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!

Brauch Analytische Geräte GmbH Jahnstr. 15 76593 Gernsbach Tel. 0176 55143117 Dr. Ilko Brauch, Sven Brauch E-Mail: <u>kontakt@raman-analytik.de</u> https://raman-analytik.de

Inhalt

1.1.1 Technische Daten	3
1.1.2 Übersicht über die Gerätemodule	4
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	9
2.4 Identifikation des Spektrums	11
2.5 Ergebnisse speichern	13
2.6 Speichern	14
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	18
3.7.2 Splines	18
3.8 Linienhäufigkeiten und Überlagerung zweier Spektren	19
3.9 Link zu RRUFF, Mineralienatlas und Mindat	20
RamanSaveDataBrowser	22
4.1 Beispielbericht	23
4.2 Metadaten bearbeiten	25
4.3 Neu analysieren	25
4.4 Backup	26
RamanAnalyzer	26
5.1 Eigene Spektren in Bibliothek aufnehmen	27
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
	1.1.1 Technische Daten 1.1.2 Übersicht über die Gerätemodule

	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	punkt "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 Umgebungstemperatur	

Bildgebungskamera

Auflösung:	2,3 Megapixel 1936 × 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".

Bildgebung Pr	be
Rauschen	1 1 1 1 1 207 🖨
Bildhelligkeit	142
Video	Stop
Kamerastatus	
🗹 Kühlung e	in Ist-Temperatur 19,5 °C
	Restzeit 0
	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".

Ran	nanControl		- [
atei	Einstellungen	Kalibration	Modus	Language
•		9		
Stopp	Neue Probe	Neue Messung		
Ausw	ahl Modus			
	Video	↓ Vorschau	ļ Aufna	hme
E	rkennen	Ergebnisse	Speiche	rn (1)
Probe	neigenschaften			
Samm	lungs-Nr. Unbe	nannt	Bearb	eiten
F	ilterdichte		N	0.0 ~
Vorsch	nau Spektrum			
Empfi	ndlichkeit	л т т	И Ма	ximal \vee
Vorsc	hau	Vorschau	starten	
Aufna	hme Spektrum			
Aufna	ahmezeit		1 1 24	ts 🔹
Aufna	ame	Aufnahme	starten	
-				
bildge	bung Probe			
Rause	then	i Vite	I.	207 ≑
Bildhe	lligkeit	1 1		142 🔹
Video		Stop)	
Kamer	astatus			
К	ühlung ein Ist-	Temperatur 19	,5 °C	
		Restzeit	0	

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

🦞 Rar	manControl		— (- X
Datei	Einstellungen	Kalibration	Modus	Language
CO Stopp	Neue Probe	P Neue Messung		
Ausv	vahl Modus			
	A		Į.	л,
	Video	Vorschau	Aufna	ahme
		Freebnisse	Speiche	
E	rkeimeli	Ligeniisse	speicht	iii (2)

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).

🛉 RamanCont	rol		— C	- X
Stopp Neue	ungen Probe	Kalibration	Modus	Language
Auswahl Moo	lus	Neue Messung		
Video		Vorschau	<u>ل</u> لم	M, ahme
Erkenner		Ergebnisse	Speiche	ern (1)
Probeneigensd Sammlungs-Nr Filterdichte	haften . Unber	nannt	Beart	beiten D 0.0 ∨
Vorschau Spek Empfindlichkeit Vorschau	trum	Vorschau	Ma I starten	iximal \vee
Aufnahme Spel Aufnahmezeit Aufname	ktrum	Aufnahme	2 e starten	4s 🔹
Bildgebung Pro Rauschen Bildhelligkeit Video	be	, , , , Stop		207 ‡ 142 ‡
Kamerastatus				
🗹 Kühlung eir	n Ist-T	Temperatur 19	,5 ℃ 0	
			• Ve	erbunden.

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.

🍄 Spektrum				- 🗆 X
Info Normalbetrieb Live-Analyse	700 -			
Analyseergebnis: Libethenite (Score 7.3)	600 -			
Kumulation Ergebnisse mitteln Aktiviert Mittelung neu starten Zurücksetzen	500 -			
	400	Mm	M	an for the surgery of the second s
	200 -	500	1 000	1 500
Bildausschnitt (ROI) anpassen			1.000	1.000

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.

Sud Met Ze	hoptionen hode Pe eige Linien	ak-Erkennu ı 🔽 Akt	ng		
Mine	ralname	Filter (Ctr	I+F: Suchen, Ctrl+G: I	Erg	
Erg	Mineral		Formel	Ident	*
8.51	Libethe	nite	Cu₂(PO₄)(OH)	32617	and the second s
8.45	Libether	nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	27523	
8.37	Libether	nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	27522	
8.15	Libether	nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	32618	
8.15 6.08	Libethei Libethei	nite nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	32618 5898	
8.15 6.08 5.83	Libether Libether Libether	nite nite nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	32618 5898 16935	
8.15 6.08 5.83 5.76	Libether Libether Libether Libether	nite nite nite nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	32618 5898 16935 5899	
8.15 6.08 5.83 5.76 5.19	Libether Libether Libether Libether Libether	nite nite nite nite nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	32618 5898 16935 5899 20307	
8.15 6.08 5.83 5.76 5.19 4.81	Libether Libether Libether Libether Libether Libether	nite nite nite nite nite nite	Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	32618 5898 16935 5899 20307 20306	

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				- 🗆	×
Messpunkt Nr. 1 (Neu	b) e (mit Laser) 1944v	24	Metadaten bearbeiten	Neu analysiere	n
Spektrum (Gr Spektrum (Ro Spektrum (Pr	aph) 2048x hdaten) 4655 ozessierte Daten) 1343	52 Sammlungs-Nummer Besitzer Fundort	12345 Ilko Brauch Miguel vacas N	line	

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.

🗉 Sample-Dat	ien	? ×
Probenidentifik	ation	
Besitzer	I. Brauch	8
Sammlung		
Sammlungs-Nu	immer 2231	8
Probenherkunf	î.	
Fundstelle	liguel Vacas Mine, Vila Vicos	a 🖸
Funddatum	2014 🖨 🗌 kein Da	atum
Format	◉ Jahr 🛛 🔾 Jahr/M	lonat/Tag
Kurzanmerkung	g (maximal 5 Zeilen a 80 Zeiche	en)
	OK	Altractors

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.

	noptionen	Б		
Met	hode Pe	ak-Erkennung		
Ze	eige Linier	n 🔽 Aktivi	ert Deta	ils
Mine	ralname	Filter (Ctrl+F	-: Suchen, Ctrl+G: I	Erg
Elem	ente	Elemente (N	a) oder Gruppen (:F	120
Elem Erg	ente Mineral	Elemente (N	a) oder Gruppen (:F Formel	120 Ident ^
Elem Erg	ente Mineral Libethe	Elemente (Ni I nite	a) oder Gruppen (:H Formel Cu;(PO2)(OH)	I2O Ident 32617
Elem Erg 8.51 8.45 8.37	ente Mineral Libethe Libethe	Elemente (Ni I nite nite	a) oder Gruppen (:H Formel Cu ₂ (PO ₂)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	Ident * 32617 27523 27522
Elem Erg 8.51 8.45 8.37 8.15	ente Mineral Libethe Libethe Libethe	Elemente (Ni nite nite nite nite	a) oder Gruppen (;+ Formel Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	Ident 32617 27523 27522 32618
Elem Erg 8.51 8.45 8.37 8.15 6.08	ente Mineral Libethe Libethe Libethe Libethe	Elemente (Ni nite nite nite nite nite	a) oder Gruppen (;F Formel Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Ident Iden
Elem Erg 8.51 8.45 8.37 8.15 6.08 5.83	ente Mineral Libether Libether Libether Libether Libether Libether	Elemente (N I nite nite nite nite nite nite	a) oder Gruppen (;F Formel Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	Ident
Elem 8.51 8.45 8.37 8.15 6.08 5.83 5.76	ente Mineral Libethe Libethe Libethe Libethe Libethe Libethe Libethe	Elemente (N. I nite nite nite nite nite nite nite	a) oder Gruppen (;F Formel Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	Ident
Elem 8.51 8.45 8.37 8.15 6.08 5.83 5.76 5.19	ente Mineral Libether Libether Libether Libether Libether Libether Libether Libether	Elemente (N. Inite nite nite nite nite nite nite nite	a) oder Gruppen (;F Formel Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	Ident
Elem 8.51 8.45 8.37 8.15 6.08 5.83 5.76 5.19 4.81	ente Mineral Libether Libether Libether Libether Libether Libether Libether Libether Libether	Elemente (N. Inite nite nite nite nite nite nite nite	a) oder Gruppen (;) Formel Cu ₂ (PO ₄)(OH) Cu ₂ (PO ₄)(OH)	Ident 32617 27523 27522 32618 5898 16935 5899 20307 20306

Verschiedene Suchoptionen: Methode auswählen

3.3 Manuelle Peak-Auswahl

Alle lösche
tails

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 \rightarrow Auswahl des Peaks, Rechtsklick \rightarrow 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.

		- 0	
Such	optionen		
Meth	ode Peak-Erkennung)	
Au	tomatische Anpassung	G Kalibration Aktiviert	
Zei	ge Linien	Aktiviert	
		Restaura de la construcción de la c	
			_
nera	name Filter (Ctrl+F:	Suchen, Ctrl+G: Ergebnis)	Ĕ.
emen	te Zn		6
~	and the second s		
Erg	Mineral		
1.69	Willemite	Zn2 SiO4	
1.69	Hemimorphite	Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2	0
1.61	Sphalerite	ZnS	
1.59	Hardystonite	Ca2 ZnSi2 O7	
4.59	Hemimorphite	Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2	0
4.52	Legrandite	Zn2 AsO4 (OH)-H2 O	
	Hemimorphite	Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2	
4.51		Zn2 AsO4 (OH)-H2 O	
4.51 4.51	Legrandite	Zn2 AsO4 (OH)-H2 O	
4.51 4.51 4.50	Legrandite Hemimorphite	Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2	0
4.51 4.51 4.50 4.47	Legrandite Hemimorphite Legrandite	Zn2 AsO4 (OH) H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 H2 Zn2 AsO4 (OH) H2 O	0
4.51 4.51 4.50 4.47 4.44	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite	Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2	C
4.51 4.51 4.50 4.47 4.44 4.35	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite Adamite	Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)	0
4.51 4.51 4.50 4.47 4.44 4.35 4.32	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite Adamite Hardystonite	Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH) Ca2 ZnSi2 O7	0
1.51 1.50 1.47 1.44 1.35 1.32	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite Adamite Hardystonite	Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH) Cn2 AsO4 (OH) Cn2 ZnSi2 O7	0
1.51 1.50 1.47 1.44 1.35 1.32 1.32	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite Adamite Hardystonite	Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH) Ca2 ZnSi2 O7	0 0
1.51 1.50 1.47 1.44 1.35 1.32 ¢ Dars	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite Adamite Hardystonite tellung	Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)·H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH) Ca2 ZnSi2 O7	• C
4.51 4.51 4.50 4.47 4.35 4.35 4.32 c Dars' Z	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite Adamite Hardystonite tellung eige Probenspektrum	Zn2 AsO4 (OH)-H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 -H2 Zn2 AsO4 (OH)-H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 -H2 Zn2 AsO4 (OH) Ca2 ZnSi2 O7 Anzahl Einträge 19	2 O 2 O 2 O
.51 .50 .47 .44 .35 .32 t Dars	Legrandite Hemimorphite Legrandite Hemimorphite Adamite Hardystonite tellung 'eige Probenspektrum	Zn2 AsO4 (OH)-H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH)-H2 O Zn4 Si2 O7 (OH)2 ·H2 Zn2 AsO4 (OH) Ca2 ZnSi2 O7 Anzahl Einträge 19	2 O 2 O 2 O

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.

Minera	alname	Filter (Ctr	HG: Erg	
Eleme	nte	: CO3		۵
Erg	Miner	al	Formel	Ident 🔺
10.00	Calcite		Ca(CO ₃)	27275
			1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	

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.

Laden und	Speichern	
	Datei öffnen	
x in nm	Aktiviert	
Spektrum	Exportieren	
Start	80 1/	cm
Datenberei	ch für Suche	E
Ende	1700 1/	cm 🗄
Anzeige 🖂	Aktiviert	
🗹 Untergr	und subtrahieren	_
Methode	Splines	
Ordnung	8	E.
	Alaticiana	

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:

Mineralnam Elemente	e Filter (Ctrl+F: Such Ca Formel	en, Ctrl+G: Ergebnis)	ldent Nr.	RRUFFID	Bilder	0
Mineralnam Elemente	e Filter (Ctrl+F: Such	en, Ctrl+G: Ergebnis)				0
Mineralnam	e Filter (Ctrl+F: Such	en, Ctrl+G: Ergebnis)				
	-					
Parame	ter Match-Algorithmus		Ar	npassen		
Zeige Li	nien	Aktiviert	Aktiviert			
Automa	tische Anpassung Kalib	oration 🗌 Aktiviert				
Methode	Peak-Erkennung					•
Marsha da						

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:

📄 [D:\] Raman-Speicherd	atenbetrachter			
Datei Backup-Kopien I	Language			
=	C 🔒	8		
Quellverzeichnis auswählen	Neu laden Änderungen speichern	Eintrag löschen Be	ericht erzeugen	
Filter				

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.

🗉 Tabellen-Spalten auswählen
لک Wählen Sie die Spalten aus, die in der Datei-Liste angezeigt werden sollen.
#
Bewertung
Sammlung
Bezeichnung
Inhalte
Erstellt
Geändert
Eindeutige ID
OK Cancel

Angezeigte Spalten konfigurieren

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

📄 [D:\] Raman-Speicherd	atenbetrachte	r			
Datei	Backup-Kopien I	anguage				
Quellve	erzeichnis auswählen	C Neu laden	Änderungen speichern	Sintrag löschen	Bericht erzeugen	
Filter	-	ſ.				
Bericht ei	rzeugen					

4.1 Beispielbericht

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

2017

Fundort

Fundjahr

29.11.18 19:37

Z	Brauch	n Analytische Geräte GmbH	Δ
	Probe		Analyse
	Eigentümer	H. Stöckle	Ergebnis B
	Sammlung		Ausgewählt durch A
	Probennummer	Baryt_ii	Durchgeführt am

Ergebnis	Baryte
Ausgewählt durch	Automatisch identifiziert
Durchgeführt am	29.11.18 19:37
Messpunkt Nr.	1
Laser-Wellenlänge	531.729 nm



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



Aufnahme-ParameterBelichtungszeit30 sDichtefilterno filterGain220Sensor-Temperatur-14.5 °C

Kommentar: Kein Kommentar angegeben.

Document created December 8, 2018 with software version 1.4. Analysis unique ID: 2c89ad0b-5232-4a0a-b38d-89044035934f

4.2 Metadaten bearbeiten

Metadaten bearbeiten	Neu analysieren

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:

Sample-Daten		?	×
Probenidentifikation			
Besitzer	I. Brauch		ω
Sammlung			
Sammlungs-Nummer	2231		Θ
Probenherkunft			
Fundstelle ligu	el Vacas Mine, Vila Vicosa		ω
Funddatum 20	14 主 🗌 kein Datum	n	
Format	Jahr 🔿 Jahr/Mona	t/Tag	
Kurzanmerkung (max	imal 5 Zeilen a 80 Zeichen)		
Kurzanmerkung (max	imai 5 zelien a 60 zelchen) -		
	OK	Abbr	echen

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

Metadaten	bearbeiten	Neu analysie	ren
-----------	------------	--------------	-----

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

D	atei	Bac	kup-Kopien	Language			
			Automatisch	e Backups durchsuchen .	. 🛛 🕹		
	Quell		Alle Backup-l	Daten löschen	ag löschen	Bericht erzeugen	
	Filte	er					Me
	Eige	entüm	er enthält				
	Erg	ebnis	enthält				
	Bez	eichnu	ung enthält				
	Bev	vertur	ng mindestens	****			

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 RamanAnalyzer

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

🗠 RamanAnalyzer (lizensiert für [nicht lizenziert])



```
RamanAnalyzer, Tools
```

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



RamanAnalyzer, 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.

→	Programme > RamanControl > examples	~ O			
rganisieren 👻 Neu	er Ordner				
🛨 Schnellzuariff	Name	Änderungsdatum	Тур	Größe ^	
	01_Doppelspat 30.09.2018 10:38		Microsoft Excel-CS		
🤜 Dieser PC	🐴 02_Brookit	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
🗳 Netzwerk	الله 03_Cerrusit	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	🔊 04_Libethenit	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	🔊 05_Malachit	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	🔊 06_Azurit	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	الله معند المعند الم	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	08_Volborthit_Chalcantit	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	3 09_Aragonit	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	الله المعام المعام معام المعام ال	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.		
	الله المعالم ال	30.09.2018 10:38	Microsoft Excel-CS.	. 🗸	
	<			>	
Date	iname: 07 Wulfenit	~	Raman-Spektren im CSV-	Forma V	

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.

Datei Tools	Hilfe Language	
L+ Neues Fenster	Spektrum laden Schließen A	uswahl aufr
Zuschneid Start 60 Ende 4000	en L/cm ≑	1
Glättungsf Breite 5 Ordnung 2	ilter * *	0,8 -
Untergrun Methode Separat anze	d entfernen Splines igen Aktiviert	0,6 -
Kontrollpun Dynamisch	kte 8	0,4
Identifizier Siehe Panel a	✓ Zuschneiden Start 60 1/cm ♀ Ende 4000 1/cm ♀ Glättungsfilter Breite 5 ♀ Ordnung 2 ♀ ✓ Untergrund entfernen Methode Splines Separat anzeigen Aktiviert Kontrollpunkte 8<	
Endergebnis automatische Bezeichnung	r Vorschlag 🗸	0
Ergebnisse sp	eichern	
Exportieren	Spektrum 🔻	0,8 1 0,6 1
	Prozessierte Daten Rohdaten Referenz Peakliste	0,2 गाम 0,2 गाम 0 ग _

Spektrum für Bibliothek exportieren

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

🌳 Spektrum für Bibliothek expor	tieren	?	×
Bibliothek	C:/Raman_Datenbanken/Eigne_Kunststoffe	Durchsud	hen
Cache neu erzeugen	Aktiviert		
Name des Eintrags	PE_LD_Folie		
Laser-Wellenlänge nominal	532 nm		-
Chemische Zusammensetzung [Hilfe]	HTML, leer lassen um nach Namen zuzuordnen		
	Vorschau		
Chemie gültig für	nur diesen Eintrag		\sim
Orientierung	rum für Bibliothek exportieren ? ×		
	Exportieren	Can	icel

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!







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

inControl		— C	x c
instellungen	Kalibration	Modus	Language
Neue Probe	P Neue Messung		
hl Modus			
B		ļ.	M,
ideo	Vorschau	Aufna	hme
ennen	Ergebnisse	Speiche	rn (1)
	InControl Instellungen Neue Probe hl Modus	InControl Instellungen Kalibration Neue Probe Neue Messung hI Modus Fideo Fideo Figebnisse	InControl – C Instellungen Kalibration Modus Neue Probe Neue Messung hI Modus ideo Vorschau Ergebnisse Speiche

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		? ×	Such	noptionen		
Peaksuche			Met	hode Peak-Erkennu	ung 🔻	
Minimal-Faktor über Rauschen	25.0		Ze	eige Linien 🛛 🔽 Ak	tiviert	
Peak sicher üher Rauschen bei	15.0		En	npfindlichkeit	Detail	ls
Überprüfte Breite (1/cm)	16.0					
Breite für Mittelpunktsberechnung (1/	cm) 8.0	Image: A start and a start				
Minimale Flankenhöhe	0.93					
Ideale Flankenhöhe	0.35	÷	Mine	rainame Filter (Cti	ri++-: Suchen, Ctrl+G: E	:rg
Gewichtungs-Multiplikator für klare Fla	nken 1.5		Elem	ente Elemente	(Na) oder Gruppen (:H	120
Peak-Minimalhöhe (absolut)	0.0050	ŧ	Erg	Mineral	Formel	Ider
			8.51	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	326
Peak-Maximalbreite (1/cm)	70.00		8.45	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	275
Consulla Einstellungen au Conhetente	ate 1		8.37	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	275
senerelle Einstellungen zur Suchstrate	gie	in the second second	8.15	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	326
Maximale Abweichung Wellenzahl	10.0	-	6.08	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	589
			5.83	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	169
Abzug für klare unpassende Linien	4.0	<u> </u>	5.76	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	589
Toleranz Ionorieren unpassender Linie	n 15.0		5.19	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	203
		- Hannah	4.81	Libethenite	Cu ₂ (PO ₄)(OH)	203
Toleranz für perfekte Übereinstimmun	g		4.06	Strengite	Fe ⁻ (PO ₄)-2H ₂ O	250
			4.00	Strengite	Fe (PO ₄)-2H ₂ O	200
Wellenzahl Peaks (Differenz 1/cm) 1.	50	<u>.</u>	3.52	Zincolibethenite	Cu7p(PO_)(OH)	386
Breite Peaks (Verhältnis)	50	.	3.25	Strengite	Ee3+(PO_)-2H-O	230
		Luiui Intern	3.18	Strengite	Fe ³⁺ (PO ₄)-2H ₂ O	209
Energie Peaks (Verhältnis) 2.	50	<u></u>	3.14	Strengite	Fe3+(PO4)-2H-O	209
			3.05	Aegirine	NaFe ³⁺ Si ₂ O ₆	377
Uptionen			2.96	Zincolibethenite	CuZn(PO ₄)(OH)	388
Auf Standardwerte zurücksetzen	7. micksetzen		2.95	Petarasite	NasZr2Si6O18(CI,C	209
	Zurucksetzen		2.94	Spodumene	LiAISi2O6	220
			2.89	Ulexite	NaCaB ₅ O ₆ (OH) ₆	316

"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.

Date	ei Einstellungen	Kalibration	Modus	Language			
	Neue Probe			Strg+Un			
	Neue Messung	Strg+N					
	Ergebnisse im Ausgabeordner speichern S						
	Raman-Bibliotheken konfigurieren						
	Ausgabeordner auswählen						
	Beenden						
			F	1			
		E m					
Erkennen Ergebnisse Speichern							

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:

Eigene hinzufügen					Löschen	Cache leeren	Alle Caches le	eeren
Aktiviert				Pfad				^
\checkmark	D:\RAMA	N_Bibliothe	ken\RRUFF\LR-R	aman				
\checkmark	D:\RAMA	N_Bibliothe	ken\RRUFF\unrat	ted_oriente	d			
\checkmark	D:\RAMA	k\RAMAN_Bibliotheken\RRUFF\unrated_unoriented						
\checkmark	D:\RAMA	N_Spektren	BibliothekEigene	e				
\checkmark	D:\RAMA	N_Bibliothe	ken\Untergrund					
	C:\Users\	RA\AppData	NRoaming\MinS	oft\RAMA	N\chsopens	ource-pigments	;	
	C:\Users\	RA\AppData	NRoaming\MinS	oft\RAMA	N\rruff-unra	ted-oriented		
\checkmark	C:\Users\	RA\AppData	NRoaming\MinS	oft\RAMA	N\rruff-exce	llent-oriented		
\checkmark	C:\Users\	ers\RA\AppData\Roaming\MinSoft\RAMAN\rruff-fair-oriented						
\checkmark	C:\Users\	Users\RA\AppData\Roaming\MinSoft\RAMAN\rruff-fair-unoriented						
	C:\Users\	RA\AppData	NRoaming\MinS	oft\RAMA	N\rruff-exce	llent-unoriented	ł	
	Contallin.							~

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

🌳 Rai	manControl		_				
Datei	Einstellungen	Kalibration	Modus	Language			
3 Stopp	Neue Probe	P Neue Messung					
Ausv	wahl Modus						
	Video	Vorschau	⊥ُل Aufn				
E	rkennen	Ergebnisse	Speich	ern (1)			
Probe	eneigenschaften						
Sam	mlungs-Nr. Unbe	nannt	Bear	rbeiten			
F	Filterdichte		1	1D 0.0 V			
Vorsc	Vorschau Spektrum						
Empf	indlichkeit		Ma	aximal 🗸			
Vorse	thau	Vorschau	starten				
Aufna	ahme Spektrum						
Aufn	ahmezeit 👘 👘		1 1	4s 🗘			
Aufn	Aufname Aufnahme starten						
Bildge	bung Probe						
Raus	chen		I.	207 🖨			
Bildhe	elligkeit	i i		142 🜩			
Video Stop							
Kame	Kamerastatus						
<mark>⊠ K</mark>	☑ Kühlung ein Ist-Temperatur 19,5 °C						
	Restzeit 0						
			• V	erbunden.			

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 Bildgebungskamera 🧧 🗙							
Temperatur							
Ist-Temperatur 44.8 ℃ Anzeige	Ist-Temperatur 44.8 °C 🗹 Anzeige						
Aufnahmeeinstellungen							
Belichtungszeit 200	€ 🗸 ;	auto					
Gain	:	auto					
Helligkeit 77	÷ 🗆 ;	auto					
Gamma 84	÷ 🗌 i	auto					
Weißabgleich r	÷ 🗹 ;	auto					
Weißabgleich b	€ ⊻ ;	auto					
Extras							
Bild spiegeln horizontal 🗌 Aktiviert							
Bild spiegeln vertikal 🗌 Aktiviert							

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	Spektralkamera	?	×			
Peltierkühlung und Ventilator						
Ziel-Temperatur	-15 °C		* *			
Ist-Temperatur	29,7 °C		×			
Bildgebungseinst	ellungen					
Zeit in Sekunden	Aktiviert					
Belichtungszeit		800	-			
Gain		599	•			
Gamma		68	•			
Helligkeit		0	•			
Extras						
Bild horizontal sp	iegeln 🗹 Akt	iviert				
Gain für Langzeit	t-Aufnahmen 200		•			

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:

🗬 Laser-Wellenlänge einstellen				×
Laser-Wellenlänge: 531,853 nm 主		<		>
		ОК	Abb	rechen

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.