Brauch Analytische Geräte GmbH raman-analytik.de



Bedienungsanleitung

Raman Spektrometer MA-RBE-V02

Raman Spektrometer, Software Suite Vers. 1.6

RamanControl, RamanAnalyzer, SaveDataBrowser

Lesen Sie die Bedienungsanleitung und die Sicherheitshinweise vor der ersten Inbetriebnahme sorgfältig durch!

Dr. Ilko Brauch, Sven Brauch E-Mail: kontakt@raman-analytik.de

https://raman-analytik.de

Inhalt

	1.1.1 Technische Daten	3
	1.1.2 Übersicht über die Gerätemodule	4
2	Kurzanleitung zur Bedienung	5
	2.1 Start des Geräts und der Software RamanControl	5
	2.2 Auswahl der Stelle auf der Probe	6
	2.3 Aufnahme eines Spektrums	g
	2.4 Identifikation des Spektrums	11
	2.5 Ergebnisse speichern	13
	2.6 Speichern	14
3	Suche, Identifizieren des Spektrums	15
	3.1 Korrelation	15
	3.2 Peakerkennung	15
	3.3 Manuelle Peak-Auswahl	16
	3.4 Zoomfunktion und Vergleich mehrerer Spektren	16
	3.5 Nach chemischen Elementen suchen	17
	3.6 Nach Formelteilen suchen	17
	3.7 Möglichkeiten zur Untergrundentfernung	18
	3.7.1 Goldindec	
	3.7.2 Splines	
	3.8 Linienhäufigkeiten und Überlagerung zweier Spektren	19
	3.9 Link zu RRUFF, Mineralienatlas und Mindat	20
4	RamanSaveDataBrowser	22
	4.1 Beispielbericht	23
	4.2 Metadaten bearbeiten	25
	4.3 Neu analysieren	25
	4.4 Backup	
5	RamanAnalyzer	26
	5.1 Eigene Spektren in Bibliothek aufnehmen	27
6	Weitere Programmfunktionen	29
	6.1 Vorschau des Spektrums	29
	6.2 Neue Probe oder neue Messung	30
	6.3 Parameter zur Peakerkennung	30
	6.4 Menüpunkt "Datei"	31

	6.4.1	Pfad zum Speichern der Daten festlegen	31
	6.4.2	Raman-Bibliotheken konfigurieren	31
6.5	Menüp	ounkt "Einstellungen"	32
	6.5.1	Kameraeinstellungen anpassen	32
6.6	Kalibra	ation	34
	6.6.1	Ein-Linien-Kalibration	35
6.7	Menüp	ounkt "Modus"	36
6.8	Menüp	ounkt "Language": Umstellen auf Englisch	36

1 Technische Daten

Typbezeichnung: Raman-Spektrometer MA-RBE-V02

Hersteller: Brauch Analytische Geräte GmbH

Herstellungsdatum:

Art des Lasergeräts: Raman-Spektrometer

Vorgesehener Anwendungsbereich: Raman-Spektroskopie von Mineralproben

Laser-Lebensdauer: 10.000 h

Laser

Wellenlänge:	531.8 nm
Leistung:	50 mW

Spektrometer

Wellenzahlbereich:	100 bis 1.800 cm ⁻¹ , konfigurierbar	
Auflösung:	< 2 cm ⁻¹	
Eingebautes Gitter:	1.200 Linien/mm, 50 mm × 50 mm × 9.5 mm	

Detektorkamera

Auflösung:	16 Megapixel (4656 × 3520)	
Belichtungszeiten:	32 μs bis 2000 s	
Kühlung: 40 K unter Umgebungstempera		

Bildgebungskamera

Auflösung: 2	2,3 Megapixel 1936 x 1216
--------------	---------------------------

Physikalische Daten

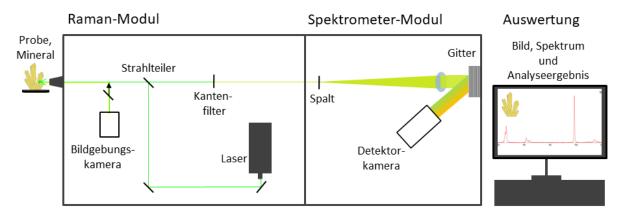
Raman-Modul, (LxBxH):	50 cm × 38 cm × 22 cm	
Raman-Modul, Gewicht	25 kg	
Spektrometer-Modul, (LxBxH):	45 cm × 38 cm × 22 cm	
Spektrometer-Modul, Gewicht	13 kg	
Gesamtabmessungen inkl. Probentisch:	110 cm × 38 cm × 22 cm	

1.1 Übersicht über die Gerätemodule

Das Raman-Spektrometer besteht aus einem Raman-Modul und einem Spektrometer-Modul. Die eigens für das Gerät entwickelte Betriebssoftware "RamanControl" ermöglicht eine komfortable und einfache Bedienung des Geräts. In dem Gerät ist eine Bildgebungskamera integriert, über welche Sie die Probe im Livebild betrachten und eine Stelle auf der Probe auswählen können. Über einen motorisiert verfahrbaren Strahlteiler können Sie so neben den Raman-Spektren auch ein hochauflösendes Farbbild der vermessenen Stelle wiedergeben und abspeichern. Filterwechsel und Anpassungen der Vergrößerungsstufen führen Sie einfach per Mausklick durch.

Zur Analyse und Organisation der aufgenommenen Messdaten stehen Ihnen die separaten Programme "RamanAnalyzer" und "SaveDataBrowser" zur Verfügung. Sie können hiermit einmal aufgenommene Spektren jederzeit neu analysieren. Sie haben die Möglichkeit, automatisch einen Kurzbericht zu der erfolgten Analyse mit einem Bild der Probe und dem Analyseergebnis zu erzeugen.

Anhand eines speziellen Fingerabdruck-Verfahrens, welches signifikante Merkmale im untersuchten Spektrum erkennt, bewertet und mit einer Datenbank abgleicht, können Sie Spektren von Mineralien innerhalb weniger hundertstel Sekunden unter tausenden Datenbankeinträgen identifizieren.



Skizze der wesentlichen Komponenten des Raman-Spektrometers

Die wesentlichen Schritte zur Bestimmung eines Minerals mit dem Raman-Spektrometer sind:

- Auswahl der Stelle auf der Probe
- Aufnahme des Spektrums
- Identifizieren des aufgenommenen Spektrums
- Speichern der Resultate

2 Kurzanleitung zur Bedienung

Die Software für das Gerät umfasst die folgenden drei Komponenten:

- Raman Spectrometer Control zur Steuerung des Gerätes und Erfassung von Spektren
- Raman Spectrum Analyzer zur geräteunabhängigen Analyse
- Raman Save Data Browser zum einfachen Ablegen und Wiederauffinden von Daten.

2.1 Start des Geräts und der Software RamanControl

- Probe auf dem Probentisch vor einem Objektiv im Abstand von ca. 8 mm positionieren. Die Probe darf nicht über den Probentisch hinausragen, um die Objektive bei Drehung nicht zu beschädigen. Steht die Probe am Rand des Probentischs, hat sie bereits etwa den richtigen Abstand.
- Gerät am Hauptschalter einschalten. Laser einschalten durch Drehen des Schlüsselschalters auf der gegenüberliegenden Gehäuseseite. Der Laser beginnt nach maximal 30-60 Sekunden zu leuchten und hat eine Aufwärmzeit von wenigen Minuten, nach welcher sich die Wellenlänge stabilisiert.
- Software RamanControl starten. Im Startfenster erscheint ganz unten die Anzeige "Verbunden".



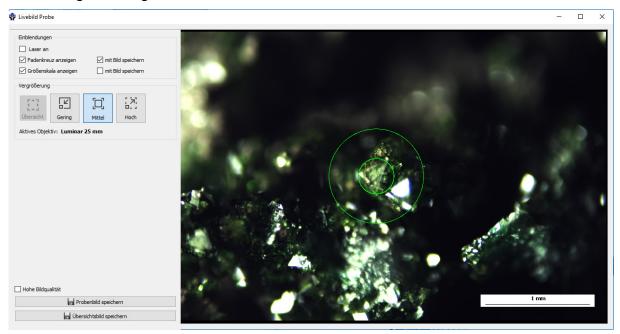
RamanControl Startfenster, Software ist mit dem Raman-Spektrometer verbunden

2.2 Auswahl der Stelle auf der Probe



RamanControl Startfenster, Auswahl Videomodus

Um eine bestimmte Stelle auf Ihrer Probe zu finden, wählen Sie nun den Modus "Video". Jetzt wird ein Bild der Probe live auf dem Monitor angezeigt. Verschieben Sie die Probe von Hand und mit Hilfe der Stellschrauben am xyz-Tisch so lange, bis Sie die Stelle der Probe, die Sie untersuchen möchten, im Videobild erkennen. Um sich auf der Probe zu orientieren, beginnen Sie mit der geringsten und wechseln dann zu höherer Vergrößerung.



Übersichtsbild der Probe bei niedriger Vergrößerung

Im Fenster links oben neben dem Videobild der Probe finden Sie die Checkbox "Laser an". Ein Setzen des Hakens blendet den Laserstrahl ins Bild ein. Durch erneutes Klicken wird der Laser wieder ausgeblendet.

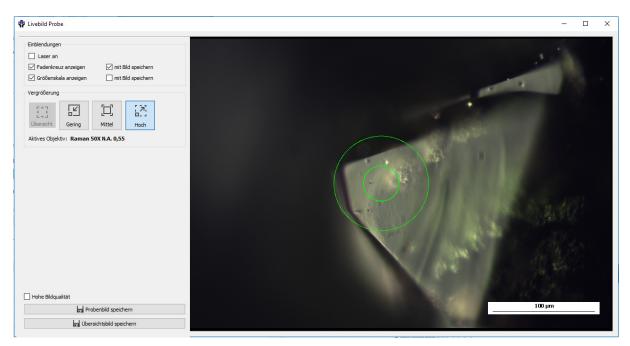


Bild der Probe, hohe Vergrößerung durch das Raman-Objektiv mit eingeblendetem Messkreis bzw. Fadenkreuz

Außerdem können Sie ein Fadenkreuz und einen Maßstab im Bild ein- oder ausblenden. Im Fenster neben dem Bild können Sie auch die Vergrößerung einstellen. Durch Klicken auf die entsprechende Bildschaltfläche wird automatisch das Objektiv gewechselt und das Bild in der neuen Vergrößerung angezeigt. Die Bezeichnung des aktuell verwendeten Objektivs wird im Fenster links neben dem Bild eingeblendet.

Ist die zu untersuchende Stelle bei geringer Vergrößerung zentriert, wechseln Sie zu höherer Vergrößerung. Die Aufnahme eines Spektrums muss immer mit dem "Raman-Objektiv" durchgeführt werden. Dieses ist das am stärksten vergrößernde Objektiv, welches den Strahl am besten auf der Probe fokussiert. Die schwächer vergrößernden Objektive sind nicht zur Aufnahme der Raman-Spektren vorgesehen.

Haben Sie "Fadenkreuz aktiviert" im Fenster links neben dem Bild eingestellt, so werden im Videobild zwei konzentrische Kreise eingeblendet. Die zu analysierende Stelle muss in die Mitte des inneren Kreises gebracht werden. Durch Einblenden des Laserstrahls sehen Sie genau, welche Stelle der Probe analysiert wird.

Im unteren Teil des Fensters links neben dem Bild finden Sie außerdem die Möglichkeit, das Probenbild zu speichern. Falls Sie noch ein Bild bei geringerer Vergrößerung als Übersichtsbild zu der Messung archivieren möchten, wählen Sie "Übersichtsbild speichern".

Bevor Sie die Aufnahme des Spektrums durchführen, tragen Sie zur Benennung der Probe zunächst Ihre Sammlungsnummer ein. Zur Eingabe wählen Sie die Schaltfläche "Bearbeiten".



RamanControl Startfenster, Probeneigenschaften und Filterdichte einstellen

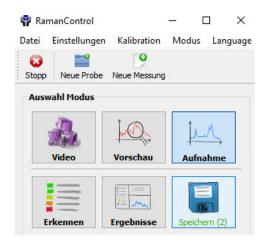
Für viele Proben kann die Laserleistung voll ausgenutzt werden. Wollen Sie aber eine wärmeempfindliche oder unbekannte Probe untersuchen, wählen Sie hier ein Filter aus.

Filter wählen

Da der Laserstrahl sehr stark fokussiert wird, wird heizt sich die Probe ohne Filter an der untersuchten Stelle auf und könnte zerstört werden.

Wir empfehlen zunächst mit der Filtereinstellung 0,6 zu beginnen, für empfindliche Proben sollte die Laserleistung durch ein entsprechendes Filter im Strahlengang weiter abgeschwächt werden.

2.3 Aufnahme eines Spektrums

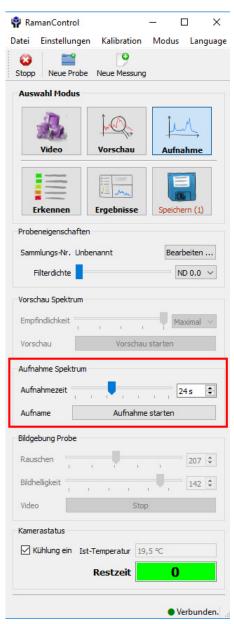


Modus "Aufnahme"

Nach Auswahl des Modus "Aufnahme" stellen Sie im RamanControl-Startfenster die Aufnahmeparameter für das Raman Spektrum ein.

Wählen Sie eine geeignete Belichtungszeit und die Filterstärke 0,6. Starten Sie mit kurzen Zeiten wie z.B. 10 s.

In Zweifelsfällen können Sie im Vorschaumodus die Signalstärke beobachten und danach auswählen. Für starke Signale ist bereits 1 s ausreichend. Mittlere Signale werden mit 30 s bis 60 s schon gute Ergebnisse liefern. Für empfindliche Proben, die mit abgeschwächter Laserleistung bestrahlt werden oder für sehr schwache Raman-Signale sind längere Belichtungszeiten zu empfehlen. Die maximale Belichtungszeit für eine Einzelaufnahme beträgt 1.800 s (30 min).

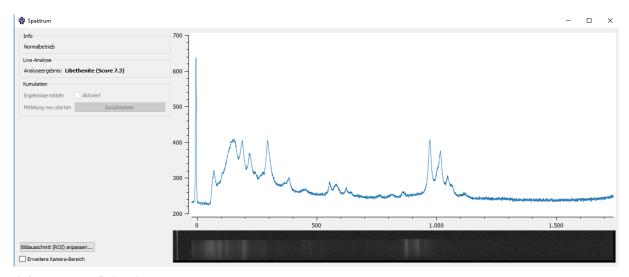


RamanControl Startfenster, Belichtungszeit zur Aufnahme eines Spektrums einstellen

Wurden die gewünschten Einstellungen durchgeführt, klicken Sie "Aufnahme starten", um eine Aufnahme mit der gewählten Belichtungszeit zu starten.

Die von der Belichtungszeit noch verbleibende Restzeit wird im roten Feld unten angezeigt. Sobald die gesamte Zeit verstrichen ist, erscheint die Restzeit "0", die Feldfarbe wechselt auf grün und das aufgenommene Spektrum wird angezeigt.

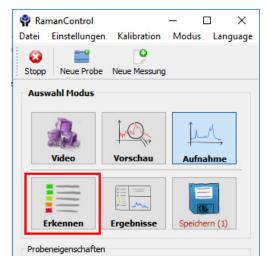
Sie können die laufende Aufnahme durch einen erneuten Klick auf den Aufnahme-Button (Aufnahme starten- Aufnahme stoppen) wieder abbrechen. Nach der Aufnahme wird das Rohspektrum angezeigt.



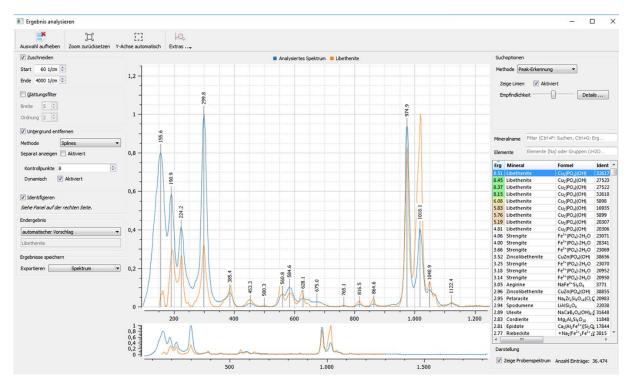
Aufgenommenes Rohspektrum

2.4 Identifikation des Spektrums

Um das aufgenommene Spektrum mit einem Bibliotheksspektrum zu vergleichen, wählen Sie im RamanControl-Startfenster nun den Modus "Erkennen".



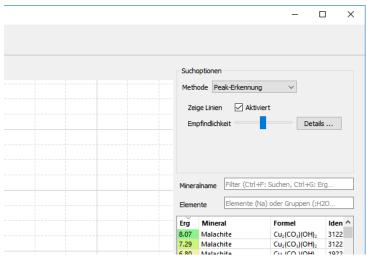
Modus "Erkennen" wählen



Aufgenommenes Spektrum nach Entfernung des Untergrunds und Vergleich mit Bibliotheksspektrum

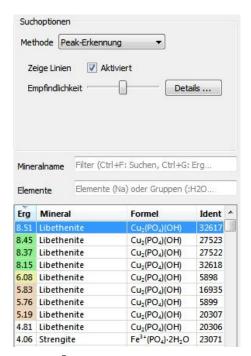
Für die Suche in der im festgelegten Verzeichnis vorhandenen Bibliothek der Mineralspektren wird der (insbesondere durch Fluoreszenz hervorgerufene) Untergrund automatisch vom aufgenommenen Spektrum abgezogen. Die Mineral-Spektren aus der Bibliothek, welche die beste Übereinstimmung mit dem gemessenen Spektrum aufweisen, werden mit dem Grad der Übereinstimmung rechts neben dem Spektrum angezeigt.

Zu jeder im Spektrum als Peak identifizierten Stelle kann die Raman-Verschiebung in Wellenzahlen angezeigt werden. Dazu muss rechts oben "Zeige Linien" aktiviert sein.



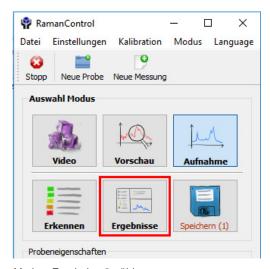
Linienbeschriftung aktiviert

Genaue Übereinstimmung des gemessenen Spektrums mit einem Spektrum aus der Bibliothek ergibt den höchsten Wert von 10. Im unteren Teil des Bereiches links neben dem Spektrum finden Sie außerdem wieder die Möglichkeit, das Ergebnis zu speichern.



Grad der Übereinstimmung der Aufnahme mit Bibliotheksspektren

2.5 Ergebnisse speichern



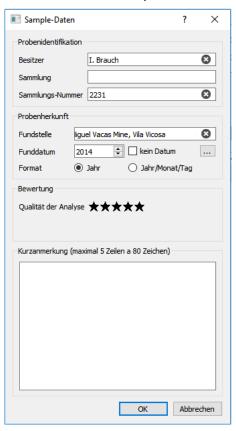
Modus "Ergebnisse" wählen

Über die Schaltfläche "Ergebnisse" gelangen Sie zum Ergebnis-Browser. Dieser zeigt, welche Daten bereits zum aktuellen Messpunkt zum Speichern vorgesehen sind (grünes Symbol) und welche evtl. noch fehlen (gelbes Achtung-Zeichen).



Ergebnis-Browser

Hier verschaffen Sie sich einen Überblick über die Ergebnisse. Möchten Sie die Daten zur Beschreibung der Probe bearbeiten, klicken Sie auf "Metadaten bearbeiten". Hier geben Sie weitere Daten zur Probe wie Fundort, Funddatum, Probenname, Sammlungsnummer etc. ein. Wenn Sie die Qualität der Analyse bewerten, können Sie diesen Parameter später zum Durchsuchen der Daten verwenden.



Fenster zur Eingabe weiterer Daten zur Beschreibung der Probe

Möchten Sie das Spektrum neu analysieren, wählen Sie "Neu analysieren" ganz rechts oben im Fenster "Ergebnis-Browser".

2.6 Speichern

Zum Abschluss der Raman-Messung speichern Sie alle Messergebnisse. Ein Klick auf den Button "Speichern" im RamanControl-Startfenster sichert alle zu der Probe vorhandenen Daten. Die erfolgreiche Sicherung wird durch den Wechsel der Schriftfarbe auf grün signalisiert.



Modus "Speichern"

Haben Sie während der Messung einzelne Daten gespeichert, z.B. das Probenbild oder ein spezielles Analyseergebnis, so werden diese Daten gespeichert. Ansonsten werden die zuletzt angezeigten Daten automatisch gespeichert. Die gesammelten Daten zur Probe werden zu jeder untersuchten Stelle der Probe in einem eigenen Ordner abgelegt.

3 Suche, Identifizieren des Spektrums

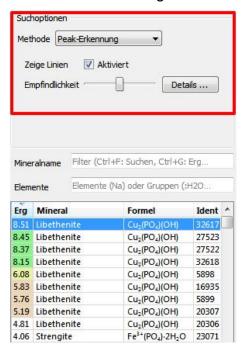
Nach der Messung im Modus "Erkennen" können Sie rechts oben neben dem Bild des Spektrums die Suchmethode auswählen.

3.1 Korrelation

Haben Sie im Suchfenster oben rechts "Korrelation" eingestellt, wird zum Vergleich des gemessenen Spektrums mit den in der Bibliothek vorliegenden Spektren der Wert der Korrelation zwischen den Spektren berechnet. Das Spektrum mit der höchsten Korrelation wird als Suchergebnis als oberstes Ergebnis in der Liste angezeigt. Danach werden die Spektren in der Reihenfolge angezeigt, in der die Korrelation zum gemessenen Spektrum abnimmt. Hierbei wird stark die Höhe der Peaks berücksichtigt.

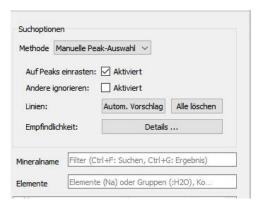
3.2 Peakerkennung

Haben Sie "Peakerkennung" als Suchmöglichkeit ausgewählt, werden die gemessenen Peaks nach Lage, Form und Höhe mit den Peaks der Spektren aus der Bibliothek verglichen. Da hier die Lage der Peaks im Unterschied zur Korrelation stärker in die Berechnung eingeht als die Höhe der Peaks, kann die Peakerkennung in vielen Fällen ein besseres Suchergebnis liefern.



Verschiedene Suchoptionen: Methode auswählen

3.3 Manuelle Peak-Auswahl



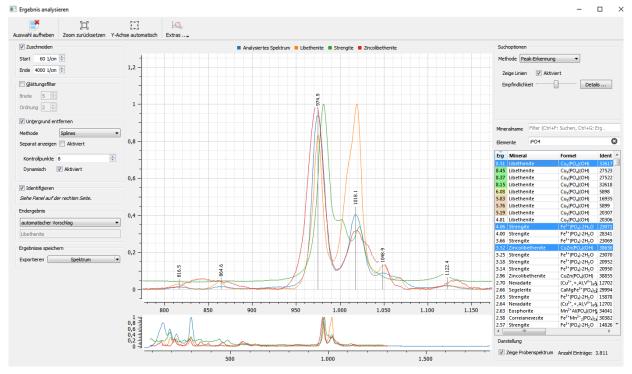
Manuelle Peak-Auswahl

Haben Sie die Suchoption "Manuelle Peak-Auswahl" eingestellt, können Sie einzelne Peaks mit der rechten Maustaste markieren. Ein Fadenkreuz an Ihrem Mauszeiger rastet auf der Spitze des Peaks ein, wenn Sie "auf Peaks einrasten" aktiviert haben. Dieser so gewählte Peak wird dann für die Suche ausgewählt. Bei der Auswahl mit der Maus gilt: Linksklick → Auswahl des Peaks, Rechtsklick → Aufheben der Auswahl des Peaks

Die Suchfunktion "Manuelle Peak-Auswahl" ist besonders geeignet, wenn eine Überlagerung mehrerer Spektren vorliegt. So kann beispielsweise eine Quarz-Linie im Spektrum erkannt und diese bei der nächsten Suche nicht mehr angewählt werden. Dann wird diese Linie bei der folgenden Suche beim Vergleich mit den Bibliotheksspektren nicht berücksichtigt.

Auch bei einer Interpretation sehr schwacher Spektren, in denen einzelne Peaks gegebenenfalls nur erahnt werden können, kann diese Funktion bei der Eingrenzung möglicher Suchergebnisse sehr hilfreich sein.

3.4 Zoomfunktion und Vergleich mehrerer Spektren



Überlagerung mehrerer Spektren und Zoomfunktion

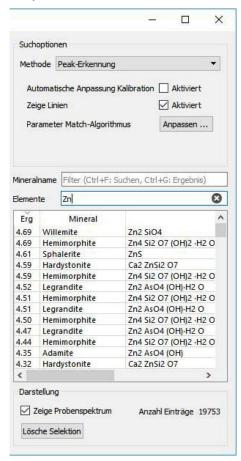
Die untere kleine Darstellung zeigt immer den gesamten Wellenzahlenbereich. Sie können mit der Maus kleine Wellenzahlenbereiche markieren und herauszoomen, im Bild wurde z.B. der Bereich zwischen 780 cm⁻¹ und 1170 cm⁻¹ herausvergrößert. Ganz oben in der oberen Leiste haben Sie die Möglichkeit über "Zoom zurücksetzen" wieder das gesamte Spektrum anzuzeigen.

Durch Anklicken mehrerer Einträge in der Liste der Datenbankeinträge rechts können Sie auch leicht mehrere Suchergebnisse miteinander vergleichen. Hier im Beispiel sind drei Bibliotheksspektren gleichzeitig mit dem aufgenommenen Spektrum dargestellt. Diese sind in der Liste rechts farbig hinterlegt. Ein zweiter Klick auf einen Eintrag wählt dieses Spektrum wieder ab. Über "Auswahl aufheben" in der Leiste oben ganz links werden alle angewählten Spektren gleichzeitig wieder abgewählt.

3.5 Nach chemischen Elementen suchen

Eventuell möchten Sie die Suchergebnisse eingrenzen, so dass nur die Mineralien, die ein bestimmtes Element enthalten, zum Vergleich der Spektren herangezogen werden. In das Feld "Elemente" können Sie dazu eines oder mehrere Elemente eintragen. Beim Eintrag von mehreren Elementen werden dann nur noch die Mineralien angezeigt, die alle angegebenen Elemente enthalten.

Zu jedem Mineral wird auch die chemische Formel angezeigt.

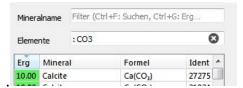


Mineralien, die das Element Zn enthalten, mit Name, Formel und Grad der Übereinstimmung

3.6 Nach Formelteilen suchen

In das Feld "Elemente" können Sie auch mit einem vorangestellten Doppelpunkt einen Teil der chemischen Formel eintragen, z.B. Ca₂, OH, CO₃ oder PO₄. Es werden dann

aus der Datenbank die Einträge herausgefiltert, die die angegebenen Formelteile enthalten. Nur diese werden dann in die Suche mit einbezogen.

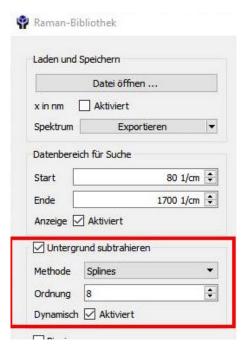


Suche nach Carbonaten

3.7 Möglichkeiten zur Untergrundentfernung

Das Raman-Signal wird oft durch einen intensiven Untergrund aufgrund der Fluoreszenz der Proben verdeckt. Daher ist es wichtig, den Untergrund vor der Analyse der Raman-Rohspektren zu korrigieren.

Befinden Sie nach der Messung im Modus "Identifizieren", können Sie auf der linken Seite im Bereich "Untergrund Subtrahieren" die Methode auswählen. Es stehen zwei verschiedene Methoden zur Auswahl.



Auswahl: Untergrund subtrahieren

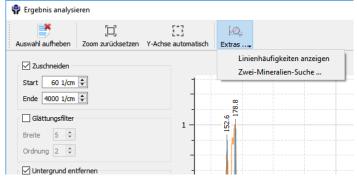
3.7.1 Goldindec

Eine neuere Methode für die Subtraktion des Untergrunds von Raman-Spektren ist der von Liu J, Sun J., Huang X, Li G, Liu B. entwickelte Algorithmus "Goldindec", der den Untergrund durch ein Polynom annähert. Hierzu kann die Methode "Goldindec" ausgewählt werden.

3.7.2 Splines

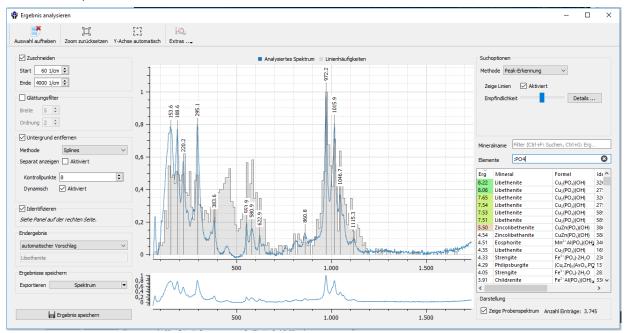
Wählt man als Methode "Splines" aus, so hat man eine proprietär entwickelte weitere Methode zur Verfügung, die in verschiedenen Fällen bessere Ergebnisse liefert. Hierbei wird der Untergrund mit Splines (stückweise stetige Polynome) angenähert. Die Zahl der Stützpunkte kann eingestellt werden.

3.8 Linienhäufigkeiten und Überlagerung zweier Spektren



Linienhäufigkeiten und Zwei-Mineralien-Suche

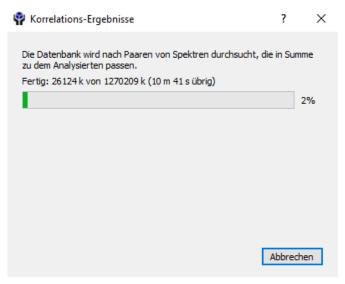
Über die Schaltfläche "Extras" können Sie "Linienhäufigkeiten anzeigen" wählen. Dann wird ein Histogramm über die in den Suchergebnissen vorkommenden Spektrallinien dargestellt. Die Höhe der Bereiche gibt an, wie häufig in diesem Bereich Linien in den Suchergebnissen vorkommen. So können Sie leichter typische Linien erkennen. Grenzen Sie dazu die Suchergebnisse auf interessante Teile, z.B. Phosphate oder Carbonate, Sulfate oder ähnliches ein.



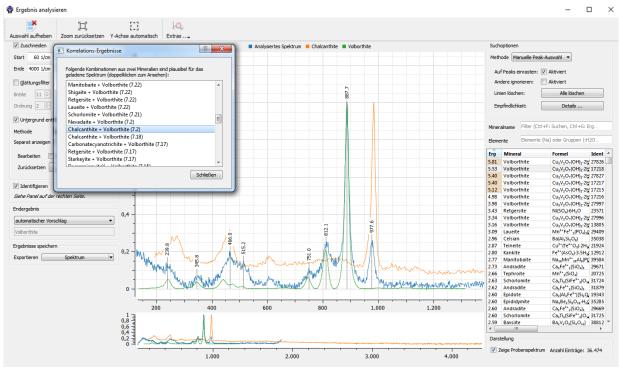
Histogramm über alle Phosphate in der Datenbank, Vergleich mit Libethenit-Spektrum

Gelegentlich kommt es vor, dass das gemessene Spektrum von einer Mischung zweier Materialien erzeugt wird. In diesem Fall hilft die Linearkombinations-Suche, plausible Kandidaten für die beiden Stoffe zu finden.

Wählen Sie dazu über die Schaltfläche "Extras" die "Zwei-Mineralien-Suche". Es wird dann eine Suche gestartet, die ein paar Minuten dauern kann, da die Spektrenbibliothek nach Paaren von Spektren durchsucht wird, die in der Summe zu dem aufgenommenen Spektrum passen.



Suche nach Kombinationen

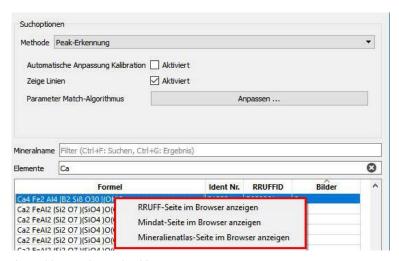


Ergebnis der Suche nach Kombinationen

Als Ergebnis erhalten Sie eine Liste mit plausiblen Paarungen für das analysierte Spektrum. In Klammern steht der Grad der Übereinstimmung des Spektrums mit diesem Paar.

3.9 Link zu RRUFF, Mineralienatlas und Mindat

Mit der rechten Maustaste können Sie auf den Bibliothekseintrag eines Minerals in der Liste klicken, dann erhalten Sie folgendes Auswahlmenü:



Auswahlmenü über rechte Maustaste

Sie können sich nun Informationen zu dem Mineral von der entsprechenden RRUFF-Seite anzeigen lassen oder auf die Mindat- oder Mineralienatlas-Startseite wechseln.

Die RRUFF-Seite des entsprechenden Minerals öffnet sich automatisch.

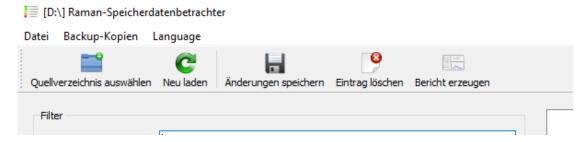
Um in Mindat oder Mineralienatlas auf das gesuchte Mineral zu gelangen, wählen Sie den Mineralnamen in der Tabellenzeile an. Wenn Sie Ctrl+C drücken, wird der Inhalt dieser Zelle in die Zwischenablage kopiert. Klicken Sie also einfach auf den Mineralnamen und drücken Sie Ctrl+C. Diesen können Sie dann für die Sucheinagbe bei Mindat oder Mineralienatlas mit Ctrl+V verwenden.

Genauso können Sie auch die RRUFF-ID oder die Formel im HTML-Format kopieren.

4 RamanSaveDataBrowser

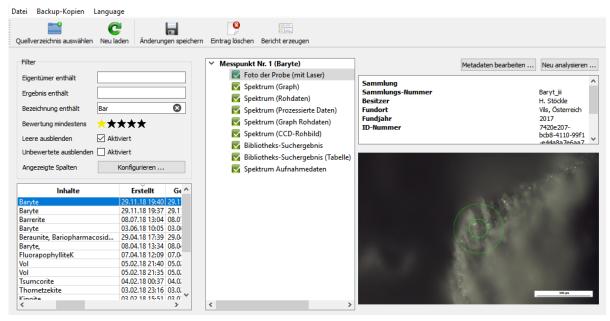
Mit Hilfe des beiliegenden Programms "RamanSaveDataBrowser" können Sie Ihre Messergebnisse bequem durchsuchen, nachträglich bearbeiten und neu analysieren.

Nach dem Start des RamanSaveDataBrowsers erscheint folgende Auswahl:



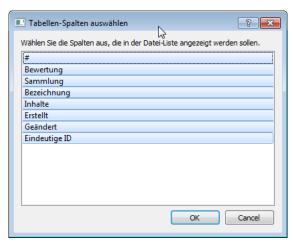
Verzeichnis auswählen

Wählen Sie zunächst ganz links ein Quellverzeichnis aus, in dem sich Ihre zu bearbeitenden Daten befinden. Dann erhalten Sie eine Übersicht Ihrer Daten.



Beispiel: Alle Daten, die in der Bezeichnung die Buchstaben "Bar" enthalten, werden angezeigt.

Sie können Ihre aufgenommenen Daten nach den angebotenen Spalten sortieren. Wählen Sie dafür die für Sie wichtigen Spalten aus.



Angezeigte Spalten konfigurieren

Wählen Sie in der oberen Leiste ganz rechts "Bericht erzeugen" aus, so erhalten Sie einen Bericht im PDF-Format.



Bericht erzeugen

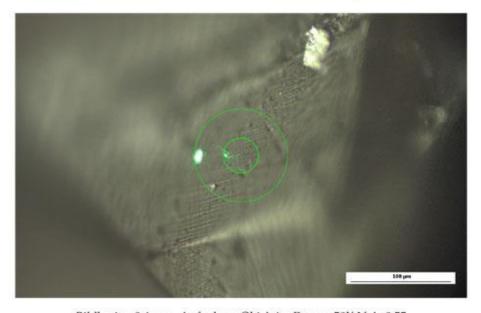
4.1 Beispielbericht

Im Folgenden wird ein Beispielbericht gezeigt, wie er aus den gespeicherten Daten über die Taste "Bericht erzeugen" automatisch generiert wird.

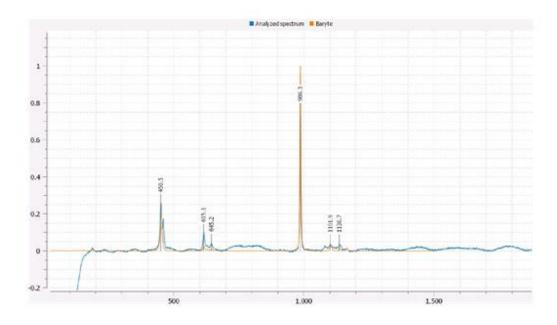


29.11.18 19:37

Probe		Analyse	
Eigentümer H. Stöckle		Ergebnis	Baryte
Sammlung		Ausgewählt durch	Automatisch identifiziert
Probennummer	Baryt_ii	Durchgeführt am	29.11.18 19:37
Fundort	Vils, Österreich	Messpunkt Nr.	1
Fundjahr	2017	Laser-Wellenlänge	531.729 nm



Bildbreite: 0,4 mm, Aufnahme-Objektiv: Raman 50X N.A. 0,55



Aufnahme-Parameter

Kommentar: Kein Kommentar angegeben.

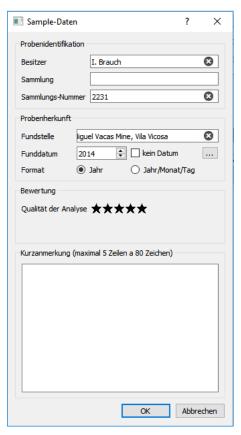
Belichtungszeit 30 s Dichtefilter no filter Gain 220 Sensor-Temperatur -14.5 °C

4.2 Metadaten bearbeiten



Metadaten bearbeiten

Oben rechts finden Sie die Möglichkeit, "Metadaten bearbeiten" auszuwählen. Es öffnet sich dann ein Eingabefenster, in dem Sie die bisher vorhandenen Eintragungen zu Ihrer Probe bearbeiten können:



Eingabe der Probendaten

Hier können Sie alle Daten zur Beschreibung Ihrer Probe ergänzen. Sie haben auch die Möglichkeit, die Qualität der Analyse mit 1-5 Sternen zu bewerten. So können Sie später z.B. nur sehr gute Analyseergebnisse durchsuchen.

4.3 Neu analysieren



Daten neu analysieren

Klicken Sie ganz rechts in dem Fenster auf "Neu analysieren", so öffnet sich das Programm "RamanSpectrumAnalyzer", in dem Ihnen dieselben Analysemöglichkeiten wie direkt bei der Aufnahme des Spektrums zur Verfügung stehen. So können Sie später, wenn z.B. neue Informationen zur Fundstelle vorliegen, das Spektrum neu analysieren.

4.4 Backup



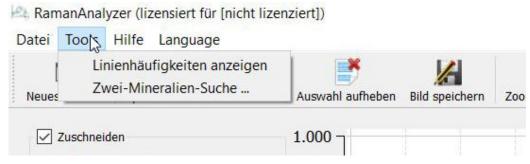
Verwaltung der Backup-Daten

Während der Arbeit mit der Software RamanControl werden regelmäßig Backups Ihrer Daten angelegt. Auf diese können Sie hier zugreifen.

Falls Sie Probleme mit dem Speicherplatz haben, können Sie bei Programmstart auch die Backup-Daten löschen.

5 Raman Analyzer

Mit Hilfe des beiliegenden Programms "RamanAnalyzer" können Sie Ihre Messergebnisse nachträglich neu analysieren. Sie finden hier alle in Abschnitt 3 beschriebenen Analysemöglichkeiten.



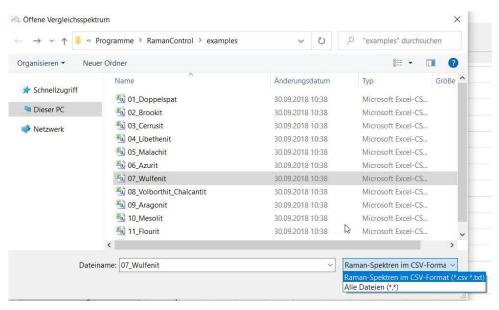
RamanAnalyzer, Tools

Um ein Vergleichsspektrum in den Analyzer zu laden, wählen Sie zunächst "Datei".



Wählen Sie hier über "Spektrum laden" eine Datei aus. Sie können im "Datei öffnen"-Dialog den Filter auch auf "Alle Dateien" umstellen, wenn Sie kein CSV- oder .txt-Format haben.

Wenn Sie eine Datei aus dem Explorer-Fenster auf den Graph eines bereits offenen Analysefensters ziehen, wird die Datei ebenfalls geöffnet.

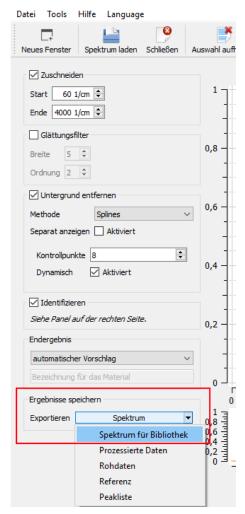


RamanAnalyzer, Spektrum laden

Sie haben wie in Kapitel 3 erwähnt auch die Möglichkeit, aus eigenen Spektren eine eigene Bibliothek zu erstellen oder Spektren zu einer vorhandenen Bibliothek hinzu zu fügen.

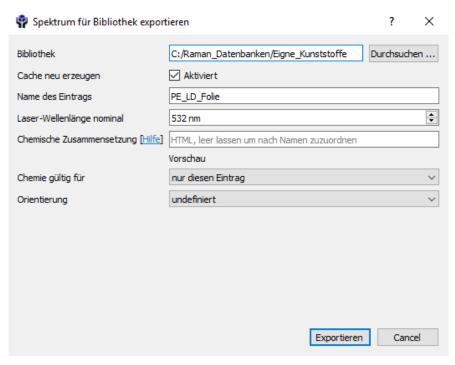
5.1 Eigene Spektren in Bibliothek aufnehmen

Dazu können Sie im RamanAnalyzer im Fenster links unten "Ergebnisse speichern – Exportieren – Spektrum für Bibliothek" benutzen.



Spektrum für Bibliothek exportieren

Sie haben dann Gelegenheit, weitere Informationen anzugeben. Es erscheint folgendes Fenster:



Daten für Bibliothek angeben

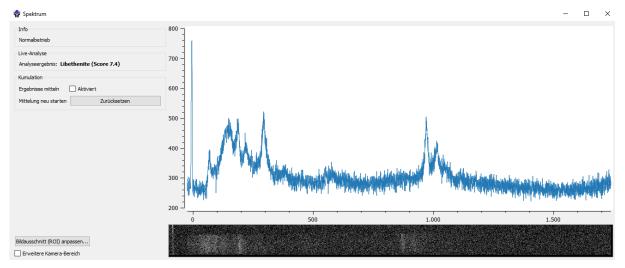
6 Weitere Programmfunktionen

6.1 Vorschau des Spektrums

Sobald Sie vom Videomodus in den Vorschaumodus wechseln, sehen Sie ein Livebild des Raman-Signals der Probe. Evtl. können Sie ein besseres Signal durch leichtes Nachfokussieren erhalten. Bei guter Signalstärke wird bereits hier das Mineral erkannt und der Name des Minerals angezeigt!



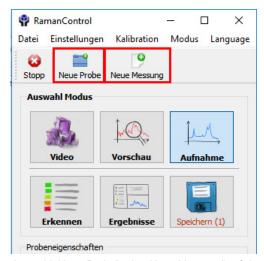
Achtung, stellen Sie hier zunächst mindestens die Filterdichte 0,6 ein!



Vorschaumodus

Im Fenster links neben dem Live-Raman-Signal können Sie die Funktion "Kumulation" auswählen. Dann werden die einzelnen Videobilder aufaddiert und das Signal wird rauschärmer.

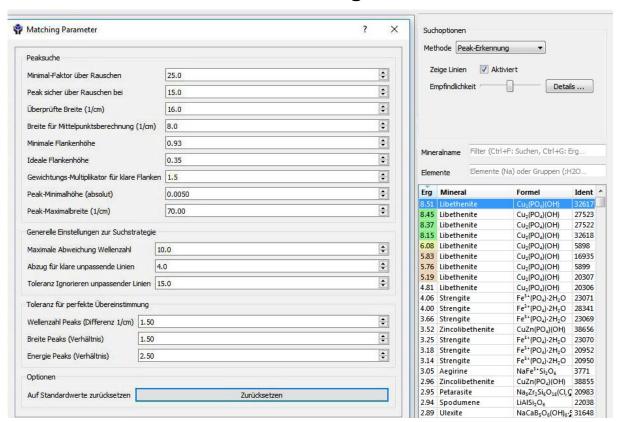
6.2 Neue Probe oder neue Messung



Auswahl "Neue Probe" oder "Neue Messung" auf derselben Probe

Ist eine Messung abgeschlossen, können Sie sich entscheiden, ob Sie als nächstes eine neue Probe messen oder ob Sie eine neue Messung an derselben Probe an einer anderen Stelle durchführen möchten. Wählen Sie dazu "Neue Probe" für eine neu ausgewählte andere Mineralprobe aus oder "Neue Messung" für eine weitere Messung auf derselben Probe.

6.3 Parameter zur Peakerkennung



"Matching-Parameter" für die Peak-Erkennung

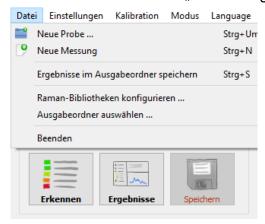
Um die Suche besser auf Ihr gemessenes Spektrum anzupassen, können Sie die Matching-Parameter zur Peak-Erkennung anpassen. Durch die Auswahl des "Zurücksetzen" – Buttons (unten) kehren Sie wieder zu dem ursprünglich eingestellten

Parametersatz zurück. Auch nach einem Neustart des Programms sind die Standardwerte wieder voreingestellt.

6.4 Menüpunkt "Datei"

6.4.1 Pfad zum Speichern der Daten festlegen

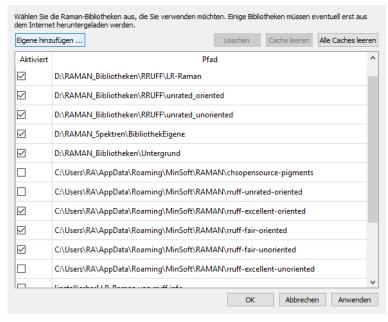
Geben Sie den Pfad bei "Datei→Ergebnisse im Ausgabeordner speichern" an.



Ergebnispfad festlegen

6.4.2 Raman-Bibliotheken konfigurieren

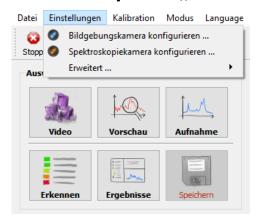
Von RRUFF werden Bibliotheken mit Spektren in verschiedener Qualität und Art angeboten. Über den Menüpunkt "Datei→Raman-Bibliotheken konfigurieren" kommen Sie zu der Auswahl der zur Verfügung stehenden Bibliotheken. Dort erscheint ein Auswahlfenster wie dieses:



Raman-Bibliothek konfigurieren

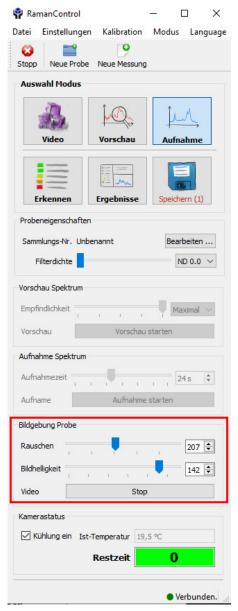
Alle Bibliotheken, die hier als "aktiviert" markiert sind, werden bei der Suche mit berücksichtigt. Hier können Sie auch eine selbst erstellte Bibliothek mit eigenen Spektren hinzufügen und aktivieren, dann werden auch diese bei der Suche mit eingebunden, siehe oben links "Eigene hinzufügen".

6.5 Menüpunkt "Einstellungen"



Einstellungen anpassen

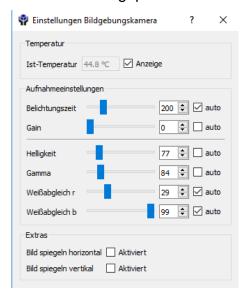
6.5.1 Kameraeinstellungen anpassen



RamanControl Startfenster, Einstellparameter der Bildgebungskamera

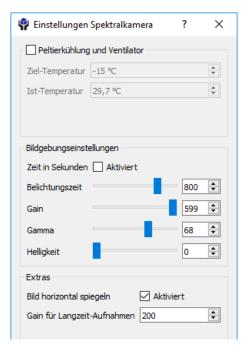
Die Aufnahmeparameter für die Bildgebungskamera werden automatisch eingestellt. Sie können diese zur Optimierung der Bildqualität jedoch auch manuell nachstellen. Im Startfenster können sie das Rauschlevel und die Bildhelligkeit einstellen. Eine Reduzierung des Rauschanteils erfordert bei gleicher Beleuchtungsstärke längere Belichtungszeiten und somit niedrigere Frameraten der Kamera. Eine sehr starke Reduzierung kann somit insbesondere bei dunklen Proben zu längeren Belichtungszeiten führen. Weitere Einstellungs-Parameter können Sie im Einstellungsfenster für die Bildgebungskamera auswählen (Menüpunkt "Einstellungen→Bildgebungskamera").

Sowohl die Einstellungen der Bildgebungskamera wie Helligkeit, Rauschen etc. als auch die Einstellungen der Spektralkamera, mit der das Spektrum aufgenommen wird, können hier angepasst werden.



Einstellungen der Bildgebungskamera

Folgende Parameter können für die Bildgebungskamera eingestellt werden: Belichtungszeit, Verstärkungsfaktor (Gain), Helligkeit, Kontrast (Gamma), Weißabgleich (rot) und Weißabgleich (blau), Bild horizontal/vertikal spiegeln und Angabe der USB-Bandbreite. Werden keine Parameter eingestellt, kommen die voreingestellten Werte zum Einsatz (auto).



Einstellungen der Spektralkamera

Folgende Parameter können für die Spektralkamera eingestellt werden: Parameter zur Kühlung des Kamerasensors, Belichtungszeit, Verstärkungsfaktor (Gain), Kontrast (Gamma), Helligkeit, Bild horizontal spiegeln und die Angabe eines Gainwertes für Langzeitaufnahmen.

6.6 Kalibration



RamanControl-Startfenster, Kalibration aus der Toolbar auswählen

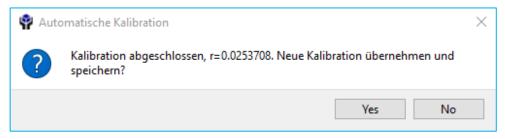
Vor der ersten Inbetriebnahme, nach Änderungen an der Hardware oder nach einem Transport muss das Gerät neu kalibriert werden. Die Kalibration erfolgt weitgehend automatisch.

Zunächst wählen Sie unter dem Punkt "Kalibration" "Kalibrationslampe Ein". Dadurch wird die Kalibrierlampe eingeschaltet und in den Strahlengang gefahren. Wechseln Sie anschließend in den Vorschaumodus.

Jetzt sehen Sie das Linienspektrum der Kalibrierlampe im Vorschaubild. Um möglichst schmale Linien für ein gutes Kalibrationsergebnis zu erhalten, verringern Sie die Spaltbreite durch Drehen an dem unter dem Raman-Modul befindlichen Einstellknopf. Der Einstellknopf befindet sich unten zwischen dem Raman- und dem Spektrometermodul. Stellen Sie die Spaltbreite so ein, dass die Spektrallinien gerade noch sichtbar sind.

Dieses Spektrum nehmen Sie nun bei ausreichender Belichtungszeit (mind. 30 s) auf.

Dann wählen Sie "Automatische Kalibration".



Automatische Kalibration durchführen

Bestätigen Sie mit "Ja", wird die Kalibration vollautomatisch durchgeführt, d.h. die aktuell aufgenommenen Linien des Argon-Spektrums werden einem hinterlegten Argon-Spektrum zugeordnet. Der r-Wert sollte unter 0,1 liegen, ansonsten sollte die Kalibration wiederholt werden, um ein besseres Spektrum (schmalere Linien und rauschärmer) zu erzeugen.

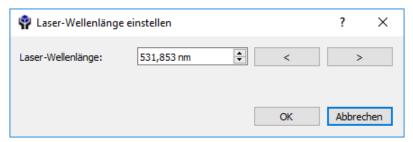
Nach Abschluss der Kalibration sollten Sie den Spalt wieder etwas weiter öffnen, indem Sie den Einstellknopf wieder zurückdrehen. Schalten Sie über das Menü "Kalibration" die Kalibrationslampe wieder aus.

6.6.1 Ein-Linien-Kalibration

Um die Kalibration abzuschließen, führen Sie noch eine Ein-Linien-Kalibration mit einer Linie eines bekannten Minerals durch. Dazu stellen Sie eine bekannte Probe mit einer schmalen Linie im Spektrum, z. B. Silizium oder Calcit vor das Raman-Objektiv. Machen Sie eine Aufnahme mit ca. 30 s Belichtungszeit. Stimmt die Position der Silizium-Linie nach der Kalibration noch nicht genau mit der Wellenzahl aus der Literatur überein, kann sie noch angepasst werden, indem Sie unter "Kalibration" "Laser-Wellenlänge" wählen.



Es erscheint folgendes Fenster:



Verschieben des Nullpunkts durch Anpassen der Laserwellenlänge

Benutzen Sie die vorgesehenen Pfeiltasten, um die Laser-Wellenlänge, die zur Berechnung der Wellenzahlen zugrunde gelegt wird, so anzupassen, dass die Wellenzahl für die größte Linie im Spektrum von Silizium 520,5 cm⁻¹ beträgt.

Wir empfehlen, diesen Teil der Kalibration zur Kontrolle und zum Ausgleich variierender Umgebungsbedingungen häufiger, insbesondere vor und nach wichtigen Messungen durchführen.

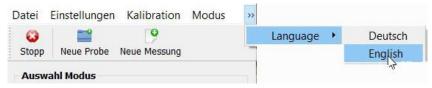
6.7 Menüpunkt "Modus"



Modus auswählen

Den Gerätemodus können Sie parallel zu den Auswahlbuttons auch über die Toolbar auswählen.

6.8 Menüpunkt "Language": Umstellen auf Englisch



Auswahl der Sprache

Unter dem Punkt "Language" ganz rechts oben im RamanControl-Startfenster können Sie die Sprache auf "deutsch" oder "englisch" einstellen. Alle Begriffe der Benutzeroberfläche und der automatisch erstellte Messbericht werden dann in der gewählten Sprache ausgegeben. Zum Anwenden dieser Einstellung ist ein Neustart des Programms erforderlich. Erst nach dem Neustart wird dann die gewählte Sprache verwendet.