

	DIN ISO 22029	
ICS 35.240.70; 71.040.99	Entwurf	Einsprüche bis 2024-07-17 Vorgesehen als Ersatz für DIN ISO 22029:2014-05
Mikrobereichsanalyse – EMSA/MAS-Standard-Dateiformat für den Datenaustausch von Spektren (ISO 22029:2022); Text Deutsch und Englisch Microbeam analysis – EMSA/MAS standard file format for spectral-data exchange (ISO 22029:2022); Text in German and English Analyse par microfaisceaux – Format de fichier standard EMSA/MAS pour échange de données spectrométriques (ISO 22029:2022); Texte en allemand et anglais Anwendungswarnvermerk Dieser Entwurf mit Erscheinungsdatum 2024-05-17 wird der Öffentlichkeit zur Prüfung und Stellungnahme vorgelegt. Weil das beabsichtigte Dokument von der vorliegenden Fassung abweichen kann, ist die Anwendung dieses Entwurfs besonders zu vereinbaren. Stellungnahmen werden erbeten – vorzugsweise online im Norm-Entwurfs-Portal von DIN unter www.din.de/go/entwuerfe bzw. für Norm-Entwürfe der DKE auch im Norm-Entwurfs-Portal der DKE unter www.entwuerfe.normenbibliothek.de, sofern dort wiedergegeben; – oder als Datei per E-Mail an nmp@din.de möglichst in Form einer Tabelle. Die Vorlage dieser Tabelle kann im Internet unter www.din.de/go/stellungnahmen-norm-entwuerfe oder für Stellungnahmen zu Norm-Entwürfen der DKE unter www.dke.de/stellungnahme abgerufen werden; – oder in Papierform an den DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP), 10772 Berlin oder Am DIN-Platz, Burggrafenstr. 6, 10787 Berlin. Es wird gebeten, mit den Kommentaren zu diesem Entwurf jegliche relevanten Patentrechte, die bekannt sind, mitzuteilen und unterstützende Dokumentationen zur Verfügung zu stellen. Gesamtumfang 36 Seiten DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)		

Inhalt

	Seite
Nationales Vorwort	3
Vorwort	4
Einleitung	6
1 Anwendungsbereich	7
2 Normative Verweisungen	7
3 Begriffe	7
4 Allgemeine Betrachtungen	7
5 Beschreibung des Formats	8
5.1 Allgemeines	8
5.2 Erforderliche Schlüsselwörter	9
5.3 Spektrendaten	11
5.4 Optionale Schlüsselwörter	12
5.5 Abschließen einer Datei	16
6 Beispiel für eine Datei im EMSA/MAS-Spektrenformat	16
Literaturhinweise	20

Tabellen

Tabelle 1 — Erforderliche Schlüsselwörter	10
Tabelle 2 — Schlüsselwörter im Zusammenhang mit Spektrenmerkmalen	12
Tabelle 3 — Schlüsselwörter im Zusammenhang mit Mikroskop/Instrument	12
Tabelle 4 — Schlüsselwörter im Zusammenhang mit der Probe	13
Tabelle 5 — Schlüsselwörter im Zusammenhang mit der ELS	13
Tabelle 6 — Schlüsselwörter im Zusammenhang mit der EDS	13
Tabelle 7 — Optionale benutzerdefinierte Schlüsselwörter	15
Tabelle 8 — Freitext-Schlüsselwortfelder	15
Tabelle 9 — Beispiel für einen einspaltigen (x,y)-Datensatz	16
Tabelle 10 — Beispiel für einen einspaltigen (x,y)-Datensatz, der optionale und benutzerdefinierte Schlüsselwörter enthält	17

Nationales Vorwort

Dieses Dokument enthält die deutsche Übersetzung der Internationalen Norm ISO 22029:2022, die vom Technischen Komitee ISO/TC 202 „Microbeam analysis“ erarbeitet wurde, dessen Sekretariat von SAC (China) gehalten wird.

Das zuständige nationale Normungsgremium ist der Arbeitsausschuss NA 062-08-18 AA „Elektronenmikroskopie und Mikrobereichsanalyse“ im DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP).

Dieses Dokument enthält in Unterabschnitt 5.4, Tabelle 4, zwei Nationale Fußnoten.

Um Zweifelsfälle in der Übersetzung auszuschließen, ist die englische Originalfassung beigelegt. Die Nutzungsbedingungen für den deutschen Text des Norm-Entwurfes gelten gleichermaßen auch für den englischen Text.

Aktuelle Informationen zu diesem Dokument können über die Internetseiten von DIN (www.din.de) durch eine Suche nach der Dokumentennummer aufgerufen werden.

Änderungen

Gegenüber DIN ISO 22029:2014-05 wurden folgende Änderungen vorgenommen:

- a) Die Dateicodierung wurde in dieser Version von ASCII auf UTF-8 geändert. Dies ermöglicht die Verwendung von Nicht-ASCII-Zeichen in bestimmten beschreibenden Feldern, gewährleistet jedoch weiterhin die Abwärtskompatibilität mit älterer Datenlese- und Schreibsoftware, da die ASCII-Codierung eine Teilmenge der UTF-8-Codierung ist. Die meisten Zeichenbeschränkungen für Schlüsselwortwerte wurden ebenfalls in dieser Version aufgehoben. Diese wurden ursprünglich eingeführt, um die Lesbarkeit von Dateien, die an Fernschreiberdrucker ausgegeben wurden, zu erleichtern, und werden nicht mehr als notwendige Einschränkung angesehen;
- b) die Definition des Schlüsselworts #OFFSET wurde geändert, um anzugeben, dass der Wert des ersten spektralen Kanals vom Mittelpunkt des Kanals genommen wird;
- c) ein neues erforderliches Schlüsselwort, #TIMEZONE, wurde hinzugefügt, und das Schlüsselwort #TIME ist nun ausdrücklich erforderlich, um sicherzustellen, dass die Ortszeit und das Datum, zu denen die Daten aufgezeichnet wurden, eindeutig bestimmt werden können;
- d) acht neue optionale Schlüsselwörter wurden hinzugefügt: #ROTATION, #WORKDIST, #CRC32C, ##MNK-RESOL, ##SUPPAREA, ##SUPPTHICK, ##SUPPMAT und ##DETPOS;
- e) das neue optionale Fehlerprüfschlüsselwort #CRC32C wurde hinzugefügt, um eine robustere Fehlerprüfung als der ursprüngliche #CHECKSUM-Wert;
- f) das Dokument wurde redaktionell überarbeitet.

Vorwort

ISO (die Internationale Organisation für Normung) ist eine weltweite Vereinigung nationaler Normungsinstitute (ISO-Mitgliedsorganisationen). Die Erstellung von Internationalen Normen wird üblicherweise von Technischen Komitees von ISO durchgeführt. Jede Mitgliedsorganisation, die Interesse an einem Thema hat, für welches ein Technisches Komitee gegründet wurde, hat das Recht, in diesem Komitee vertreten zu sein. Internationale staatliche und nichtstaatliche Organisationen, die in engem Kontakt mit ISO stehen, nehmen ebenfalls an der Arbeit teil. ISO arbeitet bei allen elektrotechnischen Normungsthemen eng mit der Internationalen Elektrotechnischen Kommission (IEC) zusammen.

Die Verfahren, die bei der Entwicklung dieses Dokuments angewendet wurden und die für die weitere Pflege vorgesehen sind, werden in den ISO/IEC Directives, Teil 1, beschrieben. Es sollten insbesondere die unterschiedlichen Annahmekriterien für die verschiedenen ISO-Dokumentenarten beachtet werden. Dieses Dokument wurde in Übereinstimmung mit den Gestaltungsregeln der ISO/IEC Directives, Teil 2, erarbeitet (siehe www.iso.org/directives).

Es wird auf die Möglichkeit hingewiesen, dass einige Elemente dieses Dokuments Patentrechte berühren können. ISO ist nicht dafür verantwortlich, einige oder alle diesbezüglichen Patentrechte zu identifizieren. Details zu allen während der Entwicklung des Dokuments identifizierten Patentrechten finden sich in der Einleitung und/oder in der ISO-Liste der erhaltenen Patenterklärungen (siehe www.iso.org/patents).

Jeder in diesem Dokument verwendete Handelsname dient nur zur Unterrichtung der Anwender und bedeutet keine Anerkennung.

Für eine Erläuterung des freiwilligen Charakters von Normen, der Bedeutung ISO-spezifischer Begriffe und Ausdrücke in Bezug auf Konformitätsbewertungen sowie Informationen darüber, wie ISO die Grundsätze der Welthandelsorganisation (WTO, en: World Trade Organization) hinsichtlich technischer Handelshemmnisse (TBT, en: Technical Barriers to Trade) berücksichtigt, siehe www.iso.org/iso/foreword.html.

Dieses Dokument wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 202, *Microbeam analysis*, erarbeitet.

Diese dritte Ausgabe ersetzt die zweite Ausgabe (ISO 22029:2012), die technisch überarbeitet wurde.

Die wesentlichen Änderungen sind folgende:

- Die Dateicodierung wurde in dieser Version von ASCII auf UTF-8 geändert. Dies ermöglicht die Verwendung von Nicht-ASCII-Zeichen in bestimmten beschreibenden Feldern, gewährleistet jedoch weiterhin die Abwärtskompatibilität mit älterer Datenlese- und Schreibsoftware, da die ASCII-Codierung eine Teilmenge der UTF-8-Codierung ist. Die meisten Zeichenbeschränkungen für Schlüsselwortwerte wurden ebenfalls in dieser Version aufgehoben. Diese wurden ursprünglich eingeführt, um die Lesbarkeit von Dateien, die an Fernschreiberdrucker ausgegeben wurden, zu erleichtern, und werden nicht mehr als notwendige Einschränkung angesehen.
- Die Definition des Schlüsselworts #OFFSET wurde geändert, um anzugeben, dass der Wert des ersten spektralen Kanals vom Mittelpunkt des Kanals genommen wird.
- Ein neues erforderliches Schlüsselwort, #TIMEZONE, wurde hinzugefügt, und das Schlüsselwort #TIME ist nun ausdrücklich erforderlich, um sicherzustellen, dass die Ortszeit und das Datum, zu denen die Daten aufgezeichnet wurden, eindeutig bestimmt werden können.
- Acht neue optionale Schlüsselwörter wurden hinzugefügt: #ROTATION, #WORKDIST, #CRC32C, ##MNK-RESOL, ##SUPPAREA, ##SUPPTHICK, ##SUPPMAT und ##DETPOS.

- Das neue optionale Fehlerprüf Schlüsselwort #CRC32C wurde hinzugefügt, um eine robustere Fehlerprüfung als der ursprüngliche #CHECKSUM-Wert.

Rückmeldungen oder Fragen zu diesem Dokument sollten an das jeweilige nationale Normungsinstitut des Anwenders gerichtet werden. Eine vollständige Auflistung dieser Institute ist unter www.iso.org/members.html zu finden.

Einleitung

Das ursprüngliche EMSA/MAS-Standard-Dateiformat für den Datenaustausch von Spektren wurde im Oktober 1991 veröffentlicht. Seitdem haben Fortschritte sowohl in der Mikrobereichsanalyse als auch im Bereich der Computertechnologie dazu geführt, dass dieser ursprüngliche Standard den heutigen Anforderungen nicht mehr vollständig gerecht wird. Die vorliegende aktualisierte Fassung wird von den Mitgliedern des ISO/TC 202 vorgeschlagen. Es wurde insbesondere darauf geachtet, nur solche Änderungen vorzunehmen, die die Anwendbarkeit der Norm verbessern oder an den aktuellen Stand anpassen, wobei versucht wurde, Inkompatibilitäten mit der Originalfassung auf ein Mindestmaß zu beschränken. Der Aufgabenbereich des ISO/TC 202 umfasst nicht Verfahren der Oberflächenanalyse; diese fallen in den Bereich des ISO/TC 201, weshalb Verweisungen auf entsprechende Verfahren gegenüber der ursprünglichen Fassung wo nötig gestrichen wurden. Das ursprüngliche Dokument enthielt außerdem Beispiele für Kodierungs- und Telekommunikationsprotokolle. Da diese mittlerweile größtenteils veraltet sind und für die Formatierung der Daten keine wesentliche Rolle spielen, wurden sie ebenfalls gestrichen.

Es wird darauf hingewiesen, dass eine der titelgebenden Organisationen (EMSA) seit Veröffentlichung des ursprünglichen Dokuments ihren Namen geändert hat. Der offizielle Name lautet nun „Microscopy Society of America“ (MSA), der Namensbestandteil „Electron“ wurde gestrichen, um die Arbeit und das Interesse der Mitglieder der Gesellschaft an jeglicher Form der Mikroskopie besser widerzuspiegeln.

1 Anwendungsbereich

Dieses Dokument stellt ein einfaches, als EMSA/MAS-Standard bezeichnetes Format für den Austausch digitaler Spektrendaten vor. Dieses Format ist sowohl für den Menschen als auch für Computer lesbar und zur Übertragung durch verschiedene elektronische Netze, das Telefonsystem (mit Modems) oder auf physikalischen Computerspeichern (wie mobile Speichermedien) geeignet. Das Format ist nicht an einen Computer, eine Programmiersprache oder ein Computerbetriebssystem gebunden. Die Anwendung dieses Standardformats ermöglicht unterschiedlichen Laboratorien den freien Austausch von Spektrendaten und hilft bei der Standardisierung von Datenanalysesoftware. Wenn die Gerätehersteller ein gemeinsames Format unterstützen, kann die Mikroskopie- und Mikroanalyse-Gemeinschaft den doppelten Aufwand, den das Schreiben von Datenanalysesoftware darstellen würde, vermeiden.

2 Normative Verweisungen

Es gibt keine normativen Verweisungen in diesem Dokument.

3 Begriffe

In diesem Dokument werden keine Begriffe aufgeführt.

ISO und IEC stellen terminologische Datenbanken für die Verwendung in der Normung unter den folgenden Adressen bereit:

- ISO Online Browsing Platform: verfügbar unter <https://www.iso.org/obp>
- IEC Electropedia: verfügbar unter <https://www.electropedia.org/>

4 Allgemeine Betrachtungen

Die Vorzüge eines einzigen Standard-Datenformats wurden bereits von verschiedenen Autoren sehr anschaulich beschrieben [1] [2] [3] [4]. Oft wäre es praktisch, nachdem ein anderes Labor aufgesucht wurde, um einen anderen Spektrometertyp für die Mikroanalyse zu benutzen, zur Auswertung der Daten in das eigene Labor zurückkehren zu können oder wenn ein Labor ein Spektrum an eine andere Gruppe an einem anderen Standort versenden könnte, damit diese das Spektrum auf ihrem Computer analysieren könnte. Mit einem gemeinsamen Format ermöglicht es außerdem, Prüfspektren zwischen Datenerfassungssystemen zu transportieren, um unterschiedliche Datenanalyseroutinen zu vergleichen, und der Anwender hätte basierend auf kommerzieller oder auf Public-Domain-Software eine größere Auswahlmöglichkeit in Bezug auf das Analyseverfahren. Am wichtigsten ist, dass es eine Methode zum Archivieren von Daten bietet, die nicht auf der fortlaufenden Verfügbarkeit eines bestimmten Geräts oder einer bestimmten Softwareversion beruht, um zugänglich zu bleiben.

Eine Ideallösung für die Hersteller ist die Darstellung der Daten in einem Standardformat, doch ohne eine gewisse Richtungsvorgabe seitens ihrer Kunden (der Mikroanalyse-Gemeinschaft) ist eine Einigung hierzu eher unwahrscheinlich. Daher ist es in hohem Maße wünschenswert, dass EMSA und MAS mit der Verabschiedung eines Standardformats voranschreiten. Ein derartiges Format schließt nicht aus, dass Forschungsgruppen oder Hersteller ihre eigenen, möglicherweise proprietären Formate anwenden. Intern können Spektrendaten in jedem beliebigen Format gespeichert werden, solange die Möglichkeit besteht, dieses Format zwecks Austausches in den externen Standard umzuwandeln (und umgekehrt). Ein Standardformat sollte die folgenden Merkmale aufweisen.

- a) Es sollte die Daten exakt (ohne Veränderung des wissenschaftlichen Inhalts) darstellen können.
- b) Das Format sollte einfach und leicht zu verwenden sein.
- c) Es darf NICHT an einen bestimmten Computer, eine bestimmte Programmiersprache oder ein bestimmtes Betriebssystem gebunden sein. Es sollte auf einer großen Anzahl von Computern jeglicher Größe funktionieren, wobei nicht garantiert werden kann, dass es auf sämtlichen möglichen Computern funktionieren wird.

- d) Das Format sollte sowohl für den Menschen als auch für Maschinen (Computer) lesbar sein.
- e) Es sollte mit bestehenden elektronischen Kommunikationsnetzen kompatibel sein. Zukünftige Netzwerke werden wahrscheinlich die Kompatibilität mit diesen Netzen beibehalten.
- f) Das Format sollte Spektren unterstützen, die für die Mikrobereichsanalyse-Gemeinschaft von Interesse sind (zum Beispiel XEDS, EELS, AES) und ausreichend flexibel sein, um zukünftige, noch nicht festgelegte Datensätze integrieren zu können.
- g) Jede Datei sollte ausreichend Informationen enthalten, um Typ und Ursprung der Spektrendaten eindeutig identifizieren zu können und deren Signifikanz zu rekonstruieren.
- h) Falls möglich, sollte das Format mit verschiedenen handelsüblichen Datendarstellungs- oder -analyseprogrammen kompatibel sein (d. h. Tabellenkalkulationsprogramme oder Graphikauswertungspakete).
- i) Das vorgeschlagene Format braucht kein hocheffizienter Speichermechanismus zu sein. Seine vorstehend genannten primären Ziele schließen im Allgemeinen eine hohe Speichereffizienz aus. Dieses Format ist eher darauf ausgerichtet, einfach und benutzerfreundlich zu sein.

Das ursprünglich von der Electron Microscopy and Microanalysis Public Domain Library (EMMPDL) in Argonne [1] angewendete Format besitzt zwar den Vorteil, dass es einfach ist, für eine allgemeine Anwendung ist es jedoch zu unflexibel. In einer kürzlich erfolgten Überarbeitung [5] wurden einige Unzulänglichkeiten behoben, eine umfassendere Neubearbeitung ist jedoch bereits gestartet. Das von einer früheren EMSA-Task-Force [3] [4] vorgeschlagene Format spricht viele dieser Probleme an, wird jedoch von einigen Mikroskopikern für die alltägliche Anwendung als zu kompliziert angesehen. Das VAMAS-Format, dessen Beschreibung [6] sich auf 60 Seiten beläuft, ist für die vorgesehenen Zwecke ebenfalls zu komplex. Ein als JCAMP-DX bezeichnetes Format, das von der Infrarotspektroskopie-Gemeinschaft [2] verwendet wird, ist zwar spezifisch und detailliert, jedoch für die Spektroskopien, die in der Mikrobereichsanalyse durchgeführt werden, nicht ganz geeignet.

Das hier vorgeschlagene Format folgt in vielerlei Hinsicht dem JCAMP-DX-Format, ist jedoch weniger kompliziert und umfasst Merkmale, die speziell auf die Röntgen-, Energieverlust- und Auger-Elektronenspektroskopie ausgerichtet sind. Eine Vorabversion dieses Vorschlags wurde verschiedenen Herstellern von XEDS-Systemen zur Verfügung gestellt, welche Kommentare und Anregungen erhalten haben, von denen viele in das vorliegende Dokument eingearbeitet wurden.

5 Beschreibung des Formats

5.1 Allgemeines

Die allgemeine Struktur des Dateiformats lässt sich unter Benutzung der UTF-8-Kodierung als eine einfache sequenzielle Textdatei zusammenfassen. Sie beginnt mit einer Reihe von Kopfzeilen, die dazu dienen, die Merkmale des Spektrums zu definieren. Diese Kopfzeilen sind durch eindeutige Schlüsselwort-Felder identifiziert, die die ersten 15 Stellen jeder Zeile belegen und an die sich ein Datenfeld anschließt. Dies ist 5.2 bis 5.4 genauer beschrieben. Nach den Kopfzeilen gibt ein Schlüsselwort den Beginn der Daten an, die dann in aufeinanderfolgenden Zeilen auf eine im Kopf ausdrücklich definierte Art und Weise folgen. Nachdem alle Daten dargestellt wurden, wird schließlich durch ein Datenabschluss-Schlüsselwort angegeben, dass der Datensatz vollständig ist. Schematisch lässt sich dies wie folgt darstellen.

Kopfzeilen

:

Aufeinanderfolgende Zeilen, beginnend mit durch EMSA/MAS definierten Schlüsselwörtern, von denen einige erforderlich und andere optional sind.

:

Schlüsselwort für den Beginn der Daten

:

Versuchsdaten

:

Schlüsselwort für das Ende der Daten

Im Allgemeinen enthält jede Zeile der Datei entweder ein Schlüsselwort und dessen zugehörigen Wert oder Spektrendaten. Alle Kopfzeilen können leicht identifiziert werden, da sie jeweils mit „#“ im ersten Zeichenfeld oder der ersten Spalte beginnen. Dieses Symbol kennzeichnet den Beginn eines 13 Zeichen langen Schlüsselwort-Feldes, das beschreibende Informationen zu den Daten enthält, gefolgt von einem zugehörigen Wert. EMSA/MAS-definierte Schlüsselwörter (deren Definition nur durch EMSA/MAS geändert werden darf) beginnen mit einem einzelnen # und belegen die ersten 13 Spalten (Zeichen) jeder Kopfzeile. Das Schlüsselwort selbst besteht aus höchstens 12 Zeichen, die sich unmittelbar an das # anschließen; kürzere Schlüsselwörter sind zulässig, wobei möglicherweise verbleibende Stellen nach dem definierten Schlüsselwort mit beschreibendem Text gefüllt werden dürfen, zum Beispiel mit einer Einheitenbezeichnung, um die Lesbarkeit bei einem Ausdruck der Datei zu erleichtern (siehe Beispiele in Tabelle 9). Wird eine Stelle im Schlüsselwort-Feld nicht genutzt, muss sie mit einem Leerzeichen gefüllt werden. Groß- und Kleinschreibung spielt bei den Schlüsselwörtern keine Rolle, sodass zum Beispiel #Xunits genauso interpretiert wird wie #XUNITS.

Die 14. und die 15. Zeichenstelle (Spalte) in jeder Zeile sind durch Schlüsselwort/Wert-Feldtrennzeichen belegt, die aus einem Doppelpunkt mit anschließendem Leerzeichen bestehen. Der mit jedem Schlüsselwort assoziierte Wert beginnt in Spalte 16 und kann entweder in Textform oder als Zahl vorliegen, je nachdem, was durch das Schlüsselwort vorgegeben ist. Die frühere Version dieser Norm sah eine Zeilenbegrenzung auf 79 Zeichen vor für Lesbarkeit auf CRT-Monitoren mit Standardbreite, doch wird dies nicht mehr für notwendig erachtet. Das Ende einer Zeile wird durch das Zeichenpaar Wagenrücklauf/Zeilenvorschub (<CR><LF>) angezeigt.

Die Dateicodierung muss UTF-8 sein. Jedoch sind die einzigen Zeichen in der Datei zulässigen Zeichen, außer wenn ausdrücklich anders angegeben, Leerzeichen (UTF-8-Zeichen 32), Wagenrücklauf (UTF-8-Zeichen 13) und Zeilenvorschub (UTF-8-Zeichen 10) sowie der folgende druckbare UTF-8-Zeichensatz:

!"#\$%&'()*+,-./0123456789;<=>? @ (UTF-8-Zeichen 33 bis 64)

ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ (UTF-8-Zeichen 65 bis 90)

abcdefghijklmnopqrstuvwxyz (UTF-8 97 bis 122)

[\]^_`{|}~ (UTF-8-Zeichen 91 bis 96, UTF-8-Zeichen 123 bis 126)

Horizontale Tabulatorzeichen als Ersatz für Leerzeichen oder Kommas sind in diesem Dateiformat NICHT zulässig. Beispiele für Schlüsselwörter, Trennzeichen und Daten können Tabelle 1 entnommen werden. Bei der Benennung der Datei sollten die Erweiterungen .TXT, .EMSA oder .MSA verwendet werden.

5.2 Erforderliche Schlüsselwörter

Die folgenden Schlüsselwörter sind erforderlich und müssen zu Beginn der Datei in der in Tabelle 1 festgelegten Reihenfolge erscheinen. Zwar mögen einige dieser Schlüsselwörter willkürlich gewählt erscheinen, jedoch sollen sie einem langfristigen Bedarf genügen. Wenn ein Labor über viele Jahre hinweg von Studenten und externen Personen genutzt wird, kann dies zu einer Unmenge von Dateien unbekannten Ursprungs führen. Sofern nicht von Beginn an eine geeignete Form der Kennzeichnung durchgesetzt wird, gehen viele wertvolle Dateien verloren, während nutzlose Daten immer noch auf der Festplatte vorhanden sind und wertvollen Spei-

E DIN ISO 22029:2024-06

cherplatz belegen. Mit der folgenden Mindestmenge an Schlüsselwörtern sollte es möglich sein, die Signifikanz der meisten Spektren zu rekonstruieren.

Es muss beachtet werden, dass jedes erforderliche Schlüsselwort genau einmal vorkommen muss, ausgenommen das Schlüsselwort #TITLE, das mindestens einmal vorkommen muss, jedoch nach Ermessen des Benutzers mehr als einmal vorkommen darf, um einen längeren Titel anzugeben.

Tabelle 1 — Erforderliche Schlüsselwörter

#FORMAT	Zeichenkette, die dieses Format identifiziert als „EMSA/MAS-Spektrendatei“
#VERSION	Versionsnummer des Dateiformats (für diese Implementierung TC202v3.0)
#TITLE	Gibt eine kurze Beschreibung des Spektrums. Je Datei einmal oder mehrmals.
#DATE	Der Kalendertag, -monat, -jahr, in dem das Spektrum aufgezeichnet wurde, mit dem Monat in Buchstaben und dem Jahr und dem Tag in Zahlen im Format: TT-MMM-JJJJ. Beispiel: 07-JUL-2021.
#TIME	Die Ortszeit, zu der das Spektrum aufgezeichnet wurde, im 24-Stunden-Format: HH:MM.
#TIMEZONE	Die Differenz der Ortszeit Zeit relativ zur koordinierten Weltzeit (UTC) in Stunden. Für nicht ganzzahlige Differenzen muss dies im Dezimalformat angegeben werden. Zum Beispiel hat Indien eine Ortszeit, die der koordinierten Weltzeit 5:30 Stunden voraus ist und deshalb einen Wert der #TIMEZONE von 5,5 hat.
#OWNER	Der Name der Person, die das Spektrum aufgezeichnet hat.
#NPOINTS	Gesamtanzahl der Datenpunkte in X- und Y-Datenfeldern. $1. \leq \text{NPOINTS}$. Der ursprüngliche EMSA-Standard hatte als Obergrenze 4096 festgelegt. Dies wird als eine zu starke Beschränkung und für moderne Computersysteme als unnötig angesehen.
#NCOLUMNS	Anzahl der Datenspalten $1. \leq \text{NCOLUMNS} < 5$. wenn DATATYPE Y $1. \leq \text{NCOLUMNS} < 3$. wenn DATATYPE XY Es wird empfohlen, Werte > 1 nicht zu verwenden, da mehrspaltige Formate Probleme beim Importieren der Daten in Tabellenkalkulationspakete verursachen. Ursprünglich sollte mit mehreren Spalten bei Fernschreiberausdrucken von Dateien Platz gespart werden.
#XUNITS	Einheiten für Daten der x-Achse, z. B.: eV.
#YUNITS	Einheiten für Daten der y-Achse, z. B.: counts.
#DATATYPE	Typ, in dem die Datenwerte gespeichert sind: Werte nur der Y-Achse oder X,Y-Datenpaare. Die aktuellen Optionen sind die Zeichen Y und XY.
#XPERCHAN	Die Anzahl der x-Achsen-Einheiten je Kanal.
#OFFSET	Eine reelle (aber möglicherweise negative) Zahl, die den Mittelwert von Kanal Eins in der gleichen Einheit wie #XUNITS darstellt.

Tabelle 1 (fortgesetzt)

#SPECTRUM	Gibt an, dass in der nächsten Zeile die Spektrendaten beginnen. Es muss beachtet werden, dass es zulässig ist, auf dieser Zeile nach dem Doppelpunkt beschreibenden Text hinzuzufügen (siehe den Beispiel-Datensatz in Tabelle 9).
#ENDOFDATA	Gibt das Ende der Spektrendaten an. Es muss beachtet werden, dass es zulässig ist, auf dieser Zeile nach dem Doppelpunkt beschreibenden Text hinzuzufügen (siehe den Beispiel-Datensatz in Tabelle 9).

5.3 Spektrendaten

Die Spektrendaten müssen zwischen zwei Schlüsselwörtern aufgeführt sein:

#SPECTRUM : Bedeutet den Beginn der Spektrendaten (in der nächsten Zeile).
#ENDOFDATA : Bedeutet das Ende der Spektrendaten.

Zwischen diesen Schlüsselwörtern wird das Spektrum auf eine von zwei Arten, festgelegt durch den Wert von #DATATYPE, aufgelistet.

Bei Spektren mit abstandsgleichen x -Werten (gleiche Inkremente je Kanal) können bis zu #NCOLUMNS y -Werte je Zeile angegeben werden. Für den xy -Achsen-Datentyp gilt $1 < \text{\#NCOLUMNS} < 5$. Jeder y -Wert ist entweder eine reelle Zahl (mit einem Dezimalpunkt als Dezimaltrennzeichen, sofern gefordert) oder er wird exponentiell angegeben (z. B. $3.142\text{E}+3$), und es schließt sich unmittelbar ein Komma an. Die zugehörigen x -Werte können aus den angegebenen Werten von #XPERCHAN und #OFFSET oder #CHOFFSET ermittelt werden.

Wenn der Benutzer dies vorzieht, dürfen Daten bei #NCOLUMNS je Zeile als (x,y) -Datenpunktpaare gespeichert werden. Für den XY -Achsen-Datentyp gilt $1 \leq \text{\#NCOLUMNS} < 3$. Die x - und y -Werte werden als reelle Zahlen oder exponentiell angegeben und durch ein Komma voneinander getrennt. Um Verwirrung oder Mehrdeutigkeit zu vermeiden, darf ein Komma weder als Dezimaltrennzeichen noch als Tausendertrennzeichen in den numerischen Werten verwendet werden, sondern nur als Trennzeichen zwischen Werten auf einer Zeile. Wenn mehr als ein (x,y) -Paar je Zeile vorhanden ist, werden die (x,y) -Paare selbst durch ein Komma voneinander getrennt, gefolgt von mindestens einem Leerzeichen. Wagenrücklauf- und Zeilenvorschubzeichen dienen als Trennzeichen für den letzten Datenwert einer Zeile. Zusätzliche Leerzeichen oder Komma-Trennzeichen dürfen zur Klarheit hinzugefügt werden, aber jedes Programm, das die Datenwerte ausliest, sollte aufeinanderfolgende Trennzeichen als ein einziges behandeln. Der Datenwert Null muss daher ausdrücklich durch mindestens ein „0“-Textzeichen dargestellt werden und nicht durch zwei aufeinanderfolgende Trennzeichen.

Ganze Zahlen werden deshalb vermieden, weil in einigen Fällen Dezimalwerte erzeugt werden, z. B. wenn Energieverlustspektren für eine Normierung skaliert wurden oder um eine Verstärkungsänderung zu beseitigen. Um ganzzahlige Werte zu erhalten, können Dezimalpunkt und Komma erforderlichenfalls mit einem Texteditor entfernt werden (durch globales Ersetzen), während der umgekehrte Vorgang nicht ganz so einfach sein kann.

Numerische Werte zwischen 1 und -1 können entweder mit oder ohne Null vor dem Dezimalpunkt dargestellt werden (z. B. 0.1 oder .1 sind gleichwertig und zulässig). Bei negativen Zahlen sollten zwischen dem Minuszeichen und dem Zahlenwert keine Leerzeichen stehen. Es wird empfohlen, nach einer Zahl (vor dem Komma) ebenfalls keine Leerzeichen zu verwenden. Die (x,y) -Option wurde mit aufgenommen, um segmentierte Spektren, die Lücken enthalten, bei denen keine y -Daten angegeben sind, zu berücksichtigen und um auch nichtlineare x -Achsen-Skalen zu ermöglichen. Außerdem sind die Daten dadurch mit den meisten Allzweck-Softwarepaketen zur Darstellung von Graphen kompatibel. In zukünftigen Versionen des Formats kann diese Möglichkeit durch räumliche x - und y -Koordinaten erweitert werden, um auch Röntgenabbildungen oder energiegefilterte Bilder zu berücksichtigen, allerdings könnte eine auf einem TIFF-Standard basierende kompakte Darstellung wünschenswerter sein.