

Manual de usuario AllSpec.

AllSpec está diseñado como un software gratuito y de libre acceso, cuya función es ayudar a los estudiantes e investigadores al procesamiento de datos (respuestas físicas) de diferentes técnicas espectroscópicas.

Actualmente cuenta con 5 módulos de tratamiento:

Espectroscopía UV-Vis:

Formatos aceptados ([".csv"](#), [".ascii"](#), [".dat"](#), [".sp"](#)).

Infrarrojo (IR):

Formatos aceptados ([".asc"](#), [".txt"](#)).

Fluorescencia:

Formatos aceptados ([".sp"](#)).

Difracción de rayos X de polvos (DRX):

Formatos aceptados ([".csv"](#), [".uxd"](#), [".dat"](#), [".txt"](#), [".csv"](#)).

Técnicas electroquímicas: voltamperometría cíclica, lineal, de disco rotatorio y cronoamperometría.

Formatos aceptados ([".csv"](#), [".txt"](#), [".dat"](#), [".sp"](#)).

Las funcionalidades generales son:

1. Carga múltiple de datos.
2. Visualización de los datos cargados.
3. Manipulación de los ejes y títulos.
4. Exportación de los datos unidos en un solo archivo ([".csv"](#)).
5. Exportación de imagen ([".JPG"](#)).

Índice.

- (1) La interfaz ... pg. (3)
- (2) Módulo UV-Vis ... pg. (4-11)
- (3) Módulo de Fluorescencia ... pg. (12-14)
- (4) Módulo de Infrarrojo ... pg. (14-17)
- (5) Módulo de Voltamperometría ... pg. (18-21)
- (6) Módulo de DRX ... pg. (21-23)

1. La interfaz

Fue diseñada para ser amigable con el usuario, donde cada botón de la idea de su función. En la **Fig. 1**, se muestra el menú principal contando con 5 botones para la selección de la técnica, y uno adicional en la esquina superior derecha para mostrar más información (en proceso).

Es posible visitar la página de nuestro departamento y conocer mas acerca de nosotros al presionar el logo en la esquina inferior izquierda.



Figura 1. Menú principal del programa AllSpec.

A continuación, el usuario puede seleccionar el tipo de análisis que desea realizar:

- **UV-Vis**
- **Fluorescencia**
- **Infrarrojo (IR)**
- **Voltamperometría**
- **Difracción de Rayos X (DRX)**

2. Módulo UV-Vis.

Al seleccionar la técnica UV-Vis (**Fig. 2**).

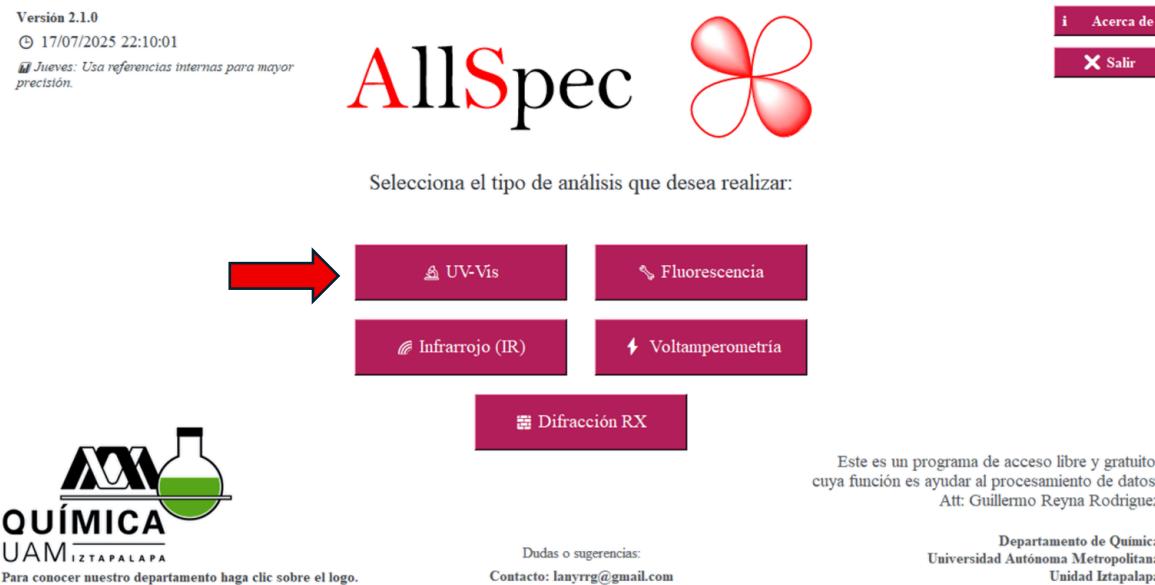


Figura 2. Selección del módulo de UV-Vis.

Se desplegará una nueva interfaz especializada para el análisis de espectros de absorción ultravioleta-visible (**Fig. 3**).

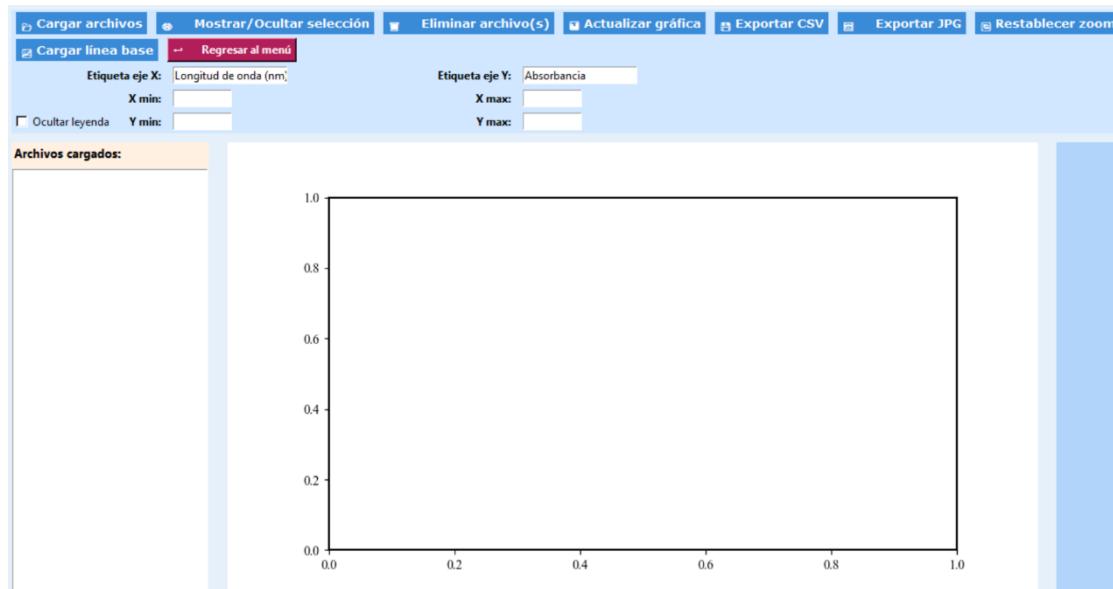


Figura 3. Interfaz del módulo UV-Vis.

Funciones principales

Cargar archivos: Permite importar múltiples espectros UV-Vis en formatos compatibles, descritos anteriormente.

Al presionar el botón (Cargar archivos), se desplegará la siguiente ventana (**Fig. 4**), ventana que permitirá la selección múltiple de archivos).

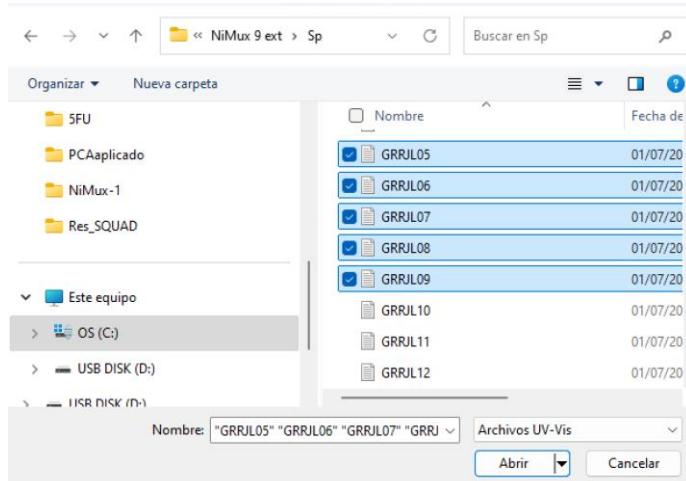


Figura 4. Ventana emergente para la carga múltiple de archivos.

Una vez cargados los archivos, estos aparecen inmediatamente tanto en la gráfica como en la sección de archivos cargados (**Fig. 5**).

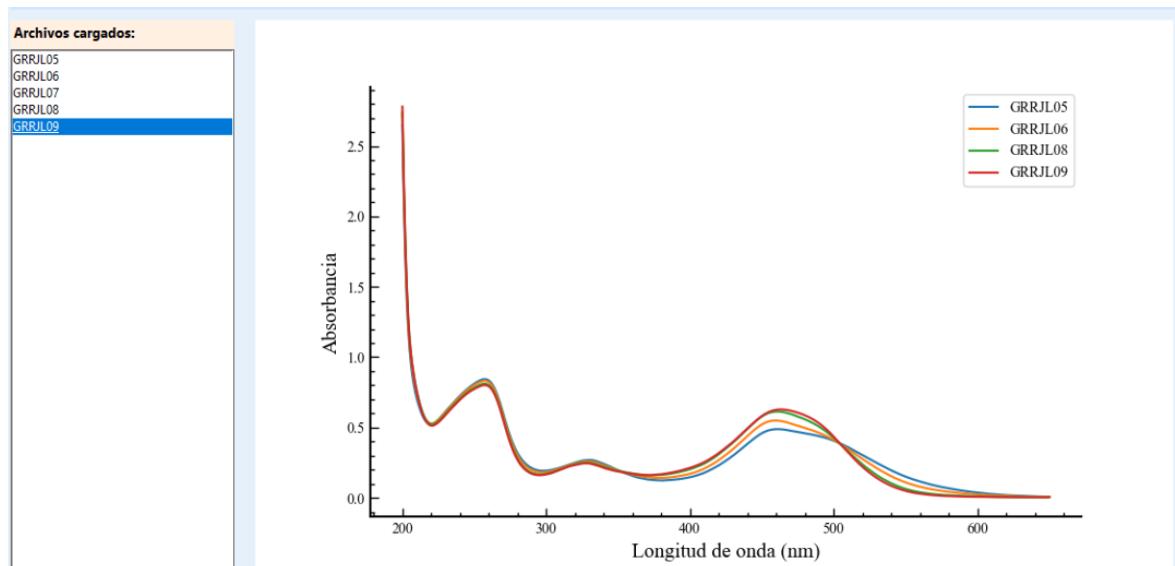


Figura 5. Sección izquierda (Archivos cargados) y sección derecha (gráfica) .

Mostrar/Ocultar selección: Controla la visualización individual de los espectros cargados.

Al presionar el botón (Mostrar/Ocultar selección), se ocultarán los archivos seleccionados (**Fig. 6**), en caso de no seleccionar archivos, un mensaje se desplegará advirtiendo la falta de archivos seleccionados. Una vez ocultos es posible revertir el proceso seleccionando los espectros ocultos y volviendo a presionar el botón.

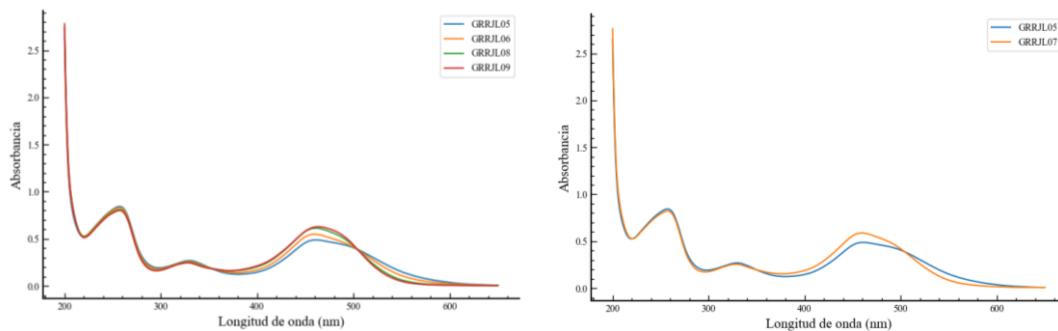


Figura 6. Comparativa gráfica de la función ocultar, del lado izquierdo (archivos cargados) y del lado derecho función activa (ocultar archivos).

Eliminar archivo(s): Elimina uno o varios archivos seleccionados del análisis.

Al presionar el botón (Eliminar archivo(s)), se eliminarán los archivos previamente seleccionados, función similar a ocultar/mostrar, un mensaje se presentará previo a la eliminación (**Fig. 7**).

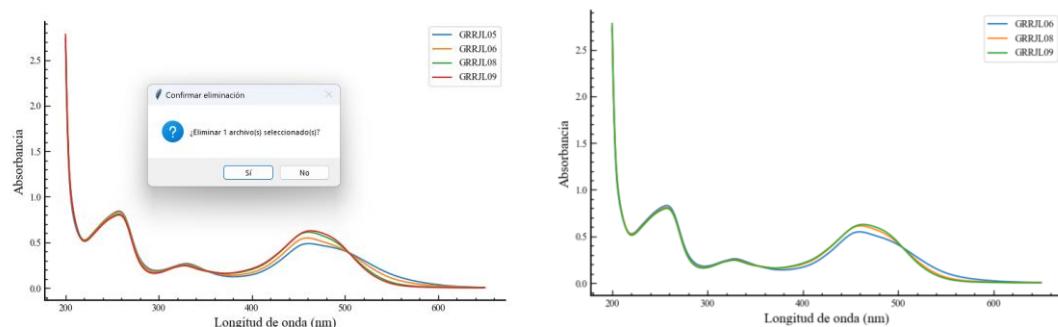


Figura 7. Interfaz para la técnica de UV-Vis.

Cargar línea base (Blanco): Incorpora un espectro de corrección para realizar una resta automática sobre todos los espectros cargados.

Nota* Esta función no es necesaria

Al presionar el botón (Cargar línea base), se desplegará una ventana donde se seleccionará el archivo base (**Fig. 8**), archivo que restará a cada una de las muestras ya graficadas (**Fig. 9**).

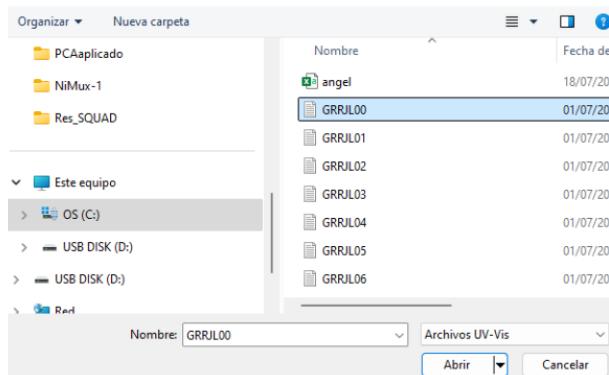


Figura 8. Interfaz para la técnica de UV-Vis.

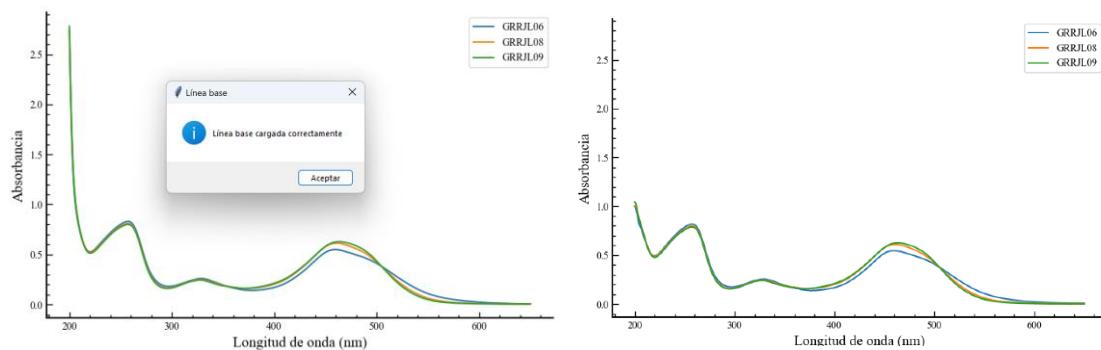


Figura 9. Comparativa gráfica para la opción (cargar línea base), del lado izquierdo la gráfica original y del lado derecho la gráfica posterior a la carga.

Manipular ejes y actualizar gráfica:

En los cuadros interactivos (**Fig. 10**)

X min:
Y min: X max:
Y max:

Figura 10. Cuadros interactivos presentes en los diferentes módulos para la manipulación de los ejes.

Es posible imponer nuevos límites a la gráfica, esta función no altera los datos de exportación ni manipula directamente los datos. Su función principal es con respecto a la generación de la imagen o visualización del usuario.

Una vez digitado los nuevos valores a graficar, es necesario presionar el botón **Actualizar gráfica**, inmediatamente los nuevos valores de los ejes serán representados (**Fig. 11**).

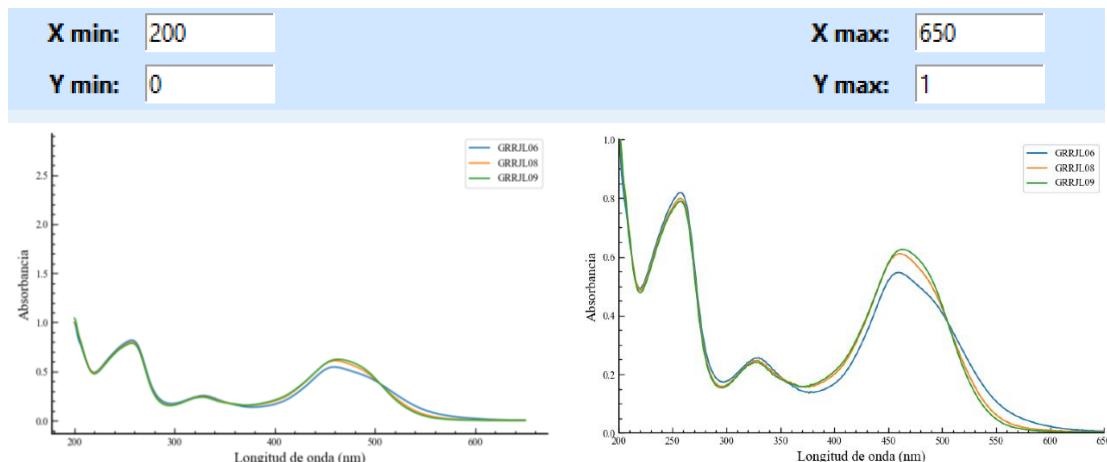


Figura 11. Comparativa gráfica para la manipulación manual de las entradas en los ejes “X” y “Y”.

Exportar CSV: Exporta los datos procesados en formato tabular para análisis posterior. Esta es una de las funciones más importantes del programa.

Al presionar el botón (Exportar CSV), se desplegará una ventana donde deberá nombrar su archivo de salida (**Fig. 12**).

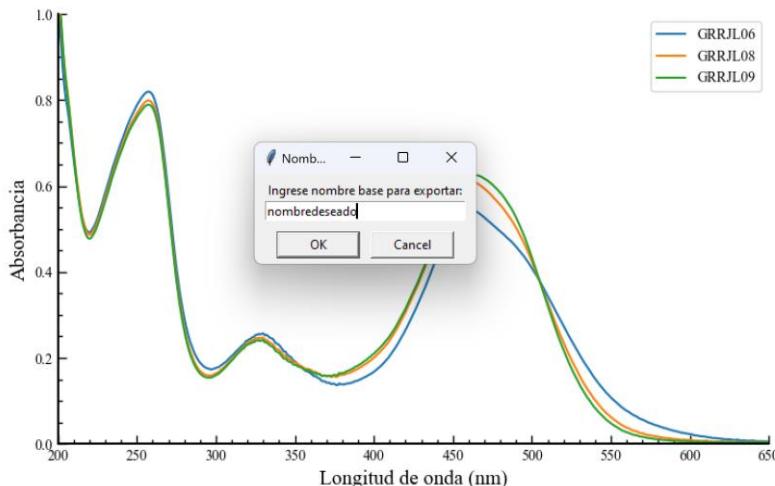


Figura 12. Ventana emergente perteneciente a la función exportar datos, se debe colocar el nombre del archivo de salida.

El formato de salida se muestra a continuación (**Fig. 13**), su implementación permitiría la estandarización de resultados de salida, además de mantener un orden en la exportación de datos.

A	B	C	D	
1	Longitud_de	GRRJL06	GRRJL08	GRRJL09
2	200	1.033913	1.018681	1.063078
3	201	0.940161	0.976237	1.012377
4	202	0.905995	0.95932	0.963932
5	203	0.881323	0.928722	0.9293
6	204	0.856453	0.901573	0.899535
7	205	0.82521	0.866603	0.863193
8	206	0.793586	0.831588	0.82653
9	207	0.761961	0.796218	0.788437
10	208	0.730206	0.7556	0.751579
11	209	0.69679	0.718877	0.713388
12	210	0.663616	0.682285	0.674938

Figura 13. Ejemplo del archivo de salida, de las celdas A2-An se encuentran las longitudes de onda, cada columna representa el conjunto de datos ingresados.

Exportar JPG: Guarda la gráfica actual (Con leyenda si, zoom, etc.) como imagen en formato ".jpg".

Al presionar el botón (Exportar JPG), se desplegará una pestaña donde podrá elegir la ruta y el nombre de su imagen (**Fig. 14**).

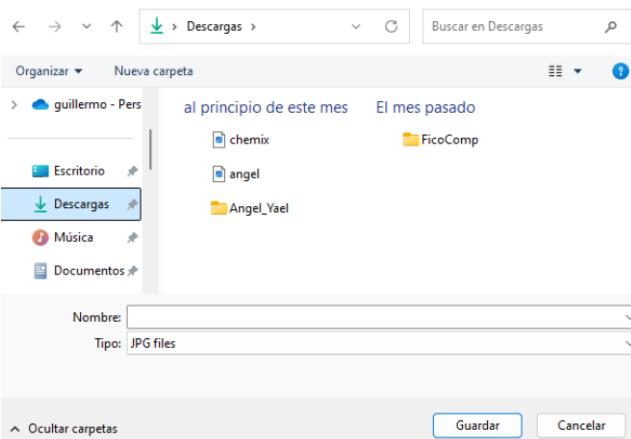


Figura 14. Ventana emergente para definir el nombre y la ruta donde almacenará su imagen .

Restablecer zoom: Restaura los ejes de la gráfica a sus valores originales (**Fig. 15**).

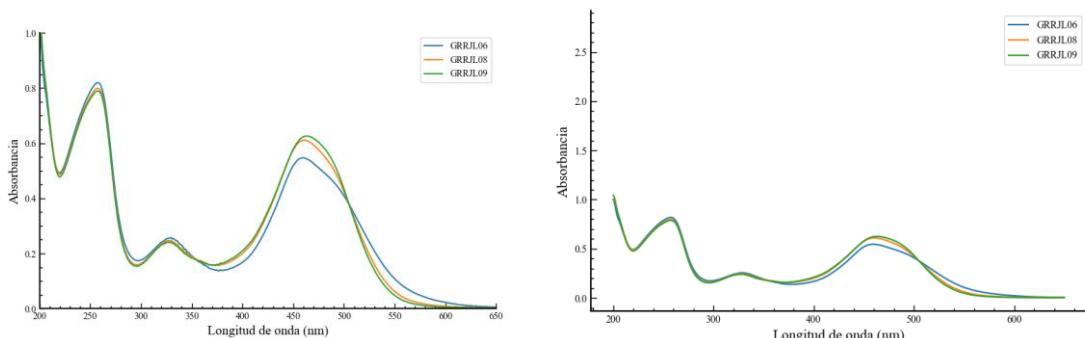


Figura 15. Comparación gráfica de la función reestablecer zoom.

Personalización

Es posible personalizar :

Etiquetas de los ejes X e Y: Permite definir los nombres de los ejes (por defecto: Longitud de onda y Absorbancia).

Límites personalizados: El usuario puede fijar los valores mínimo y máximo de los ejes X e Y para ajustar la visualización.

Ocultar leyenda: Si se desea, la leyenda puede ocultarse para una presentación más limpia (Imagen).

Explorador de archivos

A la izquierda, se muestra un listado de los archivos cargados. Desde allí, se pueden seleccionar, ocultar, mostrar o eliminar espectros de forma individual (**Fig. 16**).

Archivos cargados:

09Abril25CC10002_DP
09Abril25CC10003_DP
09Abril25CC10004_DP
09Abril25CC10005_DP
09Abril25CC10006_DP

Figura 16. Sección para realizar modificaciones.

Zona de gráfica

La región principal de la derecha presenta los espectros cargados en un eje X/Y completamente configurable. La visualización admite zoom, personalización estética y exportación (**Fig. 17**).

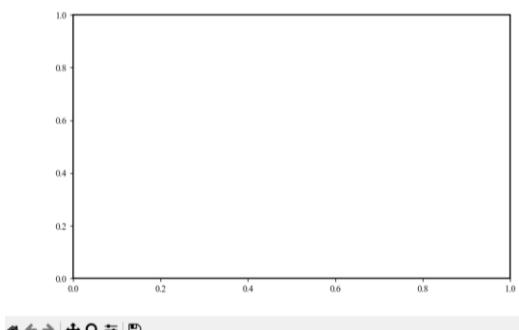


Figura 17. Gráfica en blanco, en esta sección aparecerán los datos cargados.

3. Módulo Fluorescencia.

Al seleccionar la técnica Fluorescencia desde el menú principal
(Fig. 18)



Figura 18. Selección de la técnica de Fluorescencia.

Se desplegará una nueva ventana especializada en el tratamiento de espectros de emisión molecular (**Fig. 19**).

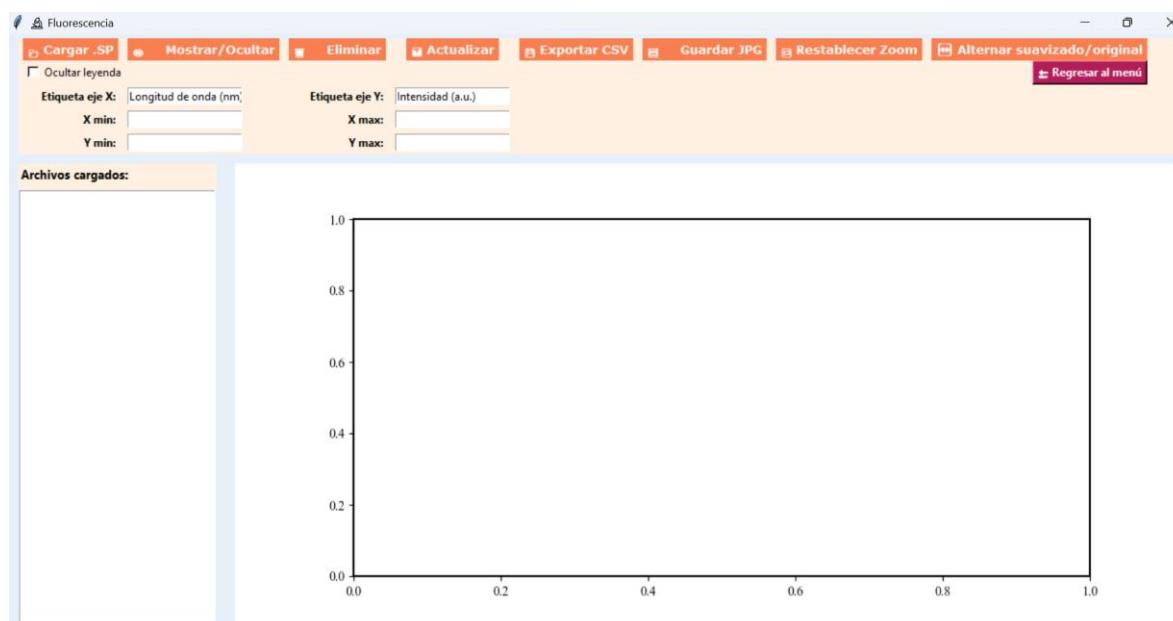


Figura 19. Interfaz del módulo Fluorescencia.

Funciones específicas:

Alternar suavizado/original: Una vez cargados los archivos, al presionar el botón, los datos serán tratados bajo un suavizado tipo Savitzky-Golay y serán mostrados en la gráfica (**Fig. 20**).

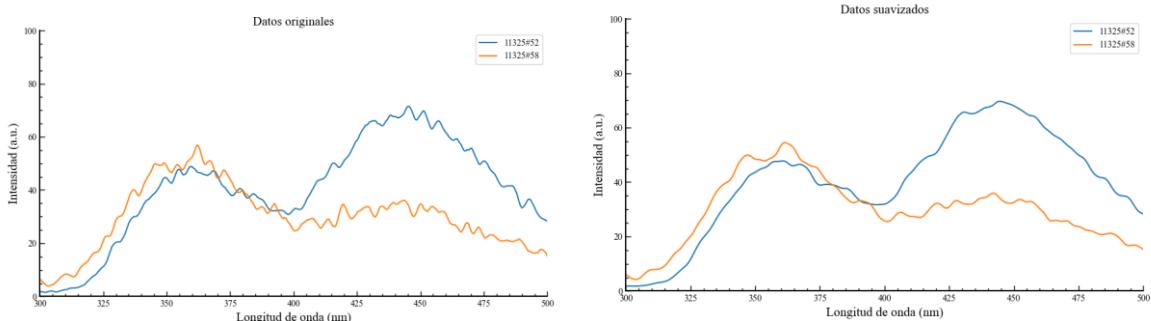


Figura 20. Comparación entre los espectros originales (izquierda) y suavizados (derecha).

Funciones del módulo similares al módulo UV-Vis:

Cargar archivos: Permite importar uno o más espectros de fluorescencia en formato únicamente ".SP", se planea ampliar a futuro.

Mostrar/Ocultar selección: Controla qué espectros se visualizan en la gráfica.

Eliminar archivos: Elimina los espectros seleccionados de la lista activa.

Actualizar: Refresca la visualización después de realizar cambios en ejes.

Exportar CSV: Exporta los datos suavizados y originales en dos archivos separados ".csv".

Guardar JPG: Guarda la gráfica actual como archivo ".JPG".

Restablecer zoom: Restaura los límites originales de la gráfica en caso de haber realizado zoom o cambios manuales a los ejes.

Etiquetas de ejes X e Y: Por defecto, el eje X representa la longitud de onda (nm) y el eje Y la intensidad de fluorescencia, pero ambos pueden editarse según necesidad.

Límites de los ejes: Posibilidad de ajustar manualmente los valores mínimo y máximo de los ejes para una visualización precisa.

Ocultar leyenda: Mejora la presentación cuando se requiere un diseño más limpio.

Explorador de archivos: Lista de todos los archivos cargados, desde donde se puede acceder a su visualización, edición o eliminación.

4. Módulo Infrarrojo.

Al seleccionar la técnica **Infrarrojo** desde el menú principal (**Fig. 21**).

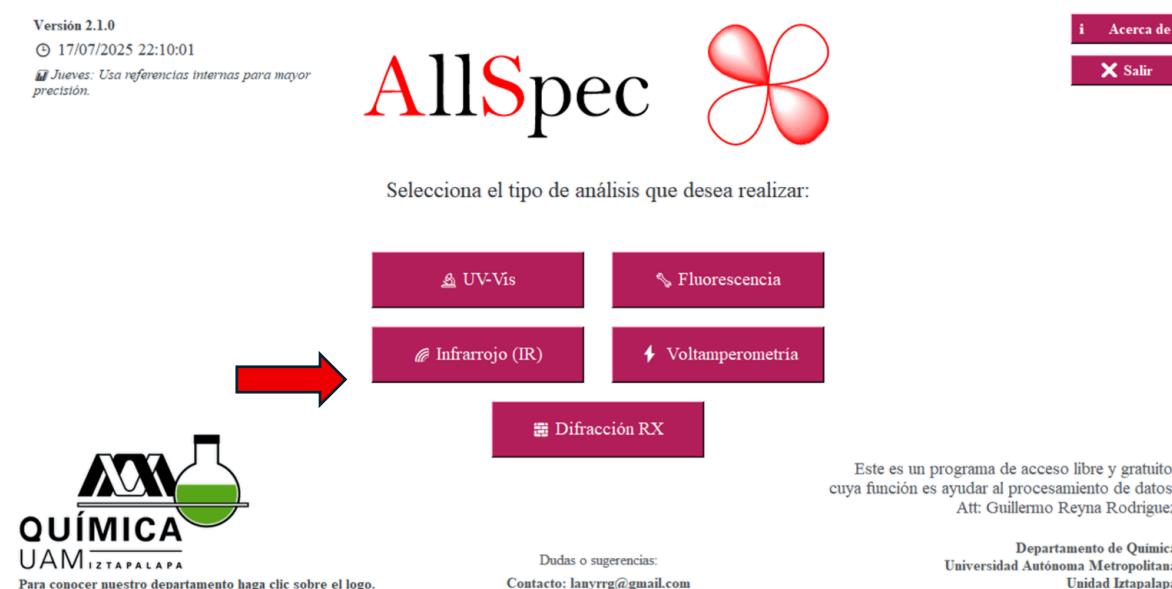


Figura 21. Selección de la técnica Infrarrojo.

Se desplegará una ventana especializada en el análisis de espectros obtenidos por espectroscopía infrarroja (**Fig. 22**).



Figura 22. Interfaz del módulo Infrarrojo.

Funciones específicas:

Cambiar color: Permite modificar el color de tu espectro, para hacer uso de esta función se debe seleccionar el espectro a modificar. Al presionar el botón, se desplegará una ventana para elegir el color deseado (**Fig. 23**), al presionar aceptar el color cambiará automáticamente (**Fig. 24**).

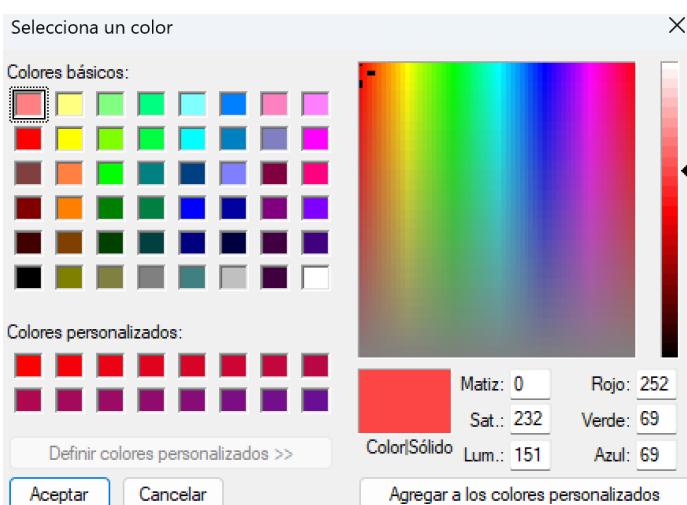


Figura 23. Ventana emergente para la selección del color del espectro seleccionado.

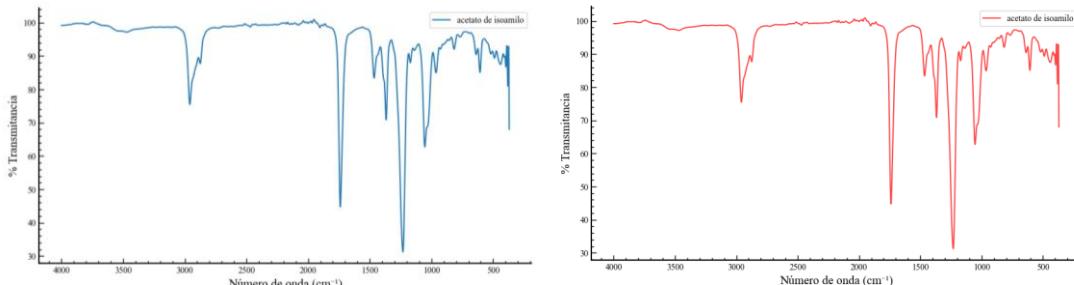


Figura 24. Comparación de las gráficas previo a cambiar color (izquierda) y posterior (derecha).

Detectar picos: Permite la detección automática de los mínimos locales, para hacer uso de esta función es seleccionar previamente el espectro a visualizar. Al presionar el botón , se desplegará una ventana que mostrará los picos detectados, es importante corroborar gráficamente si estos son significativos, además se permite exportar una tabla en formato “.csv” con los picos y sus posiciones.

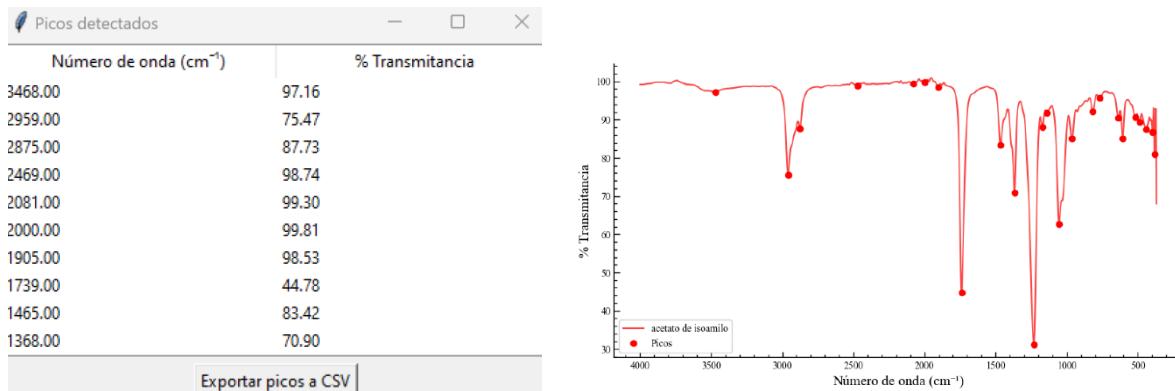


Figura 24. Tabla en pestaña emergente donde se presentan los valores en número de onda y % Transmitancia junto a la gráfica con puntos en los picos.

Funciones del módulo similares al módulo UV-Vis:

Cargar archivos (IR): Permite importar uno o más espectros de infrarrojo.

Mostrar/Ocultar: Controla qué espectros se visualizan en la gráfica activa para facilitar comparaciones o limpieza visual.

Eliminar archivos: Quita de la lista los espectros seleccionados que ya no se deseen visualizar o analizar.

Actualizar gráfica: Refresca la visualización para aplicar los cambios realizados, como ajuste de ejes o archivos cargados.

Exportar CSV

Exportar JPG: Permite guardar los datos analizados en formato tabular (.csv) o exportar la gráfica como imagen (.jpg) para reportes o presentaciones.

Restablecer zoom: Restaura la vista original de la gráfica en caso de haber aplicado zoom o desplazamientos.

Personalización:

Etiquetas de ejes X e Y: Por defecto, el eje X representa el número de onda (cm^{-1}) y el eje Y la % Transmitancia, pero ambos pueden ser editados para adaptarse a distintos tipos de espectros o preferencias del usuario.

Límites de los ejes: Posibilidad de ajustar manualmente los valores mínimos y máximos de los ejes X e Y para enfocar regiones específicas del espectro.

Ocultar leyenda: Opción para ocultar la leyenda de archivos y mejorar la presentación en casos donde se requiera un diseño más limpio o profesional.

Explorador de archivos:

En el panel izquierdo se muestra una lista de todos los archivos IR cargados. Desde aquí se puede gestionar su visualización, edición de nombre, o eliminación.

5. Módulo Voltamperometría.

Al seleccionar la técnica desde el menú principal (**Fig. 25**)

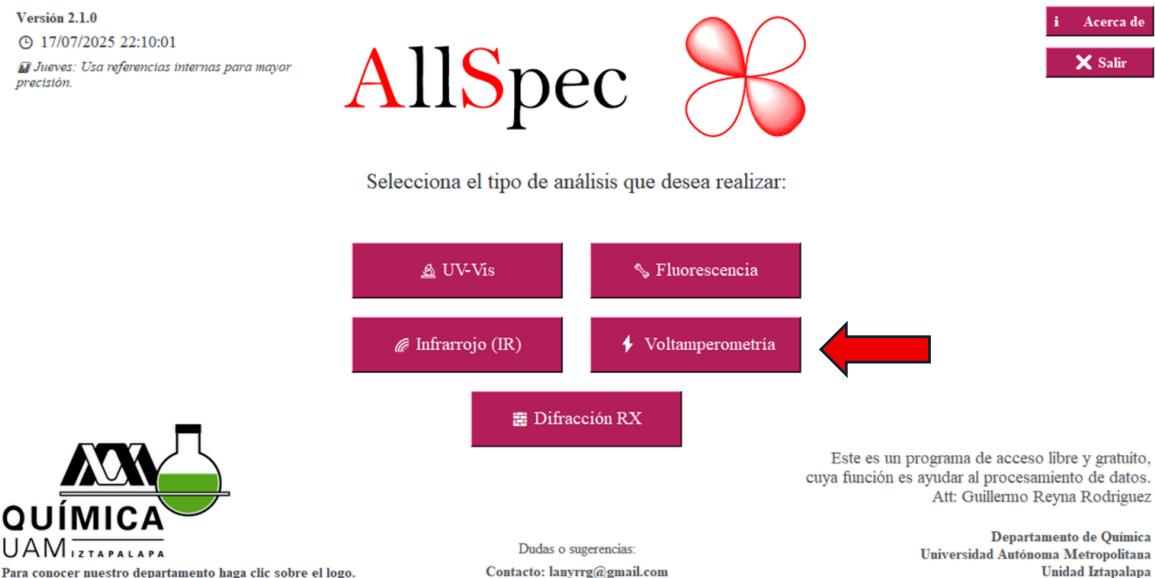


Figura 25. Selección del módulo Voltamperometría.

Se desplegará una nueva ventana especializada en el tratamiento de datos provenientes de las técnicas presentadas al inicio de este manual (**Fig. 26**).

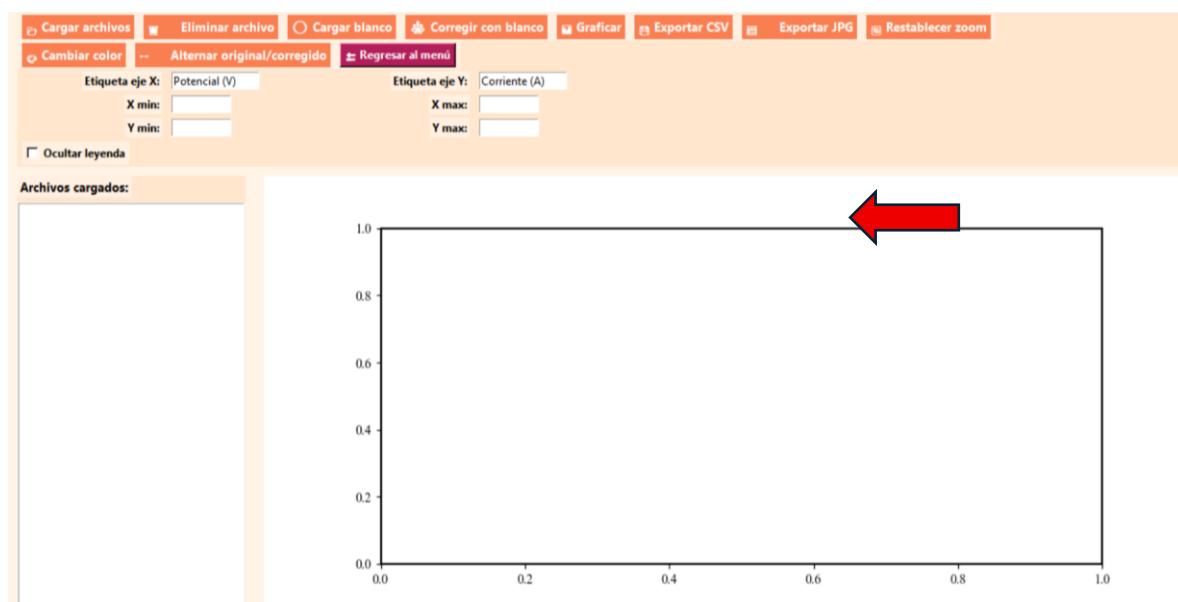


Figura 26. Interfaz del módulo Voltamperometría.

Funciones específicas:

Cargar blanco: Permite cargar un archivo (blanco) (**Fig. 27**), si es que lo hay el programa automáticamente realizará la resta sobre cada archivo cargado, la gráfica se deberá actualizar automáticamente (**Fig. 28**).

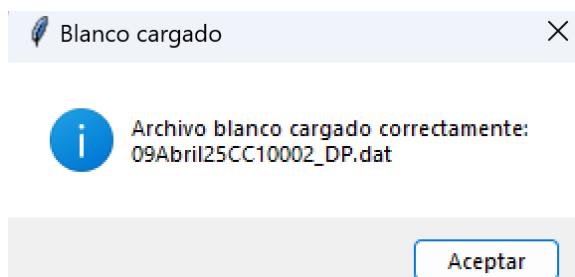


Figura 27. Ventana emergente tras la carga del archivo (Blanco).

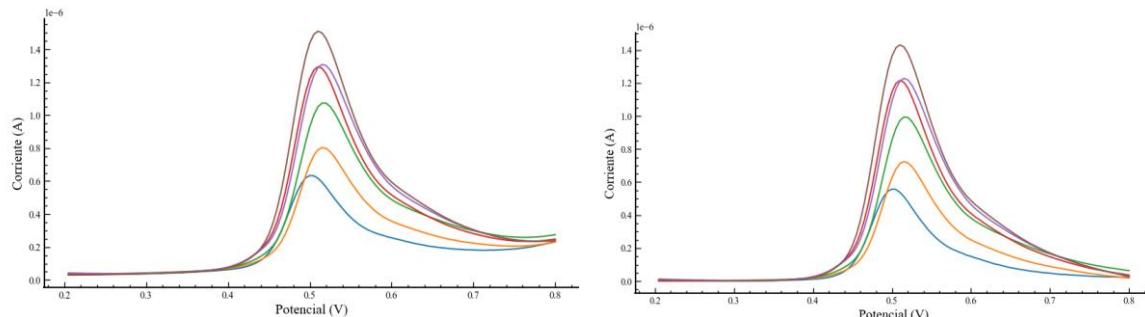


Figura 28. Comparación entre la gráfica con datos originales (izquierda) y la gráfica con resta del blanco (derecha).

Corregir con blanco: En caso de no ver actualización tras cargar el blanco, presione este botón.

Alternar original/corregido: Permite visualizar el espectro original o corregido (**Fig. 28**), útil para validar los efectos del procesamiento. Al presionar el botón aparecerá un mensaje dependiendo de la función actual (**Fig. 29**).

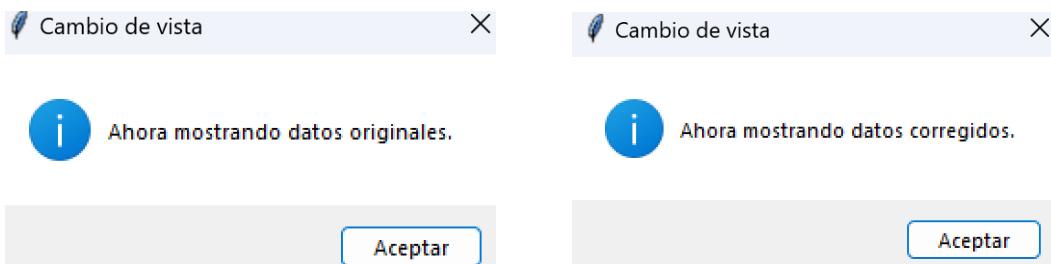


Figura 29. Ventanas emergentes para alternar entre los datos originales y corregidos.

Funciones del módulo similares al módulo UV-Vis:

Cargar archivos: Permite importar uno o más archivos de datos electroquímicos en formatos como .txt, .csv, .dat, etc.

Eliminar archivo: Elimina los archivos seleccionados de la lista para limpiar o reorganizar el análisis.

Cambiar color: Asigna colores personalizados a cada curva para facilitar la diferenciación entre experimentos.

Graficar: Genera o actualiza la visualización con base en los datos y parámetros seleccionados.

Exportar CSV: Exporta los datos originales en formato ".csv".

Exportar JPG: Guarda los datos procesados en un archivo de texto o exporta la gráfica como imagen, ideal para reportes y documentación.

Restablecer zoom: Restaura la vista inicial del gráfico después de haber hecho zoom o desplazado la vista.

Etiquetas de ejes X e Y: Por defecto, el eje X representa el Potencial (V) y el eje Y la Corriente (A), pero ambos pueden ser editados para ajustarse a distintas técnicas o presentaciones.

Límites de los ejes: Se pueden definir manualmente los valores mínimo y máximo de los ejes para enfocar áreas específicas del experimento.

Ocultar leyenda: Permite ocultar la leyenda para una presentación más limpia, especialmente útil cuando se trabaja con una sola curva o se desea exportar la imagen.

Explorador de archivos:

En el panel izquierdo se listan todos los archivos cargados. Desde ahí se puede gestionar su visualización, cambiar colores, alternar versiones corregidas u originales y eliminar elementos.

6. Módulo Difracción RX.

Al seleccionar el módulo desde el menú principal (**Fig. 30**)



Figura 30. Selección del módulo Difracción RX.

Se desplegará una ventana especializada para el tratamiento de patrones de difracción de polvos (**Fig. 31**).

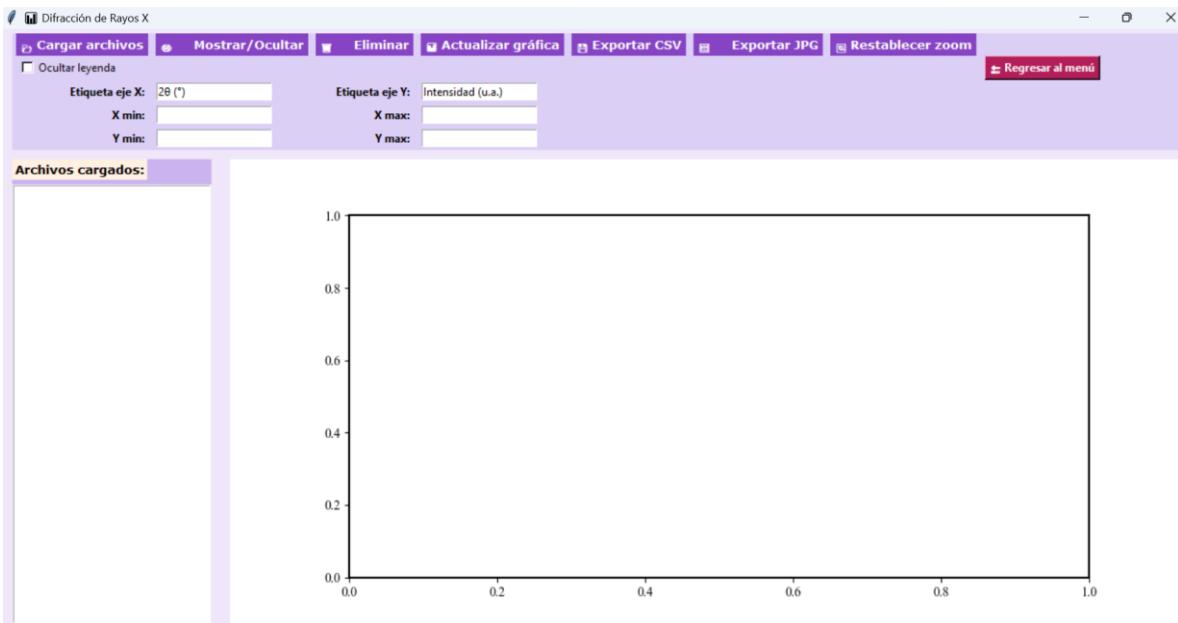


Figura 31. Interfaz del módulo Difracción de Rayos X.

Funciones del módulo similares al módulo UV-Vis:

Cargar archivos: Importa uno o más patrones de difracción para su análisis conjunto o individual.

Mostrar/Ocultar: Permite controlar qué patrones se visualizan en la gráfica, útil para comparar diferentes muestras o condiciones.

Eliminar archivos: Elimina los archivos seleccionados de la lista activa para limpiar la visualización o reorganizar el análisis.

Actualizar gráfica: Refresca la gráfica después de realizar cambios en etiquetas, límites o archivos cargados.

Exportar CSV: Exporta los datos de los gráficos actuales en formato ".csv".

Exportar JPG: Guarda la gráfica como imagen (.jpg).

Restablecer zoom: Restaura la vista original de la gráfica, útil después de hacer zoom sobre regiones específicas del patrón.

Etiquetas de ejes X e Y: De forma predeterminada, el eje X muestra el ángulo 2θ ($^{\circ}$) y el eje Y la Intensidad (u.a.), pero ambos pueden

editarse para adaptarse a otros tipos de datos o estilos de presentación.

Límites de los ejes: Posibilidad de ajustar manualmente los valores mínimo y máximo en los ejes X e Y, permitiendo un enfoque detallado en zonas de interés del patrón.

Ocultar leyenda: Opción para ocultar la leyenda de los archivos cargados.

Explorador de archivos: En el panel izquierdo se despliega una lista con todos los archivos DRX cargados, desde donde se pueden gestionar individualmente para mostrar, ocultar, eliminar o cambiar colores.