

MIRA Cal DS



Bedienlehrgang

8.105.8069DE / v7 / 2023-04-04



Metrohm Raman
407 South 2nd Street
Laramie, WY 82070
USA
+1 307 460 2089
info@metrohm.com
www.metrohm.com

MIRA Cal DS

1.2.55

Bedienlehrgang

Technical Communication
Metrohm Raman
Laramie, WY 82070

Diese Dokumentation wurde mit grösster Sorgfalt erstellt. Dennoch sind Fehler nicht vollständig auszuschliessen. Bitte richten Sie diesbezügliche Hinweise an die obenstehende Adresse.

Copyright

Diese Dokumentation ist urheberrechtlich geschützt. Alle Rechte vorbehalten.

Markenhinweis

Bluetooth® ist eine eingetragene Marke von Bluetooth SIG, Inc.

HazMasterG3® ist eine eingetragene Marke von Alluviam LLC.

Windows® ist eine eingetragene Marke der Microsoft Corporation in den Vereinigten Staaten und anderen Ländern.

Alle anderen Marken sind Eigentum ihrer jeweiligen Inhaber.

Inhaltsverzeichnis

1	Überblick	1
1.1	Produktbeschreibung	1
1.2	Produktvarianten	2
1.3	Darstellungskonventionen	2
1.4	Zusätzliche Informationen – Gerätehandbücher	2
2	Sicherheit	3
2.1	Bestimmungsgemäße Verwendung	3
2.2	Verantwortung des Betreibers	3
2.3	Personalanforderung	4
2.4	Sicherheitshinweise	4
2.4.1	Gefahren durch elektrische Spannung	4
2.4.2	Gefahren durch Strahlung	5
2.5	Gestaltung von Warnhinweisen	5
2.6	Bedeutung von Warnzeichen	6
3	Funktionsbeschreibung	8
3.1	Gesamtübersicht	8
3.2	Arbeitsvorschriften	8
3.3	Auswahlmenüs	9
3.4	Funktionsregisterkarten und Feature-Ansichten	15
3.5	Identifizierung von Proben mit Bibliotheken	19
4	Installation	20
4.1	Systemanforderungen	20
4.2	MIRA Cal DS installieren	21
5	Erstinbetriebnahme	30
5.1	MIRA Cal DS starten	30
5.2	Eine Verbindung zwischen MIRA XTR DS / MIRA DS und MIRA Cal DS herstellen	31
5.3	Konfiguration	33
5.3.1	Bibliotheken erstellen und bearbeiten	33
5.3.2	Arbeitsvorschrift und bearbeiten	35
5.4	Kalibrierung und Systemeignung	40

6	Bedienung und Betrieb	42
6.1	Datenaufnahme mit MIRA XTR DS / MIRA DS	42
6.2	Daten anzeigen und verwalten	44
6.2.1	Ein Spektrum anzeigen	44
6.2.2	Probenlistenordner verwalten	45
6.3	Ein Spektrum bearbeiten	45
6.4	Reporte erstellen	48
6.5	Export	50
6.6	Datenbanksicherung	52
6.7	Verwalten	53
6.7.1	Benutzer verwalten	53
7	Support-Protokolldatei erstellen	55

1 Überblick

1.1 Produktbeschreibung

MIRA Cal DS Software wird in Verbindung mit den Metrohm Instant Raman Analyzern MIRA XTR DS / MIRA DS verwendet.

MIRA Cal DS Software

- Administration
 - Zum Beispiel Benutzer, Arbeitsvorschriften
- Ergebnisse einsehen
- Reports erstellen
- Alle Daten speichern

MIRA XTR DS / MIRA DS Geräte

- Proben analysieren

Synchronisation zwischen MIRA XTR DS / MIRA DS Geräten und MIRA Cal DS Software

Mithilfe eines Synchronisationsworkflows werden alle benötigten Daten zwischen der MIRA Cal DS Software und den MIRA XTR DS / MIRA DS Geräten synchronisiert.

Durch die Synchronisation der MIRA XTR DS / MIRA DS Geräte mit der MIRA Cal DS Software wird sichergestellt, dass das Gerät auf dem neuesten Stand ist. Auf das Gerät werden die aktuellen Versionen der aktiven Arbeitsvorschriften, Bibliotheken und Benutzerkonten übertragen. Proben werden in der Datenbank gespeichert.

Es kann mehr als 1 Gerät verwendet werden. Sie können für eine saubere Datenverwaltung mit der gleichen Datenbank synchronisiert werden.

Auswertung

In der MIRA Cal DS Software steht eine Auswertungsmöglichkeit zur Verfügung:

- Identifizierung von Proben:
Das gemessene Spektrum einer Substanz wird mit den in einer Bibliothek vorhandenen Spektren verglichen. Es können Ergebnisse für die Identifizierung mittels Bibliotheken und den Abgleich von Mischungen eingesehen werden.

1.2 Produktvarianten

Das Produkt ist in der folgenden Version erhältlich:

Bestellnummer	Bezeichnung	Variantenmerkmal
6.06071.020	MIRA Cal DS	Version 1.2.55

1.3 Darstellungskonventionen

In der Dokumentation können folgende Formatierungen vorkommen:

(5-12)	Querverweis auf Abbildungslegende Die erste Zahl entspricht der Abbildungsnummer. Die zweite Zahl verweist auf das Produktelement in der Abbildung.
1	Anweisungsschritt Nummern kennzeichnen die Reihenfolge der Anweisungsschritte.
Methode	Namen von Parametern, Menüpunkten, Registerkarten und Dialogen
Datei ► Neu	Menüpfad
[Weiter]	Schaltfläche oder Taste

1.4 Zusätzliche Informationen – Gerätehandbücher

Informationen zu den Geräten finden Sie in den folgenden Handbüchern:

- Handbuch MIRA DS: 8.926.8001DE
- Handbuch MIRA XTR DS: 8.0926.8005DE

Geben Sie in das Suchfeld auf <https://www.metrohm.com> die Produktnummer ein, um nach den Handbüchern zu suchen.

2 Sicherheit

2.1 Bestimmungsgemässe Verwendung

Metrohm-Produkte werden zur Analyse und Handhabung von Chemikalien und anderen Materialien eingesetzt.

Die Verwendung erfordert deshalb vom Benutzer grundlegende Kenntnisse und Erfahrung im Umgang mit Chemikalien. Ausserdem sind Kenntnisse in der Anwendung von Brandschutzmassnahmen notwendig, die in Laboren vorgeschrieben sind. Sicherstellen, dass bei der Arbeit mit Chemikalien angemessene Sicherheitsvorkehrungen getroffen werden.

Das Beachten dieser technischen Dokumentation und das Einhalten der Wartungsangaben bilden einen wichtigen Bestandteil der bestimmungsgemässen Verwendung.

Jede über die bestimmungsgemässe Verwendung hinausgehende oder andersartige Benutzung gilt als Fehlgebrauch.

Angaben zu den Betriebswerten und Grenzwerten einzelner Produkte sind, falls relevant, im Abschnitt "Technische Daten" enthalten.

Die Überschreitung und/oder Nichtbeachtung der genannten Grenzwerte gefährdet Personen und Bauteile. Für Schäden, die durch Nichtbeachtung dieser Grenzwerte entstehen, übernimmt der Hersteller keine Haftung.

Die EU-Konformitätserklärung verliert ihre Gültigkeit, wenn Änderungen an den Geräten und/oder den Komponenten vorgenommen werden.

2.2 Verantwortung des Betreibers

Der Betreiber muss sicherstellen, dass grundlegende Vorschriften über Arbeitssicherheit und Unfallverhütung in Chemielaboren eingehalten werden. Der Betreiber hat folgende Verantwortungen:

- Personal in der sicheren Handhabung des Produkts instruieren.
- Personal im Umgang mit dem Produkt gemäss Benutzerdokumentation schulen (z. B. installieren, bedienen, reinigen, Störungen beseitigen).
- Personal bezüglich grundlegender Vorschriften über Arbeitssicherheit und Unfallverhütung schulen.
- Persönliche Schutzausrüstung (z. B. Schutzbrille, Handschuhe) bereitstellen.
- Geeignete Werkzeuge und Einrichtungen zur sicheren Ausführung der Arbeiten bereitstellen.

2.4.2 Gefahren durch Strahlung



WARNUNG

Augenschäden durch Laserstrahlung

Laserstrahlung kann schwere Augenschäden verursachen.

- Sicherheitsvorkehrungen und Anweisungen befolgen.
- Geräteanwendung nur durch geschultes Personal.
- Geräte der Laserklasse 3B nur in abgesicherten und gekennzeichneten Räumen benutzen.
- Bei der Arbeit mit offenen Laserstrahlen (Smart Tips der Laserklasse 3B) ist eine geeignete Schutzbrille zu tragen, siehe Kapitel "Betriebspezifikationen" in den MIRA-Gerätehandbüchern.
- Nominelle optische Gefahrendistanz (Nominal Ocular Hazard Distance - NOHD) beachten.
- Beachten Sie die Bestimmungen zur Norm IEC 60825-1 "Sicherheit von Lasereinrichtungen", sowie die in Ihrem Land geltenden Bestimmungen für den Betrieb von Laseranlagen.

2.5 Gestaltung von Warnhinweisen

Es gibt 4 Gefahrenstufen für Warnhinweise. Folgende Signalwörter werden zur Klassifizierung der Gefahrenstufen in Warnhinweisen verwendet:

- **GEFAHR** kennzeichnet eine gefährliche Situation, die sehr wahrscheinlich zu einer schweren Verletzung oder zum Tod führt, falls sie nicht vermieden wird.
- **WARNUNG** kennzeichnet eine gefährliche Situation, die zu einer schweren Verletzung oder zum Tod führen kann, falls sie nicht vermieden wird.
- **VORSICHT** kennzeichnet eine gefährliche Situation, die zu einer leichten bis mittelschweren Verletzung führen kann, falls sie nicht vermieden wird.
- **HINWEIS** kennzeichnet eine gefährliche Situation, die zu einem Sachschaden führen kann, falls sie nicht vermieden wird.

Warnhinweise unterscheiden sich in der Darstellung (Farbe und Warnzeichen) je nach Gefahrenstufe:



GEFAHR

Art und Quelle der Gefahr

Folgen bei Nichtbeachtung des Hinweises: Eine irreversible Verletzung evtl. mit Todesfolge ist sehr wahrscheinlich.

- Massnahmen zur Gefahrvermeidung



 **WARNUNG**

Art oder Quelle der Gefahr

Folgen bei Nichtbeachtung des Hinweises: Eine schwere Verletzung evtl. mit Todesfolge ist möglich.

- Massnahmen zur Gefahrvermeidung

 **VORSICHT**

Art oder Quelle der Gefahr


Folgen bei Nichtbeachtung des Hinweises: Eine leichte bis mittelschwere Verletzung ist möglich.



- Massnahmen zur Gefahrvermeidung

2.6 Bedeutung von Warnzeichen

Diese Dokumentation verwendet folgende Warnzeichen:

Tabelle 1 Warnzeichen gemäss ISO 7010

Warnzeichen	Bedeutung
	Allgemeines Warnzeichen
	Warnung vor elektrischer Spannung
	Warnung vor Handverletzungen
	Warnung vor spitzem Gegenstand
	Warnung vor heisser Oberfläche
	Warnung vor Biogefährdung
	Warnung vor giftigen Stoffen
	Warnung vor feuergefährlichen Stoffen
	Warnung vor ätzenden Stoffen

Warnzeichen	Bedeutung
	Warnung vor optischer Strahlung
	Warnung vor Laserstrahlen

Je nach Einsatzzweck des Produkts müssen entsprechende Warnzeichen-Aufkleber auf dem Produkt angebracht werden.




3.3 Auswahlmönüs

Datei	
Öffnen ►	
Proben	Importiert Proben.
Bibliotheken	Importiert Bibliotheken.
Arbeitsvorschriften	Importiert Arbeitsvorschriften.
Speichern Unter ►	
Proben	Speichert Proben am ausgewählten Speicherort.
Bibliotheken	Speichert Bibliotheken am ausgewählten Speicherort.
Arbeitsvorschriften	Speichert Arbeitsvorschriften am ausgewählten Speicherort.
Einstellungen	<p>Öffnet eine Ansicht mit 2 Registerkarten:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Allgemein (<i>siehe "Registerkarte Allgemein", Seite 11</i>) ▪ Reporte (<i>siehe "Registerkarte Reporte", Seite 13</i>)
Erweitert ►	
Datenbank	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Info Führt Datenbankinformationen auf. ▪ Hilfe ▪ Sicherung Sichert die Datenbank. ▪ Wiederherstellen Stellt die Datenbank wieder her. ▪ Speicherort Wählen Legt den Speicherort der Datenbank fest. ▪ Import Lizenzierte Bibliotheken Importiert lizenzierte Bibliotheken. ▪ Import MIRA Cal M Datenbank Importiert die Datenbank von MIRA Cal M. ▪ Zurücksetzen Entfernt alle Elemente aus der Datenbank, einschliesslich Arbeitsvorschriften, Proben und Bibliotheken.
Sprache Ändern	Ändert die Sprache der Anwendung.



Erweiterte Benutzer Verwalten	Ändert das Benutzerpasswort, verwaltet und prüft Benutzer (nur sichtbar, wenn [Erweitertes Login Erforderlich] unter Einstellungen aktiviert ist).
Serviceportal	Ermöglicht den Zugriff für den regionalen Metrohm-Service-Vertreter.
Verlassen	Schliesst MIRA Cal DS.

Gerät	
Verbinden	Verbindet MIRA XTR DS / MIRA DS mit MIRA Cal DS.
Trennen	Trennt MIRA XTR DS / MIRA DS von MIRA Cal DS.
PIN-Codes	Der Benutzer kann PIN-Codes hinzufügen. Doppelklick auf einen PIN-Code-Eintrag machen, um einen PIN-Code zu löschen, zu aktivieren oder deaktivieren. Der Standard-PIN-Code ist 1234. Er kann nicht geändert oder gelöscht werden.
Bluetooth-PIN-Code	Wird nur angezeigt, wenn das MIRA XTR DS / MIRA DS Gerät mit MIRA Cal DS verbunden ist. Ändert den PIN-Code für die drahtlose Bluetooth®-Verbindung mit MIRA Cal M. Der Standard-PIN-Code ist 9999.
Systemeignungstest-Archiv	Führt alle Systemeignungstests in der Datenbank auf.
Info	Führt Informationen zur Identifizierung des Geräts und Betriebssystems auf.
Umbenennen	Wird nur angezeigt, wenn das MIRA XTR DS / MIRA DS Gerät mit MIRA Cal DS verbunden ist. Der Benutzer kann den Namen von MIRA XTR DS / MIRA DS ändern.
Alle Proben Herunterladen	Lädt alle auf MIRA XTR DS / MIRA DS gespeicherten Proben herunter.
Skript Ausführen	Ermöglicht dem Benutzer die Ausführung von Service-Skripts für geringfügige Anpassungen am MIRA XTR DS / MIRA DS.
Gerät Kalibrieren	Führt den Benutzer durch die Kalibrierroutine. Der Systemeignungstest kann unmittelbar nach der Kalibrierung durchgeführt werden.
Systemeignungstest	Der Test kann unabhängig von der Kalibrierroutine durchgeführt werden. Die Anweisungen befolgen. Führt den Benutzer durch die Routine des Systemeignungstests. Führt Systemeignungstests unabhängig von der Kalibrierroutine durch.
Aktualisierungen ►	

<p>Sprachpaket Hochladen</p> <p>Zertifikatspaket Hochladen</p> <p>Erweitert</p>	<p>Aktualisiert Sprachen für die Anwendung.</p> <p>Aktualisiert lizenzierte Bibliotheken.</p> <p>Wird nur angezeigt, wenn MIRA XTR DS / MIRA DS mit MIRA Cal DS verbunden ist.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Verschlüsselte Bibliothek Hochladen Lädt eine verschlüsselte Bibliothek hoch. ▪ Bibliothekszugangsdatei Hochladen Lädt eine Bibliothekszugangsdatei hoch. ▪ S.T. Japan Bibliothek Hochladen Lädt eine S.T. Japan Bibliothek hoch.
<p>Hilfe</p> <p>Über</p> <p>Supportdatei Erstellen</p>	<p>Zeigt Version und Copyright von MIRA Cal DS an.</p> <p>Erstellt eine Supportdatei für die Desktop-Software und MIRA XTR DS / MIRA DS. Der Benutzer wird aufgefordert, den Kalibrierstandard anzubringen und [OK] auszuwählen. Es wird eine Supportdatei erstellt und der Benutzer aufgefordert, die Datei zu speichern. Die Supportdatei kann bei Problemen mit der Geräte- oder Desktop-Software an Metrohm Raman gesendet werden.</p>
<p>Home </p>	<p>Auf  klicken und der Benutzer gelangt zurück zum Startbildschirm.</p>
<p>Verbunden </p>	<p>Zeigt an, wenn MIRA XTR DS / MIRA DS mit MIRA Cal DS verbunden ist.</p>

Registerkarte Allgemein

Datei ► **Einstellungen**

Synchronisationseinstellungen ►	
Probenzusammenfassung Beim Sync. Speichern	Speichert eine Probenzusammenfassung nach der Synchronisation.
Systemeignungstest Beim Sync. Speichern	Speichert den Systemeignungstest nach der Synchronisation.
Autom. Synchronisation	Führt nach einer Modifikation von Arbeitsvorschriften, Bibliotheken oder anderen Gerätemodifikationen automatisch eine Synchronisation mit dem Gerät und/oder der Datenbank durch. Die Synchronisation benutzerdefinierter Arbeitsvorschriften, lizenzierter Bibliotheken und benutzerdefinierter Bibliotheken kann separat ausgewählt werden.
SmartSync	Für die Gerätesynchronisation kann ein benutzerdefinierter Ordner festgelegt werden. Der benutzerdefinierte Ordner kann definiert werden durch: Tag, Gerätenamen, Seriennummer, Synchronisationszeit, Gefahrenstufe, PIN-Code oder Arbeitsvorschrift.
Datenaufbewahrung ►	
Alle Daten Aufbewahren	Alle Daten in der Datenbank werden aufbewahrt. Ist die Option deaktiviert, können ein Ablaufdatum für die Daten, die Häufigkeit der Datenlöschung und Einstellungen für die Datenbanksicherung gewählt werden.
Diagrammeinstellungen ►	
Y-Gitterlinien	Zeigt die y-Gitterlinien im Probendiagramm an.
X-Gitterlinien	Zeigt die x-Gitterlinien im Probendiagramm an.
X-Achse invertieren	Invertiert die x-Achse im Probendiagramm.
Diagramm-Liniestärke	Legt die Linienstärke für das Diagramm fest.
Standard-Probenspalten	Legt die in der Ansicht Probe dargestellten Probenspalten fest.

Registerkarte Reporte

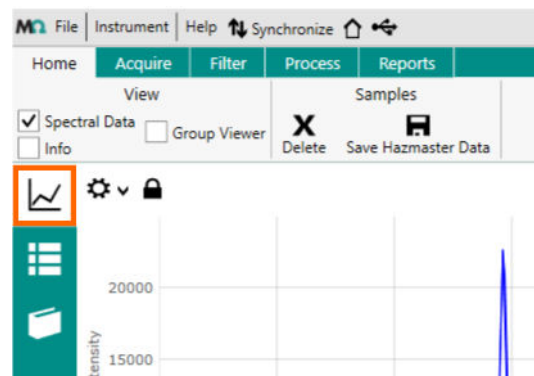
Datei ► Einstellungen


3.4 Funktionsregisterkarten und Feature-Ansichten

Die in den Funktionsregisterkarten angezeigten Features richten sich nach der Ansicht, die der Benutzer im Menü auf der linken Seite ausgewählt hat. Es gibt die folgenden Ansichten.

- Ansicht **Probe**
- Ansicht **Bibliothek**
- Ansicht **Arbeitsvorschrift**
- Ansicht **Synchronisieren**

Probenansicht



Probe 

Home ►

Proben

Auf eine Probe in der Probenliste klicken, um sie zu markieren und Aktionen auszuführen.


Mit Rechtsklick auf eine ausgewählte Probe ein Funktionsmenü öffnen.



<p>Aufnehmen ▶</p> <p>Aufnahmeeinstellungen</p> <p>Filter</p> <p>Bearbeiten</p> <p>Reporte</p>		<p>Wird nur angezeigt, wenn das MIRA XTR DS / MIRA DS Gerät mit der MIRA Cal DS Software verbunden ist.</p> <p>Aufnahmeeinstellungen für das Scannen einer Probe auswählen, während MIRA XTR DS / MIRA DS mit MIRA Cal DS verbunden ist (<i>siehe "Datenaufnahme mit MIRA XTR DS / MIRA DS", Seite 42</i>).</p> <p>Parameter zum Sortieren der Proben auswählen.</p> <p>Eine Probe auswählen und die Daten anhand anderer Bibliotheken nachbearbeiten.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Identifizierung Einen Abgleich mittels Pearson-Korrelation durchführen anhand der ausgewählten Bibliothek. ▪ Mischungsanalyse Einen Mischungsabgleich durchführen anhand der ausgewählten Bibliothek (0.999 verwenden, um einen Mischungstreffer zu erzwingen). ▪ Spektrale Mathematik Zwei Spektren addieren oder subtrahieren oder andere mathematische Operationen an ausgewählten Daten durchführen. <p>Reporte für die ausgewählten Spektren erstellen.</p>
---	--	--

Bibliotheksansicht

Libraries						Device Libraries			
Enabled	Name	Version	Last Modified	Created	Count	Enabled	Name	Version	Count
<input type="checkbox"/>	XTR Library beta	5	2021-06-16 17:43:2	2021-06-16 15:39:2	21	<input checked="" type="checkbox"/>	Bleach	2	2
<input checked="" type="checkbox"/>	Veg Oil	1	2021-05-07 08:07:2	2021-05-07 08:07:2	1	<input checked="" type="checkbox"/>	Chemical Warfare Agents	6	50
<input type="checkbox"/>	Poly XTR	1	2021-05-06 14:48:2	2021-05-06 14:48:2	1	<input type="checkbox"/>	CWA Sim	2	3
<input type="checkbox"/>	Explosives	100	2021-05-05 11:09:1	2021-04-29 14:50:5	98	<input type="checkbox"/>	Explosives	100	98

Bibliothek 

Home ▶

Bibliotheken

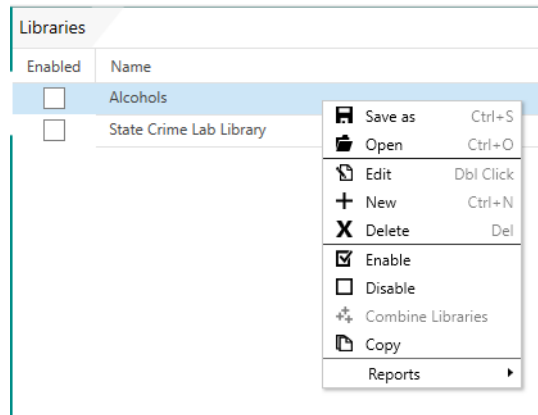
Bibliotheken

Lizenzierte Bibliotheken


Reporte ▶

Bibliotheksreporte

Mit Rechtsklick auf eine ausgewählte Bibliothek ein Funktionsmenü öffnen.

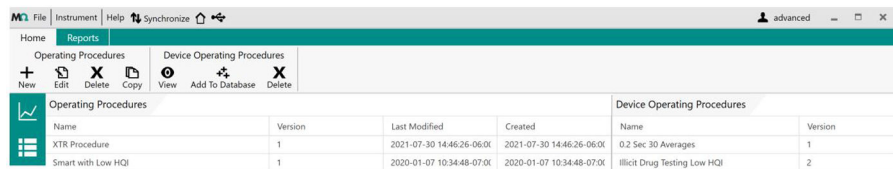



Zeigt die Bibliotheken auf dem Gerät an. Bibliotheken können dem Gerät hinzugefügt oder vom Gerät entfernt werden.

Eine lizenzierte Bibliothek auswählen und auf  **Anzeigen** klicken, um den Inhalt der Bibliothek zu sehen.

Reporte für die ausgewählten Bibliotheken erstellen.

Arbeitsvorschriftenansicht



Arbeitsvorschriften 

Home ▶

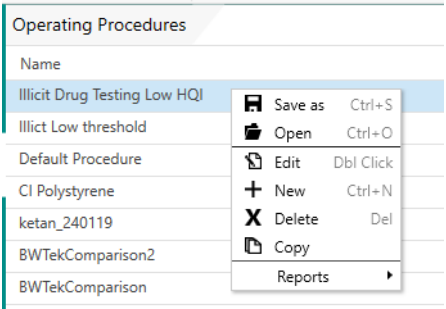
Arbeitsvorschriften

Die Arbeitsvorschriften in der Datenbank aufführen. Auf eine Arbeitsvorschrift klicken, um sie zu markieren und Aktionen auszuführen.

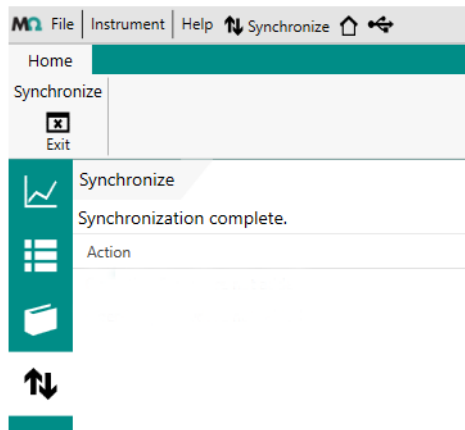
Auf die Standard-Arbeitsvorschrift können keine Aktionen angewendet werden.

Mit einem Rechtsklick auf eine ausgewählte Arbeitsvorschrift ein Funktionsmenü öffnen.




Gerätearbeitsvorschriften Reporte		<p>Liste der Arbeitsvorschriften auf dem Gerät. Der Benutzer kann sie aus dem Abschnitt Gerätearbeitsvorschriften der Datenbank hinzufügen.</p>
		<p>Erstellung eines Reports für die ausgewählten Arbeitsvorschriften.</p>

Ansicht Synchronisieren



Die Ansicht **Synchronisieren** ist nur sichtbar, wenn **Automatische Synchronisation** in den **Einstellungen** deaktiviert ist (*siehe "Auswahlmenüs", Seite 9*).

Synchronisieren 	
Synchronisieren	<p>Öffnet die Ansicht Synchronisieren. Fasst die Synchronisationsaktionen zusammen.</p> <p>Nach Abschluss der Synchronisation öffnet sich ein Fenster mit allen Arbeitsvorschriften, Benutzerbibliotheken und lizenzierten Bibliotheken, die nicht in der Datenbank sind.</p>
Home ►	
Verlassen	<p>Schliesst die Ansicht Synchronisieren.</p>

3.5 Identifizierung von Proben mit Bibliotheken

Das gemessene Spektrum einer Substanz wird mit den Spektren in einer Bibliothek verglichen, die auf den MIRA XTR DS / MIRA DS geladen wurde.

Die von Metrohm Raman erstellte **Illicit Library** ist auf dem MIRA XTR DS / MIRA DS vorinstalliert. Bibliotheken können auch vom Benutzer erstellt oder von kommerziellen Anbietern erworben werden.

Eine Bibliothek erstellen

Benutzer können in MIRA Cal DS eine Bibliothek erstellen, die dann für die Identifizierung von Proben verwendet wird. Bibliotheken zur Identifizierung werden in MIRA Cal DS aus Messungen bekannter Substanzen erzeugt, auf die der Benutzer Zugriff hat.

Kommerzielle Bibliotheken erwerben

Neben vom Benutzer erstellten Bibliotheken bietet Metrohm Raman verschiedene Pakete einsatzbereiter Bibliotheken an.

Identifizierung einer Substanz

Bibliotheken für den Abgleich werden bei der Erstellung von Arbeitsvorschriften ausgewählt.

Beim Analysieren einer Probe wird das Probenspektrum mit allen Spektren in der ausgewählten Bibliothek verglichen. Die gemessene Probe wird als eine der Bibliotheksproben identifiziert und als **Identifizierungsergebnis** angezeigt. Gibt es für die Probe keinen Treffer in einer Bibliothek, wird **Keine Übereinstimmung** angezeigt.

4.2 MIRA Cal DS installieren

i Vor der Installation von MIRA Cal DS sicherstellen, dass Administratorrechte vorhanden sind.

Sicherstellen, dass das System die Systemanforderungen erfüllt (siehe "Systemanforderungen", Seite 20).

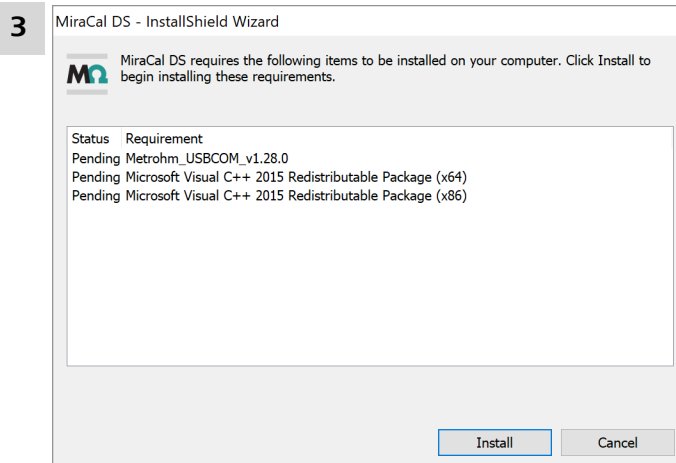
Metrohm USBCOM-Treiber installieren

1 Auf den folgenden Link klicken, um die aktuellste Version von MIRA Cal DS herunterzuladen:

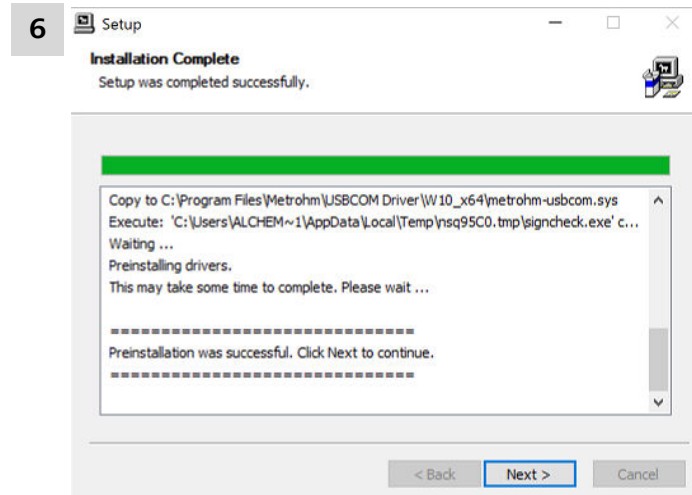
<https://www.metrohm.com/en/support-and-service/software-center/miracal/>

Doppelklick auf den Installer.

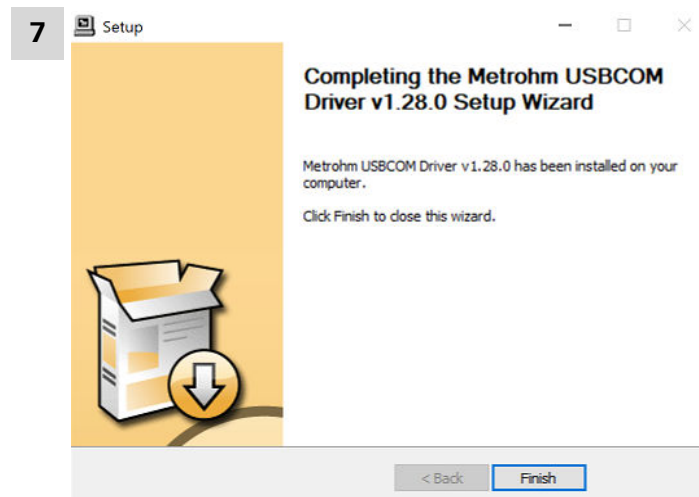
2 Im sich öffnenden Fenster auf **[Ja]** klicken und dem Assistenten auf dem Bildschirm folgen.



Auf **[Installieren]** klicken.



Auf **[Weiter]** klicken.



Auf **[Beenden]** klicken, um die Installation abzuschliessen.

3

MiraCal DS - InstallShield Wizard

Customer Information

Please enter your information.

Please enter your name and the name of the company for which you work.

User Name:

Your Name

Company Name:

Your Company

InstallShield

< Back

Next >

Cancel

Ihren **Benutzernamen** eingeben.Den **Firmennamen** eingeben.Auf **[Weiter]** klicken.

4

MiraCal DS - InstallShield Wizard

Ready to Install the Program

The wizard is ready to begin installation.

Click **Install** to begin the installation.If you want to review or change any of your installation settings, click **Back**. Click **Cancel** to exit the wizard.

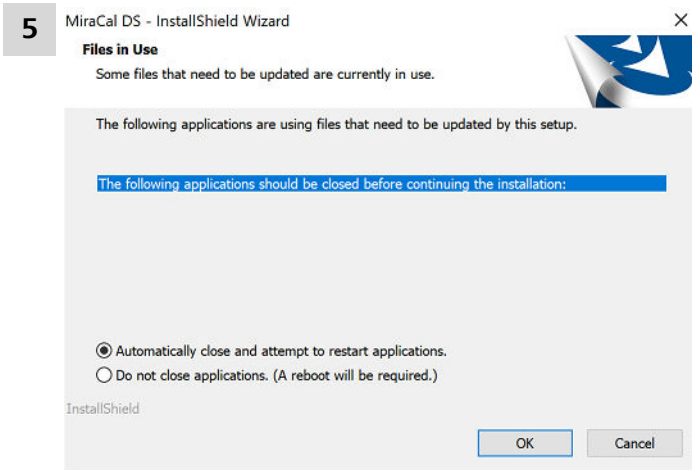
InstallShield

< Back

Install

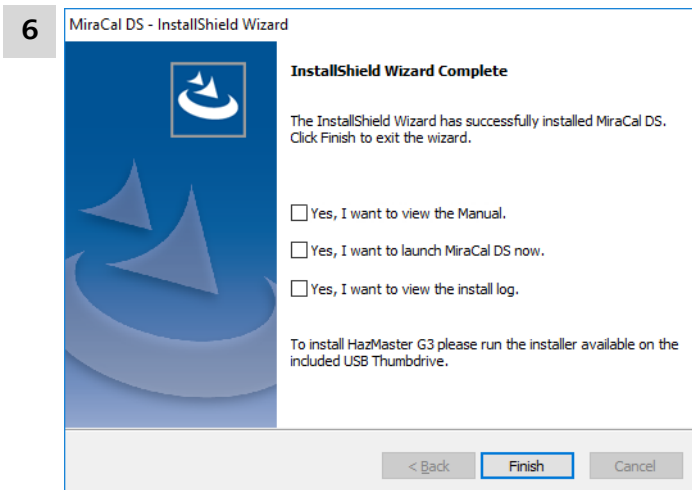
Cancel

Zum Starten der Installation auf **[Installieren]** klicken.



Anwendungen automatisch schliessen und Neustart versuchen auswählen.

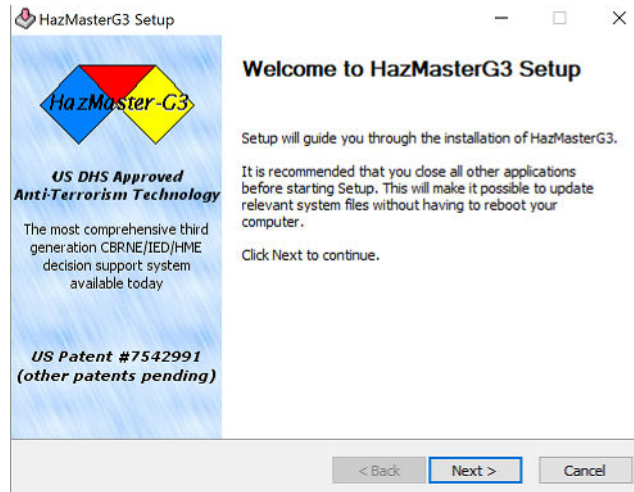
Auf **[OK]** klicken.



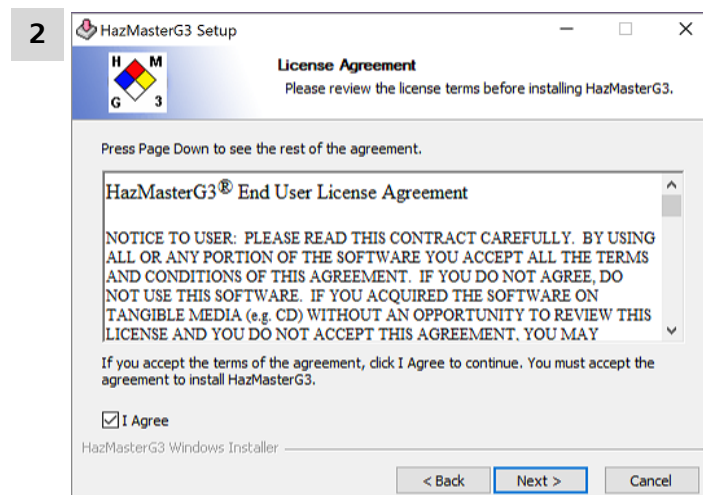
Auf **[Beenden]** klicken, um die Installation von MIRA Cal DS abzuschliessen.

HazMasterG3®-Software installieren

- 1** Wenn HazMasterG3 erworben wurde, die Anwendung HazMasterG3 vom USB-Stick kopieren und auf die ausführbare Installationsdatei doppelklicken.

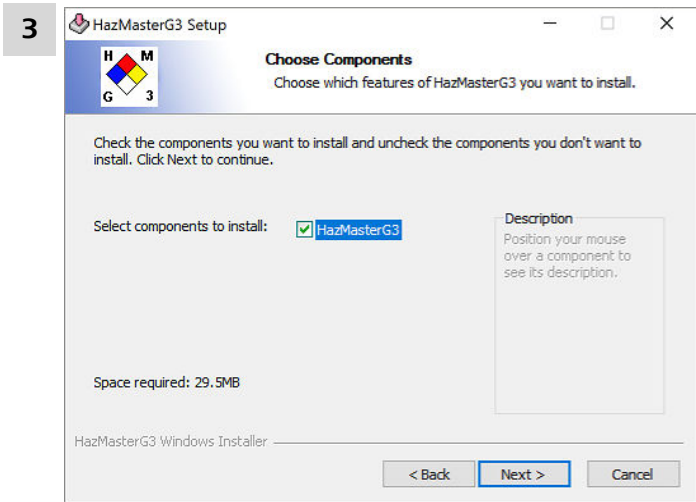


Auf **[Weiter]** klicken, um die Installation von HazMasterG3 zu starten.

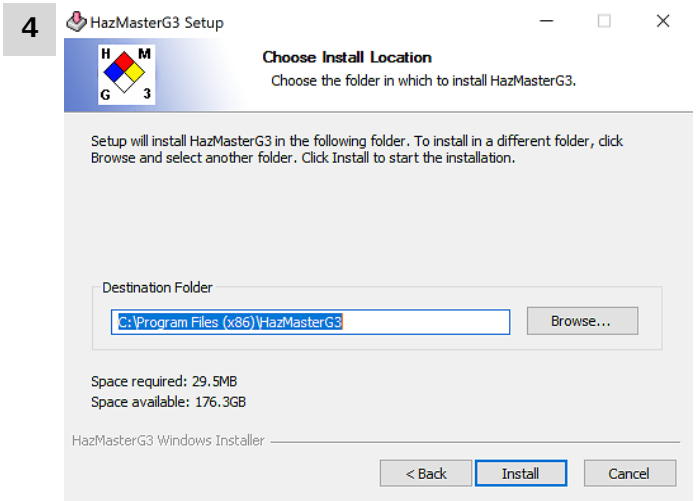


Ich Stimme Zu auswählen.

Auf **[Weiter]** klicken.

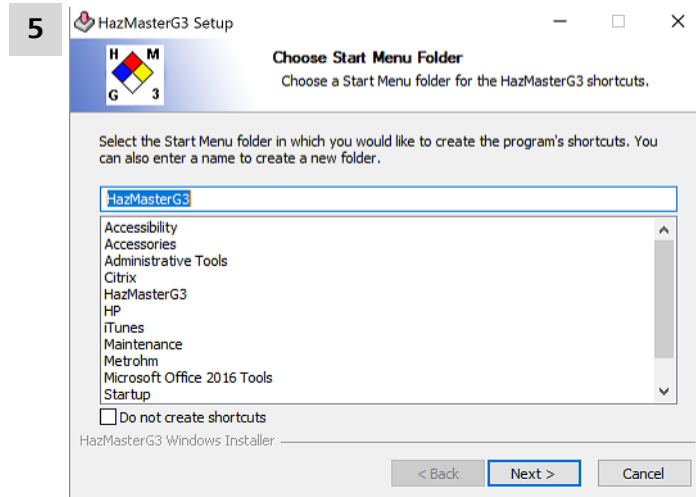


Auf **[Weiter]** klicken.

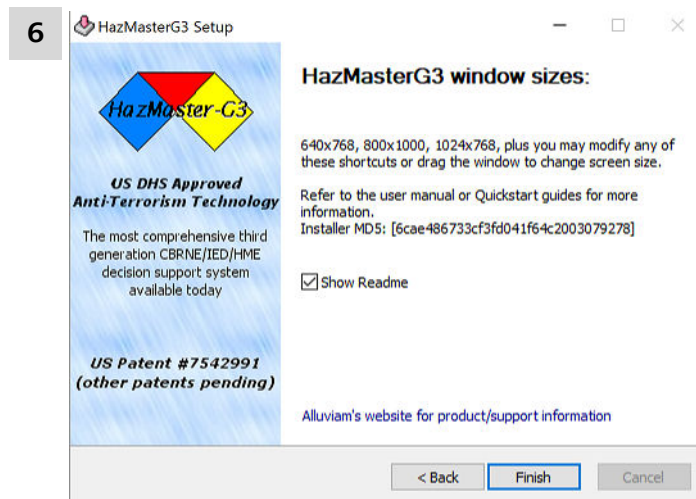


Auf **[Installieren]** klicken.





Auf **[Weiter]** klicken.



Auf **[Beenden]** klicken, um die Installation von HazMasterG3 abzuschliessen.

5.2 Eine Verbindung zwischen MIRA XTR DS / MIRA DS und MIRA Cal DS herstellen

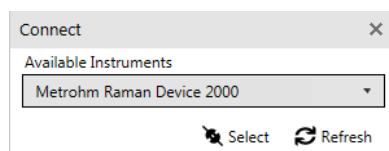
- i** Nur das von Metrohm mitgelieferte USB-Kabel (6.021.08010) und keine USB-Kabel von Drittanbietern verwenden. Metrohm empfiehlt die Verwendung eines USB-Hubs mit Stromversorgung.

Das Gerät physisch mit dem Host-Computer verbinden

- Das Gerät mit dem USB-Mini-B-Kabel an den Computer anschliessen. MIRA XTR DS / MIRA DS schalten sich automatisch ein, wenn sie mit dem Host-Computer verbunden werden.
Einen Augenblick warten, bis das Gerät bereit ist. Der Bildschirm für die Eingabe des PIN-Codes erscheint.
Den PIN-Code eingeben und vor dem Verbinden des Geräts warten, bis der Bildschirm Gerät kalibrieren erscheint.

Über die Startseite verbinden/trennen

- Auf der Startseite von MIRA Cal DS auf **[Verbinden]** klicken.
Das Gerät verbindet sich automatisch und synchronisiert seine Daten.
Ist mehr als ein MIRA XTR DS / MIRA DS verbunden, wird der Benutzer ggf. aufgefordert, ein verfügbares Gerät auszuwählen.




Metrohm Raman Device 2000 auswählen und auf **[Auswählen]** klicken.

Nach der erstmaligen Verbindung mit MIRA XTR DS / MIRA DS erkennt die Software das Gerät und fordert den Benutzer nicht erneut auf, ein verfügbares Gerät auszuwählen.

- i** Ist das Gerät nicht aufgeführt, sicherstellen, dass das Gerät eingeschaltet ist und den Bildschirm **Gerät Kalibrieren** gestartet hat. Das Gerät wird nicht aufgeführt, wenn es ausgeschaltet ist. Auf **[Aktualisieren]** klicken.

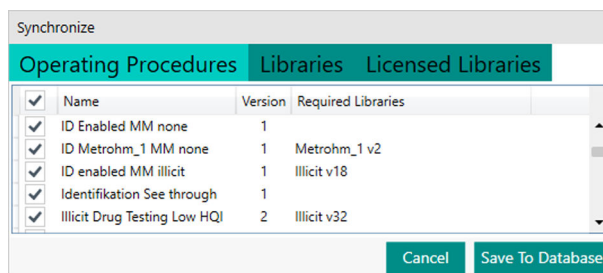


- i** Das Symbol  in der Menüleiste von MIRA Cal DS zeigt eine erfolgreiche Verbindung an.
Auf dem Bildschirm des Geräts wird **Verbunden** angezeigt.

MIRA Cal DS synchronisiert sich automatisch, wenn auf der Startseite **[Verbinden]** ausgewählt wird. MIRA Cal DS informiert den Benutzer.

✓ **Synchronization Successful**

- 2** Ist **Autom. Synchronisation** deaktiviert, werden nicht in der Datenbank hinterlegte Arbeitsvorschriften, Benutzerbibliotheken und lizenzierte Bibliotheken des Geräts in der Ansicht **Synchronisieren** aufgeführt.

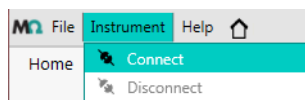


Auf **[In Datenbank Speichern]** klicken, um der Datenbank von MIRA Cal DS ausgewählte Elemente hinzuzufügen.

- 3** Um MIRA XTR DS / MIRA DS von der Software zu trennen, auf **[Trennen]** klicken.

Über erweiterte Werkzeuge verbinden/trennen

- 1** Auf der Startseite von MIRA Cal DS auf **[Erweitert]** klicken.
- 2** In den Registerkarten des Menüs **Gerät ► Verbinden** auswählen.

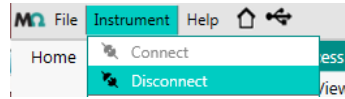


Es öffnet sich ein Fenster mit dem Synchronisationsfortschritt, das den Status der durchgeführten Aktionen anzeigt. Nach Abschluss der Synchronisation wird in der Informationsleiste unten **Bereit** angezeigt.

Der Standard von MIRA Cal DS ist eine automatische Synchronisation bei der Auswahl von **[Verbinden]**.

Der Benutzer kann die Synchronisationseinstellungen ändern, wenn MIRA XTR DS / MIRA DS mit der Software verbunden ist.

- 3 Um MIRA XTR DS / MIRA DS von der Software zu trennen, auf **Gerät ► Trennen** klicken.



- i** Es kann mehr als 1 Gerät mit der Software verwendet werden. Sie können für eine saubere Datenverwaltung mit der gleichen Datenbank synchronisiert werden. Die Geräte können jedoch nicht gleichzeitig mit der Software verbunden werden und müssen daher nacheinander verwendet werden.

5.3 Konfiguration

5.3.1 Bibliotheken erstellen und bearbeiten

Spektren für Bibliotheken stammen von Proben, die bereits aufgenommen oder in die Probandatenbank importiert wurden.

Eine Bibliothek erstellen

- 1 Die Ansicht **Bibliothek** aufrufen.
- 2 Zur Registerkarte **Home** wechseln.
- 3 Auf **[Neu]** klicken.
- 4 Metadaten hinzufügen (Bibliotheksinformationen).

i Nachdem eine Bibliothek erstellt wurde, kann ihr Name nicht mehr geändert werden.
- 5 Zur Registerkarte **Proben Hinzufügen** wechseln.
- 6 Proben auswählen. Mit den Tasten **[STRG]** und **[SHIFT]** können mehrere Proben ausgewählt werden.

i Für die Suche nach Proben den **Probenbrowser** verwenden. In der Registerkarte **Kürzlich** kann der Benutzer die zuletzt betrachteten Proben einsehen.

7 Auf die Probe doppelklicken oder im Abschnitt **Bibliotheksproben** der Registerkarte **Home** auf **[Hinzufügen]** klicken, um die Probe der Bibliothek hinzuzufügen.

8 Zur Registerkarte **Bibliotheksproben** wechseln.

9 Auf die Bibliotheksprobe in der Probenliste doppelklicken und es wird zur Registerkarte **Bibliotheksprobe Metadaten** gewechselt. In dieser Registerkarte können die folgenden Informationen hinzugefügt werden.

- Name
- CAS
- Gefahrenstufe
- Probentyp
- Gefahrenkommentar
- Synonyme
- GHS Klassifikationen

Diese Informationen werden auf den Identifizierungsbildschirmen von MIRA XTR DS / MIRA DS angezeigt.

10 In der Registerkarte **Bibliotheksproben** auf **[Speichern]** klicken, um die Probenmetadaten zu speichern.

11 Zum Erstellen der neuen Bibliothek in der Registerkarte **Bibliothek** auf **[Speichern]** klicken.

12 In den Einstellungen auf **Autom. Synchronisation** klicken, um neue Bibliotheken beim Verbinden des MIRA XTR DS / MIRA DS Geräts mit der Software automatisch zu synchronisieren.

Wenn **Autom. Synchronisation** deaktiviert ist, zum Synchronisieren neuer Bibliotheken mit MIRA XTR DS / MIRA DS auf **[Synchronisieren]** der Kopfzeile klicken.

Eine Bibliothek bearbeiten

1 Die Ansicht **Bibliothek** aufrufen.

2 Eine Bibliothek auswählen und auf **[Bearbeiten]** klicken.

3 Es können Proben hinzugefügt und gelöscht werden.

- Zum Hinzufügen einer Probe zur Registerkarte **Proben Hinzufügen** wechseln. Eine Probe auswählen. Auf die Probe doppelklicken oder im Abschnitt **Bibliotheksproben** der Registerkarte **Home** auf **[Hinzufügen]** klicken, um die Probe der Bibliothek hinzuzufügen.
- Zum Löschen einer Probe eine Probe auswählen. Auf **[Löschen]** im Abschnitt **Bibliotheksproben** der Registerkarte **Home** klicken.

4 Auf **[Speichern]** klicken.

5 Bearbeitete Bibliotheken werden auf die gleiche Weise synchronisiert wie neu erstellte Bibliotheken.

6 Bibliotheksproben-Metadaten können in bereits bestehenden Benutzerbibliotheken bearbeitet werden.

Eine Bibliothek entfernen

1 Die Ansicht **Bibliothek** aufrufen.

2 Eine Bibliothek aus der Liste auswählen und auf **[Löschen]** klicken.

5.3.2 Arbeitsvorschrift und bearbeiten

Arbeitsvorschriften regeln die Aufnahme und Auswertung von Spektren.

MIRA XTR DS / MIRA DS verfügt über **Smart-Aufnahme**, ein Prozess, der die Aufnahmeparameter zur Verbesserung der Probenauswertung optimiert. Die Standardvorschrift von MIRA XTR DS / MIRA DS und in MIRA Cal DS führt automatisch eine smarte Aufnahme durch und wertet die Spektren anhand aller verfügbaren Bibliotheken aus.

Benutzer können Arbeitsvorschriften erstellen, die eine smarte Aufnahme umfassen, aber die zur Auswertung verwendeten Bibliotheken begrenzen.

Benutzer können auch Arbeitsvorschrift ohne smarte Aufnahme, aber mit den folgenden Aufnahmeoptionen erstellen.

- Ausgewählte Laserleistung
- Mittelwertbildung
- Integrationszeit
- Auswertungsprozesse

In der folgenden Tabelle sind alle Aufnahmeoptionen für Arbeitsvorschriften aufgeführt.

Tabelle 2 Aufnahmeoptionen



Aufnahmeoption	Beschreibung
Smart-Aufnahme	Laserleistung, Integrationszeit usw. werden automatisch an die Art der verwendeten Probe, die Umgebung und die Stärke der Hintergrundbeleuchtung angepasst. Diese Methode ist besonders nützlich, wenn dem Benutzer die für eine Aufnahme geeigneten Parameter nicht bekannt sind.
Laserleistung (Stufe)	<p>Die Intensität des Lasers kann reduziert werden. Einen Wert zwischen 1 und 5 wählen. 5 ist die höchste Stufe.</p> <p>Der empfohlene Wert ist 5.</p> <p>Gründe für die Verringerung der Laserleistung sind:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Messung kritischer Materialien wie Sprengstoffe oder brennbare Materialien. ▪ Messung von Materialien mit niedrigem Schmelzpunkt. Flüssige und feste Formen einer Verbindung haben unterschiedliche Spektren.
Autom. Integration	Das Gerät wählt automatisch die beste Integrationszeit für die aktuelle Probe.
Integrationszeit (Sek.)	<p>Die Integrationszeit gibt an, wie lange ein einzelnes Spektrum erfasst wird.</p> <p>Die Integrationszeit verteilt sich auf zwei Schritte.</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Laser AN zur Aufnahme des Probenspektrums. ▪ Laser AUS zur Aufnahme der Referenz. <p>Die tatsächliche Messdauer beträgt das Doppelte des Eingabewerts.</p> <p>Die maximale Integrationszeit beträgt 30 Sekunden.</p>

Aufnahmeoption	Beschreibung
Mittelungen	<p>Ist der Wert höher als 1, ist das angezeigte Spektrum ein Mittelwert mehrerer Aufnahmen. Ein höherer Wert in diesem Feld führt zu einer längeren Messdauer, da mehr Spektren aufgenommen werden müssen.</p> <p>Die maximale Anzahl der Mittelungen liegt bei 30.</p> <p>Beispiel: Für ein gemittelttes Spektrum aus 5 gemessenen Proben den Wert 5 eingeben.</p>
Scanverzögerung	<p>In dieses Feld eine Zeit eingeben, wenn der Benutzer einen Scan verzögern möchte. Dieses Feld leer lassen, wenn der Benutzer einen Scan nicht verzögern möchte.</p> <p>Die maximale Scanverzögerung beträgt 59 Minuten.</p>
Smart Tip	<p>Den benötigten Aufsatz für die Messung Ihrer Probe auswählen. Ist kein spezieller Smart Tip erforderlich, Alle Zulassen auswählen.</p>
XTR-Modus	<ul style="list-style-type: none"> ▪ [Automatisch] führt bei erkannter Fluoreszenz automatisch die XTR-Bearbeitung durch. ▪ [Jeder Scan] führt XTR bei jeder Messung durch, auch wenn keine Fluoreszenz erkannt wurde. ▪ [Abfrage] fordert den Benutzer bei erkannter Fluoreszenz zur Bearbeitung mit XTR auf. ▪ [Nie] führt niemals eine XTR-Bearbeitung aus.

Eine Arbeitsvorschrift erstellen

- 1 Die Ansicht **Arbeitsvorschrift** aufrufen.
- 2 Zur Registerkarte **Home** wechseln.
- 3 Auf **[Neu]** klicken.

Unterbibliothek auswählen, anstatt die gesamte grosse Bibliothek zu durchsuchen.

- 8 Zum Speichern der Arbeitsvorschrift auf **[Speichern]** im Abschnitt **Arbeitsvorschrift** der Registerkarte **Home** klicken. Wurde die neu erstellte Arbeitsvorschrift ordnungsgemäss gespeichert, ist sie in der Ansicht **Arbeitsvorschrift** in der Registerkarte **Home** aufgeführt.
- 9 Wird **Autom. Synchronisation** in den Einstellungen aktiviert, erfolgt eine automatische Synchronisation neuer Arbeitsvorschriften, wenn das MIRA XTR DS / MIRA DS Gerät mit der MIRA Cal DS Software verbunden wird.

Wird **Autom. Synchronisation** nicht aktiviert, muss **[Synchronisieren]** in der Kopfzeile angeklickt werden, um neue Arbeitsvorschriften mit MIRA XTR DS / MIRA DS zu synchronisieren.

Eine Arbeitsvorschrift bearbeiten

- 1 Die Ansicht **Arbeitsvorschriften** aufrufen.
- 2 Eine Arbeitsvorschrift auswählen. Auf **Bearbeiten** klicken.
- 3 Es können folgende Einstellungen bearbeitet werden.
 - **Metadaten**
 - **Aufnahme**
 - **Identifizierung**
 - **Mischungsanalyse**
- 4 Auf **[Speichern]** klicken.
- 5 Bearbeitete Arbeitsvorschriften werden auf die gleiche Weise synchronisiert wie neu erstellte Arbeitsvorschriften.

Eine Arbeitsvorschrift löschen

- 1 Die Ansicht **Arbeitsvorschriften** aufrufen.
- 2 Eine Arbeitsvorschrift aus der Liste auswählen und auf **[Löschen]** klicken.

5.4 Kalibrierung und Systemeignung

Ein Gerät kalibrieren

- 1 Ein Gerät verbinden.
- 2 Einen geeigneten Kalibrierstandard am Gerät anbringen.
- 3 Das Gerät aufrecht hinstellen.
- 4 Auf **Gerät** ► **Gerät Kalibrieren** klicken. Die Kalibrierung kann einige Zeit dauern.
Ein Dialog zeigt an, ob die Kalibrierung erfolgreich war oder fehlgeschlagen ist.
- 5 Nach der Kalibrierung wird der Benutzer zur Durchführung eines Systemeignungstests aufgefordert. Durch Auswahl von **[OK]** wird der Test automatisch durchgeführt. Durch Auswahl von **[Abbrechen]** wird der Test beendet.

Einen Systemeignungstest durchführen

Ein Systemeignungstest ist ein Selbsttest zur Überprüfung der Eignung eines Geräts. Es werden mehrere interne Prüfverfahren ausgeführt. Darunter z. B. eine Überprüfung von Peakintensität und Wellenzahlkalibrierung.

Der Benutzer kann diesen Test unabhängig von der Kalibrierung durchführen. Der Test kann täglich durchgeführt werden, um sicherzustellen, dass das Gerät erwartungsgemäss arbeitet. Nach einem erfolgreichen oder fehlgeschlagenen Test kann ein Report gespeichert werden. Der Report enthält Einzelheiten zu den durchgeführten Tests.

- 1 Ein Gerät verbinden.
- 2 Einen Kalibrierstandard am Gerät anbringen.
- 3 Auf **Gerät** ► **Systemeignungstest** klicken.
Ein Dialog zeigt an, ob der Test erfolgreich war oder fehlgeschlagen ist.
Schlägt der Systemeignungstest nach der Kalibrierung fehl, für weitere Informationen den Abschnitt zur Problembekämpfung zurate ziehen (*siehe "Support-Protokolldatei erstellen", Seite 55*).

- 4 Einen Speicherort für die Reportdatei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.

6 Bedienung und Betrieb

6.1 Datenaufnahme mit MIRA XTR DS / MIRA DS

Datenaufnahme durchführen

i Für eine ausführliche Beschreibung der folgenden Schritte die Gerätehandbücher zurate ziehen (*siehe "Zusätzliche Informationen – Gerätehandbücher", Seite 2*).

- 1** Wenn Änderungen vorgenommen wurden, das Gerät mit MIRA Cal DS synchronisieren, um Arbeitsvorschriften und Benutzerkonten hochzuladen.
- 2** Das Gerät von MIRA Cal DS trennen.
- 3** Bei Bedarf kalibrieren oder die Kalibrierung überspringen.
- 4** Den Bildschirm **Home** aufrufen.
- 5** Sofern gewünscht, die Arbeitsvorschrift ändern.
- 6** Spektren aufnehmen.

Aufgenommene Spektren von MIRA XTR DS / MIRA DS in MIRA Cal DS übertragen

- 1** Das MIRA XTR DS / MIRA DS Gerät mit der MIRA Cal DS Software verbinden.
- 2** MIRA XTR DS / MIRA DS entweder automatisch oder manuell mit MIRA Cal DS synchronisieren. Das hängt von den Einstellungen ab.
Synchronisiert sich MIRA XTR DS / MIRA DS nicht automatisch, in den Einstellungen **Gerät ► Synchronisieren** auswählen.
Mit MIRA Cal DS synchronisierte Proben erscheinen in der Ansicht **Probe**.

Datenaufnahme mit Verbindung zwischen MIRA XTR DS / MIRA DS und MIRA Cal DS

- 1 Das MIRA XTR DS / MIRA DS Gerät mit der MIRA Cal DS Software verbinden.
- 2 Auf die Registerkarte **Aufnehmen** klicken.
- 3 Parameter auswählen.
 - Aufnehmen
 - **Einzelne Aufnahme**
Keine Häkchen setzen.
 - **Kontinuierliche Aufnahme**
Aufnahmen ohne Anklicken von **[Aufnehmen]**.
 - **Mehrfachaufnahme**
Der Benutzer legt fest, wie viele aufeinanderfolgende Aufnahmen durchgeführt werden. Der Benutzer wählt das Zeitintervall zwischen den aufeinanderfolgenden Aufnahmen aus.
 - Aufnahmeeinstellungen
Ist das Feld **Aufnahme über Arbeitsvorschrift** deaktiviert, erscheint die Registerkarte **Aufnahmeeinstellungen**.
 - Werden keine Häkchen gesetzt, wählt der Benutzer Integrationszeit, Laserleistung und Anzahl der Mittelungen aus.
 - Bei Aktivierung von **Autom. Integration** bestimmt der Prozess die Integrationszeit. Der Benutzer wählt Laserleistung und Anzahl der Mittelungen aus.
 - Bei Aktivierung von **Smart-Aufnahme** gibt es keine Benutzeroptionen für die Aufnahme.
 - Arbeitsvorschrift
Der Benutzer kann Arbeitsvorschriften auswählen, die in der Software erstellt und auf MIRA XTR DS / MIRA DS gespeichert wurden.
 - **SERS-Arbeitsvorschrift**
Diese Vorschrift erscheint nur, wenn der SERS-Aufsatz am Gerät angebracht ist und vom Benutzer für die SERS-Detektion ausgewählt wurde.
- 4 Auf **[Aufnehmen]** klicken.
- 5 Spektren werden in der Ansicht **Probe** angezeigt.

6.2 Daten anzeigen und verwalten

6.2.1 Ein Spektrum anzeigen

Wird ein Spektrum synchronisiert, erscheint es im aktiven Ansichtsfenster. Auf den Namen des Spektrums doppelklicken, um die Trefferresultate und das Referenzspektrum anzuzeigen.

Filter

- 1 Auf die Registerkarte **Filter** klicken. Der Benutzer kann grosse Datenmengen durch Verwendung der Filterkriterien filtern.
- 2 Die gewünschten Filterkriterien einstellen, um die Daten im Ansichtsfenster zu verwalten.
- 3 Auf **[Filter Löschen]** klicken, um die Filter auf den Standard zurückzusetzen.

Fenster mit Spektralansicht

- 1 Ein Spektrum aus dem **Probenbrowser** auswählen.
- 2 Zwischen den folgenden Optionen wählen. Sind diese Optionen nicht aktiviert, wird ein normales Raman-Spektrum angezeigt.
 - **[Vom Browser]**
 - **[Versatz]** sorgt durch einen leichten Versatz von 2 überlagerten Spektren für eine bessere Vergleichbarkeit.
 - **[Basislinie]** – Normale Raman-Daten können bearbeitet werden, um für eine bessere Ansicht eine erhöhte Basislinie zu entfernen.
 - **[XTR]** zeigt die mit MIRA XTR DS erfassten eXTRahierten Daten an.
 - **[Treffer]** blendet die Treffer des aktiven Spektrums im Ansichtsfenster ein.
 - **[Peaks]** beschriftet die Peaks im Fenster mit Spektralansicht. Zur Begrenzung der Anzahl der abgebildeten Peaks können Schwellen festgelegt werden.
 - **[Normieren]** normiert den höchsten Peak für einen Vergleich von Spektren mit unterschiedlichen Intensitäten auf 1.
 - **[Legende]** zeigt eine Legende der im Fenster mit Spektralansicht dargestellten Proben an.

6.2.2 Probenlistenordner verwalten

- 1 Die Ansicht **Probe** auswählen.
- 2 Ordner können auf der rechten Seite des Fensters der Probenansicht erstellt werden.
- 3 Um eine Probe hinzuzufügen, die Probe aus der Probenliste auswählen. Einen Rechtsklick darauf machen und sie ausschneiden. Den gewünschten Ordner auswählen und die Probe in den Ordner einfügen.

6.3 Ein Spektrum bearbeiten

Spektren können mit verschiedenen Methoden bearbeitet und nachbearbeitet werden.

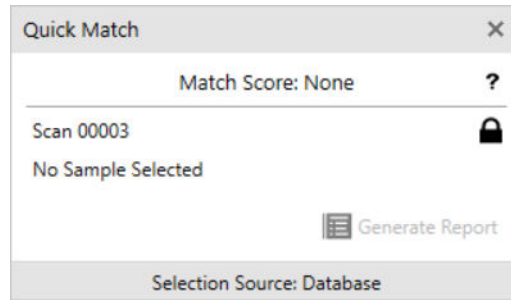
Die Registerkarte **Bearbeiten** aufrufen, um die verschiedenen Bearbeitungsoptionen anzuzeigen.


Identifizierung

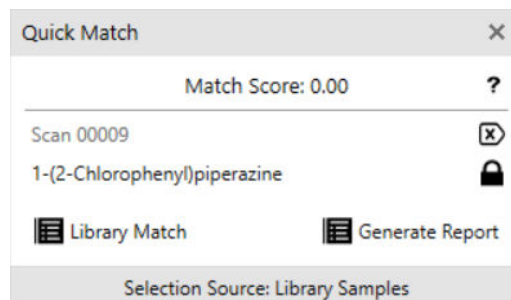
- 1 Die Bibliothek für den Abgleich aus der Auswahlliste **Bibliothek** auswählen.
- 2 Die Zahl unter **Treffer** verringern oder erhöhen, um die Anzahl der angezeigten Resultate festzulegen.
- 3 Die Zahl unter **Schwelle** verringern oder erhöhen, um die Schwelle für den Abgleich festzulegen.
Ein höherer Schwellenwert erhöht die Wahrscheinlichkeit für falsch negative Resultate. Der Standardwert ist 0.85.
- 4 Auf **[Treffer]** klicken, um den Abgleich mit den ausgewählten Parametern durchzuführen.

Schnellabgleich

- 1 **[Schnellabgleich]** auswählen, um das Fenster **Schnellabgleich** zu öffnen.



- 2 Das ausgewählte Spektrum wird angezeigt. Das Symbol  anklicken, um das aktive Spektrum zu sperren.
- 3 Ein anderes Spektrum auswählen, um die Trefferquote für den Vergleich der beiden Spektren anzuzeigen.
- 4 Zur Registerkarte **Bibliothek** wechseln. Das Fenster **Schnellabgleich** bleibt aktiv.
- 5 Eine Bibliothek aus der Liste auswählen. Mit der rechten Maustaste auf die Bibliothek klicken und **Anzeigen** auswählen. Zur Registerkarte **Bibliothekspalten** wechseln. Ein Symbol für Bibliothekstreffer wird aktiv.



- 6 Auf **[Bibliothekstreffer]** klicken, um die Trefferquote als Spalte in der Bibliothekslisten anzuzeigen.
- 7 Auf **[Report Erstellen]** klicken, um einen Abgleichsreport im .pdf-Format zu erstellen.

Mischungsanalyse

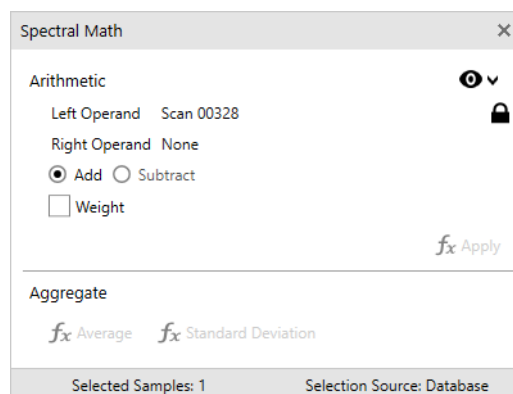
- 1 Die Bibliothek für den Abgleich aus der Auswahlliste **Bibliothek** auswählen.


- 2 Die Zahl unter **Schwelle** verringern oder erhöhen, um die Schwelle für den Abgleich festzulegen. Eine hohe Zahl wie z. B. 0.99 erhöht die Wahrscheinlichkeit für erzwungene Treffer. Für den Abgleich am Gerät liegt der Standard-Schwellenwert bei 0.920.
- 3 Auf **[Treffer]** klicken, um den Mischungstreffer mit den ausgewählten Parametern durchzuführen.


Spektrale Mathematik

Der Benutzer kann auf ein Spektrum grundlegende spektrale Mathematik anwenden. Zu diesen Operationen gehören Addition, Subtraktion, Mittelwertbildung und Standardabweichung eines ausgewählten Datensatzes.

- 1 Auf **[Spektrale Mathematik]** klicken, um das Fenster **Spektrale Mathematik** zu öffnen.



- 2 Ein Spektrum auswählen. Das Symbol  anklicken, um das aktive Spektrum zu sperren. Ein anderes Spektrum auswählen.
- 3 Die mit den beiden Spektren durchzuführende Operation auswählen. Für Berechnungen zur Mittelwertbildung und Standardabweichung mehrere Spektren auswählen.
- 4 Es kann eine gewichtete Subtraktion oder Addition durchgeführt werden. **Anteil** aktivieren und den Schieberegler oder das Zahlenfeld verwenden, um die gewichtete Implementierung auf den Operand einzustellen.
- 5 Das Resultat wird im aktiven Ansichtsfenster als neues Spektrum angezeigt.

Für eine Vorschau der Resultate auf  klicken und **Ergebnisvorschau** aktivieren.


6.4 Reporte erstellen

Es gibt 2 Optionen für die Erstellung eines Probenreports. Diese werden in den folgenden 2 Vorgehensweisen beschrieben. Der Report sieht bei beiden Vorgehensweisen gleich aus.

Probenreport Option 1

- 1 Die Ansicht **Probe** auswählen.
- 2 Auf die Registerkarte **Reporte** klicken.
- 3 Entweder **[Zusammenfassung Speichern]** oder **[Vollständigen Report Speichern]** anklicken.
- 4 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.
- 5 Bei Bedarf die PDF-Datei ausdrucken.

Probenreport Option 2

- 1 Eine Probe auswählen. Einen Rechtsklick auf die ausgewählte Probe machen.
 - 2 Zu **Reporte** wechseln.
 - 3 Ein Reportformat auswählen.
-  Mit **[Zusammenfassung Anzeigen]** oder **[Vollständigen Report Anzeigen]** eine Vorschau des Reports erzeugen.

Es gibt 2 Optionen für die Erstellung eines Bibliotheksreports. Diese werden in den folgenden 2 Vorgehensweisen beschrieben. Der Report sieht bei beiden Vorgehensweisen gleich aus.

Bibliotheksreport 1

- 1 Die Ansicht **Bibliotheken** auswählen.
- 2 Auf die Registerkarte **Reporte** klicken.

- 3 Auf **[Vollständigen Report Speichern]** klicken.
- 4 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.
- 5 Bei Bedarf die PDF-Datei ausdrucken.

Bibliotheksreport 2

- 1 Eine Bibliothek auswählen. Einen Rechtsklick auf die ausgewählte Bibliothek machen.
- 2 Zu **Reporte** wechseln.
- 3 Ein Reportformat auswählen.
- i** Durch Auswahl von **[Vollständigen Report Anzeigen]** eine Vorschau des Reports erzeugen.

Es gibt 2 Optionen für die Erstellung eines Arbeitsvorschriftsreports. Diese werden in den folgenden 2 Vorgehensweisen beschrieben. Der Report sieht bei beiden Vorgehensweisen gleich aus.

Arbeitsvorschriftsreport Option 1

- 1 Die Ansicht **Arbeitsvorschrift** auswählen.
- 2 Auf die Registerkarte **Reporte** klicken.
- 3 Auf **[Vollständig]** klicken.
- 4 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.
- 5 Bei Bedarf die PDF-Datei ausdrucken.

Arbeitsvorschriftsreport Option 2

- 1 Eine Arbeitsvorschrift auswählen. Einen Rechtsklick auf die ausgewählte Arbeitsvorschrift machen.
- 2 Zu **Reporte** wechseln.
- 3 Ein Reportformat auswählen.

- i** Durch Auswahl von **[Vollständigen Report Anzeigen]** eine Vorschau des Reports erzeugen.

6.5 Export

Proben exportieren

- i** Nur Proben des Dateityps **BRMS (.brms)** oder **SRMP (.srmp)** können wieder in MIRA Cal DS importiert werden. Diese Dateien sind Schutz der Datenintegrität verschlüsselt. **.brms** ist das in MIRA Cal DS verwendete Standardformat.

.brms und **.srmp** enthalten Spektren und Metadaten wie Integrationszeit, Treffer mit den verwendeten Bibliotheken, Kommentare, Konformitätsdaten und verwendete Software- und Firmware-Versionen. **.brms** ist der empfohlene Dateityp. **.srmp** wird für ältere Systeme noch unterstützt.

- 1 Die Ansicht **Proben** aufrufen.
- 2 Die zu exportierende Probe auswählen. Eine Mehrfachauswahl ist möglich.
- 3 Einen Rechtsklick auf die Probe machen. Auf **[Speichern Als]** klicken.
- 4 Einen Dateityp auswählen:
 - **BRMS-Format (.brms) / Raman-Probe**
Das ist der Standarddateityp, dessen Verwendung empfohlen wird. Das **BRMS-Format (.brms)** enthält Spektren und Metadaten wie Integrationszeit, Treffer mit den verwendeten Bibliotheken, Kommentare, Konformitätsdaten und verwendete Software- und Firmware-Versionen.
 - **SRMP-Format (.srmp)**
Das **SRMP-Format (.srmp)** enthält Spektren und Metadaten wie Integrationszeit, Treffer mit den verwendeten Bibliotheken, Kommentare, Konformitätsdaten und verwendete Software- und Firmware-Versionen.
 - **SPC-Format (.spc)**
Das **SPC-Format (.spc)** ist optimal für die Kompatibilität mit Spektroskopie-Software von Drittanbietern.
 - **PRN-Format (.prn)**
Das **PRN-Format (.prn)** ist ein Textformat.

- **CSV-Format (.csv)**
Das **CSV-Format (.csv) Spektrum** ist ein ausschliesslich aus Diagrammdateien bestehendes Textformat.
- **CSV-Format (.csv) Vollständig**
Das **CSV-Format (.csv) Vollständig** ist ein Metadaten enthaltendes Textformat.

5 Auf **[Speichern]** klicken.

Bibliotheken exportieren

- 1 Die Ansicht **Bibliotheken** aufrufen.
- 2 Die zu exportierende Bibliothek auswählen. Eine Mehrfachauswahl ist möglich.
- 3 Einen Rechtsklick auf die Bibliothek machen. Auf **[Speichern Als]** klicken. Eine Bibliothek kann nur als Dateityp `.lrm` gespeichert werden.
- 4 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.

Arbeitsvorschriften exportieren

- 1 Die Ansicht **Arbeitsvorschriften** aufrufen.
- 2 Die zu exportierende Arbeitsvorschrift auswählen. Eine Mehrfachauswahl ist möglich.
- 3 Einen Rechtsklick auf die Arbeitsvorschrift machen. Auf **[Speichern Als]** klicken. Arbeitsvorschriften können nur im Dateiformat `.orm` gespeichert werden.
- 4 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.

HazMasterG3-Daten exportieren

- 1 Die Ansicht **Proben** aufrufen.
- 2 Die zu exportierende Probe auswählen. Eine Mehrfachauswahl ist möglich.
- 3 Einen Rechtsklick auf die Probe machen. Auf **[Hazmaster-Daten Speichern]** klicken.

- 4 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.

Abbildung der Spektralansicht für Präsentationen exportieren

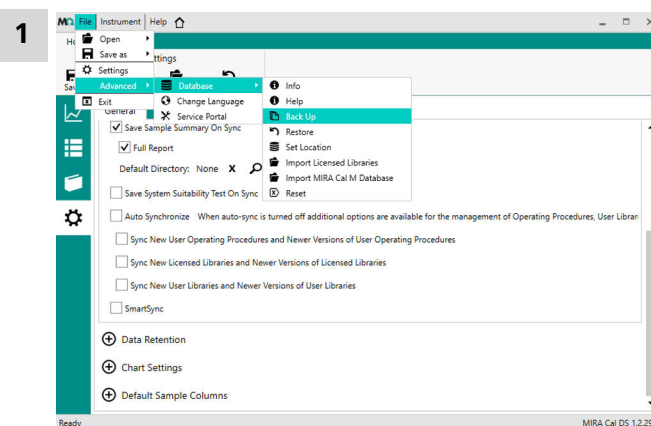
- 1 Die Ansicht **Proben** aufrufen.
- 2 Einen Rechtsklick an einer beliebigen Stelle des Probendiagramms machen. Auf **[Metadaten speichern]** klicken.
- 3 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.

Daten mit korrigierten Basislinien exportieren

- 1 Die Ansicht **Proben** aufrufen.
- 2 Eine Probe auswählen. **Basislinie** aktivieren, um die Daten mit korrigierten Basislinien im Ansichtsfenster anzuzeigen.
- 3 Einen Rechtsklick an einer beliebigen Stelle des Probendiagramms machen. Auf **[Rohdaten Speichern]** klicken.
- 4 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.

6.6 Datenbanksicherung

Datenbank exportieren



Auf **Datei** ► **Erweitert** ► **Datenbank** ► **Sicherung** klicken.

- 2 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.

Datenbank wiederherstellen

- i** Bitte beachten Sie, dass die vorhandenen MIRA Cal DS Daten mit den Daten aus der Datenbankdatei überschrieben werden.

Es muss eine bestehende MIRA Cal DS Datenbankdatei im Format **.litdb** vorliegen.

- 1 Auf **Datei ▶ Erweitert ▶ Datenbank ▶ Wiederherstellen** klicken.
- 2 Den Speicherort der Datenbank und die wiederherzustellende Datenbankdatei auswählen. Auf **[Öffnen]** klicken.
- 3 Die Wiederherstellung bestätigen. **[Ja]** auswählen.

6.7 Verwalten

6.7.1 Benutzer verwalten

Abbildung 4 Fenster Benutzerverwaltung

Erweiterte Anmeldung aktivieren

- 1 Zum Aufrufen des Fensters **Benutzer** zu **Datei ▶ Einstellungen** gehen.
- 2 **Erweiterte Anmeldung Erforderlich** aktivieren.



- 3 Zum Ändern des Passworts für den standardmässigen erweiterten Benutzer ein Passwort eingeben und auf **[Ändern]** klicken.

Benutzer erstellen und löschen

- 1 Auf **Datei ▶ Einstellungen** klicken.
- 2 **[Erweiterte Benutzer verwalten]** anklicken.
- 3 Im Abschnitt **Neuer Benutzer** einen Benutzernamen und ein Passwort eingeben und auf **[Speichern]** klicken.
- 4 Zum Löschen eines Benutzers den Benutzer im Abschnitt **Benutzer löschen** auswählen und auf **[Löschen]** klicken.
- 5 Zum Schliessen des Fensters **Benutzer** auf **[Schliessen]** klicken.

7 Support-Protokolldatei erstellen

Mit Hilfe dieser Funktion kann eine Protokolldatei erstellt werden. Diese Protokolldatei kann im Problemfall an Ihren regionalen Metrohm-Vertreter gesendet werden.

Am Gerät sollte ein Kalibrierstandard angebracht sein, das ist aber nicht zwingend notwendig.

Support-Protokoll des Geräts

- 1 Auf **Hilfe ▶ Supportdatei erstellen** klicken. Den Kalibrierstandard einsetzen. Auf **[OK]** klicken.

Es wird eine Protokolldatei erstellt. Das kann einige Zeit dauern.

- 2 Einen Speicherort für die Datei auswählen. Auf **[Speichern]** klicken.