XRayAnalyzer

User manual

Popisné charakteristiky dokumentu

Projekt	XRayAnalyzer		v0.1.2
Dokument	Používateľská príručka		v1.0
Autor	František Pastorek frantisekpastorek@g		gmail.com
Odkaz	https://github.com/irelevant25/XRayAna	alyzer	

Contents

Úvod	3
Začíname	4
Spectrum processing	6
Load file	7
Peaks editing	11
Only select peak	12
Add peak	13
Edit peak bases	15
Remove peak	17
Search peaks	18
Data calibration	21
Background removal	27
Sum peaks removal	30
Net extraction	32
Analysis	34
Qualitative analysis	35
Quantitative analysis	38
Data	40
Elements line	41
Detector efficiencies	45
Fluorescent yields	49
Jump ratios	53
Xrav mass coefficients	57

Úvod

Dokument slúži ako používateľská príručka pre pochopenie jednotlivých funkcionalít a dosiahnutie cieleného výsledku pri práci so softvérom. V jednotlivých častiach dokumentu sú popísané kroky, ktoré je potrebné dodržať pre správne vyhodnotenie analýzy XRF dát spektra.

Začíname

Softvér vyžaduje operačný systém Windows 10 s odporúčaným rozlíšením aspoň full HD, teda 1920x1080. Samozrejme, výšku a šírku okna je možné si prispôsobiť, avšak pri veľkej redukcií predvolenej šírky, či výšky, môže dôjsť k artefaktom resp. k nesprávnemu zobrazeniu niektorých komponentov používateľského rozhrania. Odporúčaná minimálna šírka okna 1600 a výška 1200.

Pred použitím softvéru je nevyhnutné disponovať vstupnými dátami vo formáte MCA, prípadne z JSON, ak používateľ už v minulosti softvér použil a výstup uložil. Dáta musia obsahovať informácie o spektre a súbor nesmie byť poškodený, prípadne musí byť validný podľa formátu, ktorý reprezentuje. Je to minimálna požiadavka pre správne načítanie súboru.

Pri práci so softvérom je nutné zachovať postupnosť krokov spracovania spektra pre správne fungovanie a následné určenie chemického zloženia skúmanej vzorky:

- 1. Načítanie súboru "Select file" v časti "Spectrum processing" v obrazovke "Load file".
- 2. Pridanie píkov "Add peak" v časti "Spectrum processing" v obrazovke "Peak editation".
- 3. Energetická kalibrácia "Calibration" v časti "Spectrum processing" v obrazovke "Data calibration".
- 4. Detekcia (odstránenie) pozadia <u>(voliteľný krok)</u> "**Background remove**" v časti "**Spectrum processing**" v obrazovke "**Background removal**".
- 5. Odstránenie sumačných píkov <u>(voliteľný krok)</u> "**Sum peaks remove"** v časti "**Spectrum processing"** v obrazovke "**Sum peaks removal"**.
- 6. Výpočet plôch píkov "Net area" v časti "Spectrum processing" v obrazovke "Net extraction".
- 7. Kvalitatívna analýza "Qualitative analysis" v časti "Analysis" v obrazovke "Qualitativa analysis".
- 8. Kvantitatívna analýza "Quantitative analysis" v časti "Analysis" v obrazovke "Quantitative analysis".

Dodržanie jednotlivých krokov v presne určenom podarí vyššie je veľmi dôležité a pri preskakovaní krokov, prípadne vynechaniu niektorého kroku, je možné, že program spadne,

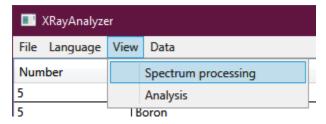
prípadne nebude možné vykonať analýzy. V prípade niektorých chýb program používateľa upozorní chybovou hláškou.

Upozornenie: Pre správne fungovanie softvéru je nevyhnutné aby boli skripty nastavené presne tak, ako majú. V prípade akéhokoľvek zásahu do skriptov pythonu neručím za nesprávne fungovanie softvéru, prípadne nemožnosti spustenia samotného softvéru.

Upozornenie: Prvé spustenie softvéru môžu trvať až niekoľko minút z dôvodu inicializácie niekoľkých súborov potrebných pre správne fungovanie softvéru.

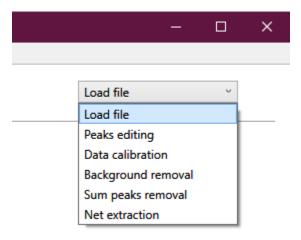
Spectrum processing

Sekcia "**Spectrum processing**" obsahuje obrazovky pre spracovanie spektra, ktoré predstavuje nevyhnutný krok pre vykonanie kvalitatívnej a kvantitatívnej analýzy.



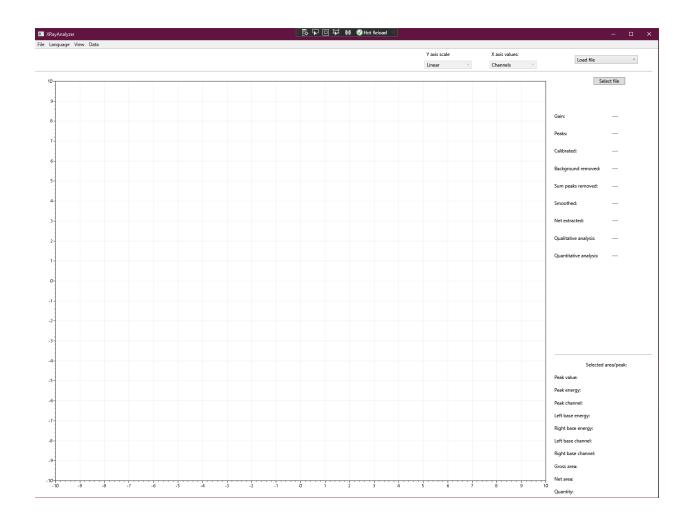
Sekcia je dostupná v menu v ľavej hornej časti obrazovky ako "View". Menu obsahuje niekoľko ďalších menu položiek. Prvá z nich je práve spracovanie spektra "Spectrum processing".

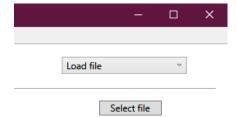
Load file



Používateľ prejde do tejto časti "**Load file**" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

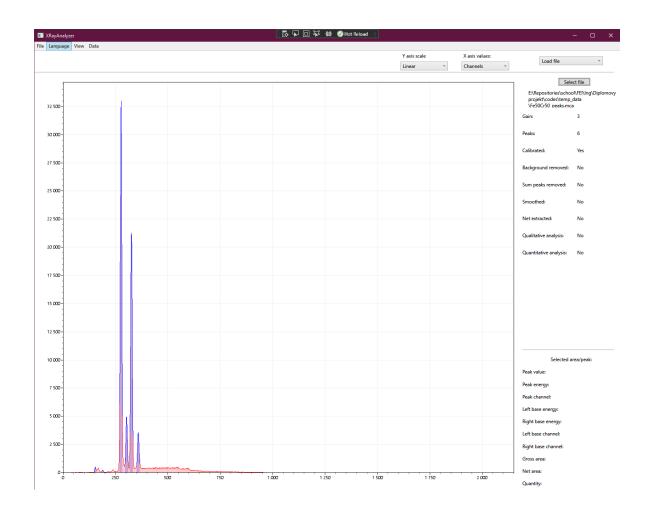
Pri spustení softvéru sa používateľ síce môže voľne pohybovať naprieč obrazovkami, ale žiadna funkcionalita nebude fungovať. Ukážka programu pri spustený:



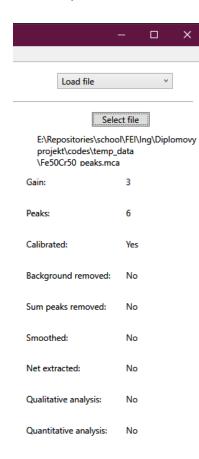


Ako prvé je potrebné načítať súbor. Buď formátu MCA alebo JSON. Možnosť výberu súboru je možné prostredníctvom tlačidla "Select file".

Po vybratí a potvrdení súboru sa okamžite zobrazia dáta. Vykreslenie píkov, bodov, spektra, a pod. systém vždy vykonáva automaticky.

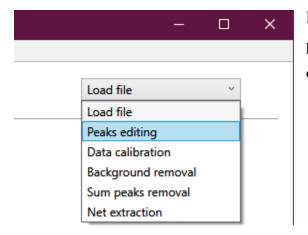


Na pravej strane obrazovky môže používateľ vidieť, aké všetky dáta súbor obsahuje. V podobe zoznamu, či:



- "Gain" došlo k zosilneniu spektra prostredníctvom softvéru DppMCA,
- "Peeks" dáta obsahujú dáta o píkoch. Ak áno, softvér ich automaticky vykreslí,
- "Calibrated" sú dáta kalibrované,
- "Background removed" došlo k odstráneniu, resp. detekcií pozadia,
- "Sum peaks removed" boli odstránené sumačné píky,
- "Smoothed" došlo k vyhladeniu spektra, 102
- "Net extracted" boli extrahované plochy píkov,
- "Qualitative analysis" bola vykonaná kvalitatívna analýza,
- "Quantitative analysis" bola vykonaná kvantitatívna analýza.

Peaks editing



Používateľ prejde do tejto časti "**Peaks editing**" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre editáciu píkov má používateľ možnosť pracovať s píkmi a upraviť si ich podľa potreby.

Only select peak

Only select peak		Pre možnosť zobrazenia informácií o píku je potrebné,
		aby používateľ zvolil možnosť "Only select peak" v
	Confirm	pravej časti obrazovky "Peaks editing".
O Add peak	Cancel	
	Confirm	
Edit peak bases	Cancel	
○ Remove peak		
Search peaks		

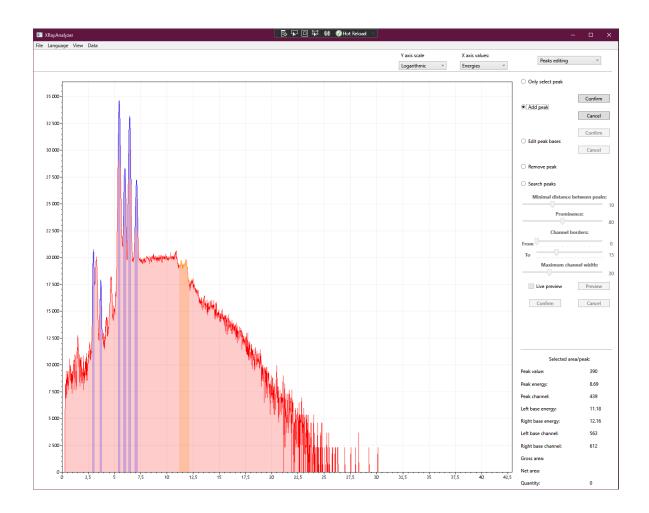
Selected area/peak:		
Peak value:	32996	
Peak energy:	5.46	
Peak channel:	277	
Left base energy:	5.16	
Right base energy:	5.8	
Left base channel:	262	
Right base channel:	294	
Gross area:		
Net area:		
Quantity:	0	

Pri kliknutí na akýkoľvek pík, sa zobrazia informácie o píku v pravom dolnom rohu obrazovky. Zobrazia sa iba informácie, ktoré sú pre pík dostupné.

Add peak

Only select peak		Pre možnosť pridania píku je potrebné, aby
		používateľ zvolil možnosť "Add peak" v pravej časti
	Confirm	obrazovky " Peaks editing ".
Add peak	Cancel	
0.5	Confirm	
Edit peak bases	Cancel	
Remove peak		
Search peaks		

Pri pridávaní píku sa vytvorí v grafe pík, ktorý je farebne odlíšených od ostatných aby používateľ vedel, ktorý pík momentálne ovláda. Konkrétne pík nadobudne oranžovú farbu.



Add peak

Cancel

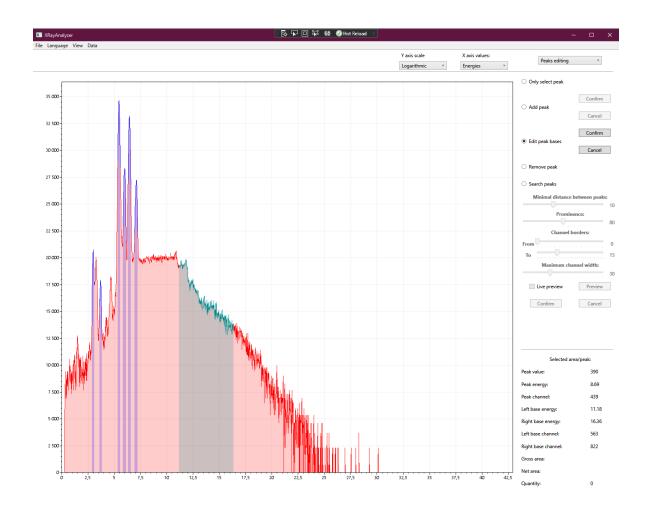
V prípade, že si používateľ rozmyslí pridanie píku, stačí kliknúť na tlačidlo "Cancel" v pravej časti obrazovky. V takom prípade systém pík odstráni. Ak chce vytváraný pík potvrdiť, stačí kliknúť na tlačidlo "Confirm" v pravej

časti obrazovky. Systém pri potvrdení píku prefarbí pík na modrú farbu, ktorá signalizuje aktuálne registrované píky v spektre.

Edit peak bases

Only select peak		Pre možnosť upravenia píku je potrebné, aby používateľ zvolil možnosť "Edit peak bases" v
Add peak	Confirm	pravej časti obrazovky "Peaks editing".
O 7.000 P-0.01	Cancel	
Edit peak bases	Confirm	
C. Competence	Cancel	
O Remove peak		
Search peaks		

V prípade úspešného kliknutia na pík, systém prefarbí pík na tyrkysovú, aby používateľ pomocou farebného odlíšenia vedel, ktorý pík momentálne ovláda a pomocou konkrétnej farby aj to, že daný pík nevytvára, ale upravuje.





V prípade, že si používateľ rozmyslí upravenie píku, stačí kliknúť na tlačidlo "**Cancel**" v pravej časti obrazovky. V takom prípade systém pík odstráni zmeny a vráti pík do pôvodného stavu. Ak chce upravený pík potvrdiť, stačí

kliknúť na tlačidlo "**Confirm**" v pravej časti obrazovky. Systém pri potvrdení píku prefarbí pík na modrú farbu, ktorá signalizuje aktuálne registrované píky v spektre.

Remove peak

Only select peak		Pre možnosť odstránenia píku je potrebné, aby
		používateľ zvolil možnosť "Remove peak" v pravej
	Confirm	časti obrazovky "Peaks editing".
O Add peak	Cancel	
	Confirm	
Edit peak bases	Cancel	
Remove peak		
Search peaks		

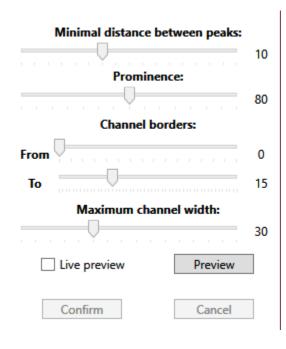
V tomto stave už iba stačí na ktorýkoľ vek pík kliknúť a systém ho okamžite a automaticky odstráni. Nie je potrebné nič potvrdiť a taktiež nie je možné odstránenie píku vrátiť späť.

Search peaks

Only select peak	
Add peak	Confirm
	Cancel
Edit peak bases	Confirm
	Cancel
Remove peak	
Search peaks	

Pre možnosť automatického vyhľadania píkov je potrebné, aby používateľ zvolil možnosť "Search peaks" v pravej časti obrazovky "Peaks editing".

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:

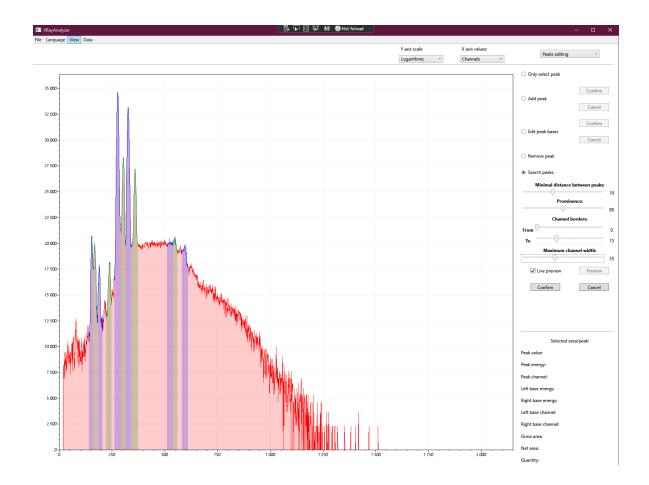


- "Minimal distance between peaks": Požadovaná minimálna horizontálna vzdialenosť (>= 1) vo vzorkách medzi susednými píkami. Najprv sa odstraňujú menšie píky, kým nie je splnená podmienka pre všetky zostávajúce píky
- "Prominence": Požadovaná dôležitosť píkov. Vždy interpretovaný ako minimálna dôležitosť.
- "Channel borders": Požadovaná šírka píkov vo vzorke. "From" hodnota je minimálna požadovaná šírka a "To" maximálna požadovaná šírka.
- "Maximum channel width": Používa sa na výpočet dôležitostí píkov.

Live preview Confirm	Preview Cancel	Po nastavení jednotlivých parametrov podľa potreby, stačí kliknúť na tlačidlo " Preview " a systém zavolá skript, ktorý na základe parametrov vyhľadá všetky píky, ktoré následne systém vykreslí.
✓ Live preview Confirm	Preview	V prípade, že používateľ nechce po každej zmene parametrov klikať na tlačidlo, môže si zaškrtnúť možnosť "Live preview", kedy systém bude reagovať na akúkoľvek zmenu ktoréhokoľvek parametra a automaticky zavolá skript pre vykonanie vyhľadania píkov, ktoré následne hneď aj zobrazí.
✓ Live preview Confirm	Preview	V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, môže kliknúť na tlačidlo "Cancel", kedy sa odstránia všetky píky, ktoré boli vykreslené pomocou funkcie automatického vyhľadania píkov a systém naspäť zobrazí predchádzajúce píky. V prípade, že používateľ klikne na

tlačidlo "Confirm", predošlé píky sa zo systému natrvalo odstránia a nahradia sa novými.

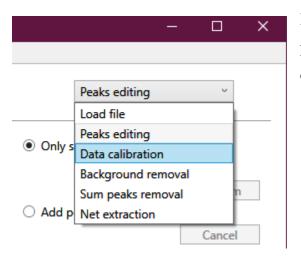
Systém automaticky a striedavo mení farbu zobrazených píkov. Je to pre prípad, že by sa hranice niektorých píkov prekrývali, prípadne nebolo jasne vidieť hranice blízkych píkov.



V momente, keď používateľ automatické vyhľadanie píkov potvrdí, systém zmení farbu všetkých píkov na modrú.

Upozronenie: V režime vyhľadávania píkov, sa dočasne skryjú všetky predošlé píky.

Data calibration



Používateľ prejde do tejto časti "**Data calibration**" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre energetickú kalibráciu má používateľ možnosť kalibrovať jednotlivé kanály na energie.

Ak načítané dáta obsahovali kalibračné body, systém automaticky zavolá skript pre kalibráciu a vykoná kalibráciu spektra. Používateľ môže kalibračné body odstrániť, vytvoriť nové a spektrum kalibrovať pomocou nich. Urobí tzv. Rekalibráciu.

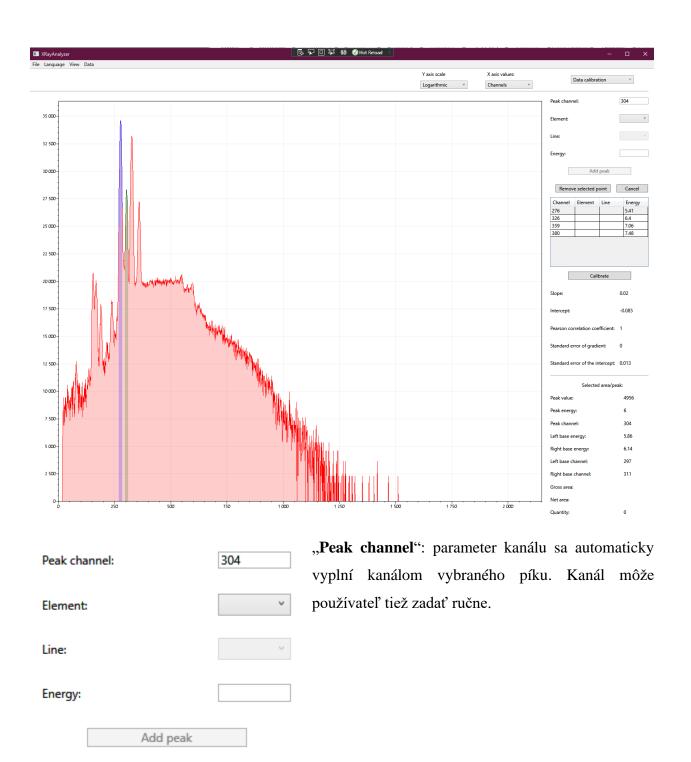
Channel	Element	Line	Energy
276			5.41
326			6.4
359			7.06
380			7.48

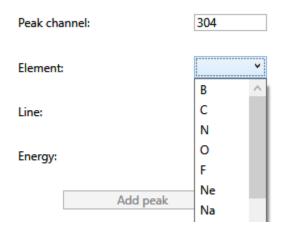
Jednotlivé kalibračné body sú zobrazené v tabuľke kalibračných bodov na pravej strane obrazovky. V prípade, že kalibračné body boli načítané zo súboru, tabuľka obsahuje iba kanále a energie kalibračných bodov.

el
у

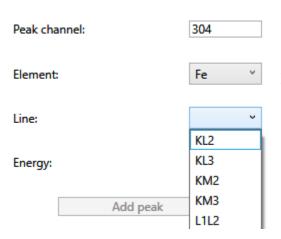
Pre odstránenie kalibračného bodu je potrebné najskôr kalibračný bod v tabuľke označiť (kliknúť naň). Vtedy dôjde k označeniu riadka kalibračného bodu a používateľ môže kalibračný bod odstrániť kliknutím na tlačidlo "Remove selected point". V prípade, že si používateľ neželá kalibračný bod odstrániť, stačí kliknúť na tlačidlo "Cancel" a systém zruší označenie daného kalibračného bodu v tabuľke kalibračných bodov.

Používateľ môže hodnoty kanálov a príslušné energie zadať ručne, alebo môže využiť funkcie, ktoré softvér ponúka. Používateľ má možnosť kliknúť na ľubovoľný pík v grafe, čím dôjde k jeho označeniu a zmene farby na zelenú pre indikáciu označeného píku.





Ďalší krok predstavuje voľbu chemického prvoku "Element". Na výber sú všetky chemické prvky periodickej tabuľky. Zoznam obsahuje chemické označenia jednotlivých chemických prvkov. Tento krok je dobrovoľný.



Po vybraní chemického prvku sa odomkne možnosť výberu emisnej čiary "**Line**". Zobrazené čiary sú len pre vybraný chemický prvok. Každá čiara ma charakteristickú energiu. Tento krok je dobrovoľný.

Peak channel:

Element:

Fe

Line:

KL3

Energy:

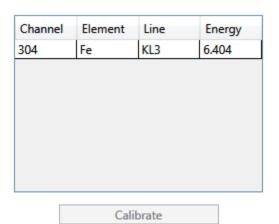
Add peak

Po vybraní emisnej čiary, sa automaticky podľa nej vyplní parameter energie "**Energy**". Energia môže byť zadaná aj ručne. V takom prípade je ale bezvýznamné vyberať chemický prvok a jeho čiaru.

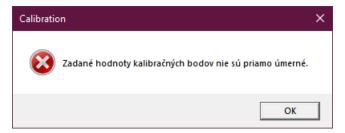
A teraz už iba stačí kliknúť na tlačidlo "Add point", čím sa pridá kalibračný bod do tabuľky. Používateľ teda nemusí ručne hľadať energie v tabuľkách.

Po zadaní kalibračných bodov môže používateľ kliknúť na tlačidlo "Calibrate", čím dôjde k energetickej kalibrácií.

Calibrate



Pre sprístupnenie tlačidla "Calibrate" je nutné zadať minimálne dva kalibračné body. Inak nie je možné vykonať energetickú kalibráciu resp. tlačidlo "Calibrate" bude blokované.



Kalibračné musia byť priamo úmerné. To znamená, že vyšší kanál musí mať vyššiu energiu ako ktorýkoľvek nižší kanál. V opačnom prípade softvér používateľa upozorní a v takom prípade nie je možné vykonať kalibráciu.

Slope: 0.02

Intercept: -0.064

Pearson correlation coefficient: 1

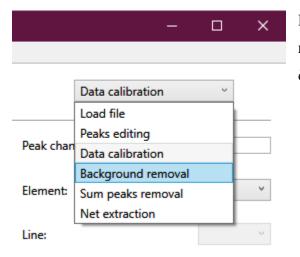
Standard error of gradient: 0

Standard error of the intercept: 0

Po úspešnom kalibrovaní sa pod tabuľkou zobrazia štatistiky kalibrácie (smerodajnú chybu, sklon krivky a pod.).

Upozronenie: Keď používateľ raz klikne na tlačidlo "Calibrate", vykonanú kalibráciu nie je možné vrátiť, ani odstrániť, iba nanovo kalibrovať.

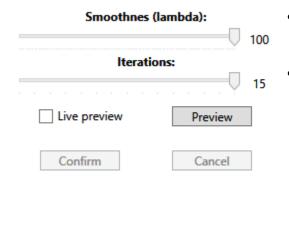
Background removal



Používateľ prejde do tejto často "**Background** removal" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre odstránenie pozadia má používateľ možnosť podľa parametrov odstrániť pozadie zo spektra.

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:



Live preview

Confirm

- "Smoothnes": Parameter lambda algoritmu. Parameter predstavuje silu vyhľadenia pozadia.
- "Iterations": Parameter počtu iterácií algoritmu.

Po nastavení jednotlivých parametrov podľa potreby, stačí kliknúť na tlačidlo "**Preview**" a systém zavolá skript, ktorý na základe parametrov vypočíta pozadie

a zobrazí priamo v grafe so špecifickou farbou, konkrétne tyrkysovou.

Preview

Cancel

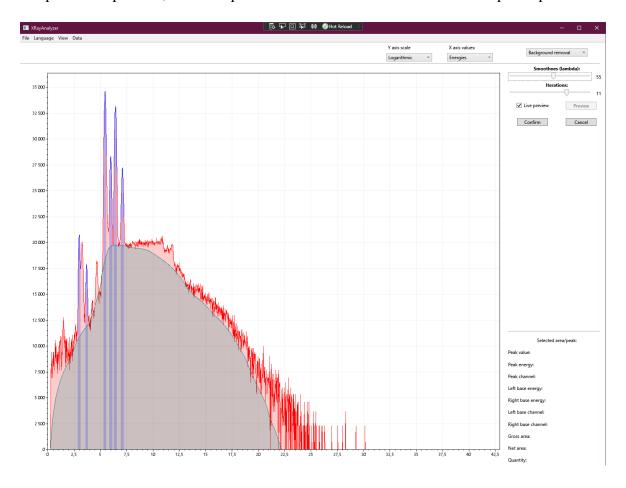


V prípade, že používateľ nechce po každej zmene parametrov klikať na tlačidlo, môže si zaškrtnúť možnosť "Live preview", kedy systém bude reagovať na akúkoľvek zmenu ktoréhokoľvek parametra a automaticky zavolá skript.

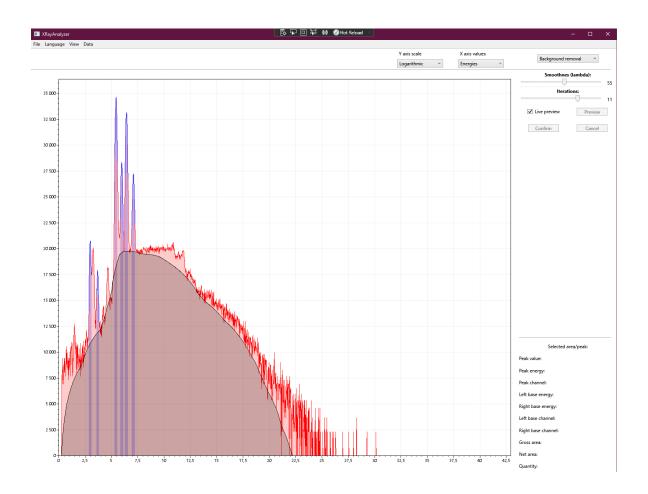
V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, môže kliknúť na tlačidlo "Cancel", kedy sa odstráni vypočítané pozadie, ktoré bolo vykreslené. V prípade, že používateľ klikne na tlačidlo "Confirm", dôjde

k aplikovaniu pozadia a vypočítané pozadie sa uloží a systém zmení farbu pozadia na čiernu.

Neaplikované pozadie, ktoré má používateľ stále možnosť nastaviť/meniť podľa parametrov:

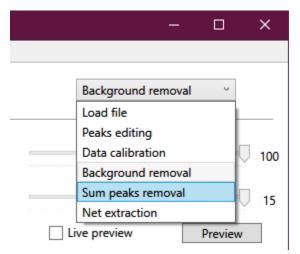


Pod pojmom **aplikovanie odstránenia** pozadia sa v tomto myslí to, že systém má údaje o pozadí síce uložené, ale zatiaľ s nimi nič nerobí. V prípade, že používateľ bude vykonávať operáciu, pri ktorej je pozadie relevantné, tak systém zistí, či používateľ vykonal operáciu odstránenia pozadia a toto pozadie skutočne odstráni, ale len na pozadí. Pri volaní skriptov sa aplikuje odstránenie pozadia na dáta. Ale v grafe pozadie bude vyzerať stále rovnako.



Upozornenie: Ak používateľ už raz pozadie potvrdí, túto operáciu nie je možné vrátiť späť.

Sum peaks removal



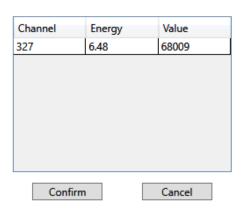
Používateľ prejde do tejto často "Sum peaks removal" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre odstránenie sumačných píkov má používateľ možnosť vidieť, ktoré píky systém detegoval ako sumačné a v prípade potreby ich odstrániť.

Channel	Energy	Value	
79	1.52	86	^
121	2.36	123	
154	3.02	861	
165	3.24	481	
189	3.72	227	
240	4.74	333	
277	5.48	27365	
327	6.48	68009	~

Detect sum peaks

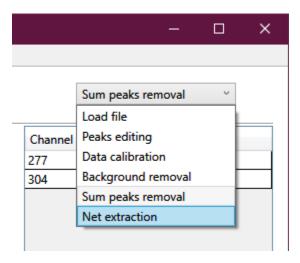
V pravej hornej časti obrazovky je tabuľka so všetkými píkami, ktoré používateľ pridal, prípadne všetky, ktoré systém načítal so súboru. Pre zistenie, ktoré z daných píkov sú sumačné, stačí kliknúť na tlačidlo "**Detect sum peaks**". Systém následne zobrazí detegované sumačné píky v tabuľke nižšie.



V tabuľke sumačných píkov sa nachádzajú vybrané resp. systémom detegované sumačné píky z tabuľky všetkých píkov. V prípade, že používateľ chce sumačné píky odstrániť, stačí kliknúť na tlačidlo "Confirm". Systém odstráni píky z tabuliek a aj z grafu. V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom detekcie sumačných píkov, stačí kliknúť na tlačidlo "Cancel" a systém tabuľku sumačných píkov vyčistí.

Upozornenie: Operáciu odstránenia píkov nie je možné vrátiť späť. V prípade, že používateľ chce odstránený pík vrátiť späť, musí ho znovu ručne pridať v časti "**Peak editation**" pomocou možnosti "**Add peak**".

Net extraction



Používateľ prejde do tejto často "**Net extraction**" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru pre výpočet plôch píkov má používateľ možnosť vidieť čistú a hrubú plochu jednotlivých píkov.

Channel	Energy	Net	Gross
277	5.48		
304	6.02		
327	6.48		
359	7.12		

Get areas

V pravej hornej časti obrazovky je tabuľka so všetkými píkmi s informáciami ako kanál "Channel", energia "Energy", čistá plocha "Net" a hrubá plocha "Gross". Pre vykonanie výpočtu plochy píkov stačí kliknúť na tlačidlo "Get areas". Systém automaticky vypočíta plochu píkov a zobrazí v tabuľke.

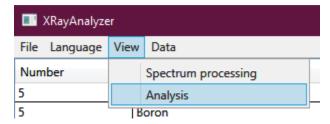
Channel	Energy	Net	Gross
277	5.48	281859	281859
304	6.02	40832	40832
327	6.48	186252	186252
359	7.12	30291	30291

V prípade, že používateľ aplikoval detekciu pozadia, tak čistá aj hrubá plocha píku bude mať rovnakú hodnotu.
V prípade, že pozadie aplikované nebolo, systém na základe ľavého a pravého bodu píku určí čistú plochu.
Naopak hrubú plochy bude brať ako celú plochu píku.

Get areas

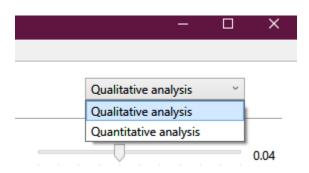
Analysis

Sekcia "**Analysis**" obsahuje obrazovky pre analýzu spektra, konkrétne kvalitatívnu analýzu a kvantitatívnu analýzy.



Sekcia je dostupná v menu v ľavej hornej časti obrazovky ako "**View**". Menu obsahuje niekoľko ďalších menu položiek. Druhá z nich je práve spracovanie spektra "**Analysis**".

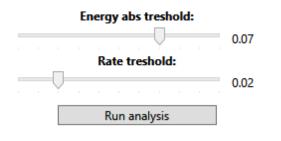
Qualitative analysis



Používateľ prejde do tejto často "Qualitative analysis" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru kvalitatívna analýza má používateľ možnosť nastavenia parametrov pre docielenie čo najlepšej kvalitatívnej analýzy.

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:



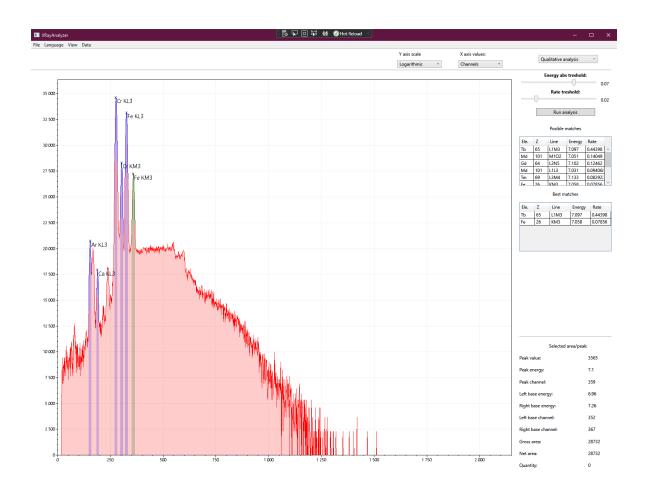
- "Energy abs treshold": Maximálny rozdiel energie medzi referenčnou a porovnávanou hodnotou.
- "Rate treshold": Vyhľadanie všetkých vyhovujúcich chemických prvkov na základe pravdepodobnosti vybraných čiar podľa energie píku.

Po kliknutí na tlačidlo " **Run Analysys**", system zavola skripty pre vykonanie kvalitatívnej analýzy.



Systém indikuje aktuálne vykonávanie skriptu tak, že zablokuje tlačidlo "**Run Analysis**" a premenuje ho na "**Analysis is running**". Po dokončení analýzy sa opäť povolí tlačidlo a zmení sa jeho názov späť.

Keď systém získa zo skriptu výsledné dáta, tak tlačidlo vráti do pôvodného stavu a výsledky zobrazí priamo do grafu. V grafe sa dáta zobrazia ako texty pre jednotlivé píky. Konkrétne chemická značka prvku a zistená emisná čiara.



Posible matches

Ele.	Z	Line	Energy	Rate	
Tb	65	L1M3	7.097	0.44398	^
Md	101	M102	7.051	0.14049	
Gd	64	L3N5	7.102	0.12462	
Md	101	L1L3	7.031	0.094068	
Tm	69	L3M4	7.133	0.082922	
Fe	26	КМЗ	7.058	0.07856	~

Best matches

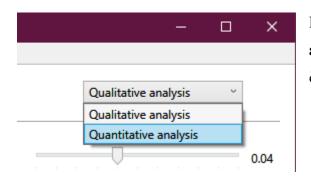
Ele.	Z	Line	Energy	Rate
Tb	65	L1M3	7.097	0.44398
Fe	26	KM3	7.058	0.07856
	1			

V prípade že používateľ nie je spokojný s výsledkom vyhodnotenia niektorého píku, môže na pík kliknúť, čím zobrazia informácie o výsledku kvalitatívnej analýzy pre daný pík. Konkrétne všetky možnosti emisných čiar a prvkov "Possible matches", o ktorých by algoritmus kvalitatívnej analýzy na základe parametrov vôbec uvažoval a zoznam emisných čiar a prvkov "Best matches", ktoré algoritmus vyhodnotil ako najviac pravdepodobné.

Keďže algoritmus uprednostňuje najskôr K čiary, teda ak nejaké možnosti K čiar vôbec boli vybrané medzi možné výsledky. Ak sa v zozname všetkých možností, medzi ktorými algoritmus uvažuje, sa nenachádza akceptovateľný výsledok, je to s najväčšou pravdepodobnosťou dané tým, že pík buď nie je reálnym odrazom žiadneho prvku ale nejakého fyzikálneho efektu, ktorý spôsobil artefakt v podobe píku v spektre, alebo kvôli zlej kalibrácií. V takom prípade je nutné, aby používateľ zväčšil hodnoty vyhľadávacích parametrov.

Upozornenie: Vykonanie analýzy nie je možné vrátiť späť. Po spustený analýzy system automaticky uloží výsledok. V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, je potrebné znovu kliknúť znovu na tlačidlo "Run analysis".

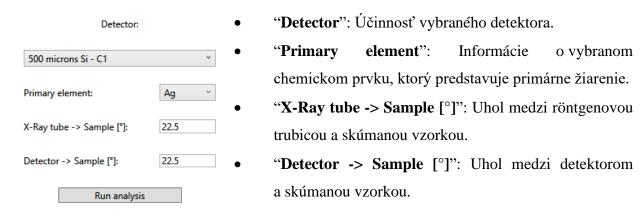
Quantitative analysis



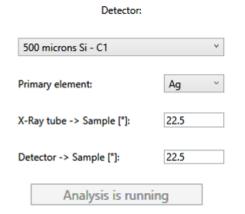
Používateľ prejde do tejto často "Quantitative analysis" prostredníctvom list boxu v pravej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru kvantitatívna analýza má používateľ možnosť nastavenia parametrov pre docielenie čo najlepšej kvalitatívnej analýzy.

V tomto prípade má používateľ k dispozícií hneď niekoľko nastavení:



Po kliknutí na tlačidlo " **Run Analysys**", system zavola skripty pre vykonanie kvantitatívnej analýzy.



Systém indikuje aktuálne vykonávanie skriptu tak, že zablokuje tlačidlo "**Run Analysis**" a premenuje ho na "**Analysis is running**". Po dokončení analýzy sa opäť povolí tlačidlo a zmení sa jeho názov späť.

Keď systém získa zo skriptu výsledné dáta, tak tlačidlo vráti do pôvodného stavu a výsledky zobrazí v tabuľke nižšie.

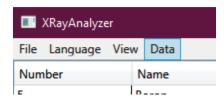
Element	Amount
Cr	0.5017708482472211
Fe	0.4982291517527791

V tabuľke sa zobrazia jednotlivé prvky "**Element**" a ich celkové zastúpenie vo vzorke "**Amount**". Pri vynásobení výsledku 100 dostaneme celkové zastúpenie priamo v percentách.

Upozornenie: Vykonanie analýzy nie je možné vrátiť späť. Po spustený analýzy system automaticky uloží výsledok. V prípade, že používateľ nie je spokojný s výsledkom, je potrebné znovu kliknúť znovu na tlačidlo "**Run analysis**".

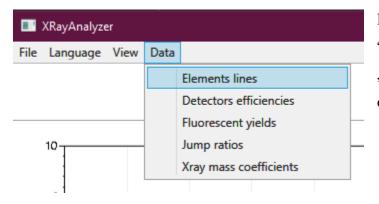
Data

Sekcia "**Data**" obsahuje tabuľky hodnôt jednotlivých, ktoré používa softvér pre spracovanie spektra a kvalitatívnu a kvantitatívnu analýzu.



Sekcia je dostupná v menu v ľavej hornej časti obrazovky ako "**Data**". Menu obsahuje niekoľko ďalších menu položiek. Každá predstavuje samostatnú obrazovku s vlastným datasetom.

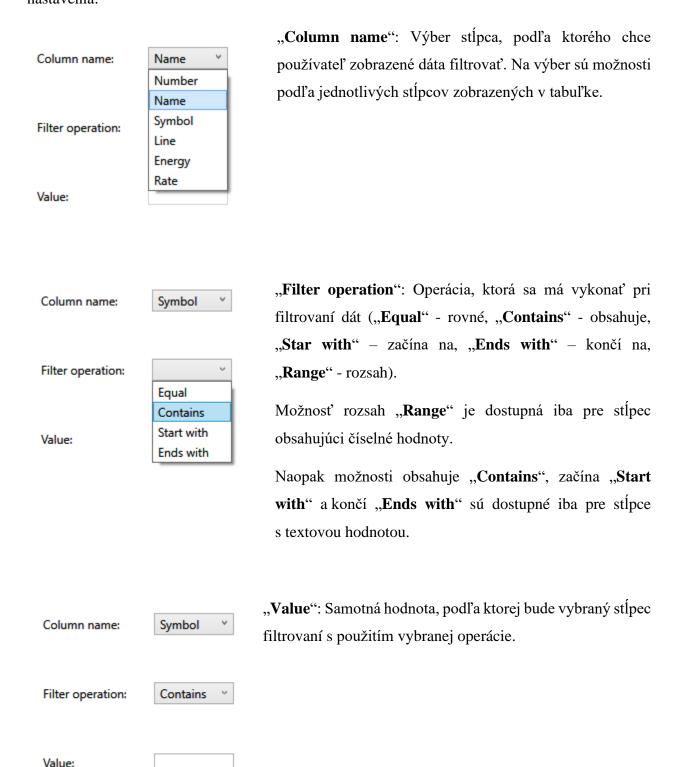
Elements line



Používateľ prejde do tejto časti "Elements line" prostredníctvom "Data" menu v ľavej hornej časti obrazovky.

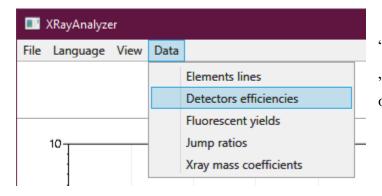
Pri prechode do časti softvéru "**Data**", konkrétne "**Elements lines**" má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát jednotlivých emisných čiar chemických prvkov.

XRayAnalyzer				☑ Hot Reload <				
File Language View Data								
Number	Name	Symbol	Line	Energy	Rate			
	Boron	В	KL2	0.183	0.33299	^	Column name:	
	Boron	В	KL3	0.183	0.66701			
	Boron	В	L1L2	0.008	0.33298	1		
	Boron	В	L1L3	0.008	0.66702	1		
	Carbon	С	KL2	0.277	0.33398	1	Filter operation:	
	Carbon	С	KL3	0.277	0.66602	1		
	Carbon	С	L1L2	0.012	0.33241	1		
	Carbon	С	L1L3	0.012	0.66759	1	Value:	
	Nitrogen	N	KL2	0.392	0.33404	1	value:	
	Nitrogen	N	KL3	0.392	0.66596	1		
	Nitrogen	N	L1L2	0.015	0.33155	1		
	Nitrogen	N	L1L3	0.015	0.66845	1		
	Oxygen	0	KL2	0.525	0.33431	1		
	Oxygen	0	KL3	0.525	0.66569	1		
	Oxygen	0	L1L2	0.021	0.33067	1		
	Oxygen	0	L1L3	0.021	0.66933	1	Submit	Reset
	Fluorine	F	KL2	0.677	0.33447	1		
	Fluorine	F	KL3	0.677	0.66553	1		
	Fluorine	F	L1L2	0.025	0.33073	1		
	Fluorine	le le	L1L3	0.025	0.66927	1		
)	Neon	Ne Ne	KL2	0.848	0.33412	1		
)	Neon Neon	Ne Ne	KL3	0.848	0.66588	-		
)						-		
	Neon	Ne	L1L2	0.027	0.32939	-		
1	Neon	Ne	L1L3	0.027	0.67061	-		
)	Neon	Ne	L2L3	0	1	-		
	Sodium	Na	KL2	1.041	0.33361	-		
	Sodium	Na	KL3	1.041	0.66639	4		
1	Sodium	Na	L1L2	0.032	0.32805	4		
	Sodium	Na	L1L3	0.032	0.67195	1		
	Sodium	Na	L1M1	0.063	8.0995E-13]		
	Sodium	Na	L2M1	0.03	1			
	Sodium	Na	L3M1	0.03	1			
2	Magnesium	Mg	KL2	1.254	0.33343			
2	Magnesium	Mg	KL3	1.254	0.66657	7		
2	Magnesium	Mg	L1L2	0.038	0.32609	7		
!	Magnesium	Mg	L1L3	0.038	0.67391	1		
2	Magnesium	Mg	L1M1	0.087	9.058E-12	1		
	Magnesium	Mg	L2M1	0.049	1	1		
	Magnesium	Mg	L3M1	0.049	1	1		
3	Aluminium	Al	KL2	1.486	0.32899	1		
	Aluminium	Al	KL3	1.487	0.65798	1		
3	Aluminium	Al	KM2	1.554	0.00435	1		
	Aluminium	Al	KM3	1.554	0.00869	1		
3	Aluminium	Al	L1L2	0.044	0.29133	1		
3	Aluminium	Al	L1L3	0.045	0.60818			
	Aluminium	Al	L1M1	0.117	3.3631E-11	1		
· :	Aluminium	Al	L1M2	0.112	0.034168			
	Aluminium	Al	L1M3	0.112	0.066322	1		
		Al	L2L3	0	2.394E-10	1		
	Aluminium	Al	L2M1	0.072	0.99999	+		
	Aluminium					+		
	Aluminium	Al	L2M2	0.068	2.4349E-12	+		
	Aluminium	Al	L2M3	0.068	1.0929E-05	-		
	Aluminium	Al	L3M1	0.072	0.99999			
	Aluminium	Al	L3M2	0.067	7.0141E-06			
3	Aluminium	Al	L3M3	0.067	6.9193E-06			
	Silicon	Si	KL2	1.739	0.32576			
	Silicon	Si	KL3	1.74	0.64724			
1	Silicon	Si	KM2	1.836	0.009			
4	Silicon	ci	KM3	1.936	0.018	~		



Column name:	Energy Y	V prípade, že je zvolená operácia filtrovania "Range", používateľ zadáva hodnoty od "Value from" do "Value to".
Filter operation:	Range ~	
Value from:		
Value to:		
		Pre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo "Submit".
Submit	Reset	Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí
		kliknúť na tlačidlo "Reset".

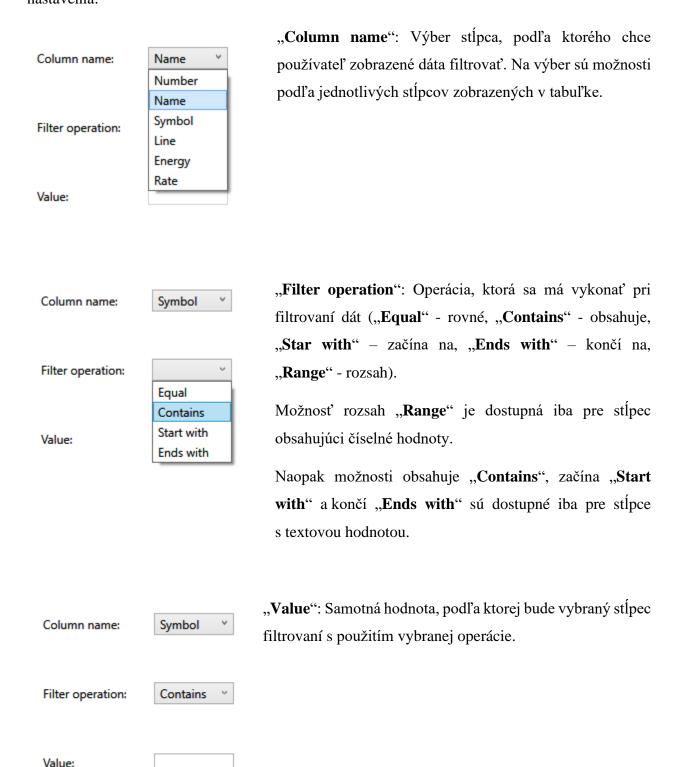
Detector efficiencies



Používateľ prejde do tejto časti "**Detector efficiencies**" prostredníctvom "**Data**" menu v ľavej hornej časti obrazovky.

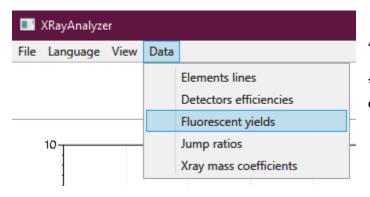
Pri prechode do časti softvéru "**Data**", konkrétne "**Detector efficiencies**" má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát jednotlivých detektorov a ich učínností.

XRayAnalyzer				☑ Hot Reload <				
File Language View Data								
Number	Name	Symbol	Line	Energy	Rate			
	Boron	В	KL2	0.183	0.33299	^	Column name:	
	Boron	В	KL3	0.183	0.66701			
	Boron	В	L1L2	0.008	0.33298	1		
	Boron	В	L1L3	0.008	0.66702	1		
	Carbon	С	KL2	0.277	0.33398	1	Filter operation:	
	Carbon	С	KL3	0.277	0.66602	1		
	Carbon	С	L1L2	0.012	0.33241	1		
	Carbon	С	L1L3	0.012	0.66759	1	Value:	
	Nitrogen	N	KL2	0.392	0.33404	1	value:	
	Nitrogen	N	KL3	0.392	0.66596	1		
	Nitrogen	N	L1L2	0.015	0.33155	1		
	Nitrogen	N	L1L3	0.015	0.66845	1		
	Oxygen	0	KL2	0.525	0.33431	1		
	Oxygen	0	KL3	0.525	0.66569	1		
	Oxygen	0	L1L2	0.021	0.33067	1		
	Oxygen	0	L1L3	0.021	0.66933	1	Submit	Reset
	Fluorine	F	KL2	0.677	0.33447	1		
	Fluorine	F	KL3	0.677	0.66553	1		
	Fluorine	F	L1L2	0.025	0.33073	1		
	Fluorine	le le	L1L3	0.025	0.66927	1		
)	Neon	Ne Ne	KL2	0.848	0.33412	1		
)	Neon Neon	Ne Ne	KL3	0.848	0.66588	-		
)						-		
	Neon	Ne	L1L2	0.027	0.32939	-		
1	Neon	Ne	L1L3	0.027	0.67061	-		
)	Neon	Ne	L2L3	0	1	-		
	Sodium	Na	KL2	1.041	0.33361	-		
	Sodium	Na	KL3	1.041	0.66639	4		
1	Sodium	Na	L1L2	0.032	0.32805	4		
	Sodium	Na	L1L3	0.032	0.67195	1		
	Sodium	Na	L1M1	0.063	8.0995E-13]		
	Sodium	Na	L2M1	0.03	1			
	Sodium	Na	L3M1	0.03	1			
2	Magnesium	Mg	KL2	1.254	0.33343			
2	Magnesium	Mg	KL3	1.254	0.66657	7		
2	Magnesium	Mg	L1L2	0.038	0.32609	7		
!	Magnesium	Mg	L1L3	0.038	0.67391	1		
2	Magnesium	Mg	L1M1	0.087	9.058E-12	1		
	Magnesium	Mg	L2M1	0.049	1	1		
	Magnesium	Mg	L3M1	0.049	1	1		
3	Aluminium	Al	KL2	1.486	0.32899	1		
	Aluminium	Al	KL3	1.487	0.65798	1		
3	Aluminium	Al	KM2	1.554	0.00435	1		
	Aluminium	Al	KM3	1.554	0.00869	1		
3	Aluminium	Al	L1L2	0.044	0.29133	1		
3	Aluminium	Al	L1L3	0.045	0.60818			
	Aluminium	Al	L1M1	0.117	3.3631E-11	1		
· :	Aluminium	Al	L1M2	0.112	0.034168			
	Aluminium	Al	L1M3	0.112	0.066322	1		
		Al	L2L3	0	2.394E-10	1		
	Aluminium	Al	L2M1	0.072	0.99999	+		
	Aluminium					+		
	Aluminium	Al	L2M2	0.068	2.4349E-12	+		
	Aluminium	Al	L2M3	0.068	1.0929E-05	-		
	Aluminium	Al	L3M1	0.072	0.99999			
	Aluminium	Al	L3M2	0.067	7.0141E-06			
3	Aluminium	Al	L3M3	0.067	6.9193E-06			
	Silicon	Si	KL2	1.739	0.32576			
	Silicon	Si	KL3	1.74	0.64724			
1	Silicon	Si	KM2	1.836	0.009			
4	Silicon	ci	KM3	1.936	0.018	~		



Column name:	Energy Y	V prípade, že je zvolená operácia filtrovania "Range", používateľ zadáva hodnoty od "Value from" do "Value to".
Filter operation:	Range ~	
Value from:		
Value to:		
		Pre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo "Submit".
Submit	Reset	Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí
		kliknúť na tlačidlo "Reset".

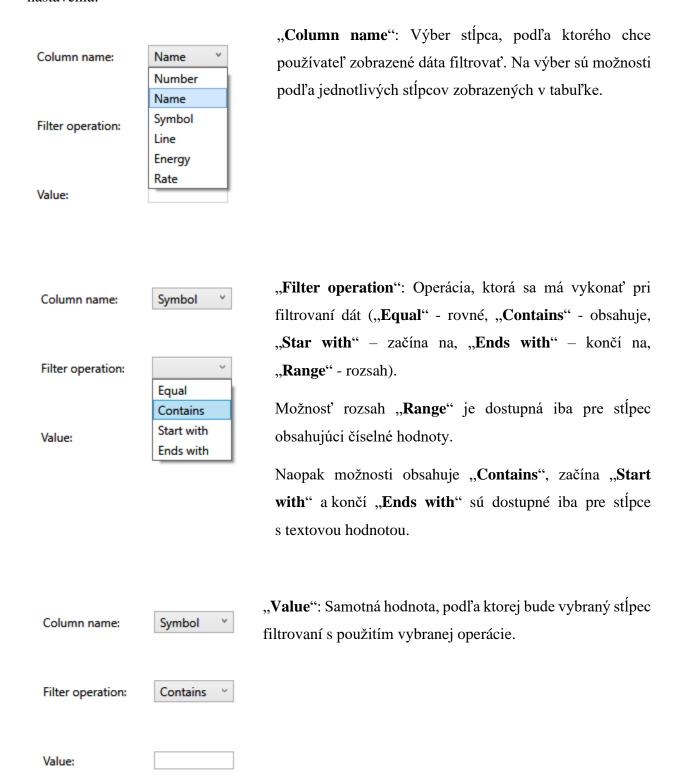
Fluorescent yields



Používateľ prejde do tejto časti "Fluorescent yields" prostredníctvom "Data" menu v ľavej hornej časti obrazovky.

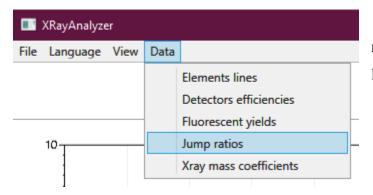
Pri prechode do časti softvéru "**Data**", konkrétne "**Fluorescent yields**" má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát fluorescenčných výťažkov jednotlivých prvkov prvkov.

XRayAnalyzer				☑ Hot Reload <				
File Language View Data								
Number	Name	Symbol	Line	Energy	Rate			
	Boron	В	KL2	0.183	0.33299	^	Column name:	
	Boron	В	KL3	0.183	0.66701			
	Boron	В	L1L2	0.008	0.33298	1		
	Boron	В	L1L3	0.008	0.66702	1		
	Carbon	С	KL2	0.277	0.33398	1	Filter operation:	
	Carbon	С	KL3	0.277	0.66602	1		
	Carbon	С	L1L2	0.012	0.33241	1		
	Carbon	С	L1L3	0.012	0.66759	1	Value:	
	Nitrogen	N	KL2	0.392	0.33404	1	value:	
	Nitrogen	N	KL3	0.392	0.66596	1		
	Nitrogen	N	L1L2	0.015	0.33155	1		
	Nitrogen	N	L1L3	0.015	0.66845	1		
	Oxygen	0	KL2	0.525	0.33431	1		
	Oxygen	0	KL3	0.525	0.66569	1		
	Oxygen	0	L1L2	0.021	0.33067	1		
	Oxygen	0	L1L3	0.021	0.66933	1	Submit	Reset
	Fluorine	F	KL2	0.677	0.33447	1		
	Fluorine	F	KL3	0.677	0.66553	1		
	Fluorine	F	L1L2	0.025	0.33073	1		
	Fluorine	le le	L1L3	0.025	0.66927	1		
)	Neon	Ne Ne	KL2	0.848	0.33412	1		
)	Neon Neon	Ne Ne	KL3	0.848	0.66588	-		
)						-		
	Neon	Ne	L1L2	0.027	0.32939	-		
1	Neon	Ne	L1L3	0.027	0.67061	-		
)	Neon	Ne	L2L3	0	1	-		
	Sodium	Na	KL2	1.041	0.33361	-		
	Sodium	Na	KL3	1.041	0.66639	4		
1	Sodium	Na	L1L2	0.032	0.32805	4		
	Sodium	Na	L1L3	0.032	0.67195	1		
	Sodium	Na	L1M1	0.063	8.0995E-13]		
	Sodium	Na	L2M1	0.03	1			
	Sodium	Na	L3M1	0.03	1			
2	Magnesium	Mg	KL2	1.254	0.33343			
2	Magnesium	Mg	KL3	1.254	0.66657	7		
2	Magnesium	Mg	L1L2	0.038	0.32609	7		
!	Magnesium	Mg	L1L3	0.038	0.67391	1		
2	Magnesium	Mg	L1M1	0.087	9.058E-12	1		
	Magnesium	Mg	L2M1	0.049	1	1		
	Magnesium	Mg	L3M1	0.049	1	1		
3	Aluminium	Al	KL2	1.486	0.32899	1		
	Aluminium	Al	KL3	1.487	0.65798	1		
3	Aluminium	Al	KM2	1.554	0.00435	1		
	Aluminium	Al	KM3	1.554	0.00869	1		
3	Aluminium	Al	L1L2	0.044	0.29133	1		
3	Aluminium	Al	L1L3	0.045	0.60818			
	Aluminium	Al	L1M1	0.117	3.3631E-11	1		
· :	Aluminium	Al	L1M2	0.112	0.034168			
	Aluminium	Al	L1M3	0.112	0.066322	1		
		Al	L2L3	0	2.394E-10	1		
	Aluminium	Al	L2M1	0.072	0.99999	+		
	Aluminium					+		
	Aluminium	Al	L2M2	0.068	2.4349E-12	+		
	Aluminium	Al	L2M3	0.068	1.0929E-05	-		
	Aluminium	Al	L3M1	0.072	0.99999			
	Aluminium	Al	L3M2	0.067	7.0141E-06			
3	Aluminium	Al	L3M3	0.067	6.9193E-06			
	Silicon	Si	KL2	1.739	0.32576			
	Silicon	Si	KL3	1.74	0.64724			
1	Silicon	Si	KM2	1.836	0.009			
4	Silicon	ci	KM3	1.936	0.018	~		



Column name:	Energy Y	V prípade, že je zvolená operácia filtrovania "Range", používateľ zadáva hodnoty od "Value from" do "Value to".
Filter operation:	Range ~	
Value from:		
Value to:		
		Pre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo "Submit".
Submit	Reset	Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí
		kliknúť na tlačidlo "Reset".

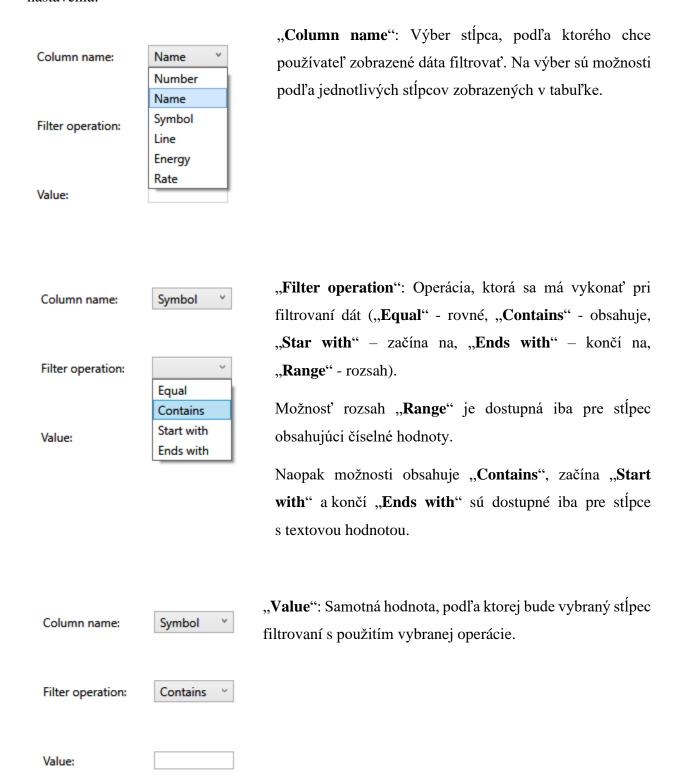
Jump ratios



Používateľ prejde do tejto časti "**Jump** ratios" prostredníctvom "**Data**" menu v ľavej hornej časti obrazovky.

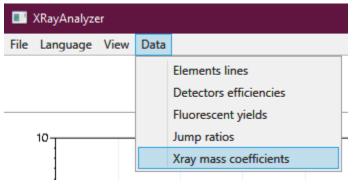
Pri prechode do časti softvéru "**Data**", konkrétne "**Jump ratios**" má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát jednotlivých hrán emisných čiar chemických prvkov.

XRayAnalyzer				☑ Hot Reload <				
File Language View Data								
Number	Name	Symbol	Line	Energy	Rate			
	Boron	В	KL2	0.183	0.33299	^	Column name:	
	Boron	В	KL3	0.183	0.66701			
	Boron	В	L1L2	0.008	0.33298	1		
	Boron	В	L1L3	0.008	0.66702	1		
	Carbon	С	KL2	0.277	0.33398	1	Filter operation:	
	Carbon	С	KL3	0.277	0.66602	1		
	Carbon	С	L1L2	0.012	0.33241	1		
	Carbon	С	L1L3	0.012	0.66759	1	Value:	
	Nitrogen	N	KL2	0.392	0.33404	1	value:	
	Nitrogen	N	KL3	0.392	0.66596	1		
	Nitrogen	N	L1L2	0.015	0.33155	1		
	Nitrogen	N	L1L3	0.015	0.66845	1		
	Oxygen	0	KL2	0.525	0.33431	1		
	Oxygen	0	KL3	0.525	0.66569	1		
	Oxygen	0	L1L2	0.021	0.33067	1		
	Oxygen	0	L1L3	0.021	0.66933	1	Submit	Reset
	Fluorine	F	KL2	0.677	0.33447	1		
	Fluorine	F	KL3	0.677	0.66553	1		
	Fluorine	F	L1L2	0.025	0.33073	1		
	Fluorine	le le	L1L3	0.025	0.66927	1		
)	Neon	Ne Ne	KL2	0.848	0.33412	1		
)	Neon Neon	Ne Ne	KL3	0.848	0.66588	-		
)						-		
	Neon	Ne	L1L2	0.027	0.32939	-		
1	Neon	Ne	L1L3	0.027	0.67061	-		
)	Neon	Ne	L2L3	0	1	-		
	Sodium	Na	KL2	1.041	0.33361	-		
	Sodium	Na	KL3	1.041	0.66639	4		
1	Sodium	Na	L1L2	0.032	0.32805	4		
	Sodium	Na	L1L3	0.032	0.67195	1		
	Sodium	Na	L1M1	0.063	8.0995E-13]		
	Sodium	Na	L2M1	0.03	1			
	Sodium	Na	L3M1	0.03	1			
2	Magnesium	Mg	KL2	1.254	0.33343			
2	Magnesium	Mg	KL3	1.254	0.66657	7		
2	Magnesium	Mg	L1L2	0.038	0.32609	7		
!	Magnesium	Mg	L1L3	0.038	0.67391	1		
2	Magnesium	Mg	L1M1	0.087	9.058E-12	1		
	Magnesium	Mg	L2M1	0.049	1	1		
	Magnesium	Mg	L3M1	0.049	1	1		
3	Aluminium	Al	KL2	1.486	0.32899	1		
	Aluminium	Al	KL3	1.487	0.65798	1		
3	Aluminium	Al	KM2	1.554	0.00435	1		
	Aluminium	Al	KM3	1.554	0.00869	1		
3	Aluminium	Al	L1L2	0.044	0.29133	1		
3	Aluminium	Al	L1L3	0.045	0.60818			
	Aluminium	Al	L1M1	0.117	3.3631E-11	1		
· :	Aluminium	Al	L1M2	0.112	0.034168			
	Aluminium	Al	L1M3	0.112	0.066322	1		
		Al	L2L3	0	2.394E-10	1		
	Aluminium	Al Al	L2M1	0.072	0.99999	+		
	Aluminium					+		
	Aluminium	Al	L2M2	0.068	2.4349E-12	+		
	Aluminium	Al	L2M3	0.068	1.0929E-05	-		
	Aluminium	Al	L3M1	0.072	0.99999			
	Aluminium	Al	L3M2	0.067	7.0141E-06			
3	Aluminium	Al	L3M3	0.067	6.9193E-06			
	Silicon	Si	KL2	1.739	0.32576			
	Silicon	Si	KL3	1.74	0.64724			
1	Silicon	Si	KM2	1.836	0.009			
4	Silicon	ci	KM3	1.936	0.018	~		



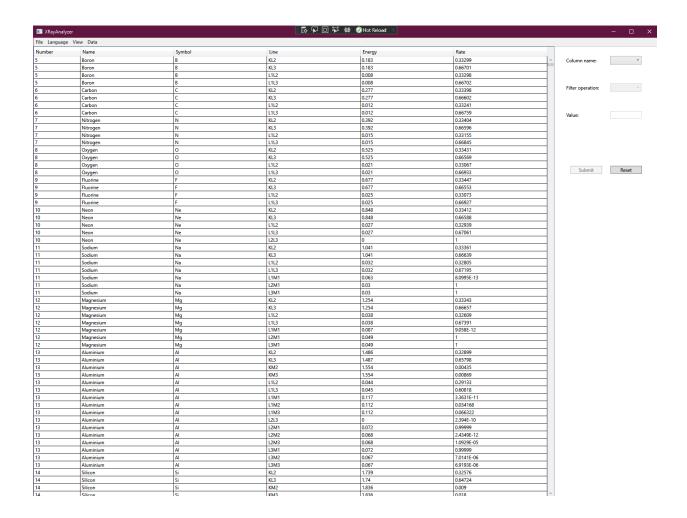
Column name:	Energy Y	V prípade, že je zvolená operácia filtrovania "Range", používateľ zadáva hodnoty od "Value from" do "Value to".
Filter operation:	Range ~	
Value from:		
Value to:		
		Pre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo "Submit".
Submit	Reset	Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí
		kliknúť na tlačidlo "Reset".

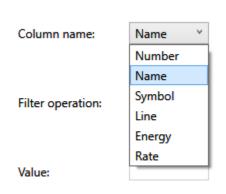
Xray mass coefficients



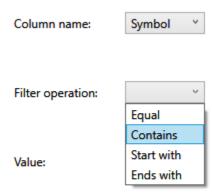
Používateľ prejde do tejto časti "**Xray** mass coefficients" prostredníctvom "**Data**" menu v ľavej hornej časti obrazovky.

Pri prechode do časti softvéru "**Data**", konkrétne "**Xray mass coefficients**" má používateľ možnosť zobrazenia a filtrovania dát hmotnostných súčiniteľov zoslabenia jednotlivých chemických prvkov.





"Column name": Výber stĺpca, podľa ktorého chce používateľ zobrazené dáta filtrovať. Na výber sú možnosti podľa jednotlivých stĺpcov zobrazených v tabuľke.



"Filter operation": Operácia, ktorá sa má vykonať pri filtrovaní dát ("Equal" - rovné, "Contains" - obsahuje, "Star with" – začína na, "Ends with" – končí na, "Range" - rozsah).

Možnosť rozsah "Range" je dostupná iba pre stĺpec obsahujúci číselné hodnoty.

Naopak možnosti obsahuje "Contains", začína "Start with" a končí "Ends with" sú dostupné iba pre stĺpce s textovou hodnotou.

Column name:	Symbol	"Value": Samotná hodnota, podľa ktorej bude vybraný stĺpec filtrovaní s použitím vybranej operácie.
Filter operation:	Contains ~	
Value:		
Column name:	Energy ^v	V prípade, že je zvolená operácia filtrovania "Range", používateľ zadáva hodnoty od "Value from" do "Value to".
Filter operation:	Range v	
Value from:		
Value to:		
Submit	Reset	Pre aplikovanie filtra stačí kliknúť na tlačidlo " Submit ". Pre zrušenie filtrovania a zobrazenia všetkých dať stačí kliknúť na tlačidlo " Reset ".