Whitepaper

Die Analyse der Bestandteile organischer und anorganischer Substanzen stellt heute eines der zentralen Gebiete der biologischen, chemischen oder medizinischen Forschung dar. Durch das Verfahren der Trennung und Analyse von Gemischen durch die Zentrifugation einer Lösung bei hoher Geschwindigkeit, auch als analytische Ultrazentrifugation bezeichnet, gelingt es, die unterschiedlichen Substanzen in einer Lösung zu charakterisieren und Aufschlüsse über die Stoffanteile verschiedener Lösungen zu gewinnen.

Dieses Verfahren besitzt gegenüber anderen Methoden der Kolloidanalytik den Vorteil, Gemische exakt voneinander trennen zu können und dabei auch Teilchen unter einer Größe von 30nm herauszufiltern. So ist es z. B. bei der Untersuchung einer Blutprobe im Gegenteil zu anderen Verfahren, wie z. B. der Elektronenmikroskopie, möglich, nicht nur Ausschnitte, sondern gesamte Probenvolumen zu analysieren. Dies

erlaubt die Ermittlung der genauen Verteilungsverhältnisse flüssiger und fester Bestandteile des Blutes.

Mitarbeiter des Max-Planck-Instituts für Kolloid- und Grenzflächenforschung in Golm werten zur Erforschung von Gemischen Proben mit Hilfe des Geschwindigkeitslaufes aus. Durch die extreme Beschleunigung einer Lösung in der Zentrifuge erfolgt die Trennung der Teilchen voneinander. Die einzelnen Teilchen sondern sich in Schichten voneinander ab. Anhand dieser Sedimentation kann die Geschwindigkeit der einzelnen Stoffanteile in der Lösung, die durch die unterschiedliche Schwere der Teilchen entsteht, mit optischen Methoden erfaßt werden. Es können verschiedene Teilchenparameter aus den Sedimentationsschichten ermittelt werden. Das Zentrifugieren einer Probe in zwei unterschiedlichen, aber chemisch äquivalenten Lösungsmitteln ermöglicht außerdem das Ablesen der Teilchendichteverteilung.

*Die statistische Analyse und Visualisierung der gemessenen Eigenschaften erfordert das Einlesen der Daten in eine Software. Es sollen verschiedene Aufgaben bewältigt werden:*

- \* Definition eines eigenen Importfilters zum Einlesen der Rohdaten aus der Ultrazentrifugation
- \* Automatisierung der Abläufe und Erstellung einer benutzerdefinierten Oberfläche zur Vereinfachung der Arbeitsabläufe
- \* Berechnung der Sedimentationskoeffizientenverteilung

- \* Glätten der Daten mit FFT oder Splines
- \* Berechnung der Teilchengrößenverteilung, Abspeichern in integraler und differenzierter Form
- \* Erstellung eines Graphen zur Teilchendichteverteilung ( $r/T$ )
- \* Erstellung einer Layoutseite zur Dokumentation des Graphen und der Messdaten.



# ADDITIVE Whitepaper

ORIGIN, das System zur Visualisierung, Analyse und Präsentation von Daten, stellt bei der Bewältigung der Analyse eine umfassende Lösung dar. Es erlaubt neben der Erstellung eines eigenen Importfilters und der Bearbeitung der Daten durch zahlreiche mathematische Funktionen die Automatisierung von Abläufen mittels der C-ähnlichen

Programmiersprache LabTalk. Über ein ORIGIN-Makro, entwickelt von Helmut Coelfen und Kristian Schilling am Max-Planck-Institut, werden Arbeitsschritte der Analyse automatisiert und die Berechnung der Daten über individuell programmierte Windows-Buttons benutzerfreundlich gesteuert.

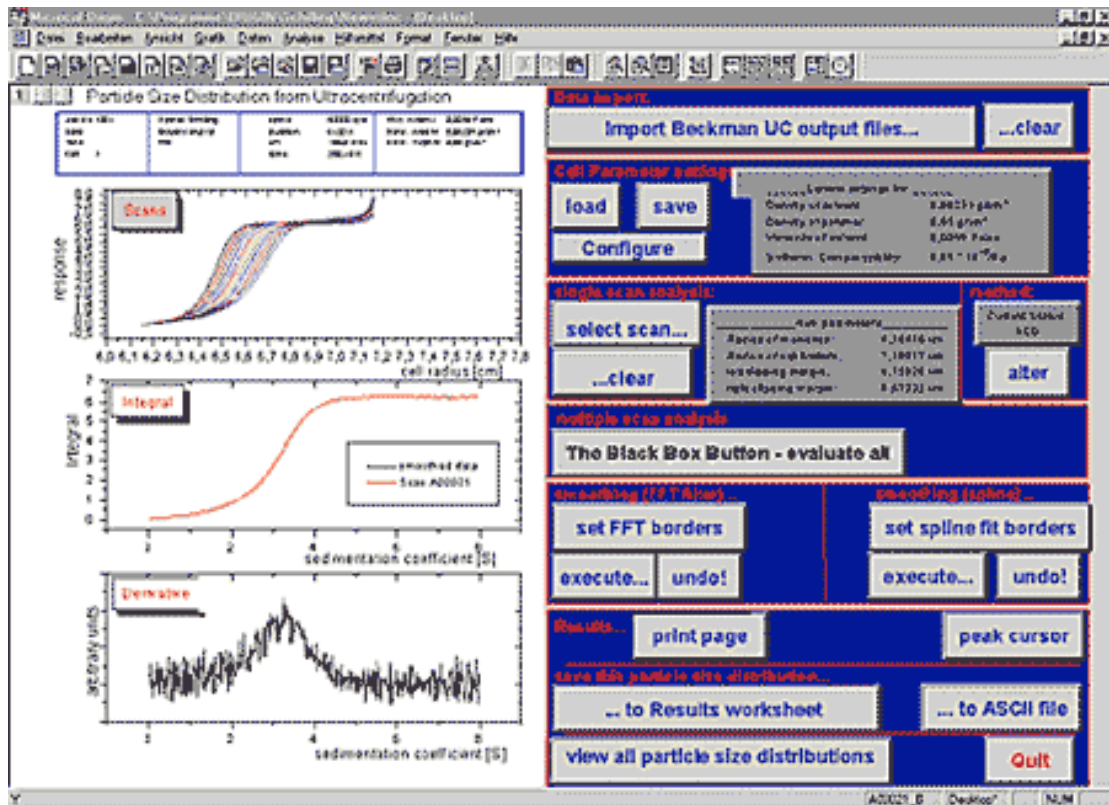


Abb. Bedienoberfläche der Anwendung

Nach dem Einlesen der Rohdaten wird die Verteilung des Sedimentationskoeffizienten berechnet. Danach erfolgt die Glättung der Werte mit Hilfe des

eingebauten FFT-Filters in ORIGIN oder mit einer Splinefunktion, die mittels einer externen DLL eingebunden werden kann, bearbeitet.



# ADDITIVE Whitepaper

Die Ergebnisse der Teilchen-  
größenverteilung werden in eigenen  
Worksheets abgespeichert. Neben der  
Bildung eines Mittelwerts des  
Sedimentationskoeffizienten erfolgt die

Weiterverarbeitung der Werte mit  
ORIGINs mathematischen Funktionen:  
Verschiedene Normierungsverfahren,  
Mittelwertbildung, Gauss-fit usw.

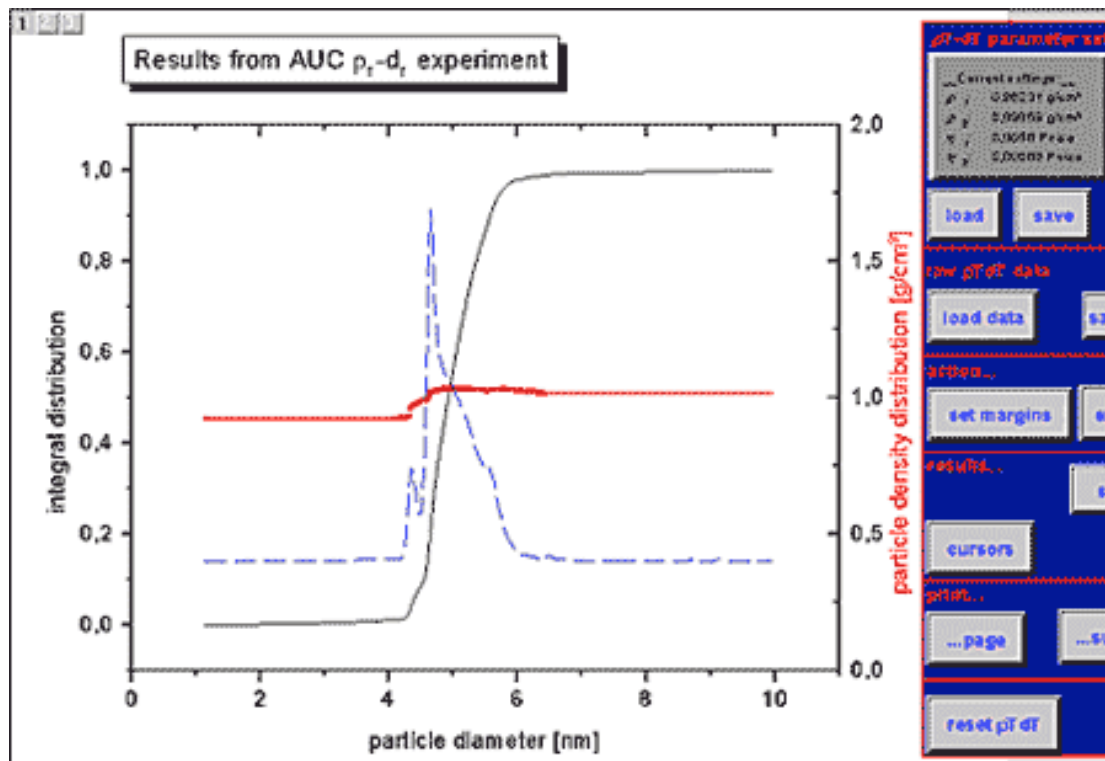


Abb. Darstellung eines Graphen

Über benutzerdefinierte Buttons wird aus  
den Worksheets zur Teilchen-  
größenverteilung der Graph zur  
Verteilung der Teilchendichte dargestellt.  
Zur Formatierung des Graphen bietet  
ORIGIN weitere Menüfunktionen, wie  
eine Achsendialogbox, verschiedene

Graph-Typen, die Möglichkeit zur  
Formatierung der Beschriftung etc. Alle  
relevanten Daten der Analyse sind im-  
und exportierbar. Die Ergebnisse und  
Graphen können in einer Layoutseite zur  
Dokumentation oder Präsentation  
zusammengefaßt werden.

## Kontakt

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