LIBS 光谱预处理及分析系统

用户操作手册

1 引言

1.1 编写目的

本手册为了帮助用户更好地了解和使用系统,手册详细讲述了操作流程和操 作方式。

1.2 项目背景

- a. 该软件系统的名称: LIBS 光谱预处理及分析系统
- b. 该软件项目的任务提出者:
- c. 该软件项目的开发者:
- d. 该软件的用户(或首批用户)

1.3 参考资料

1.4 环境要求

硬件: 计算机不应低于如下配置, 否则将会影响系统稳定和性能。Pentium II 或以上微机, 至少 64M 内存, 100M 可用硬盘空间。

软件: . NET Framework 3.5, Windows 操作系统。

1.5 系统功能

- a. 载入光谱数据
- b. 光谱滤噪
- c. 光谱基线校正
- d. 光谱标峰
- e. 光谱峰面积
- f. 元素特征峰识别
- g. 标准曲线法
- h. 谱图转换

1.6 系统性能

- a. 精度:载入的谱图文件数据为浮点型
- b. 时间特性: 响应时间迅速

2 系统运行

2.1 主界面介绍

系统主界面如图 1 所示,系统工作主画面窗口分为六个区域,说明如下:

1标题栏:窗口最上部的条状部分,显示系统名称以及最小化、最大化或关闭窗口

- 2 菜单栏:选择要进行的操作,单击实现功能
- 3 工具条: 含有多个带图标的快捷按钮,用于快速实现某些操作
- 4 列表区: 以列表形式显示分析后的结果
- 5 图形区: 以图形形式显示分析后的结果
- 6 鼠标右键选项:包括复制、另存图表、打印、还原缩放等功能

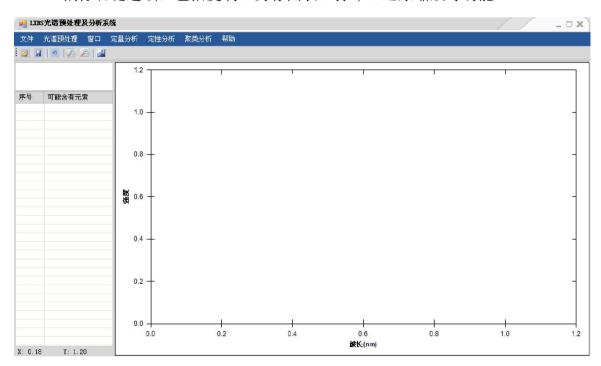


图 1 系统主页面

2.2 操作流程介绍

2.2.1 载入光谱数据

单击文件——>载入,选择载入的文件,若数据格式不正确,系统会有错误提示,如图 2 所示:



图 2 错误提示

若成功载入数据,则主界面的图形区显示谱图,如图 3 所示:

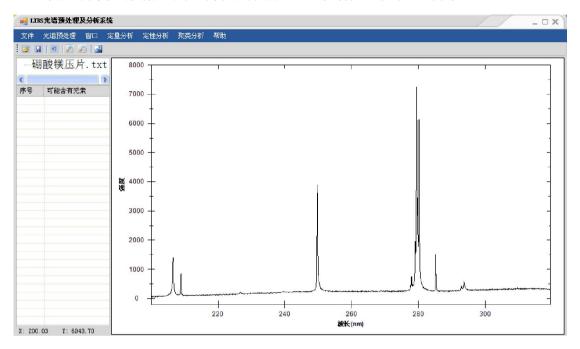


图 3 显示载入的谱图数据

2.2.2 光谱滤噪

此操作是为了过滤干扰光谱数据的噪声。单击光谱预处理——〉滤噪,完成滤噪功能,滤噪效果如图 4 所示:

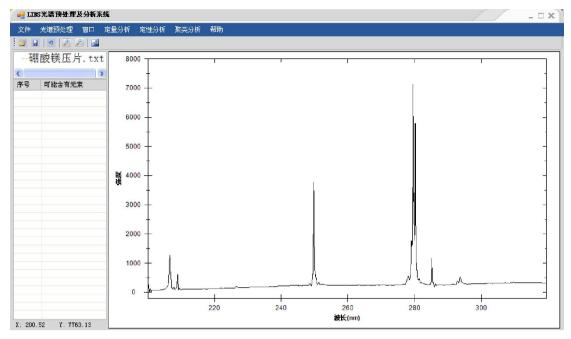


图 4 光谱数据滤噪效果图

2.2.3 光谱基线校正

单击光谱预处理——〉基线校正,完成基线校正功能,基线校正效果如图 5 所示:

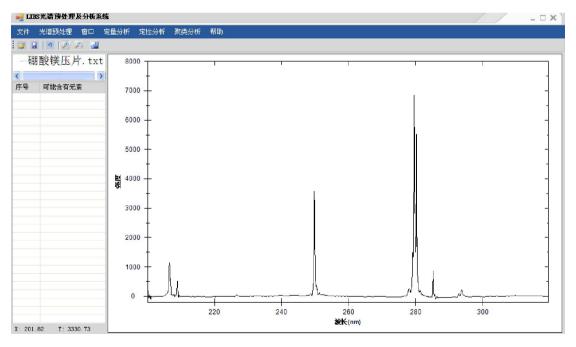


图 5 光谱数据基线校正效果图

2.2.4 光谱标峰

分析谱图,找出波峰,将波长和强度标示在波峰上。单击光谱预处理——>标峰,完成标峰功能,标峰效果如图 6 所示:

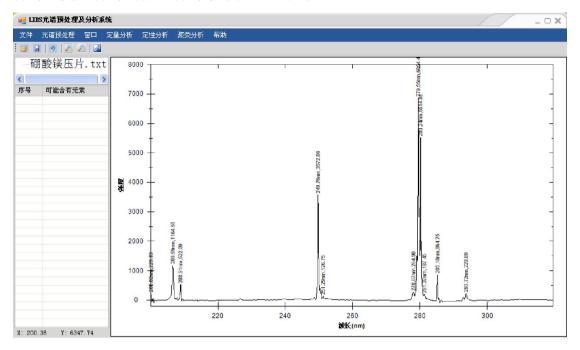


图 6 光谱数据标峰效果图

2.2.5 光谱峰面积

单击光谱预处理——〉峰面积,完成计算峰面积功能,标识峰面积效果如图 7 所示:

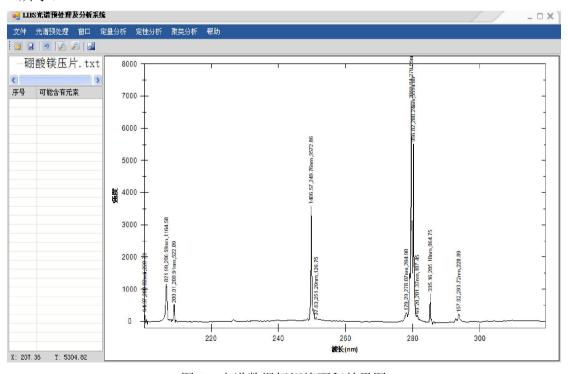


图 7 光谱数据标识峰面积效果图

2.2.6 元素特征峰识别

单击定性分析——>元素特征峰的识别,完成识别元素特征峰并将元素标示出来的功能,特征峰识别效果如图 8 所示:

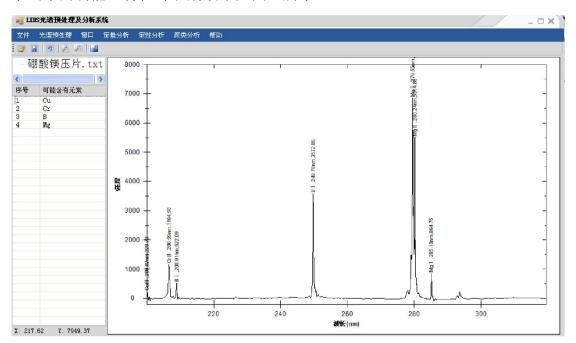


图 8 光谱数据特征峰识别效果图

列表区列出了谱图数据中可能含有的元素,如图 9 所示:

序号	可能含有元素
1	Cu
1 2 3 4	Cr
3	В
4	Mg
	_
X · 214 ·	52 Y: 7986-61

图 9 谱图数据中可能含有元素列表

图形区以谱图方式将结果显示出来,把可能含有的元素谱线类型、波长和强度信息标示在谱图上,标识效果如图 10 所示:

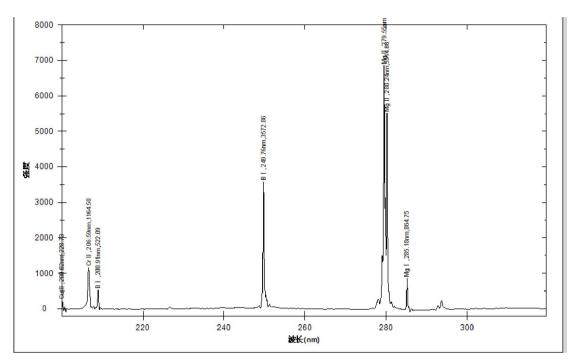


图 10 元素的谱线类型、波长和强度信息

单击列表区某一元素,图形区将标识此元素对应特征峰的谱线类型、波长和强度信息,标识效果如图 11 所示:

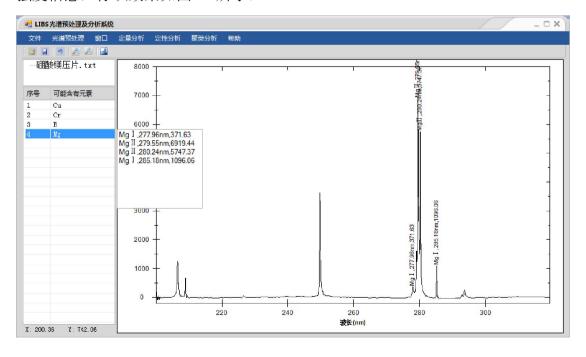


图 11 选定元素的谱线类型、波长和强度信息

2.2.7 标准曲线法

单击定量分析——>标准曲线法,在此之前若未执行元素特征峰识别操作,则给出错误提示,如图 12 所示:

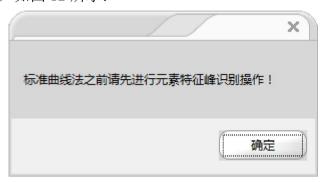


图 12 未执行特征峰识别错误提示

若已执行元素特征峰识别操作,则打开标准曲线法界面,如图 13 所示:

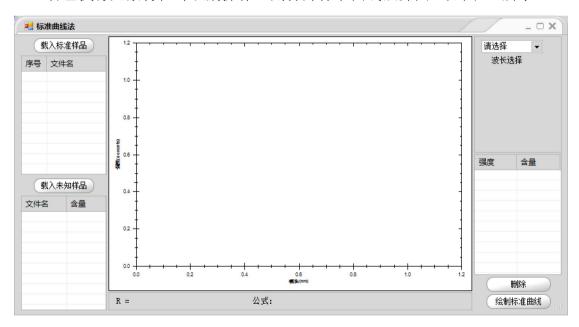


图 13 标准曲线法界面

单击载入标准样品,选择载入的文件(至少选择三个光谱数据文件),如图 14、15 所示:

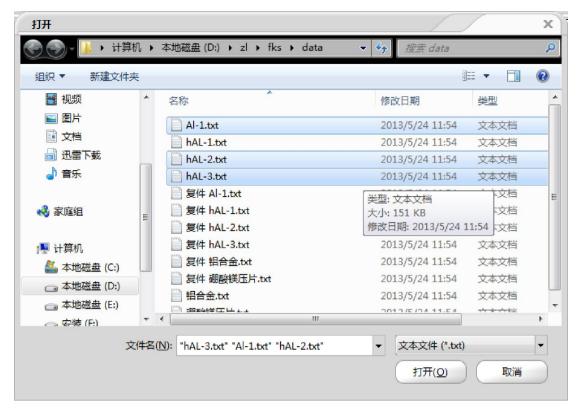


图 14 选择标准样品

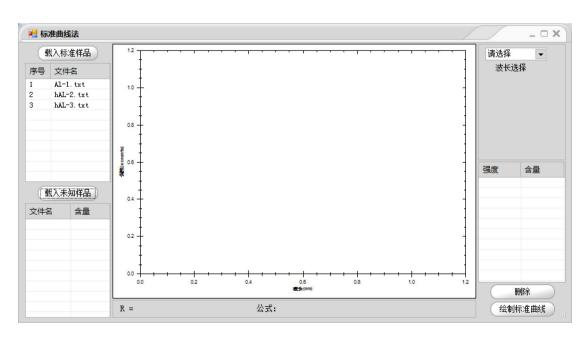


图 15 载入标准样品效果图

单击选中一个文件,展开右侧下拉列表并选中一个元素,则显示出选中标准 样品中对应元素的所有波长,如图 16、17 所示:

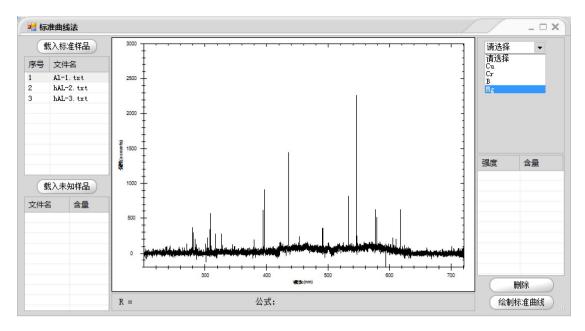


图 16 选择下拉列表中元素(一)

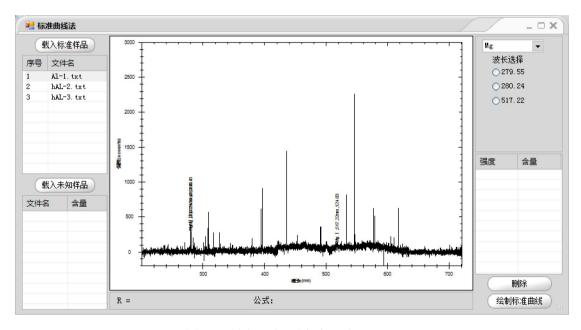


图 17 选择下拉列表中元素(二)

从右侧上方的波长列表中选择一个,则被选中波长添加到右侧下方的列表中,如图 18 所示:

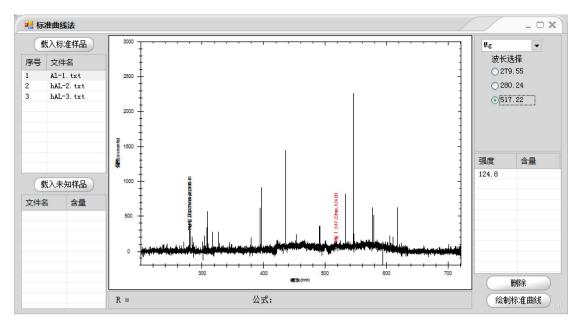


图 18 波长选择

按照载入的标准样品数量依次添加,并在每个波长后面双击输入相应样品的含量,如图 19 所示:

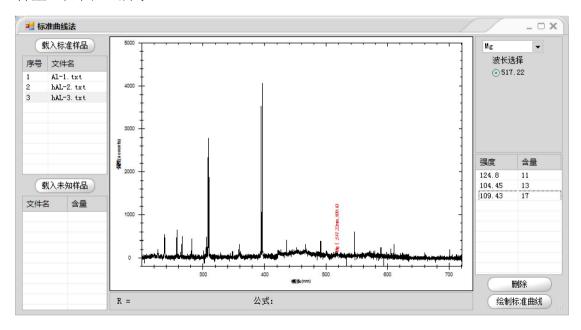


图 19 添加样品对应的含量

单击绘制标准曲线按钮,则绘制出曲线,并计算出系数 R 和曲线公式,如图 20 所示:

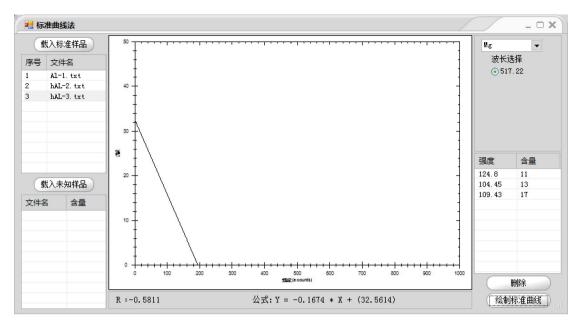


图 20 绘制曲线, 计算出系数 R 和曲线公式

单击载入未知样品,则计算出某元素在未知样品中的含量,如图 21、22 所示:

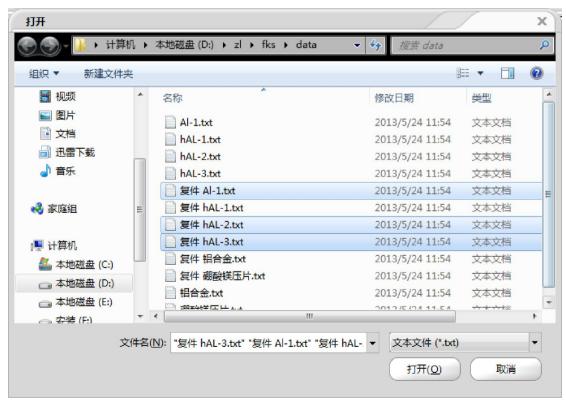


图 21 载入未知样品

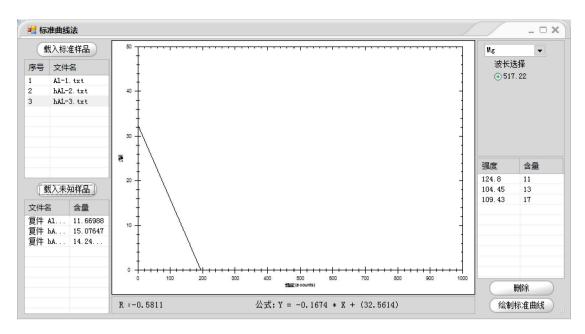


图 22 计算未知样品中某元素含量