

Quira-Version 3.3 R

Beschreibung von Struktur und Funktionalität

Aktuelle Version unter www.quirade.de

1. Februar 2007

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Präambel

In dieser Dokumentation werden zunächst die Kernfunktionen von Quira beschrieben. Features von neueren Versionen werden in Abschnitt ?? erläutert. Diese Dokumentation wurde sorgfältig erstellt. Dennoch wird keine Gewähr für Vollständigkeit und Richtigkeit übernommen.

Das vorliegende Dokument beinhaltet eine Beschreibung der Struktur und Funktionalität von QUIRA. QUIRA besitzt eine WINDOWS-Oberfläche, deren Bedienung durch Hilfen und Message-Boxen erleichtert¹ wird.

QUIRA ist ein Programmsystem zur automatischen qualitativen und quantitativen Routineanalytik von Proben mit Hilfe der IR-Spektrometrie. Das Programm arbeitet materialorientiert, d.h. auf Basis von Material-Stammdateien, in denen festgelegt ist, welche Operationen mit einem bestimmten Material unter einem bestimmten Punkt des QUIRA-Menüs (siehe ??) durchzuführen sind. Spektren und Analysenergebnisse werden langfristig abgespeichert und stehen damit auch für eine spätere statistische Analyse oder für eine Übertragung an ein LIMS-System zur Verfügung.

QUIRA besteht aus vier Teilprogrammen. Mit dem ersten Teilprogramm (QPREP) wird ein Auftrag zur Durchführung einer bestimmten Analyse, zur Aufnahme eines Referenzspektrums oder zur Vermessung der Schichtdicke einer Küvette erstellt. Hierbei hat der Benutzer als erstes den gewünschten Punkt des Auftragsmenüs (siehe ??) und anschließend weitere benötigte Informationen (wie z.B. die Material-Nr. einer Analysenprobe) einzugeben. Mit diesen Angaben wird ein Auftrag erstellt, und zwar in

¹So enthält z.B. jedes Formular im Kopf eine Kommando-Leiste, nach deren Anklicken ein Hinweis-Text zur Bedienung des Formulars ausgegeben wird.

Form einer entsprechenden Auftragsdatei, die *alle* Informationen enthält, die für die Abarbeitung des Auftrags erforderlich sind.

Mit dem zweiten Teilprogramm QEXE wird der mit QPREP erstellte Auftrag bearbeitet. Im Falle eines Analysenauftrags wird ein entsprechendes Analyseergebnis ausgegeben und langfristig verwaltet. Bevor QEXE mit der Aufnahme eines Spektrums beginnt, wird stets eine Arbeitsanweisung ausgegeben. Das Programm ist so gestaltet, daß bei Bedarf für jede auftretende Kombination eines QUIRA-Menüpunktes mit einem Material eine separate Arbeitsanweisungen aufgestellt werden kann.

In der vorliegenden Programmversion von QUIRA verarbeitet QEXE ohne Unterbrechung den von QPREP erstellten Auftrag.

Das dritte Programm innerhalb des QUIRA-Programmsystems ist QUTIL, mit dem alle Daten, die QPREP für die Auftragsbearbeitung benötigt (z.B. Methodendateien, Materialstammdateien und Arbeitsanweisungen) konfiguriert werden.

Gerätespezifische Parameter und einige andere besondere Einstellungen, wie z.B. die Anzahl der Scans für Analysen- und Background-Spektren, eine Zeitschranke für die Neuaufnahme des Backgrounds, die Angaben ob ein Probenshuttle verwendet wird oder nicht und ob eine Reinheitskontrolle (z.B. bei ATR-Messungen) durchgeführt werden soll etc., werden mit dem Programm CONFIG² eingestellt, das die entsprechenden Parameter in den Dateien quira##.ini³ unter WINDOWS ablegt.

2 Erstellung eines Auftrags (QPREP)

2.1 Start-Formular und QUIRA-Menüpunkte

Der Programmteil QPREP dient der Vorbereitung eines Auftrags. Hierbei entscheidet sich der Benutzer zunächst anhand des Start-Formulars (Abb. ??) für eine bestimmte Aufgabe. Es kann zwischen der Durchführung einer Analyse, einer Schichtdickenbestimmung und der Aufnahme eines Referenzspektrums gewählt werden. Als Quelle für die Spektrendaten kann das Gerät oder eine Spektren-Datei dienen.

Eine Besonderheit stellt die 'Wiederholung (Replay)' dar, bei der ein Spektrum ausgewählt wird, das von einer früher unter QUIRA durchgeführten Analyse stammt. Auf Grund der im Memo-Bereich des Spektrums abgespeicherten Information wird der Analysenablauf rekonstruiert. Die ursprüngliche Spektren- bzw. Ergebnis-Datei wird hierbei *nicht* überschrieben.

Entscheidet sich der Benutzer auf dem Startformular für einen Analysenauftrag, so wird ein weiteres Formular angeboten (Siehe Abb. ??), in dem das QUIRA-Menü präsentiert wird. Das QUIRA-Menü ist ein zentraler Bestandteil von QUIRA und enthält die vom Benutzer unter QUTIL konfigurierbaren QUIRA-Menüpunkte, d.h. diejenigen Menüpunkte, die der Operator im routinemäßigen Analysenbetrieb zur Auswahl

²Das Programm config wird unter dem 1. Menüpunkt („Spezifische Einstellungen“) des Programms QUTIL aufgerufen.

³Es sind hundert (quira00.ini - quira99.ini) Einstellungen möglich. Die Geräteeinstellungen werden unter dem QUTIL Menüpunkt „Anlegen bzw. Editieren von Analysenmethoden“ mit den Quira-Methoden verknüpft.

Quira 26.02.2001
04:03:30

Start-Formular (Quira) Info

<p>Auftragstyp</p> <ul style="list-style-type: none"><input checked="" type="radio"/> Durchführung einer <u>A</u>nalyse<input type="radio"/> Wieder<u>h</u>olung (Replay)<input type="radio"/> Aufnahme einer <u>R</u>eferenz <input type="radio"/> <u>S</u>chichtdickenbestimmung	<p>Spektr<u>e</u>nquelle</p> <ul style="list-style-type: none"><input checked="" type="radio"/> IR-<u>G</u>erät<input type="radio"/> <u>D</u>atei (.sp)
--	---

Weiter! Programm beenden!

Abbildung 1: Start-Formular von QUIRA

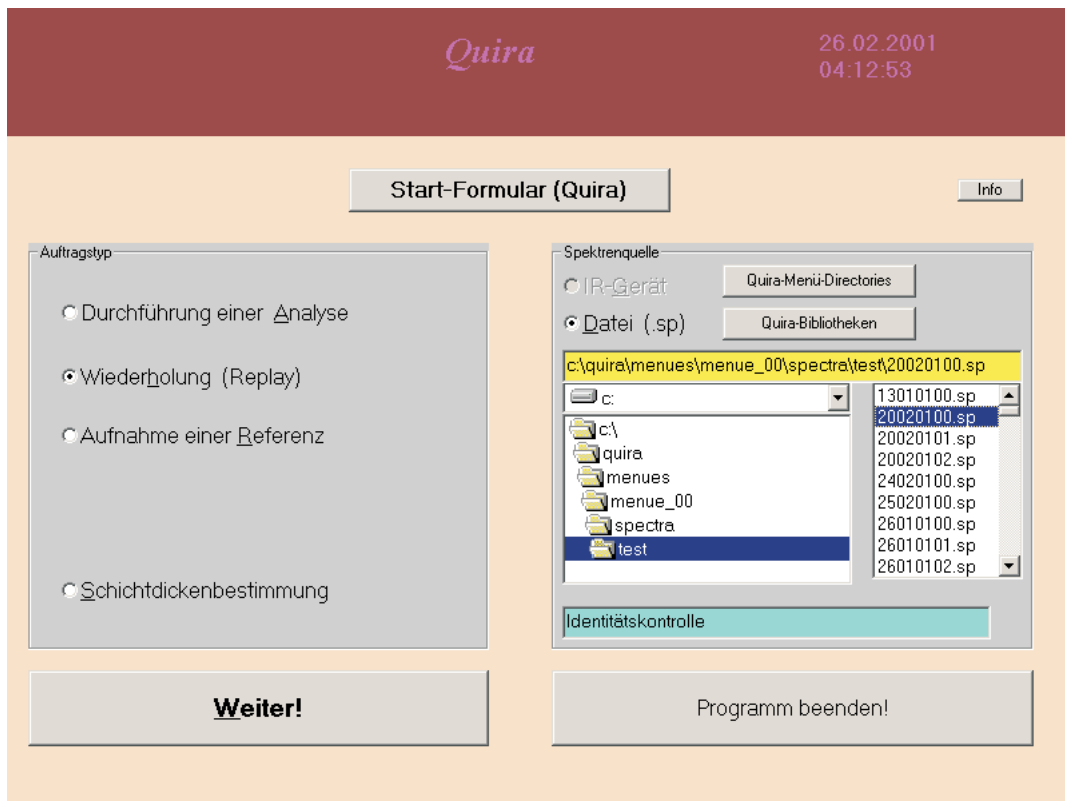


Abbildung 2: Replay einer Analyse durch Aufruf eines QUIRA-Spektrums

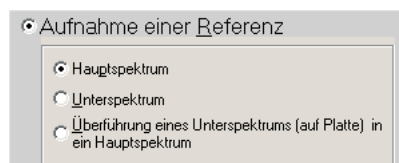


Abbildung 3: QUIRA-Startformular: Aufnahme eines Referenzspektrums



Abbildung 4: Das „QUIRA-Menü“. Die fünf hier aufgeführten QUIRA-Menüpunkte wurden mit QUTIL konfiguriert (siehe Abb. ??). Das „Quira-Menü“ hat in QUIRA eine zentrale Bedeutung. Hinter jedem Menüpunkt verbirgt sich ein Directory, unter dem alle Spektren und Ergebnisse langfristig gespeichert werden. Es stehen in QUIRA einhundert Quira-Menü-Directories zur Verfügung („menue_00“ – „menue_99“).

hat. Nach der Wahl des entsprechenden Menüpunkts (durch Doppelklick, Drücken der RETURN-Taste oder Anklicken des Kommando-Buttons „Weiter!“) gibt der Benutzer unter anderem die Material-Nr. der Probe ein. Die abzuarbeitende qualitative oder quantitative Methode ergibt sich eindeutig aus der Kombination des QUIRA-Menü-Punktes mit der Material-Nummer. Auf Grund dieser beiden Angaben besitzt das System alle Informationen, um den Analysenauftrag zu erstellen, der mit QEXE dann automatisch abgearbeitet wird.

Im Falle der Aufnahme eines Referenzspektrums kann der Benutzer auswählen, ob ein „Hauptspektrum“ oder ein „Unterspektrum“ aufgenommen werden soll (siehe Abb. ??). Wird ein Hauptspektrum aufgenommen, so wird dieses direkt als Bibliotheksspektrum verwendet. Alternativ können für ein bestimmtes Material mehrere Unterspektren aufgenommen werden. Ein Unterspektrum kann jederzeit durch Einlesen von

Identitätskontrolle

Operator

Material-Nr.

Lang-Material-Nr.

Materialname

Proben-Nr.

Charge

Anmerkung zur Probenpräparation

Dicke

Bemerkung

Abbildung 5: Formular für Analysenauftrag

Platte (unter der Referenzspektrenaufnahme-Option „Hauptspektrum“) in ein Hauptspektrum überführt werden. Darüber hinaus bietet QUTIL die Möglichkeit, von mehreren Unterspektren ein Mittelwertspektrum (... \mittel \mittelw.sp) zu berechnen, das ebenfalls als Unterspektrum zu verstehen ist und dementsprechend in ein Hauptspektrum überführt werden kann.

Die folgenden Abschnitte beschreiben die Eingaben, die nach der Auswahl eines bestimmten QUIRA-Menüpunktes auf dem nachfolgenden Auftragsformular zu erfolgen haben.

2.2 Eingaben von Probandaten für eine Analyse

Für die Erstellung eines Analysenauftrags müssen im Formular für den Analysenauftrag (Abb. ??) folgende Angaben gemacht werden:

1. Operator [obligatorisch⁴]

⁴Bei obligatorischen Eingaben *muß*, bei optionalen Eingaben *kann* das entsprechende Eingabefeld ausgefüllt werden.

2. Proben-Nr. [obligatorisch]
Wird QUIRA bei der Installation so konfiguriert, daß sich der Dateiname von Spektren und Resultaten nach der Proben-Nr. richtet, dann sind für die Proben-Nr. maximal 8 alphanumerische Zeichen zulässig. Erfolgt die Konfiguration bei der Installation so, daß die Dateinamen für die Spektren und Resultate automatisch auf Basis des Datums und einer laufenden Nummer erzeugt werden, so kann die Proben-Nr. beliebig lang gewählt werden.
3. Kurz-Material-Nr. (maximal 8 alphanumerische Zeichen)[obligatorisch]
Für jede Probe *muß* eine Kurz-Material-Nummer eingegeben werden. Falls die eingegebene Material-Nummer QUIRA nicht bekannt ist, wird die Eingabe zurückgewiesen⁵. Entsprechendes gilt, falls dieses Material unter dem gewählten Analysenmenüpunkt (gemäß der Konfiguration der Material-Stammdatei) nicht vorgesehen ist. Die Liste der zur Verfügung stehenden Materialien kann mit dem Hilfe-Button („?“) aufgerufen und das gewünschte Material ausgewählt⁶ und übernommen werden.
4. Lang-Material-Nr.[Infofeld und Eingabefeld]
Falls mit einer Kurz-Material-Nr. eine Lang-Material-Nr. verbunden ist, erscheint diese nach Eingabe der Kurz-Material-Nr. automatisch im entsprechenden Feld. Wird QUIRA bei der Installation entsprechend konfiguriert, so kann die Lang-Material-Nr. auch per Hand eingegeben werden. Beim Verlassen des Feldes wird dann automatisch überprüft, ob ein Material mit einer entsprechenden Lang-Material-Nr. vorliegt⁷. Gegebenenfalls wird dann im entsprechenden Feld (siehe Punkt ??) die zugehörige Kurz-Material-Nr. angegeben. Auch hier kann für die Unterstützung der Auswahl der Hilfe-Button („?“) in Anspruch genommen werden.
5. Material-Name [Infofeld⁸]
Ist der Materialname vorhanden, so erscheint dieser nach Eingabe der Material-Nr. in einem hierfür vorgesehenen Feld (leer, falls kein Materialname vorliegt).
6. Charge [optional]
7. Schichtdicke in mm [obligatorisch]
Hierbei wird in einem Textfeld derjenige Wert angeboten, der bei der Erstellung der QUIRA-Methode (siehe Abb. ??) eingegeben wurde. Dieser Wert kann manuell überschrieben werden. Die Angabe einer Schichtdicke ist obligatorisch. Sollte

⁵Falls man Analysen von Proben mit unbekannter Material-Nummer durchführen möchte, kann man dies dadurch erreichen, daß man für solche Fälle eine provisorische Kurz-Material-Nr. wie z.B. 99999 oder UNBEK einführt und hierfür auch eine entsprechende Material-Stammdatei anlegt (siehe ??).

⁶Wird ein Material angeklickt, das unter dem betreffenden Menüpunkt nicht erlaubt ist, so erfolgt eine Warnung in roter Schrift.

⁷Falls mehrere Materialien mit gleicher Lang-Material-Nr. vorliegen, erfolgt eine Warnung.

⁸Infofelder können nicht editiert werden.

die Schichtdicke für die Auswertung nicht benötigt werden, so ist der entsprechende Wert als informativ im Sinne einer ungefähren Schichtdickenangabe zu verstehen.

8. Kommentar zum Zubehör (z.B. Küvetten, ATR-Einheit etc.) [Infofeld]
Hierbei wird in einem Textfeld derjenige Text angezeigt, der bei der Erstellung der QUIRA-Analysenmethode eingegeben wurde.
9. Kommentar
Zusätzlich kann ein Kommentar eingegeben werden, der im Analysenprotokoll und - im Falle einer Identitätskontrolle - auch beim Spektrenplot⁹ mit ausgedruckt wird.

Die oben gemachten Angaben werden in die Ergebnisdatei übernommen.

2.3 Eingaben für die Aufnahme eines Referenzspektrums

Für die Erstellung eines Referenzspektrums sind exakt die gleichen Angaben erforderlich wie für die Erstellung eines Analysenauftrags. Allerdings ist die Eingabe der Proben-Nr. optional.

2.4 Eingaben für die Vermessung einer Schichtdicke

Vor der Vermessung einer Schichtdicke müssen in einem separaten Formular (Abb. ??) folgende Angaben gemacht werden:

1. Operator [obligatorisch]
2. Küvetten-Nr. [obligatorisch]
Wird QUIRA bei der Installation so konfiguriert, daß sich der Dateiname von Schichtdicken-Spektren nach der Küvetten-Nr. richtet, dann sind für die Küvetten-Nr. maximal 8 alphanumerische Zeichen zulässig. Erfolgt die Konfiguration bei der Installation so, daß die Spektrennamen automatisch auf Basis des Datums und einer laufenden Nummer erzeugt werden, so kann die Küvetten-Nr. beliebig lang gewählt werden.
3. Kommentar [optional]

Die obigen Angaben werden in die entsprechende Ergebnisdatei geschrieben.

⁹Hierbei wird allerdings nur eine begrenzte Zahl von Zeichen berücksichtigt.

Quira 26.02.2001
12:09:49

Auftrag zur Bestimmung einer Schichtdicke

Operator

**Küvetten/
Aufnahme-Nr.**

Bemerkung

Dateiname

Abbildung 6: Formular für die Bestimmung der Schichtdicke einer (leeren) Küvette

3 Abarbeitung eines Auftrags (QEXE)

Nachdem mit QPREP ein Auftrag erstellt worden ist, wird dieser mit QEXE abgearbeitet. Hierbei wird auf eine Auftragsdatei zurückgegriffen, die alle Informationen enthält, die QEXE benötigt. Falls bei der Bearbeitung eines Auftrags eine Unregelmäßigkeit (z.B. Abbruch) auftritt oder eines der Analysenergebnisse als nicht o.k. befunden wird, so erfolgt ein entsprechender Hinweis in einer Message-Box, und es wird zum Auftragsformular zurückgekehrt und gefragt, ob der Auftrag wiederholt werden soll.

3.1 Behandlung von Spektren

3.1.1 Aufnahme bzw. Einlesen von Spektren in QUIRA

Für die Durchführung von Analysen oder die Aufnahme von Referenzspektren unter QEXE können die entsprechenden Spektren vom Gerät registriert oder von Festplatte oder Diskette eingelesen werden. Beim Einlesen von Festplatte oder Diskette gibt es zwei Möglichkeiten:

1. Ein beliebiges Spektrum kann an Stelle des Gerätes als Quelle für die spektralen Daten angegeben werden. Das Spektrum wird dann eingelesen und so verarbeitet, als ob die spektralen Daten vom Gerät neu aufgenommen worden wären. Hierbei wird mit diesen Daten ein neues QUIRA-Analysen-Spektrum erzeugt und auch eine neue Ergebnis-Datei angelegt. Auf diese Weise ist es möglich, auch außerhalb von QUIRA registrierte Spektren in QUIRA aufzunehmen¹⁰.
2. Wiederholung des Analysenablaufs mit einem QUIRA-Spektrum (Replay)
In diesem Fall wird ein unter QUIRA erzeugtes Spektrum wieder eingelesen und der Analysenablauf wiederholt, ohne daß die ursprünglichen Spektren- und Ergebnisdaten¹¹ hierbei überschrieben werden.

3.1.2 Graphische Darstellung von Spektren

Durch zweimaliges Anklicken eines Spektrums der in Abb. ?? gezeigten Spektrenliste kann ein Spektrum graphisch auf dem Bildschirm dargestellt und auf Wunsch auch geplottet werden. Der Ausdruck erfolgt im Querformat (Landscape). Ist dies nicht gewünscht, so kann die Datei „viewssp.exe“ auf „viewsp.exe“ kopiert werden (überschreiben!), was einen Ausdruck im Portrait-Modus bewirkt (A4 senkrecht). Soll wieder zum Landscape-Modus zurückgegangen werden, so ist die QUIRA-Datei „viewspl.exe“ auf „viewsp.exe“ zu kopieren.

3.1.3 Langfristige Datenhaltung von Spektren

Die aufgenommenen Analysenspektren werden unter den Directories „menue_00\spectra“ – „menue_99\spectra“ abgespeichert. Alternativ können mit

¹⁰Voraussetzung ist, daß die Anfangs- und Endwellenzahl und das Wellenzahlkrement passend sind.

¹¹Das bei der Wiederholung erzeugte Ergebnis wird hierbei unter „repeat.res“ abgespeichert.

QUTIL für die einzelnen QUIRA-Menüpunkte auch QUIRA-externe Directories für die Speicherung der Analysenspektren spezifiziert werden.

Der Benutzer kann bei der Installation entscheiden, ob er die Analysenspektren direkt unter dem Directory „spectra“ abspeichern möchte oder ob noch ein Unterdirectory dazwischen geschaltet werden soll, das einen der Kurz-Material-Nummer entsprechenden Namen trägt. Der Dateiname richtet sich nach der Proben-Nummer oder wird alternativ aus dem Datum und einer laufenden Nummer gebildet (z.B. 09050118.sp: 18. Proben-Spektrum, das am 9. Mai 2001 aufgenommen wurde). Die Art der Dateinamengenerierung muß bei der Installation von QUIRA festgelegt werden.

Im Falle der Schichtdickenbestimmung werden die Spektren unter dem Directory c:\quira\thickn\spectra gespeichert. Der Dateiname richtet sich nach der Küvettenbezeichnung oder wie oben beschrieben nach dem Datum.

Bei der Aufnahme von Referenzspektren ist zu unterscheiden, ob diese als Haupt- oder Unterspektren dienen sollen. Aufgenommenen Referenz-Hauptspektren werden unter den Directories bibli_00\spectra – bibli_99\spectra abgespeichert. Darüber hinaus kann bei der Konfigurierung einer Analysenmethode mit QUTIL auch jedes andere existierende Directory angegeben werden. Der Dateiname richtet sich nach der Kurz-Material-Nummer. Bei der Aufnahme von Unterspektren erfolgt die Abspeicherung unter einem Unterdirectory, das den Namen der Kurz-Material-Nummer trägt. Der Dateiname wird in diesem Fall nach Datum und fortlaufender Nummer vergeben.

Alle unter QUIRA aufgenommenen Spektren haben am Beginn des Ident-Bereiches einen Kenncode, der diese Spektren eindeutig als QUIRA-Spektren kennzeichnet. Hierbei wird zusätzlich angegeben, um welchen Spektrentyp es sich handelt (Analysenspektrum, Referenzspektrum, Schichtdickenspektrum).

Eventuell bestehende Spektren gleichen Namens werden prinzipiell nur nach Bestätigung einer entsprechenden Rückfrage überschrieben.

3.2 Behandlung von Analyseergebnissen

Für jede Analysenmethode wird in QEXE der Analysenwert (bei qualitativen Analysen ist das der Korrelationskoeffizient) zusammen mit dem allgemeinen Namen der Analysenmethode, dem Prüfpunktnamen und weiteren im Auftragsformular eingegebenen Zusatzinformationen ausgegeben, und zwar

- bei quantitativen Analysen optional¹² zusammen mit der Angabe eines Normwertes und eines oberen und unteren Schwellenwertes
- bei qualitativen Analysen optional¹³ zusammen mit der Ausgabe eines Schwellenkorrelationskoeffizienten.

¹²Diese Option kommt zum Tragen, wenn in QUTIL entsprechende Schwellenwerte bzw. ein Normwert gesetzt wurde. Die Schwellenwerte werden immer auf Über- bzw. Unterschreitung überprüft.

¹³Diese Option kommt zum Tragen, wenn in QUTIL ein Schwellenkorrelationskoeffizient gesetzt wurde.

Langfristige Speicherung der Analyseergebnisse

Unter QEXE werden die Analyseergebnisse unter den Directories „menue_00\results“ – „menue_99\results“ abgespeichert, wobei analog zur Abspeicherung von Spektren materialspezifische Unterdirectories eingerichtet¹⁴ werden können.

Der Dateiname richtet sich nach der Proben-Nummer oder wird alternativ aus dem Datum und einer laufenden Nummer gebildet (z.B. 09059918.res: 18. Ergebnis-Datei, die am 9. Mai 1999 erzeugt wurde). Die Art der Dateinamen-Generierung muß bei der Installation von QUIRA festgelegt werden.

Eventuell bestehende Analysenergebnisse gleichen Namens werden prinzipiell nur nach Bestätigung einer entsprechenden Rückfrage überschrieben.

Auch bei der Aufnahme von Referenzspektren wird eine Ergebnis-Datei¹⁵ erzeugt, die den Namen der Kurz-Material-Nummer trägt und die bei jeder neuen Aufnahme eines Referenzspektrums des entsprechenden Materials überschrieben wird und damit Information über das zuletzt aufgenommene Referenzspektrum für dieses Material enthält.

Neben der Erzeugung der Ergebnisdateien werden Informationen zu den QUIRA-Läufen in einer **History-Datei** (c:\quira\daten\quira.his) abgelegt.

3.3 Quantitative Analysemethoden

Quantitative Analysemethoden können in QEXE als QUANT+-Methode (Predict-Aufruf von *.md) oder als kompilierte OBEY-Methode (Shell-Aufruf von *.exe) aufgerufen werden. Die Einbindung von Quant+-Methoden erfolgt automatisch, wenn eine QUIRA-Methode erstellt worden ist, die auf die Quant+-Methode verweist siehe ???. Bei Aufruf der entsprechenden QUIRA-Methode erfolgt eine graphische Darstellung des aufgenommenen Analysenspektrums und eine Ausgabe der Quant+-Ergebnisse (siehe Abb. ???).

3.4 IDENT-Analysemethode

Das Ergebnis einer qualitativen Analyse ('IDENT'-Analysen) ist ein Korrelationskoeffizient, der innerhalb von ident.exe mit Hilfe eines COMPARE-Aufrufs berechnet wird.

Voraussetzung für die Durchführung einer Identitätskontrolle ist das Vorliegen des zum prüfenden Material gehörenden Referenzspektrums. Liegt dieses nicht vor, so erfolgt eine entsprechende Meldung und die Analyse kann nicht durchgeführt werden.

Bei der Analyse erfolgt nach erfolgreicher Eingabe der Probandaten eine graphische Darstellung des Proben- und des Referenzspektrums¹⁶ auf dem Bildschirm (siehe Abb. ???). Mit Hilfe der drei Buttons „keine Aussage“, „stimmen überein“, „stimmen nicht überein“ kann manuell entschieden werden, wie die Probe bewertet wird. Allerdings

¹⁴Ob materialspezifische Unterdirectories eingerichtet werden sollen oder nicht muß bei der Installation von QUIRA entschieden werden.

¹⁵unter dem QUIRA-Directory „matres“

¹⁶Beim Papier-Plot ist die Ausgabe des Referenzspektrums optional.

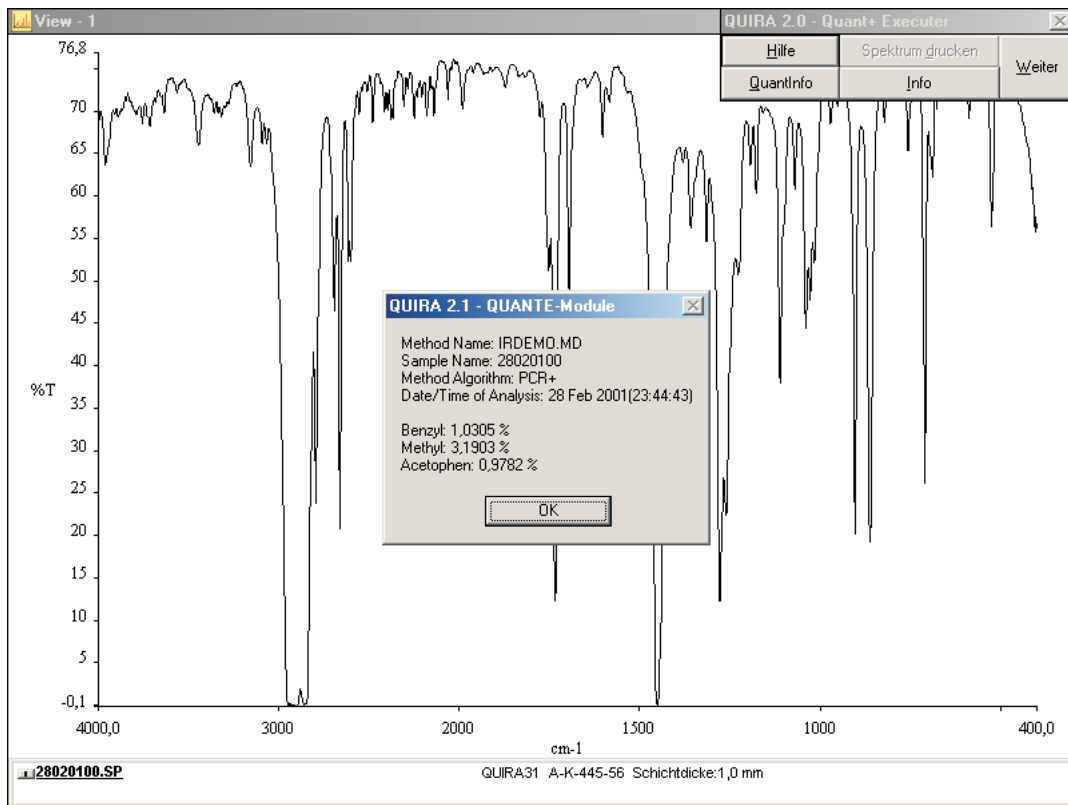


Abbildung 7: Bildschirmausgabe für eine quantitative Analyse auf Basis von Quant+

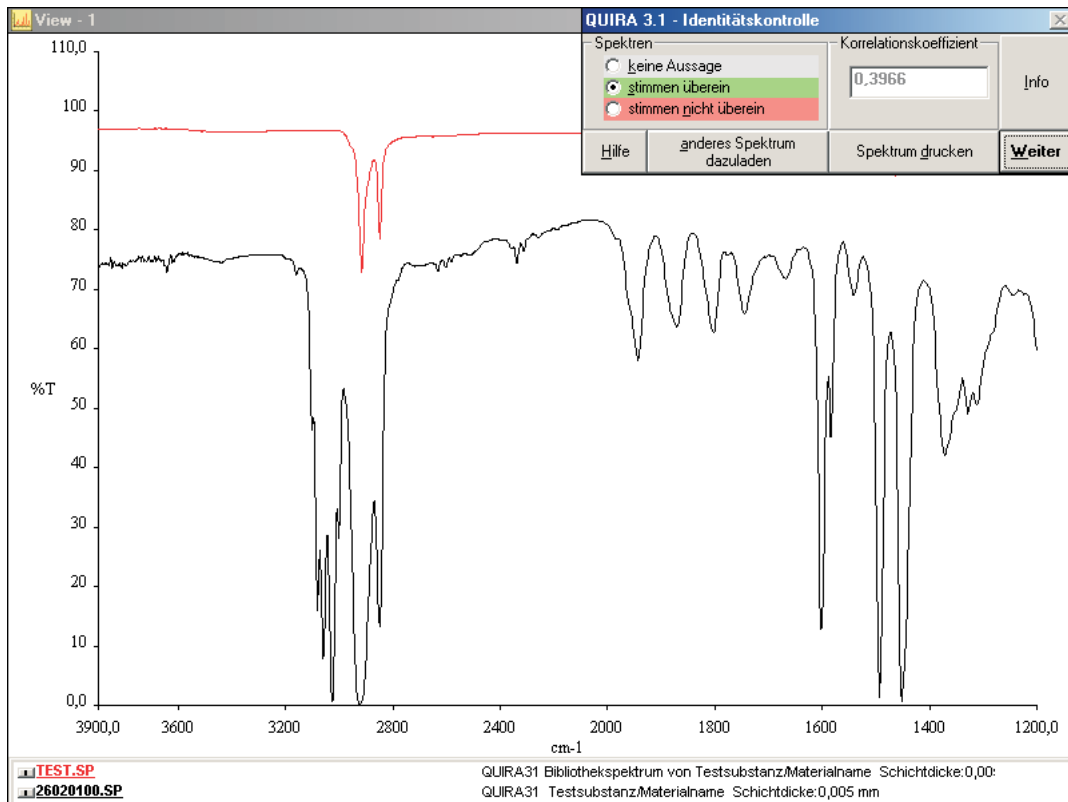


Abbildung 8: Bildschirmausgabe für Identitätskontrolle (ident.exe)

sind diese Buttons deaktiviert, wenn in der entsprechenden QUIRA-Methode die Option „Automatische Überprüfung“ gesetzt wurde (siehe Abb. ??).

Darüber hinaus kann für Vergleichszwecke ein zusätzliches Spektrum eingelesen und dargestellt werden.

Auf Wunsch kann ein Plot erfolgen. Hierbei werden auf dem gleichen Blatt, auf dem die Spektren ausgeplottet werden, zusätzlich folgende Informationen ausgedruckt¹⁷:

1. Lang-Material-Nr. oder wahlweise Materialname (wird abgefragt)
2. Proben-Nr.
3. Charge
4. Kommentar aus Eingabeformular
5. Aktueller Kommentar zur Analyse.

¹⁷Die Angaben 1-4 hierzu müssen an dieser Stelle nicht eingegeben werden, da die entsprechende Information bereits vorhanden ist.

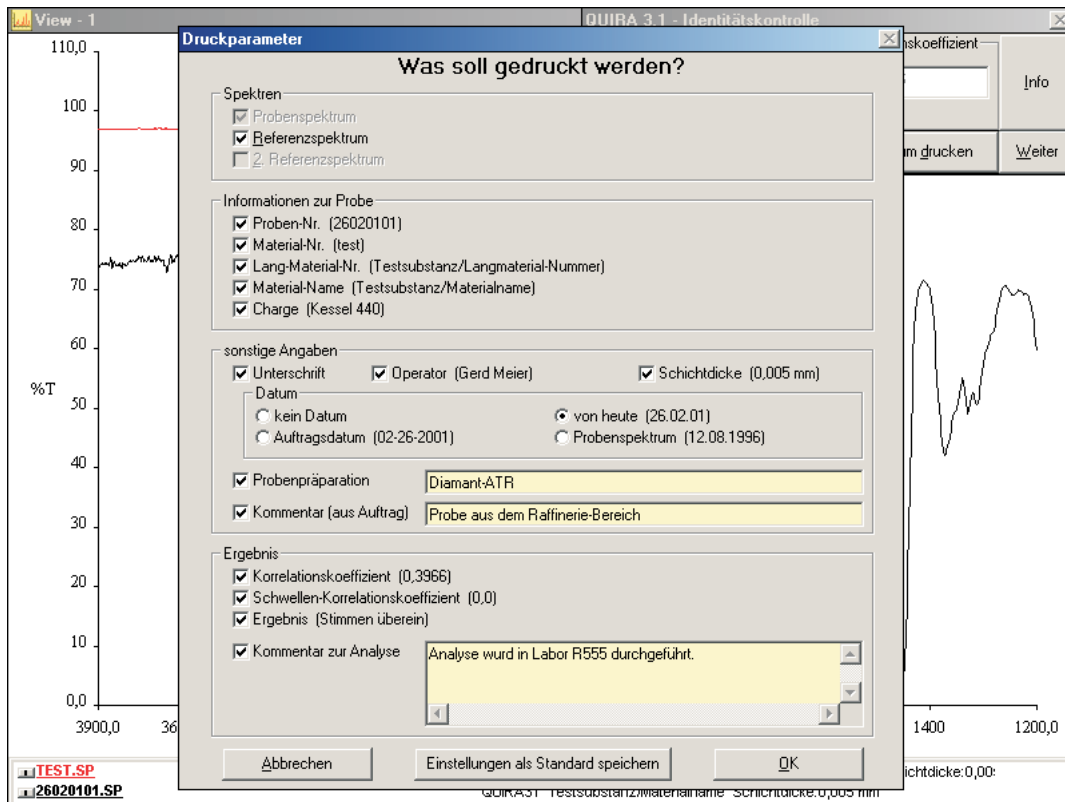


Abbildung 9: Formular für Festlegung der Druckoptionen (ident.exe)

6. Schichtdicke: „Schichtdicke: # mm“
7. Korrelationskoeffizient und Schwellenkorrelationskoeffizient
8. Firmenname (konfigurierbar mit CONFIG)
9. Firmenlogo (aus QUIRA-Datei „IMAGES\VLOGO.WMF“)
10. Datum
11. „Operator:“ gefolgt von einem Leerfeld für die Unterschrift des Operators

Was im einzelnen ausgedruckt werden soll, läßt sich auf einem vor dem Ausdruck erscheinenden separaten Formular eingeben (siehe Abb. ??).

Der Ausdruck erfolgt im Querformat (Landscape). Ist dies nicht gewünscht, so kann die Datei „qvviewdp.exe“ auf „qvviewid.exe“ kopiert werden (überschreiben!), was einen Ausdruck im Portrait-Modus bewirkt (A4 senkrecht). Soll wieder zum Landscape-Modus zurückgegangen werden, so ist die QUIRA-Datei „qvviewidl.exe“ auf „qvviewid.exe“ zu kopieren.

3.5 Schichtdickenbestimmung

Die Schichtdicke von Küvetten läßt sich bekanntlich durch Aufnahme der leeren Küvette und anschließende Auswertung der gemessenen Interferenzzüge bestimmen. Die Bestimmung der Schichtdicke erfolgt mit dem vorliegenden Programm halbautomatisch. Der Schwellenwert für die Peakerkennung von Interferenzbanden kann mit dem Programm CONFIG eingestellt werden.

3.6 Datensicherung

Regelmäßige Datensicherung ist angezeigt! Es wird empfohlen das ganze Quira-Directory zu sichern. Hierzu werden Programme empfohlen, die eine solche Datensicherung automatisch durchführen, wie z.B. „second copy“ (download unter www.centered.com).

3.7 Übergabe der Ergebnisse an ein LIMS-System

In QUIRA ist die Abspeicherung der Ergebnisse in einem vorbestimmten Directory möglich, aus dem das LIMS-System die Daten abholt. Bitte wenden Sie sich an Ihren Perkin-Elmer Vertreter um das gewünschte Format abzusprechen.

4 Dienstleistungsprogramm (QUTIL)

QUTIL ist ein separates Programm, das für unterschiedliche Dienstleistungen vorgesehen ist. Mit QUTIL lassen sich unter anderem diejenigen Informationen eingeben, die QPREP für die Auftragserstellung benötigt. Abb. ?? zeigt die wählbaren QUTIL-Menüpunkte. Dies sind im einzelnen:

- **Spezifische Einstellungen**
Mit diesem QUTIL-Menüpunkt wird das Programm CONFIG aufgerufen, mit dem alle gerätespezifischen und sonstigen besonderen Einstellungen vorgenommen werden.
- **Anlegen bzw. Editieren von Analysenmethoden**
In QUIRA können QUIRA-eigene Analysenmethoden mit beliebigem Namen kreiert werden. Die Verknüpfung des QUIRA-Methodennamens mit einer unter Perkin-Elmer-SPECTRUM lauffähigen Methode erfolgt unter diesem QUTIL-Menüpunkt (siehe Abschnitt ??).
- **Konfigurierung von Menüpunkten**
Die QUIRA-Menüpunkte, die dem Operator beim routinemäßigen Analysenbetrieb angeboten werden, können hier konfiguriert werden (siehe Abschnitt ??)
- **Einrichtung von QUIRA-Bibliotheken**
Es können 100 Bibliotheksdirectories eingerichtet werden. Jeder dieser Bibliotheken kann ein Name zugeordnet werden, der unter QUIRA verwaltet wird.



Abbildung 10: Das QUTIL-Menü (Startformular von QUTIL)

- **Kommentierung von QUIRA-Bibliotheken**
Unter diesem QUTIL-Menüpunkt kann jede QUIRA-Bibliothek zu Dokumentationszwecken ausführlich beschrieben werden.
- **Anlegen und Editieren von Materialstammdateien**
Unter diesem QUTIL-Menüpunkt werden Namen für Materialien vergeben¹⁸. Entscheidend für die Verwaltung unter QUIRA ist die 8-stellige Kurz-Material-Nummer, nach der die Dateien benannt werden, in denen die Information für die einzelnen Materialien gespeichert ist. Für jedes Material wird festgelegt, unter welche QUIRA-Menüpunkten es im späteren Routinebetrieb aufgerufen werden kann. Ferner wird unter diesem QUTIL-Menüpunkt festgelegt, welche Arbeitsanweisung dem Operator für ein bestimmtes Material unter einem bestimmten QUIRA-Menüpunkt anzuzeigen ist (bevor er die Probe präpariert und das Spektrum aufnimmt).
- **Beschreibung der Funktion von QUTIL**
Hier erfolgt nur ein kurzer Hinweis auf die Dokumentation.
- **Auflisten eines Spektren-Directories**
Hier können Spektren unter QUIRA-Directories (oder anderen Directories) aufgelistet werden, wobei die mit dem Spektrum verknüpfte Information in einer Textbox ausgegeben wird (siehe ??). Auf Wunsch kann das Spektrum graphisch dargestellt werden. Darüber hinaus ist es unter diesem QUTIL-Menüpunkt möglich, von allen Spektren eines Directories ein Mittelwertspektrum zu berechnen.
- **Auflisten eines Ergebnisdateien-Directories**
Hier kann der Inhalt der Ergebnisdateien ausgegeben werden (siehe ??).
- **Erstellen von Text für Arbeitsanweisungen**
Unter diesem QUTIL-Menüpunkt können QUIRA-Menüpunkt-spezifische und materialspezifische Arbeitsanweisungen erstellt werden (siehe Abschnitte ??).
- **Festlegen von Directories für Analysenspektren**
Normalerweise werden QUIRA-Spektren unter den QUIRA-Menü-Directories abgespeichert. In Einzelfällen (z.B. bei Betrieb von QUIRA in einem Netz) kann es wünschenswert sein, daß die Analysenspektren unter einem anderen Directory abgespeichert werden. Dieser QUTIL-Menüpunkt bietet daher die Möglichkeit, für die einzelnen QUIRA-Menüpunkte QUIRA-externe Directories für das Abspeichern von Spektren festzulegen (und zu aktivieren bzw. deaktivieren).

4.1 Konfigurierung von QUIRA-Menüpunkten

Die QUIRA-Menüpunkte sind ein zentraler Teil von QUIRA. Hierbei handelt es sich um Arbeitspunkte, die dem Operator im Routinebetrieb zur Auswahl gestellt werden, bevor er die Material-Nummer eingibt. Die Zahl der aktivierbaren QUIRA-Menüpunkte

¹⁸QUIRA kann im Routinebetrieb nur ihm bekannte Materialien analysieren!

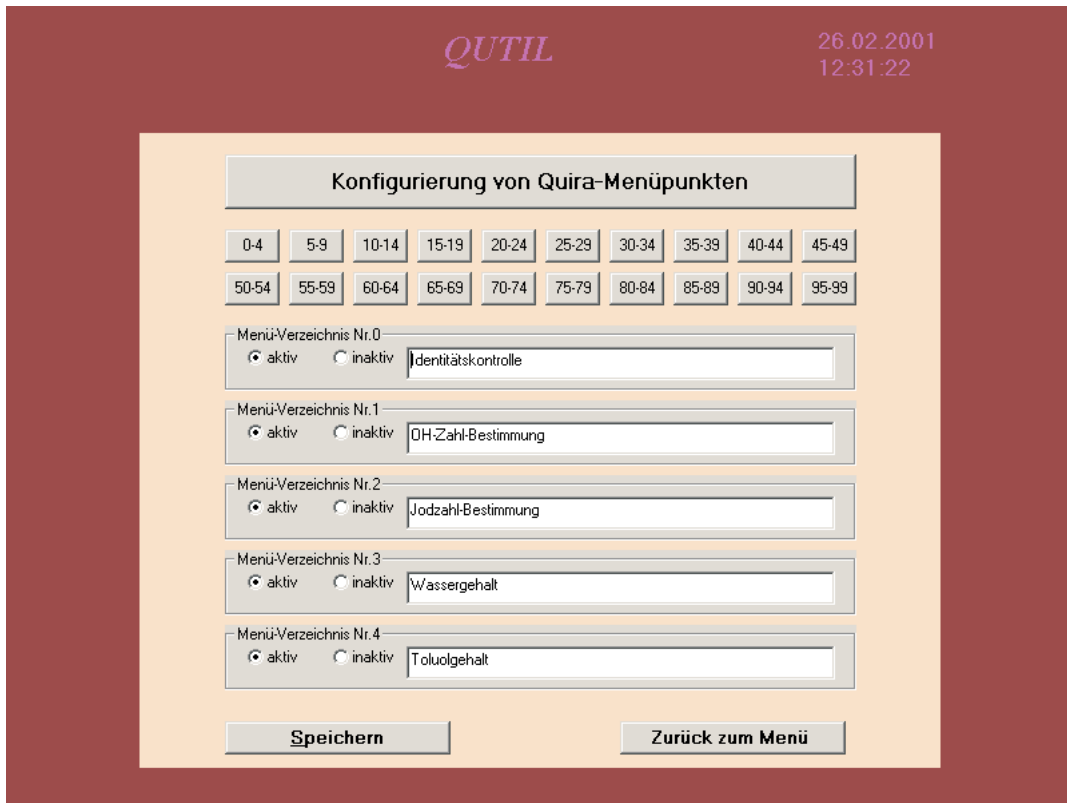


Abbildung 11: Konfigurierung von QUIRA-Menüpunkten mit QUTIL

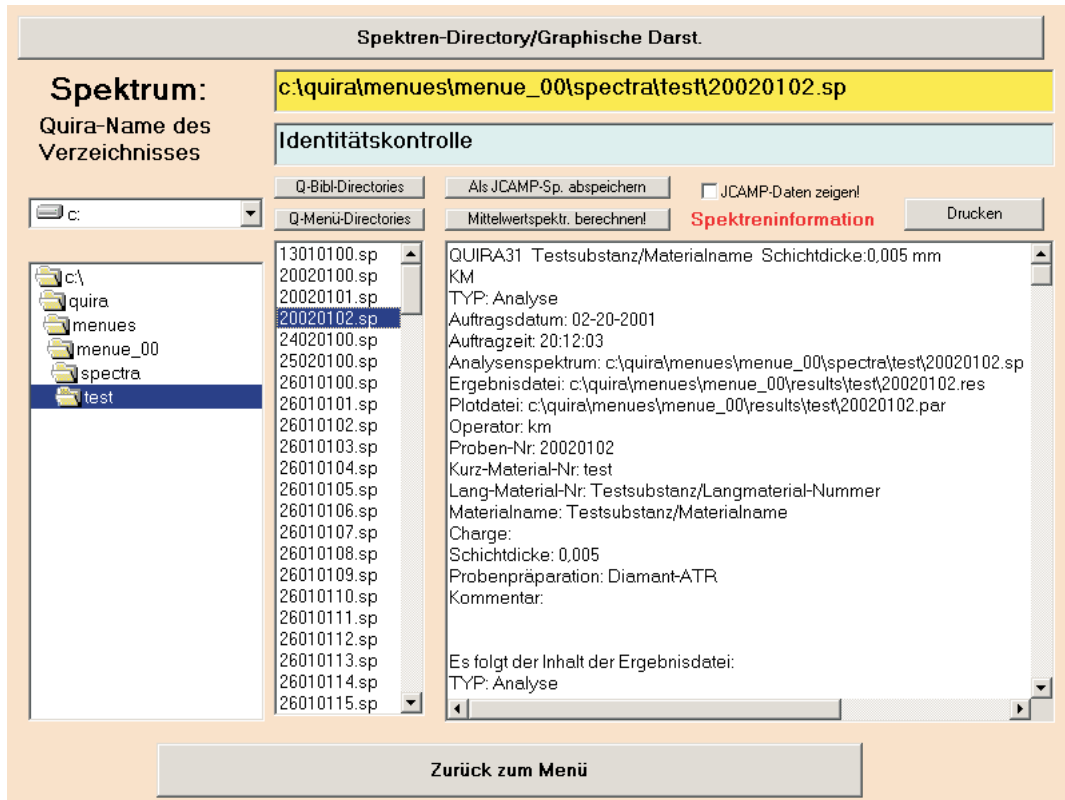


Abbildung 12: Auflisten von QUIRA-Spektren mit QUTIL

beträgt maximal 100. Die Texte sind frei wählbar (siehe Abb. ??). Alle unter den QUIRA-Menüpunkten anfallenden Daten werden von QUIRA unter den Directories „menue_00“ bis „menue_99“ verwaltet.

4.2 Spektren-Inhaltsverzeichnis

Es kann für jedes Directory (innerhalb oder außerhalb von QUIRA) ein Inhaltsverzeichnis der unter dem betreffenden Directory vorhandenen Spektren erstellt werden (Abb. ??). Durch Anklicken einer Spektrendatei wird die Ident-Information des Spektrums zusammen mit dem Inhalt der zugehörigen Ergebnis-Datei ausgegeben. Durch nochmaliges Klicken auf dasselbe Spektrum wird dieses graphisch dargestellt. Darüber hinaus ist es unter diesem QUTIL-Menüpunkt möglich, von allen Spektren eines Directories ein Mittelwertspektrum zu berechnen. Spektren, die nicht in die Mittelwertberechnung einbezogen werden sollen müssen vorher aus dem Directory gelöscht werden. Bei der erstmaligen Berechnung eines Mittelwertspektrums wird ein Unterdirectory mit dem Namen „mittel“ erzeugt. Unter dem Directory „mittel“ wird dann das Mittelwertspektrum unter dem Namen „mittelw.sp“ abgelegt.

Analysenmethoden überprüfen bzw. editieren

Quira-Methode

ident2

aromat
ident
ident1

Methodentyp

Methode

Bibliothek

Obere und untere Wellenzahl für Plot

Bearbeiten/Weiter!

Zurück zum Menü!

Abbildung 13: Einrichtung einer Methode für die Identitätskontrolle (Hauptformular). Der angegebene Spektralbereich wird für die Berechnung des Korrelationskoeffizienten genutzt. Beachten Sie, daß unterschiedliche Methoden mit unterschiedlichen Spektralbereichen kreiert werden können.

4.3 Ergebnis-Inhaltsverzeichnis

Es kann für jedes Directory ein Inhaltsverzeichnis der unter dem betreffenden Directory vorhandenen Ergebnis-Dateien (*.res) erstellt werden. Durch Anklicken einer Ergebnis-Datei wird deren Inhalt in einem Textfeld ausgegeben.

4.4 Anlegen und Editieren von QUIRA-Methoden

Es ist mit Hilfe dieses Eingabeprogramms möglich, QUIRA-Methoden anzulegen. Ein Beispiel für eine Identitätskontroll-Methode zeigen Abb. ?? und ?. Beispiele für eine quantitative 3-Komponentenanalyse zeigen Abb. ?? - ?. Für jede QUIRA-Methode müssen folgende Informationen eingegeben werden:

1. Name der QUIRA-Methode: maximal 8 Zeichen
Der Name der QUIRA-Methode ist frei wählbar und muß nicht mit dem Namen

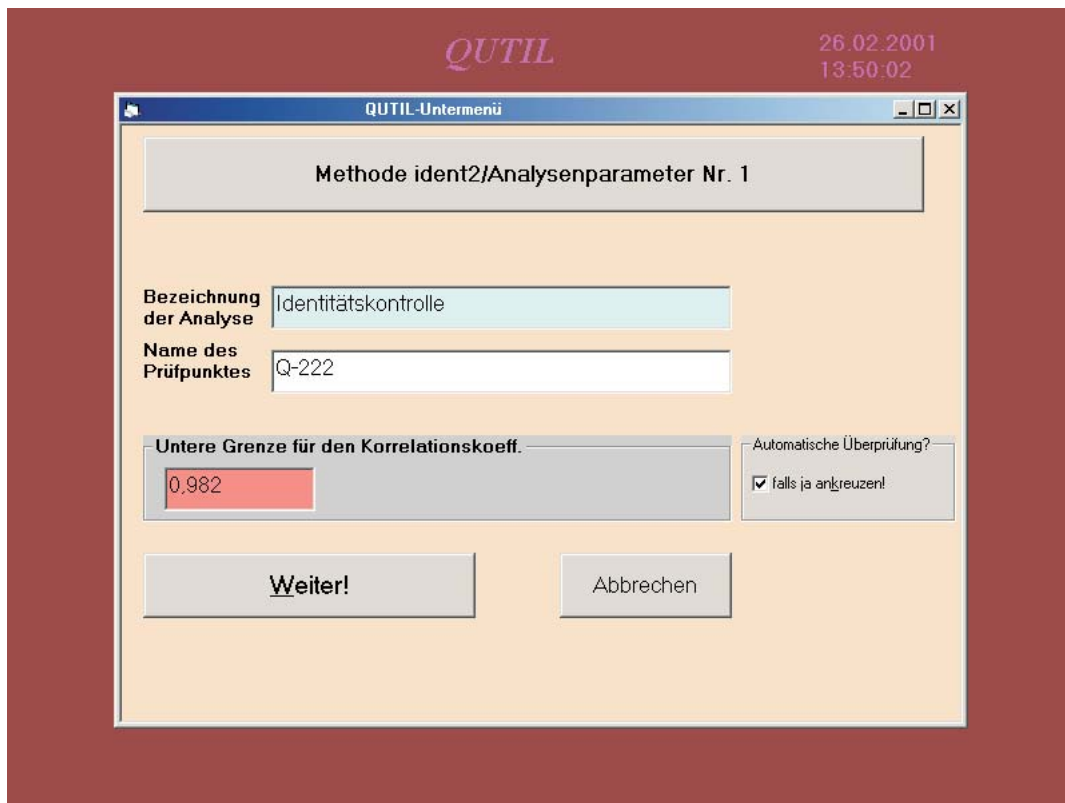


Abbildung 14: Einrichtung einer Methode für eine Identitätskontrolle (Unterformular). Durch das Häkchen bei der automatischen Überprüfung wird bewirkt, daß später die Aussage, ob eine Probe o.k. oder nicht o.k. ist vollautomatisch erfolgt (d.h. Eingreifen oder persönliche Entscheidung durch den Operator ist nicht möglich).

Analysenmethoden überprüfen bzw. editieren

Quira-Methode

- aromat
- aromat
- ident
- ident1

Methodentyp

Methode

Bibliothek

Obere und untere Wellenzahl für Plot

Schichtdicke

Bearbeiten/Weiter! Anmerkung zur Probenpräparation

Zurück zum Menü!

Parameter-Zahl

Abbildung 15: Erstellen von QUIRA-Methoden mit QUTIL am Beispiel einer quantitativen Dreikomponentenanalyse (Hauptformular)

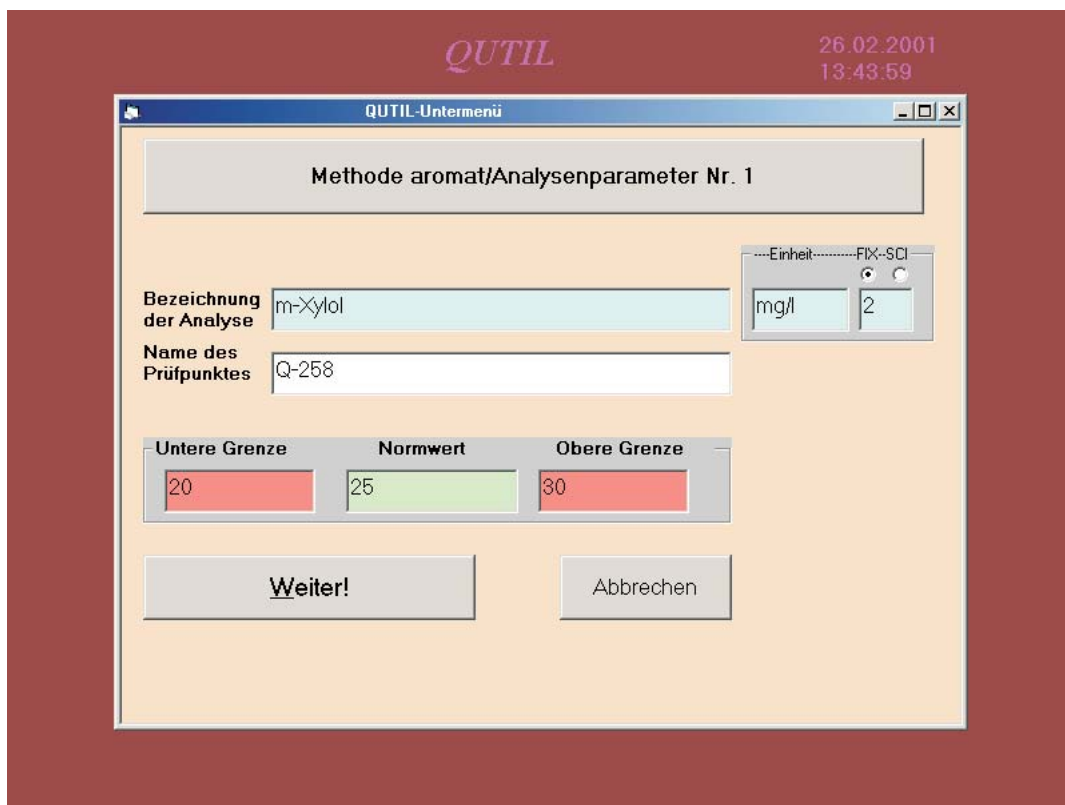


Abbildung 16: Erstellen von QUIRA-Methoden mit QUTIL am Beispiel einer quantitativen Dreikomponentenanalyse(Unterformular für 1. Analysenparameter (m-Xylol))

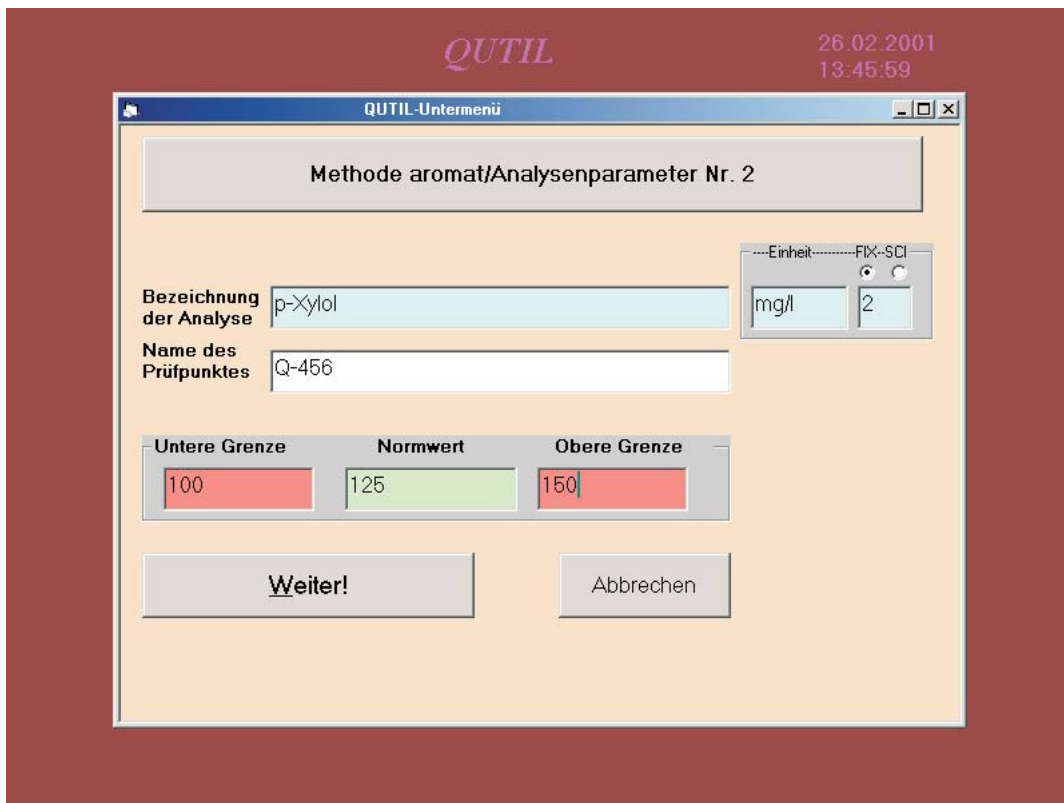


Abbildung 17: Erstellen von QUIRA-Methoden mit QUTIL am Beispiel einer quantitativen Dreikomponentenanalyse(Unterformular für 2. Analysenparameter (p-Xylol))

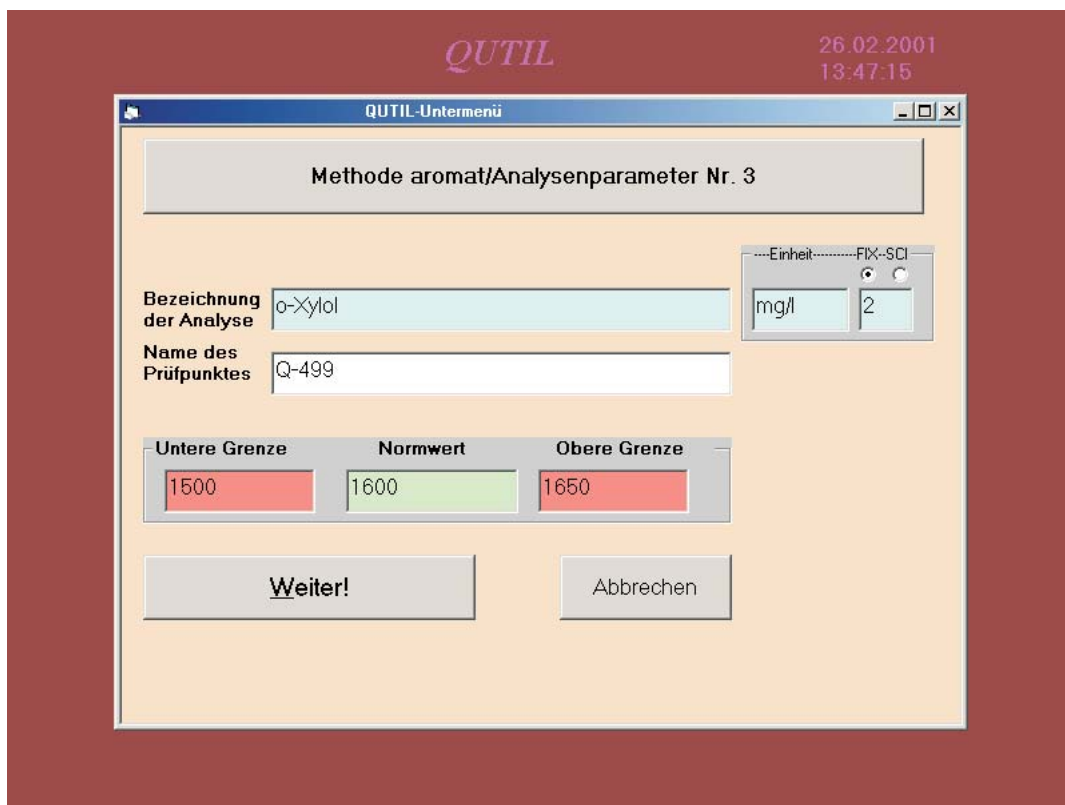


Abbildung 18: Erstellen von QUIRA-Methoden mit QUTIL am Beispiel einer quantitativen Dreikomponentenanalyse (Unterformular für 3. Analyseparameter (o-Xylol))

der mit der QUIRA-Methode verknüpften unter dem Perkin-Elmer-Spectrum-Programmsystem laufenden Methode übereinstimmen (siehe Punkt ??).

2. Methodentyp

Es sind folgende 4 Typen möglich: General, Quant+, Beer¹⁹, Ident. Allen QUIRA-Methoden muß eine Analysenmethode in Form einer unter dem Perkin-Elmer-Spectrum-Programmsystem lauffähigen *.exe-Datei (Methodentyp General und Ident, Shell-Aufruf) oder *.md-Datei (Methodentyp Quant+ bzw. Beer, Predict-Aufruf) zugeordnet werden.

3. Name der *.exe (z.B. VB4/Procedures-Programm) oder *.md-Datei (Quant+ bzw. Beer-Methode)

Hierbei ist der komplette Dateiname²⁰ einschließlich des gesamten Pfades einzugeben.

4. Bibliothek

Hier ist der Name des Directories einzugeben, unter dem sich ein eventuell benötigtes Referenzspektrum befindet.

5. Spektralbereich [obere Wellenzahlgrenze, untere Wellenzahlgrenze]

für die Spektrendarstellung²¹ auf dem Bildschirm. Dies ist gleichzeitig auch der Spektralbereich, der auf dem Drucker ausgeplottet wird. Ferner wird dieser Spektralbereich bei der Identitätskontrolle (ident.exe) für die Berechnung des Korrelationskoeffizienten benutzt.

6. Zahl der Analysenparameter

Eine Methode kann auch für die Ausgabe *meherer* Analysenparameter konfiguriert werden. Die Zahl der Analysenparameter, die eine bestimmte Methode erzeugen darf, ist auf zehn beschränkt.

7. Nummer der Gerätekonfiguration, die auf die Methode angewendet werden soll.

8. Alle weiteren Angaben zu der QUIRA-Methode erfolgen auf zusätzlichen Formularen²² (siehe Abb. ?? und Abb. ?? - ??):

- a) Allgemeiner Name für die Analysenmethode mit zusätzlicher Angabe der zu verwendenden Einheit und der auszugebenden Stellenzahl²³. [optional]
- b) Prüfpunktname [optional]

¹⁹Beer-Methoden können unter QUIRA nicht automatisch eingebunden werden.

²⁰mit Erweiterung (Extension)

²¹Der tatsächlich registrierte Spektralbereich richtet sich nach der Einstellung, die mit CONFIG vorgenommen wurde.

²²Die Zahl dieser Unterformulare richtet sich nach der Zahl der Parameter, die eine bestimmte Methode als Ergebnis ausgibt.

²³Hierbei kann (ähnlich wie bei einem Taschenrechner) zwischen Festkomma (FIX)- und Exponentialdarstellung (SCI='scientific') gewählt werden.

- c) Untere Grenze für Analysenwert [optional]
Im Falle einer Identitätskontrolle ist dies der Schwellenkorrelationskoeffizient.
- d) Obere Grenze für Analysenwert [optional]
(gilt nur für quantitative Analysen)
- e) Normwert [optional]
(gilt nur für quantitative Analysen)
- f) Option „Automatische Auswertung“
Bestimmt im Falle der Identitätskontrolle, ob eine automatische Auswertung anhand des Schwellenkorrelationskoeffizienten erfolgen soll.

4.5 Anlegen und Editieren von Material-Stammdateien

Für jede Material-Nr. wird eine Material-Stammdatei (Hauptformular siehe Abb. ??) angelegt, die alle für die Durchführung von Analysen mit diesem Material relevanten Informationen enthält. Diese Datei trägt den Namen der Kurz-Material-Nr. und enthält im einzelnen folgende Informationen:

1. Lang-Material-Nr. [optional]
2. Materialname [optional]
3. Analysen-Menüpunkte, unter denen dieses Material auftreten kann.
4. Für jeden Analysen-Menüpunkt erscheint nun ein Unterformular (Abb. ??), in dem folgende Informationen abgefragt werden:
 - a) Methoden, die unter diesem Menüpunkt auftreten.
Hierbei kann eine Liste von bis zu zehn hintereinander abzuarbeitender QUIRA-Methoden konfiguriert werden.
 - b) Dateiname der Arbeitsanweisung
Voreinstellung ist hierbei die menüspezifische Standard-Arbeitsanweisung (siehe ??).

4.6 Erstellung von Arbeitsanweisungen

Innerhalb von QUTIL lassen sich beliebige Arbeitsanweisungen erstellen. Bevor QEXE mit der Aufnahme eines Spektrums vom Gerät beginnt, wird eine Arbeitsanweisung ausgegeben. Jede Arbeitsanweisung ist in einer ASCII-Text-Datei gespeichert. Jedem Menüpunkt ist eine Standard-Arbeitsanweisung (c:\quira\menues\menue_##\arbeit.dat) zugeordnet (Abb. ??). Darüber hinaus können beliebig viele weiteren Spezial-Arbeitsanweisungen (unter c:\quira\arbeit) erstellt werden (Abb. ??), die in den Material-Stammdateien zuzuordnen sind. Jeweils eine separate Spezial-Arbeitsanweisung ist für die Aufnahme von Referenzspektren („referenz“) und die Aufnahme von Spektren für die Schichtdickenbestimmung („schicht“) vorgesehen.

QUTIL 26.02.2001
20:28:05

Material-Stammdateien überprüfen bzw. editieren

K.-Material-Nr

additiv2	L-Material-Nr Special Additive	
additiv1	Materialname Irganox 208	
test		

Menüpunkte

Identitätskontrolle	0
OH-Zahl-Bestimmung	1
Jodzahl-Bestimmung	2
Wassergehalt	3
Toluolgehalt	4

Bearbeiten/Weiter!
Zurück zum Menü

Abbildung 19: Erstellen einer Material Stammdatei („additiv2“). Aus der Liste der QUIRA-Menüpunkte sind alle Menüpunkte zu entfernen, unter denen das betreffende Material *nicht* vorkommen soll. Hierbei können einer oder mehrere Menüpunkte übrigbleiben, unter denen dann später im Routinebetrieb das betreffende Material analysiert werden kann. Welche Methoden unter den unterschiedlichen QUIRA-Menüpunkten mit dem jeweiligen Material durchzuführen sind, wird in Unterformularen eingegeben (1 Unterformular pro Menüpunkt, siehe Abb. ??).

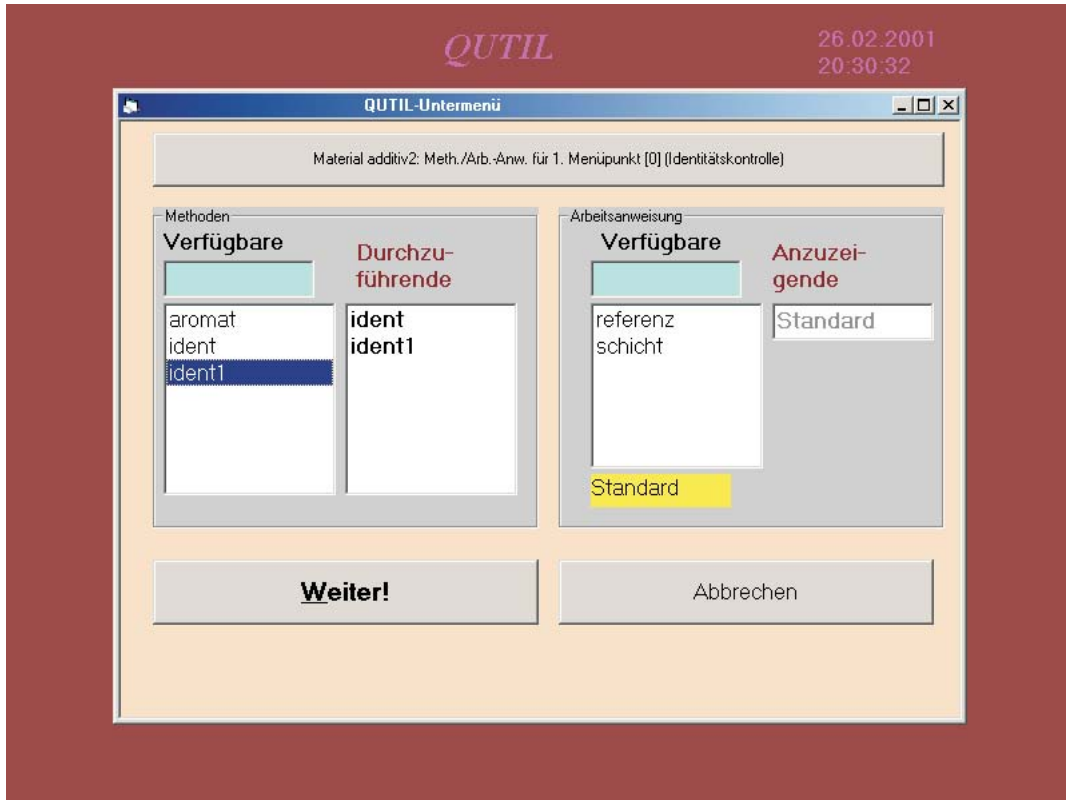


Abbildung 20: Unterformular zur weiteren Eingabe von Daten für das Material „additiv2“. Beachten Sie, daß unter dem QUIRA-Menüpunkt „Identitätskontrolle“ zwei Methoden (ident, ident1) durchgeführt werden sollen. Diese rufen zwar beide das gleiche Programm (ident.exe) auf, unterscheiden sich aber im Wellenzahlbereich, der zur Berechnung des Korrelationskoeffizienten herangezogen wird. Neben den QUIRA-Methoden wird in diesem Unterformular noch die Arbeitsanweisung festgelegt, die im Routinebetrieb erscheinen soll, wenn das Material „additiv2“ unter dem Menüpunkt „Identitätskontrolle“ zur Analyse kommt.

Abbildung 21: Formular zur Erstellung einer Standard-Arbeitsanweisung. Zunächst wird der QUIRA-Menüpunkt ausgewählt, für den die Standardarbeitsanweisung erstellt werden soll. Anschließend wird die Arbeitsanweisung in die Textbox geschrieben.

The image shows a graphical user interface for creating a special work instruction. It is divided into two main panels: 'Standard-Arbeitsanweisung' (left) and 'Spezial-Arbeitsanweisung' (right). The 'Standard-Arbeitsanweisung' panel includes a 'Datei auswählen!' button, a yellow selection box, a list box containing 'referenz' and 'schicht', and 'Bearbeiten' and 'Abbrechen' buttons. The 'Spezial-Arbeitsanweisung' panel features a large, empty text area for input. At the bottom of the interface, there are two buttons: 'Speichern' and 'Zurück zum Menü'.

Abbildung 22: Formular zur Erstellung einer Spezial-Arbeitsanweisung. Zunächst wird ein Name für die Spezial-Arbeitsanweisung vergeben. Dieser Name kann beliebig sein (z.B. Name des Materials oder der Materialgruppe, auf welche sich die Arbeitsanweisung beziehen soll). Anschließend wird die Arbeitsanweisung in die Textbox geschrieben.

5 Neue Funktionen unter Quira3.3

Unter Quira wurden bis Version 3.3R folgende einige neue Funktionen realisiert die im Folgenden kurz erläutert werden sollen.

5.1 Neues Modul pkheight.exe

Für die Erstellung von Methoden unter QUTIL steht ein zusätzliches Modul „pkheight.exe“ vom Typ GENERAL zur Verfügung. Dies wertet die relative Änderung (prozentual) der Bandenhöhe im Vergleich zu einer Referenzbande aus. Beim Einrichten der Methode muss das Referenzspektrum angegeben werden. Ferner muss im dem Feld „Name des Prüfpunktes“ (2. Seite bei der Einrichtung der Methode) die Bande, an der ausgewertet werden soll, spezifiziert werden. Hierzu sind in dieses Feld 3 durch Komma getrennte Zahlen einzutragen.

1. Die 1. Zahl bestimmt die Lage der Bande (Wellenzahl des Peaks)
2. Die 2. und 3. Zahl bestimmen die Lage der Basislinienpunkte
3. Soll eine horizontale Basislinie verwendet werden, so ist für die 2. und 3. Zahl der gleiche Wert einzutragen.

Beispiel: 1710,1900,1900

Es wird die Bande bei 1710 WZ mit einer horizontalen Basislinie durch den Spektrenpunkt bei 1900 WZ ausgewertet.

Beispiel: 2840,3200,2750

Es wird die Bande bei 2840 mit Basislinienpunkten bei 3200 und 2750 ausgewertet.

5.2 Neues Modul Reinh.exe

Für die Erstellung von Methoden unter QUTIL steht ein zusätzliches Modul „Reinh.exe“ vom Typ REINH zur Verfügung. Dies bestimmt den Reinheitsgrad der Probe bezüglich eines Referenzspektrums. Ergebnis der Reinheitskontrolle ist ein Reinheitsgrad (0-1). Diese Methode ist im Ablauf analog zu einer Identitätskontrolle, wobei man statt des Korrelationskoeffizienten den Reinheitsgrad erhält. Die Bestimmung des Reinheitsgrad erfolgt mit Hilfe einer automatisierten dynamischen Differenzspektroskopie. Hierbei können drei unterschiedliche Rechenverfahren angewendet werden:

1. Als Reinheitsgrad wird der Differenzfaktor genommen.
2. Als Reinheitsgrad das Integral der positiven Anteil des Differenzspektrums im Verhältnis zum Integral des Referenzspektrums genommen.
3. Als Reinheitsgrad das Integral der positiven Anteil des Differenzspektrums im Verhältnis zum Integral des Referenzspektrums genommen, das Ganze allerdings nur im C-H-Valenzschwingungsbereich von 3150 cm^{-1} bis 2750 cm^{-1} .

Achtung! Die Reinheitskontrolle ist keine unmittelbare quantitative Analyse, sondern liefert einen berechneten spektralen Reinheitsgrad, dessen Wert vom verwendeten Algorithmus und den eingestellten Parametern (Shift, Empfindlichkeit) abhängig ist, und der Anhaltspunkte über möglicherweise bestehende Verunreinigungen eines bekannten Produkts durch unbekannte Komponenten gibt. Artefakte in Spektren können dazu führen, dass man einen zu niedrigen Reinheitsgrad erhält! Es wird empfohlen die Reinheitskontrolle immer in Verbindung mit einer Identitätskontrolle durchzuführen.

Beim Einrichten der Methode muss das Referenzspektrum angegeben werden. Ferner müssen im Feld „Name des Prüfpunktes“ (2. Seite bei der Einrichtung der Methode) die Bande vier ganze durch Komma getrennte Zahlen angegeben werden, die folgende Bedeutung haben.

1. Berechnungsmethode (1,2,3)
1: Diff-Faktor, 2: Integral des Differenzspektrums, 3: dto. im C-H-Valenz-Bereich
2. Normierung (0,1)
Im Falle von 1 wird eine Vektornormierung (Einheitsvektor) durchgeführt
3. Shift
Kleine ganze Zahl, normalerweise zwischen 1-10
4. Empfindlichkeit
Ganze Zahl, normalerweise zwischen 10-100

Die Parameter Shift und Empfindlichkeit bestimmen den Schwellenwert der „Operationscharakteristik“. Nach einem Quira-Lauf steht dies als Graphik unter dem Quira-Verzeichnis in der Datei diff2.pdf zur Verfügung.

5.3 Validierung mit Compare (QUTIL)

Unter dem Menüpunkt „Auflisten eines Spektren-Directories“ können mit der PerkinElmer-Funktion „Compare“ die Korrelationskoeffizienten eines ausgewählten Spektrums oder eines ganzen Spektrendirectories mit einem anderen Spektrendirectory berechnet werden. Die Ergebnisse werden im Textfenster des Formulars ausgegeben und können von dort ausgedruckt werden.

5.4 Erfassung der Ergebnisse mit einer EXCEL-Tabelle (QUTIL)

5.4.1 Spezifizierung der in die EXCEL-Tabelle aufzunehmenden Daten

Unter dem Menüpunkt „Auflisten eines Ergebnisdateien-Directories“ gibt es jetzt eine Funktion „Quira Data Mining“. Damit können Ergebnisse in eine Excel-Datei geschrieben werden²⁴. Hierbei kann genau spezifiziert werden, welche Parameter ausgegeben

²⁴Der Name der Excel-Datei ist XQUIRA.CSV unter dem Quira-Directory XQUIRA

werden sollen. Das Programm greift dabei direkt auf die *.res-Dateien zurück. Wurden Mehrfachbestimmungen (Doppel- oder Dreifachbestimmungen) durchgeführt, so können auf Wunsch zusätzlich die jeweiligen Mittelwerte in die EXCEL-Datei aufgenommen werden. Wird letztere Funktion aktiviert, so greift das Programm nicht auf die *.res-Dateien, sondern auf die History-Datei zurück. Gibt es dabei Probleme mit der History-Datei, so kann diese gelöscht und damit ein „Neuanfang“ gemacht werden.

5.4.2 Einrichtung von Doppel- und Dreifachbestimmungen

Die Einrichtung von Doppel- und Dreifachbestimmungen erfolgt nach einigen einfachen Regeln:

1. Für die Erstbestimmung, die Zweitbestimmung und gegebenenfalls die Drittbestimmung muss jeweils ein separater Menüpunkt eingerichtet werden!
2. Die Namen der Methoden, die in Einfach- bis Dreifachbestimmungen verwendet werden, müssen gleich lang sein und dürfen sich nur im letzten Zeichen unterscheiden!
Beispiel: meth1,meth2,meth3.
3. In dem Textfeld „Bezeichnung der Analyse“ (2. Seite bei der Methodenerstellung) muss jeweils [1] für Erstbestimmung, [2] für Zweitbestimmung und [3] für Drittbestimmung eingegeben werden²⁵.
4. Ferner muss bei Abfolge mehrerer Methoden für ein bestimmtes Material die Reihenfolge in der Einfach-, Zweifach und Dreifach-Bestimmung übereinstimmen!

6 Hilfe

Hilfen sind durch entsprechende Hinweise (z.B. Message-Boxen, Info-Buttons), und Fehlerauffangroutinen in einer Art und Weise in das Programm eingebaut, daß innerhalb von QUIRA eine Fehlbedienung praktisch ausgeschlossen ist. Die vorliegende Bedienungsanleitung zu QUIRA befindet sich unter dem Directory „Doku“ (quira.pdf).

7 Installation

7.1 Lizenzbedingungen

Im Rahmen der Installation von Quira wird der Anwender auf die Lizenzbedingungen hingewiesen. Eine Installation erfolgt nur, wenn die Lizenzbedingungen anerkannt werden.

²⁵an beliebiger Stelle innerhalb der Zeichenkette

7.1.1 Lizenzbedingungen für QUIRA

Mit dem Kauf der vorliegenden Software haben Sie das Recht erworben, Quira an 1 Messplatz zu betreiben.

Quira beinhaltet Module für die quantitative Analyse, qualitative Analyse (Identitätskontrolle), Gehalts- und Reinheitskontrolle. Die Reinheitskontrolle ist keine unmittelbare quantitative Analyse, sondern liefert einen berechneten spektralen Reinheitsgrad, dessen Wert vom verwendeten Algorithmus abhängig ist, und der Anhaltspunkte über möglicherweise bestehende Verunreinigungen eines bekannten Produkts durch unbekannte Komponenten gibt. Bitte beachten Sie auch die Hinweise zu den einzelnen Methoden in der Quira-Dokumentation.

Als „Rechenmaschine“ in QUIRA wird die Software „R“ benutzt (derzeit nur für die Reinheitskontrolle). Hierzu muss R installiert werden. Nach Installation von „R“ ist dieses auch als allgemeine Statistik- Software nutzbar. Die Nutzung von R unterliegt der GNU GENERAL PUBLIC LICENSE, die Sie auf der mitgelieferten Diskette unter dem Directory „Lizenz“ finden.

Die Entwicklung von QUIRA erfolgte fachgerecht und sorgfältig. Dennoch sind Sie sich als Anwender darüber im Klaren, dass Ergebnisse von computergestützten Analysengeräten stets kritisch überprüft werden müssen und dass nach Stand der Technik Fehler in komplexer Anwendungssoftware wie Quira auch bei sorgfältiger Entwicklung nicht ausgeschlossen werden können. Unabhängig von der Art eventuell auftretender Fehler oder Mängel von QUIRA wird keine Haftung für jegliche Art von Schäden übernommen, die Ihnen oder Dritten durch eine Fehlfunktion von Quira entstehen sollten.

Der Quellcode, das Urheberrecht und alle sonstigen mit der Software QUIRA verbundenen Rechte, die über den oben genannten Lieferumfang und Nutzungsbereich hinausgehen, bleiben beim Hersteller dieser Software.

7.1.2 Lizenzbedingungen für R

Als „Rechenmaschine“ in QUIRA wird die Software „R“ benutzt (derzeit nur für die Reinheitskontrolle). Hierzu muss R installiert werden. Dies befindet sich in Form einer exe-Datei auf der beiliegenden CD-ROM. Die Installation erfolgt einfach durch den Aufruf dieser exe-Datei. Nach Installation von „R“ ist dieses auch als allgemeine Statistik- Software nutzbar. Die Homepage für „R“ befindet sich unter www.r-project.org/. Die Nutzung von R unterliegt der folgenden GNU GENERAL PUBLIC LICENSE:

GNU GENERAL PUBLIC LICENSE
Version 2, June 1991

Copyright (C) 1989, 1991 Free Software Foundation, Inc.
59 Temple Place, Suite 330, Boston, MA 02111-1307 USA
Everyone is permitted to copy and distribute verbatim copies
of this license document, but changing it is not allowed.

Preamble

The licenses for most software are designed to take away your freedom to share and change it. By contrast, the GNU General Public License is intended to guarantee your freedom to share and change free software--to make sure the software is free for all its users. This General Public License applies to most of the Free Software Foundation's software and to any other program whose authors commit to using it. (Some other Free Software Foundation software is covered by the GNU Library General Public License instead.) You can apply it to your programs, too.

When we speak of free software, we are referring to freedom, not price. Our General Public Licenses are designed to make sure that you have the freedom to distribute copies of free software (and charge for this service if you wish), that you receive source code or can get it if you want it, that you can change the software or use pieces of it in new free programs; and that you know you can do these things.

To protect your rights, we need to make restrictions that forbid anyone to deny you these rights or to ask you to surrender the rights. These restrictions translate to certain responsibilities for you if you distribute copies of the software, or if you modify it.

For example, if you distribute copies of such a program, whether gratis or for a fee, you must give the recipients all the rights that you have. You must make sure that they, too, receive or can get the source code. And you must show them these terms so they know their rights.

We protect your rights with two steps: (1) copyright the software, and (2) offer you this license which gives you legal permission to copy, distribute and/or modify the software.

Also, for each author's protection and ours, we want to make certain that everyone understands that there is no warranty for this free software. If the software is modified by someone else and passed on, we want its recipients to know that what they have is not the original, so that any problems introduced by others will not reflect on the original authors' reputations.

Finally, any free program is threatened constantly by software patents. We wish to avoid the danger that redistributors of a free program will individually obtain patent licenses, in effect making the program proprietary. To prevent this, we have made it clear that any patent must be licensed for everyone's free use or not licensed at all.

The precise terms and conditions for copying, distribution and modification follow.

GNU GENERAL PUBLIC LICENSE
TERMS AND CONDITIONS FOR COPYING, DISTRIBUTION AND MODIFICATION

0. This License applies to any program or other work which contains a notice placed by the copyright holder saying it may be distributed under the terms of this General Public License. The "Program", below, refers to any such program or work, and a "work based on the Program" means either the Program or any derivative work under copyright law: that is to say, a work containing the Program or a portion of it, either verbatim or with modifications and/or translated into another language. (Hereinafter, translation is included without limitation in the term "modification".) Each licensee is addressed as "you".

Activities other than copying, distribution and modification are not

covered by this License; they are outside its scope. The act of running the Program is not restricted, and the output from the Program is covered only if its contents constitute a work based on the Program (independent of having been made by running the Program). Whether that is true depends on what the Program does.

1. You may copy and distribute verbatim copies of the Program's source code as you receive it, in any medium, provided that you conspicuously and appropriately publish on each copy an appropriate copyright notice and disclaimer of warranty; keep intact all the notices that refer to this License and to the absence of any warranty; and give any other recipients of the Program a copy of this License along with the Program.

You may charge a fee for the physical act of transferring a copy, and you may at your option offer warranty protection in exchange for a fee.

2. You may modify your copy or copies of the Program or any portion of it, thus forming a work based on the Program, and copy and distribute such modifications or work under the terms of Section 1 above, provided that you also meet all of these conditions:

a) You must cause the modified files to carry prominent notices stating that you changed the files and the date of any change.

b) You must cause any work that you distribute or publish, that in whole or in part contains or is derived from the Program or any part thereof, to be licensed as a whole at no charge to all third parties under the terms of this License.

c) If the modified program normally reads commands interactively when run, you must cause it, when started running for such interactive use in the most ordinary way, to print or display an announcement including an appropriate copyright notice and a notice that there is no warranty (or else, saying that you provide a warranty) and that users may redistribute the program under these conditions, and telling the user how to view a copy of this License. (Exception: if the Program itself is interactive but does not normally print such an announcement, your work based on the Program is not required to print an announcement.)

These requirements apply to the modified work as a whole. If identifiable sections of that work are not derived from the Program, and can be reasonably considered independent and separate works in themselves, then this License, and its terms, do not apply to those sections when you distribute them as separate works. But when you distribute the same sections as part of a whole which is a work based on the Program, the distribution of the whole must be on the terms of this License, whose permissions for other licensees extend to the entire whole, and thus to each and every part regardless of who wrote it.

Thus, it is not the intent of this section to claim rights or contest your rights to work written entirely by you; rather, the intent is to exercise the right to control the distribution of derivative or collective works based on the Program.

In addition, mere aggregation of another work not based on the Program with the Program (or with a work based on the Program) on a volume of a storage or distribution medium does not bring the other work under the scope of this License.

3. You may copy and distribute the Program (or a work based on it,

under Section 2) in object code or executable form under the terms of Sections 1 and 2 above provided that you also do one of the following:

- a) Accompany it with the complete corresponding machine-readable source code, which must be distributed under the terms of Sections 1 and 2 above on a medium customarily used for software interchange; or,
- b) Accompany it with a written offer, valid for at least three years, to give any third party, for a charge no more than your cost of physically performing source distribution, a complete machine-readable copy of the corresponding source code, to be distributed under the terms of Sections 1 and 2 above on a medium customarily used for software interchange; or,
- c) Accompany it with the information you received as to the offer to distribute corresponding source code. (This alternative is allowed only for noncommercial distribution and only if you received the program in object code or executable form with such an offer, in accord with Subsection b above.)

The source code for a work means the preferred form of the work for making modifications to it. For an executable work, complete source code means all the source code for all modules it contains, plus any associated interface definition files, plus the scripts used to control compilation and installation of the executable. However, as a special exception, the source code distributed need not include anything that is normally distributed (in either source or binary form) with the major components (compiler, kernel, and so on) of the operating system on which the executable runs, unless that component itself accompanies the executable.

If distribution of executable or object code is made by offering access to copy from a designated place, then offering equivalent access to copy the source code from the same place counts as distribution of the source code, even though third parties are not compelled to copy the source along with the object code.

4. You may not copy, modify, sublicense, or distribute the Program except as expressly provided under this License. Any attempt otherwise to copy, modify, sublicense or distribute the Program is void, and will automatically terminate your rights under this License. However, parties who have received copies, or rights, from you under this License will not have their licenses terminated so long as such parties remain in full compliance.

5. You are not required to accept this License, since you have not signed it. However, nothing else grants you permission to modify or distribute the Program or its derivative works. These actions are prohibited by law if you do not accept this License. Therefore, by modifying or distributing the Program (or any work based on the Program), you indicate your acceptance of this License to do so, and all its terms and conditions for copying, distributing or modifying the Program or works based on it.

6. Each time you redistribute the Program (or any work based on the Program), the recipient automatically receives a license from the original licensor to copy, distribute or modify the Program subject to these terms and conditions. You may not impose any further restrictions on the recipients' exercise of the rights granted herein. You are not responsible for enforcing compliance by third parties to this License.

7. If, as a consequence of a court judgment or allegation of patent infringement or for any other reason (not limited to patent issues), conditions are imposed on you (whether by court order, agreement or otherwise) that contradict the conditions of this License, they do not excuse you from the conditions of this License. If you cannot distribute so as to satisfy simultaneously your obligations under this License and any other pertinent obligations, then as a consequence you may not distribute the Program at all. For example, if a patent license would not permit royalty-free redistribution of the Program by all those who receive copies directly or indirectly through you, then the only way you could satisfy both it and this License would be to refrain entirely from distribution of the Program.

If any portion of this section is held invalid or unenforceable under any particular circumstance, the balance of the section is intended to apply and the section as a whole is intended to apply in other circumstances.

It is not the purpose of this section to induce you to infringe any patents or other property right claims or to contest validity of any such claims; this section has the sole purpose of protecting the integrity of the free software distribution system, which is implemented by public license practices. Many people have made generous contributions to the wide range of software distributed through that system in reliance on consistent application of that system; it is up to the author/donor to decide if he or she is willing to distribute software through any other system and a licensee cannot impose that choice.

This section is intended to make thoroughly clear what is believed to be a consequence of the rest of this License.

8. If the distribution and/or use of the Program is restricted in certain countries either by patents or by copyrighted interfaces, the original copyright holder who places the Program under this License may add an explicit geographical distribution limitation excluding those countries, so that distribution is permitted only in or among countries not thus excluded. In such case, this License incorporates the limitation as if written in the body of this License.

9. The Free Software Foundation may publish revised and/or new versions of the General Public License from time to time. Such new versions will be similar in spirit to the present version, but may differ in detail to address new problems or concerns.

Each version is given a distinguishing version number. If the Program specifies a version number of this License which applies to it and "any later version", you have the option of following the terms and conditions either of that version or of any later version published by the Free Software Foundation. If the Program does not specify a version number of this License, you may choose any version ever published by the Free Software Foundation.

10. If you wish to incorporate parts of the Program into other free programs whose distribution conditions are different, write to the author to ask for permission. For software which is copyrighted by the Free Software Foundation, write to the Free Software Foundation; we sometimes make exceptions for this. Our decision will be guided by the two goals of preserving the free status of all derivatives of our free software and of promoting the sharing and reuse of software generally.

NO WARRANTY

11. BECAUSE THE PROGRAM IS LICENSED FREE OF CHARGE, THERE IS NO WARRANTY FOR THE PROGRAM, TO THE EXTENT PERMITTED BY APPLICABLE LAW. EXCEPT WHEN OTHERWISE STATED IN WRITING THE COPYRIGHT HOLDERS AND/OR OTHER PARTIES PROVIDE THE PROGRAM "AS IS" WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EITHER EXPRESSED OR IMPLIED, INCLUDING, BUT NOT LIMITED TO, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY AND FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. THE ENTIRE RISK AS TO THE QUALITY AND PERFORMANCE OF THE PROGRAM IS WITH YOU. SHOULD THE PROGRAM PROVE DEFECTIVE, YOU ASSUME THE COST OF ALL NECESSARY SERVICING, REPAIR OR CORRECTION.

12. IN NO EVENT UNLESS REQUIRED BY APPLICABLE LAW OR AGREED TO IN WRITING WILL ANY COPYRIGHT HOLDER, OR ANY OTHER PARTY WHO MAY MODIFY AND/OR REDISTRIBUTE THE PROGRAM AS PERMITTED ABOVE, BE LIABLE TO YOU FOR DAMAGES, INCLUDING ANY GENERAL, SPECIAL, INCIDENTAL OR CONSEQUENTIAL DAMAGES ARISING OUT OF THE USE OR INABILITY TO USE THE PROGRAM (INCLUDING BUT NOT LIMITED TO LOSS OF DATA OR DATA BEING RENDERED INACCURATE OR LOSSES SUSTAINED BY YOU OR THIRD PARTIES OR A FAILURE OF THE PROGRAM TO OPERATE WITH ANY OTHER PROGRAMS), EVEN IF SUCH HOLDER OR OTHER PARTY HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES.

END OF TERMS AND CONDITIONS

How to Apply These Terms to Your New Programs

If you develop a new program, and you want it to be of the greatest possible use to the public, the best way to achieve this is to make it free software which everyone can redistribute and change under these terms.

To do so, attach the following notices to the program. It is safest to attach them to the start of each source file to most effectively convey the exclusion of warranty; and each file should have at least the "copyright" line and a pointer to where the full notice is found.

```
<one line to give the program's name and a brief idea of what it does.>  
Copyright (C) 19yy <name of author>
```

```
This program is free software; you can redistribute it and/or modify  
it under the terms of the GNU General Public License as published by  
the Free Software Foundation; either version 2 of the License, or  
(at your option) any later version.
```

```
This program is distributed in the hope that it will be useful,  
but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of  
MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the  
GNU General Public License for more details.
```

```
You should have received a copy of the GNU General Public License  
along with this program; if not, write to the Free Software  
Foundation, Inc., 59 Temple Place, Suite 330, Boston, MA 02111-1307 USA
```

Also add information on how to contact you by electronic and paper mail.

If the program is interactive, make it output a short notice like this when it starts in an interactive mode:

```
Gnomovision version 69, Copyright (C) 19yy name of author  
Gnomovision comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY; for details type `show w'.  
This is free software, and you are welcome to redistribute it  
under certain conditions; type `show c' for details.
```

The hypothetical commands 'show w' and 'show c' should show the appropriate parts of the General Public License. Of course, the commands you use may be called something other than 'show w' and 'show c'; they could even be mouse-clicks or menu items--whatever suits your program.

You should also get your employer (if you work as a programmer) or your school, if any, to sign a "copyright disclaimer" for the program, if necessary. Here is a sample; alter the names:

```
Yoyodyne, Inc., hereby disclaims all copyright interest in the program
'Gnomovision' (which makes passes at compilers) written by James Hacker.
```

```
<signature of Ty Coon>, 1 April 1989
Ty Coon, President of Vice
```

This General Public License does not permit incorporating your program into proprietary programs. If your program is a subroutine library, you may consider it more useful to permit linking proprietary applications with the library. If this is what you want to do, use the GNU Library General Public License instead of this License.

7.2 Durchführung der Installation

Bei der Erstinstallation von QUIRA muß zunächst ein SETUP durchgeführt werden, und zwar durch Aufruf von setup unter dem Ursprungsverzeichnis der mitgelieferten CD-ROM. Nach erfolgreicher Durchführung ist in einem zweiten Schritt Qinstall.exe aufzurufen, das sich ebenfalls unter dem Ursprungsverzeichnis der mitgelieferten CD-ROM befindet. Mit Qinstall wird die QUIRA-spezifische Directory-Struktur eingerichtet, wobei zusätzlich bestimmte Parameter und Wunscheinstellungen abgefragt werden. Soll an diesen Einstellungen später etwas geändert werden, so kann Qinstall.exe jederzeit (beliebig oft) wieder aufgerufen werden.

Während des Ablaufs von Qinstall.exe werden folgende Punkte abgefragt:

1. Operator-Name
Es muß der Operator eingegeben werden, der die Installation durchführt. Dies wird in der log-Datei (siehe unten) protokolliert.
2. Lizenzbedingungen
Der Anwender wird auf die Lizenzbedingungen (siehe oben) hingewiesen. Erst nach Anerkenntnis derselben kann die weitere Installation durchgeführt werden.
3. „In welches Directory soll QUIRA installiert werden?“
Sollte in dem entsprechenden Directory schon eine QUIRA-Version installiert sein, so werden durch die neue Installation die vom Benutzer bereits angelegten Daten **nicht** überschrieben. Soll eine völlige Neuinstallation ohne Übernahme alter Daten erfolgen, so muß ein neues oder leeres Directory angegeben werden.

Bei der Eingabe des Directories ist zu beachten, daß das übergeordnete Directory existieren muß, da das Programm sonst mit einer Fehlermeldung abbricht.

Ist das angegebene Directory noch nicht vorhanden, so erfolgt vor Anlegen desselben die Frage: „Soll das Directory angelegt werden?“

4. „Auf welches Directory soll im Falle von QUANT+-Methoden zurückgegriffen werden?“
Voreinstellung ist c:\quant\pcr\methods.
5. „Auf welches Directory soll im Falle von Beer-Methoden²⁶ zurückgegriffen werden?“
Voreinstellung ist c:\pel_data\quant\methods.
6. „Sollen die aufgenommenen Analysenspektren nach dem Datum benannt und automatisch inkrementiert werden?“
Es kann ein Format nach dem Schema Tag/Monat/Jahr (tt,mm,jj) ausgewählt werden, z.B. ttmmjj oder jjmmtt etc. Die Spektren und auch die zugehörigen Ergebnisdateien werden nach dem gewählten Datumsformat und einer laufenden Nummer benannt, z.B. ist (im Falle des Formats ttmmjj) '09050712.sp' das 12. am 9. Mai 2007 aufgenommene Probenspektrum. Die zugehörige Ergebnisdatei heißt dann '09050712.res'. Wird diese Frage verneint, so richten sich die Dateinamen für Spektren und Ergebnisse nach einer explizit einzugebenden Probennummer.
7. „Sollen beim späteren Betrieb von QUIRA für die Analysenspektren materialspezifische Directories eingerichtet werden?“
Falls die Frage mit ja beantwortet wird, erfolgt die Abspeicherung von Analysenspektren unter Unterdirectories, die jeweils nach den Kurz-Material-Nummern benannt sind. Die Einrichtung eines entsprechenden Unterdirectories erfolgt jeweils bei der ersten Aufnahme eines Analysenspektrums des betreffenden Materials.
8. „Sollen die aufgenommenen Schichtdickenspektren nach dem Datum benannt und automatisch inkrementiert werden?“
Es gilt das gleiche wie unter Punkt ???. Wird diese Option nicht gewählt, so richten sich die Dateinamen für Spektren und Ergebnisse nach der entsprechenden Küvetten-Nummer.
9. „Soll im Formular für die Analysenerstellung nach der Langmaterialnummer gesucht werden?“
Wird diese Frage bejaht, so kann im Formular für den Analysenauftrag das Feld für die Langmaterial-Nummer vom Operator beschrieben werden. Die Langmaterial-Nummer wird dann entsprechend gesucht. Wenn diese gefunden worden ist, erscheint die zugehörige Kurzmaterial-Nummer im entsprechenden Feld.

²⁶Beer-Methoden lassen sich unter Quant 3.1 nicht automatisch einbinden.

10. „Wird QUIRA unter WINDOWS NT/2000/XP betrieben?“
Bitte geben Sie hierbei das Betriebssystem an, das Sie verwenden. Falls diese Frage mit nein beantwortet wird, erfolgt noch eine Abfrage ob Windows ME verwendet wird.
11. „Ist Ihr Rechner mit einem Gerät des Typs SPECTRUM ONE gekoppelt?“
Bitte bejahen Sie diese Frage, wenn Sie ein SPECTRUM ONE (IR) benutzen.
12. Falls bereits ein Logo existiert, werden Sie zunächst darauf aufmerksam gemacht und dann gefragt, ob Sie es mit dem aktuell auf der ausgelieferten CD-ROM vorhandenen Logo überschreiben wollen.
13. „Wieviel Menü-Directories wollen Sie einrichten?“
Richten Sie bitte mindestens so viele QUIRA-Menü-Directories ein wie Sie später QUIRA-Menüpunkte benötigen. Die maximal zulässige Zahl ist 100. Es sind nur ganzzahlige Vielfache von 5 erlaubt, was aber durch das Installationsprogramm automatisch berücksichtigt wird.
14. „Wieviel Bibliotheks-Directories wollen Sie einrichten?“
Richten Sie bitte mindestens so viel QUIRA-Bibliotheks-Directories ein wie Sie später unterschiedliche QUIRA-Bibliotheken erzeugen wollen. Die maximal zulässige Zahl ist 100. Es sind nur ganzzahlige Vielfache von 5 erlaubt, was aber durch das Installationsprogramm automatisch berücksichtigt wird.
15. „Sollen die bei der Installation kopierten Daten auf dem Bildschirm gemeldet werden?“
Dies ist nicht erforderlich. Falls Sie die Frage jedoch bejahen, so wird jede einzelne kopierte Datei in einer Message-Box gemeldet, die Sie zum Fortfahren durch RETURN oder OK quittieren müssen.
16. „Sollen die bestehenden *.exe-Files gesichert werden?“
Dies ist im allgemeinen nicht erforderlich.

Während des Ablaufs von Qinstall.exe wird unter dem QUIRA-Directory eine Protokoll-Datei 'qinst.log' geschrieben, in welcher die durchgeführten Schritte dokumentiert wird.

Nach jeder Durchführung von Qinstall.exe sollte das CONFIG-Programm²⁷ aufgerufen werden, um die Datei quira.ini zu aktualisieren und um wichtige Einstellungen noch einmal zu überprüfen!

Nach der Erstinstallation sollten die ausführbaren Programme 'quira.exe' und 'qutil.exe', die sich nun unter dem QUIRA-Verzeichnis befinden, jeweils mit einer Ikone²⁸ verknüpft werden, so daß sie vom Desktop aus durch Anklicken gestartet werden können. Geeignete Ikonen (diverse Q's auf farbigem Untergrund) finden Sie unter dem QUIRA-Verzeichnis „images“.

²⁷ über den Menüpunkt „Spezifische Geräteeinstellungen“ unter QUTIL

²⁸ Die Ikone für CONFIG wird von SETUP automatisch kreiert.

8 Bekannte Bugs und mögliche Störungen

Unter Windows kann es zu folgendem Fehler kommen: Nachdem mit Quira ca. 20 Analysen durchgeführt wurden, ohne Quira zwischendurch zu verlassen, erfolgt die Fehler-Meldung: „error 7: out of memory“. Dieser Fehler ist systembedingt und lässt sich nicht vermeiden.²⁹ Der Benutzer wird daher nach 12 Quira-Läufen aufgefordert, Quira zu beenden und neu zu starten. Sollte der Fehler dennoch einmal unter Windows 2000,NT,XP auftreten, so kann Quira einfach neu gestartet werden.

Sollte nach längerer Standzeit nach dem Starten von Quira eine Kommunikation mit dem Gerät nicht möglich sein, so ist dies auszuschalten und nach einigen Sekunden Wartezeit wieder einzuschalten.

Sollte es einmal nicht möglich sein, nach bereits aufgenommenen Background und fertig präparierter Probe (z.B. mit Probe belegter ATR-Kristall) wegen gestörter Kommunikation mit dem IR-Gerät ein Spektrum aufzunehmen, so kann nach dem Neustart von Quira bei der Abfrage nach der Aufnahme des Backgrounds auf eine Background-Aufnahme verzichtet werden. Es wird dann der zuletzt abgespeicherte Background verwendet³⁰. Auf diese Weise kann ein Spektrum aufgenommen werden, ohne dass man die Probe (wegen einer vorhergehenden Backgroundaufnahme) neu präparieren muss.

²⁹Dieser Fehler tritt nicht unter Windows ME auf. Es empfiehlt sich daher beim Betrieb von QUIRA unter Windows 98 auf Windows ME aufzurüsten!

³⁰In diesem Fall ist allerdings Monitoring und Reinheitskontrolle des Kristalls nicht möglich.