

# Erste Schritte

Dieses Handbuch enthält alle erforderlichen Informationen für die Aufnahme von Spektren mit dem Thermo Scientific™ Smart Raman-Spektrometer und dem DXR™ Raman- oder Thermo Scientific™ DXR3 Flex™ Raman-Mikroskop.

---



<b>Erste Schritte</b> .....	<b>1</b>
Die erste Messung .....	1
Vorbereiten des Systems .....	1
Vorbereiten und Einsetzen der Probe .....	2
Aufnehmen des Probenspektrums .....	2
Speichern des Spektrums .....	4
Durchsuchen einer Spektrenbibliothek .....	4
Weitere Vorgänge .....	6

## Die erste Messung

Detaillierte Informationen zu den Funktionen und Arbeitsabläufen der Software finden Sie im Hilfesystem oder in der Dokumentation des Geräts auf Ihren Datenträgern (mit der Software installiert).

## Vorbereiten des Systems

1. Schalten Sie das Gerät ein.
2. Starten Sie die Thermo Scientific™ OMNIC™ Software.
3. Justieren Sie das Gerät.

- 
- a. Klicken Sie auf das Symbol Expt Set (Experimenteinstellungen) (  ) in der Symbolleiste.
  - b. Wählen Sie die Registerkarte „Diagnostic“ (Diagnostik) im Dialogfeld „Experiment Setup“ (Experimenteinstellungen) aus.
  - c. Klicken Sie auf Align (Justieren)  .

Weitere Informationen finden Sie unter den OMNIC Hilfethemen im Menü „Help“ (Hilfe).

## Vorbereiten und Einsetzen der Probe

Sie können eine eigene Probe oder eine von uns bereitgestellte Probe verwenden.

- Wenn Sie ein Mikroskop haben, handelt es sich um einen Objektträger, der mit dem Mikroskoptisch kompatibel ist.
  - Platzieren Sie die Probe auf dem Mikroskoptisch.
- Wenn Sie ein Spektrometer haben, wird die Probe so eingerichtet, dass sie für das verwendete Zubehör geeignet ist.
  - Legen Sie die Probe in das Zubehör, das Sie verwenden möchten.
- Bewegen Sie den Tisch, um die Probe zu positionieren und zu fokussieren.

Ausführliche Informationen zur Positionierung und Fokussierung finden Sie unter *Arbeiten mit Ihrem DXR Raman-Gerät* in der Dokumentation, die mit Ihrem Gerät geliefert wurde.

## Aufnahmen des Probenspektrums

Beachten Sie vor der Aufnahme eines Probenspektrums Folgendes:

- Die Parameter für die Datenerfassung werden über die Versuchsdatei auf Werte eingestellt, die für Ihr Gerät und Ihre Konfiguration geeignet sind.
  - Wenn Sie im Dropdown-Listefeld Experiment (Versuch) von OMNIC einen Versuch auswählen, wird automatisch die entsprechende Versuchsdatei geöffnet.

- 
- Sie können bei Bedarf durch die Parameter blättern, um sich anzuschauen, wie das System eingerichtet ist.

Wählen Sie im Menü Collect (Messen) die Option Experiment Setup (Experimenteinstellungen) aus.

- Vor der Aufnahme eines Probenspektrums wird normalerweise der Hintergrund gemessen, damit dieser von den Probandaten subtrahiert werden kann.


Auf diese Weise wird sichergestellt, dass die Peaks im abschließenden Spektrum ausschließlich auf die Probe zurückgehen.

- Der Hintergrund für die erste Messung wird automatisch von der Software aufgenommen.
- Nach der ersten Messung können Sie über die Registerkarte „Collect“ (Messen) des Dialogfelds „Experiment Setup“ (Experimenteinstellungen) festlegen, wie und wann der Hintergrund gemessen werden soll.
- Die folgenden Optionen sind verfügbar:
  - Vor jeder Probenmessung einen Hintergrund messen
  - Einen Hintergrund messen, wenn eine festgelegte Anzahl von Expositionen erreicht ist
  - Einen intelligenten Hintergrund verwenden, bei dem es sich um einen gespeicherten, hochqualitativen Referenzhintergrund handelt
- Die Erstellung eines intelligenten Hintergrunds dauert ungefähr 40 Stunden. Daher ist diese Funktion auf der Registerkarte „Collect“ (Messen) erst verfügbar, nachdem das System mindestens 40 Stunden betrieben wurde und ein erster intelligenter Hintergrund erstellt wurde.
- Über die Funktion „Auto Exposure“ (Automatische Exposition) auf der Registerkarte „Collect“ (Messen) des Dialogfelds „Experiment Setup“ (Experimenteinstellungen) können Sie auf der Grundlage des gewünschten Signal-Rausch-Verhältnisses automatisch die Expositionszeit und die Anzahl der Expositionen festlegen.

Für diese Funktion wird ein intelligenter Hintergrund benötigt. Diese Funktion ist daher erst verfügbar, nachdem ein intelligenter Hintergrund erzeugt wurde.

---

❖ **So nehmen Sie ein Probenspektrum auf**

1. Schließen Sie die Türen des Probenbereichs (falls vorhanden).
2. Klicken Sie in der Symbolleiste auf **Collect Sample (Probe messen)** (  ).
3. Geben Sie im Dialogfeld „Collect Sample“ (Probe messen) einen Titel ein und klicken Sie dann auf **OK**.

Es werden vorläufige Daten erfasst und angezeigt. Auf diese Weise können Sie die Spektraldaten beurteilen oder den Probenfokus anpassen, bevor Sie die eigentliche Datenerfassung starten.

4. Klicken Sie auf **Start Collection (Erfassung starten)**, um die Erfassung von Proben Daten zu starten.

Diese Schaltfläche befindet sich oben rechts im Fenster. Nach der Erfassung der Proben Daten werden Sie im Dialogfeld „Confirmation“ (Bestätigung) gefragt, ob das Spektrum in ein Spektralfenster eingefügt werden soll:

5. Klicken Sie auf **Yes (Ja)**, um das Probenspektrum in das Fenster einzufügen.

Bei Auswahl von **No (Nein)** wird das Verfahren ohne Speichern des Spektrums beendet.

Bei Auswahl von **Cancel (Abbrechen)** wird wieder das Fenster „Collect Sample“ (Probe messen) angezeigt.

## Speichern des Spektrums

Zum Speichern Ihres Spektrums stehen zwei Befehle zur Verfügung: „Save“ (Speichern) oder „Save as“ (Speichern unter).

## Durchsuchen einer Spektrenbibliothek

Wenn Sie die Zusammensetzung Ihrer Probe nicht kennen, können Sie diese bestimmen, indem Sie das Probenspektrum mit den Referenzspektren in einer Spektrenbibliothek vergleichen.

---

❖ **So durchsuchen Sie eine Spektrenbibliothek**

1. Wählen Sie das Probenspektrum aus.
2. Wählen Sie im Menü „Analyze“ (Analysieren) die Option Library Setup (Bibliothekseinstellungen) aus.

In dem daraufhin angezeigten Dialogfeld wird eine Liste der Verzeichnisse eingeblendet, die derzeit für Spektrensuchen verwendet werden.

3. Fügen Sie das Verzeichnis `My Documents\OMNIC\LIBS` zur Liste der Verzeichnisse hinzu, wenn es sich nicht bereits darin befindet.

Dies ist das Verzeichnis, in dem sich die Raman-Probenbibliothek befindet. Wählen Sie **Add Directory (Verzeichnis hinzufügen)** aus, um das Verzeichnis zur Liste hinzuzufügen. Gehen Sie in dem daraufhin angezeigten Dialogfeld zum Verzeichnis

`My Documents\OMNIC\LIBS`, wählen Sie es aus und klicken Sie dann auf **OK**.

4. Fügen Sie die Bibliothek mit der Bezeichnung **Raman Sample Library (Raman-Probenbibliothek)** zur Liste der Bibliotheken hinzu, um Suchvorgänge durchzuführen.

Klicken Sie im Feld Available Search Libraries And Groups (Verfügbare Suchbibliotheken und -gruppen) auf die Bibliothek und dann auf Add (Hinzufügen).

5. Öffnen Sie die Registerkarte **Search Results (Suchergebnisse)** und wählen Sie **Use Search Expert (Suchassistent verwenden)** aus.

Mit dem Suchassistenten wird Zeit gespart, da immer die Wellenzahlregion zwischen 2.600 und 450 durchsucht wird.

6. Wählen Sie im Menü **Analyze (Analysieren)** die Option **Search (Suche)** aus.

Das Fenster „Search“ (Suche) wird angezeigt. Bei der Identifizierung von Bibliothekstreffern werden die besten Übereinstimmungen in der Reihenfolge des Übereinstimmungswerts in die Liste der Suchergebnisse eingefügt.

Nach Abschluss der Suche werden das Probenspektrum und das damit am besten übereinstimmende Bibliotheksspektrum in Anzeigefeldern im oberen Teil des Fensters angezeigt.

Kommentare zur Suche werden im unteren Fensterbereich eingeblendet.

7. Klicken Sie auf **Close (Schließen)**, um das Fenster „Search“ (Suche) zu schließen.

---

# Weitere Vorgänge

Weitere nützliche Vorgänge, die nach der Aufnahme eines Spektrums durchgeführt werden können:

- Kennzeichnen von Peaks
- Erstellen und Drucken von Berichten
- Erstellen von Benutzerbibliotheken
- Hinzufügen eines Spektrums zu einer Benutzerbibliothek

Informationen zu diesen Vorgängen finden Sie im Hilfesystem der Software.

© Thermo Fisher Scientific. Alle Rechte vorbehalten.

269-215102\_A DXR - Erste Schritte