

# Spectra Analysis 中文操作手册





1

序

緣說.....

長久以來, Jasco (日本分光) 在光譜分析技術上不斷精進, 且在 市場上佔有相當之比例, 目前 Jasco 在傅立葉轉換式紅外線光譜儀 所推出的是 FT/IR 400plus 及 600plus 系列, 在紫外/可見光分光光 譜儀則推出 V-500系列, 而在螢光光譜儀是 FP-700系列; 另外在光 譜分析方面, Jasco 於 1997 年發表最新一代光譜控制分析視窗軟 體 Spectra Manager, 其特點有下:

 整合性軟體, Jasco 之光譜儀如 FT/IR, UV/VIS 及 FP 皆是 透過 Spectra Manager 控制及分析,因此不但可用電腦同 時控制不同之光譜儀,在圖譜分析上亦只要學習一次即可.
 應用軟體眾多,每一種光譜儀除 Spectra Manage 外亦有多

種應用程式供使用者選用 (如 Validation, Lab Search...等)

本書是 Spectra Manager 之中文操作手册, 在製作過程中除要 求文句簡潔易懂外並輔以大量之圖形及範例, 期以 Step by Step 方 式將各種分析功能介紹給使用者, 如果使用者在使用上有任何問題, 亦歡迎來電.

#### 尚偉分析儀器部門

## 目錄

PART

| I | Spectra Analysis (光譜分析)       |  |
|---|-------------------------------|--|
|   | A. 檔案處理 (FILE)                |  |
|   | 開啟檔案 (Open) 10                |  |
|   | 疊圖 (Overlay) 11               |  |
|   | B. 檔案編輯 (EDIT)                |  |
|   | 圖譜複製至剪貼簿 (Copy Picture) 15    |  |
|   | 圖譜複製成點矩陣檔 (Copy Bitmap) 17    |  |
|   | C. 圖譜檢視 (VIEW)                |  |
|   | 坐標軸規格 (Scale) 21              |  |
|   | 圖譜線條編輯 (Pattern) 22           |  |
|   | 格線 (Grid) 25                  |  |
|   | D. 波峰處理 (PROCESS)             |  |
|   | 1.圖譜修正(Correction)            |  |
|   | 基準線校定 (Baseline) 28           |  |
|   | 圖譜平滑設定 (Smoothing) 30         |  |
|   | 雜訊消除設定 (Noise Elimination) 36 |  |
|   | 波峰解析設定 (Deconvolution) 40     |  |
|   | 傅立葉轉換之雜訊參數 (FT Filter) 44     |  |
|   | 2. 圖譜運算 (Operation)           |  |
|   | 波峰數學運算 (Arithmetic) 51        |  |
|   | 圖譜微分設定 (Derivatives)          |  |
|   | 3. 波峰分析 (Peak Process)        |  |
|   | 波峰搜尋 (Peak Find) 63           |  |
|   | 波峰高度 (Peak Height) 69         |  |
|   | 波峰面積 (Peak Area) 73           |  |
|   | 半波峰寬度 (Peak Width)            |  |

| 圖譜相減 | (Subtraction) | 81                 |
|------|---------------|--------------------|
|      | 圖譜相減          | 圖譜相減 (Subtraction) |

D. WINDOW(視窗排列)

| 重疊排列   | (Cascade)    |  |
|--------|--------------|--|
| 並列排列   | (Title)      |  |
| 關閉所有圖言 | 善(Close All) |  |

E. OTHER(其它設定)

| 工具列顯示 | (Tool Bar)  |  |
|-------|-------------|--|
| 喜好設定  | (Customize) |  |

F. HELP (說明)

版本及版權宣告 (About) .....101

## **Spectra Manager**



圖示: Spectra Manager 主畫面

其中左邊視窗為圖譜分析,而右邊視窗為光譜測量,每作一次光 譜測量,電腦會將測量結果直接匯集到圖譜分析中去作分析,另外使用 者亦可由圖譜分析直接開啟圖檔作圖譜分析

量测流程: .....



## PART I

## **Spectra Analysis**

## 光譜分析





如上圖所示, 光譜分析 (Spectra Manager)主要可分為兩大部份,

一為檔案管理部份,另一為圖譜處理部份

其中

【File】 Edit】 View】……為檔案管理

【Process】.....為圖譜處理

## FILE

## 檔案處理

File 主要目的是檔案處理,其項目包括

開啟檔案 (Open) 疊圖 (overlay) 關檔 (Close) 儲存檔案 (save) 另存新檔 (save as) 如下圖, File(檔案處理)可分為下列幾個部份: Open (開啟檔案),



overlay (疊圖), Close(關檔), save(儲存檔案), save as(另存新檔)

### Open (開啟檔案)

由【File】→→【Open】進入開啟檔案畫面,如下圖所示

| Open New File   |   |   | ? ×                    |
|---|---|---|------------------------|
| 查詢( <u>I</u> ): 🔁   | samples   | • 🗈   |                        |
| <ul> <li>al.jws</li> <li>baseline.jws</li> <li>ch2br2.jws</li> <li>fftfilt.jws</li> <li>green.jws</li> <li>holmium.jws</li> </ul> | ) aldh.jws<br>apolystyr.jws<br>apvc.jws<br>apvcmbs.jws<br>apqnt1.jws<br>aqnt2.jws | a qnt3.jws<br>a qnt4.jws<br>a qnt5.jws<br>a rf-kk.jws |                        |
| 檔案名稱( <u>N</u> ):<br>檔案類型( <u>T</u> ):  | JASCO Std. (*.JWS)  |   | 開啓舊檔( <u>O</u> )<br>取消 |

Spectra Manager 可開啟的光譜程式主要有兩種 (I)\*.jws (Jasco

Spectrum 格式), (ii) \*.dx (Jcamp 格式)

#### Overlay (叠圖)

疊圖模式主要是幫助使用比較不同圖譜之差異情況

使用方式如下

Step1: 開啟一圖檔,如下圖所示





Step2: 由【File】 → 【overlay】進入疊圖畫面, 如下圖所示

## EDIT

## 檔案編輯

Edit 主要的目的是將開啟的圖譜複製到剪貼簿

## 其項目包括

圖譜複製成 GIF 檔 (Copy Picture)

圖譜複製成 BMP 檔 (Copy Bitmap)

如下圖所示, Edit (檔案編輯)主要的目的是將開啟的圖譜複製到 剪貼簿中, 方便使用者在各種文書處理系統中 (如 MS Word)製成圖 文並茂的文件



#### Copy Picture (圖譜複製成 GIF 檔)

操作範例:

將已開啟之圖譜複製到文書處理系統 (Word 97)

Step 1: 由【Edit】→→【Copy Picture】, 如下圖所示



Step 2: 開啟 Word97 並開啟一新文件檔, 如下圖所示



Step3: 由 [编輯] → [貼上]將光譜圖貼到文件中, 如下圖所示



#### Copy Bitmap(圖譜複製成 BMP 檔)

操作範例:

將已開啟之圖譜複製到文書處理系統 (Word 97)

Step 1: 由【Edit】→ 【Copy Bitmap】, 如下圖所示



Step 2: 開啟 Word97 並開啟一新文件檔, 如下圖所示



Step3: 由 [编輯] → [貼上]將光譜圖貼到文件中, 如下圖所示



### VIEW

## 圖譜檢視

View 主要功能是編輯圖譜之檢視模式,如圖形坐標 軸規格大小,圖譜顏色,格線....

其項目包括

坐標軸規格(Scale)

形式编輯(Pattern)

格線(Grid)

如下圖所示, View 主要功能是編輯圖譜之觀看模式, 如圖形坐標 軸規格大小, 圖譜顏色, 格線.....







圖示:修改後X軸坐標 1000~3000 cm<sup>-1</sup>, Y 軸坐標 0~50

#### Pattern (形式編輯)

由【View】→→【Pattern】可修改圖譜線條粗細,顏色樣式..等,如 下圖所示:



#### 其中

Element:所開啟之光譜圖 (一般光譜圖為 spectrum 1, 若有疊

圖則依序為 spectrum2, spectrum3....)

Line style:光譜圖線條形式 (如實線,虛線....)

Line width:光譜圖線條粗細

Sample:光譜圖線條預視圖

As default:將所編輯之光譜圖線條規格設為預設值

將圖譜的線條透過 Pattern (形式編輯)由實線改成虛線

Step 1: 由【Edit】 → 【Pattern】, 如下圖所示



Step 2: 於 Line Style 點選虛線, 此時於 Sample 中可看到預視線條

如下圖所示

| Pattern Settings   | ×          |
|--------------------|------------|
| Element Spectrum 1 | ОК         |
| <u>C</u> olor:     | Cancel     |
|                    | As Default |
| Line Style:        | Sample     |
|                    |            |
| Line Width:        |            |



Step 3: 當線條選擇沒有問題, 按 OK 鍵可得完成圖譜, 如下所示:

#### Grid (格線)

#### 由【View】→→【Grid】可於圖譜中加入格線線條粗細,如下圖所示



圖示: 原圖選擇 Grid (格線) 功能



圖示: 格線完成圖

## PROCESSING

## 波峰處理

Processing 主要目的是分析圖譜,其項目包括

圖譜校正(Correction)

圖譜運算(Operation)

波峰分析(Peak Process)

圖譜相減(Subtraction)

單位轉換 (Y Unit Conversion)

## 圖譜校正(Correction)

Baseline (基準線設定) Smoothing (圖譜平滑設定) Noise Elimination (雜訊消除設定) Deconvolution (波峰解析設定) FT Filter (傳立葉轉換之雜訊參數)

#### Baseline (基準線設定)

Baseline 的目的主要設定光譜圖之基準線,如下圖(A)所示,因 為圖譜之基準線很明顯地不在同一水平線上,會造成判讀上的困難, 因此我們可以利用 Baseline 將圖譜之基準線拉到同一水平線上,如 下圖 (B)所示.



圖(B):經 Baseline 修正後,基準線在同一水平線上,判讀容易

#### Baseline 操作範例

**Step1**:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Correction] → [Baseline] 進入基

準線設定畫面,如下圖所示:



其中

1.上視窗為原始圖譜,下視窗為修改後圖譜之預視畫面

2. 圖上左上方為 Baseline 校正模式

line: 線性校正 (校正點間以直線連接)

spline: 抛物線校正 (校正點間以拋物線連接)

Step3: 當選定校正模式之後, 使用者可利用滑鼠去拉上視窗之基準



線,直到下視窗之預視圖符合我們所需為止,如下圖所示



Step4: 若一切沒問題, 選擇 [OK]鍵即可得到完圖如下圖所示

#### Smoothing (圖譜平滑設定)

Smoothing 的主要目的是將圖譜平滑化,如下圖(A)所示,若使 用者認為圖譜雜訊會造成判讀上的困難,我們可以利用 Smoothing 將 圖譜平滑化以方便判讀,如下圖 (B)所示.



圖(B):經 Smoothing 修正後,在1500cm<sup>-1</sup>~1800 cm<sup>-1</sup>之雜訊已被平滑化,不復存在

#### Smoothing 操作範例

**Step1**: 由 [File] → [Open] 開啟圖譜, 如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Correction] → [Smoothing] 進

入圖譜平滑設定畫面,如下圖所示



其中

1.上視窗為原始圖譜,下視窗為修改後圖譜之預視畫面

2. 圖上左上方為 method 為圖譜平滑模式

3. convolution width 為圖譜平滑程度 (5~25)數值愈大表平滑 程度愈大,但相對圖譜愈失真

Step3: 當選定圖譜平滑模式校正模式及平滑程度之後, 選擇

[Apply] 鍵觀察下視窗之預視圖,直到預視圖符合我們所需為



止,如下圖所示



Step4: 若一切沒問題, 選擇 [OK]鍵即可得到完圖如下圖所示

#### Noise Elimination (雜訊消除設定)

Noise Elimination 的目的主要消除光譜圖特定區域內之雜訊



(若選定之區域內有波峰存在亦會被消除),如下圖所示.

圖(B):經 Noise Elimination 修正後, 雜訊已被消除

| 新聞結 | W Microsoft Word - process...| 🖓 Spectra Manager

Brectra Analysis - [... 🤇 En PM 11:44
#### Noise Elimination 操作範例

**Step1**:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2: 由 [Processing] → [Correction] → [Elimination] 進

入雜訊消除設定畫面,如下圖所示



其中

- 上視窗為原始圖譜,其圖上兩垂直線間即為雜訊消除區間;下 視窗為修改後圖譜之預視畫面
- 2.圖上左上方之波數為垂直線之位置
- Step3:使用者可利用滑鼠去拉上視窗之垂直線,或直接填入垂直線 之位置,並按 [Execute]鍵,直到下視窗之預視圖符合我們所







Step4: 若一切沒問題, 選擇 OK 鍵即可得到完圖如下圖所示

Deconvolution (波峰解析設定)

Deconvolution 的目的主要作波峰解析消除,如下圖所示,因為 波峰有加成性,因此有些波峰往往是由2個或2個以上的波峰所造成, 我們可以利用 Deconvolution 將這些波峰加以釐清



圖(A):原始圖譜,我們認為是由3支波峰所造成



圖(B):經 Deconvolution 修正後,3支波峰已被釐清

#### Deconvolution 操作範例

Step1:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Correction] → [Devonvolution] 進

入雜訊解析設定畫面,如下圖所示



其中

1.上視窗為原始圖譜,其圖上兩垂直線間即為雜訊消除區間;下

視窗為修改後圖譜之預視畫面

2. 圖上左上方 FWHM (Full width of half maximum)為最大半波

峰寬度

Step3:使用者直接填入FWHM之值,並按 [Apply] 鍵,直到下視窗



之預視圖符合我們所需為止,如下圖所示



Step4: 若一切沒問題, 選擇 OK 鍵即可得到完圖如下圖所示



FFT Filter (傅立葉轉換之雜訊參數)

FFT Filter 的目的主要將圖譜再計算,並配合雜訊參數將不符雜 訊參數之雜訊于以消除

1. 假設一波峰如下圖所示, 由圖中發現雜訊寬度約為 10~12cm<sup>-1</sup>



2. 此時我們利用 FFT Filter 並設定雜訊參數為 15cm<sup>-1</sup>此時小於

15cm<sup>-1</sup>之雜訊將被消除,如下圖所示



#### FFT Filter 操作範例

Step1:由 [File]→ [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Correction] → [FFT Filter] 進入

#### 傅立葉轉換之雜訊參數設定畫面,如下圖所示



其中

1.上視窗為原始圖譜,其圖直線上點為X軸點之緊密程度(X)

及Y軸點之壓縮程度 (Y), 下點為雜訊消除參數

(Period); 下視窗為修改後圖譜之預視畫面

#### 2. 圖上左上方參數

X:圖形X軸點之緊密程度Y:圖形Y軸點之壓縮程度Period:雜訊消除參數

Step3 :

- 由上圖我們欲消除 1400cm<sup>-1</sup>~1800 cm<sup>-1</sup> 間之雜訊,並由 圖中我們發現雜訊之寬度約在 15 cm<sup>-1</sup>
- 此時我們可以利用滑鼠移動下點將 Period 定在 15 cm<sup>-1</sup> (由下圖(A), 我們發現 Period 之極限值為 9.64525, 無法 達到 15 cm<sup>-1</sup>之要求,此時我們可以水平移動上點減小 X 值,在水平移動下點以增加 Period,值,直到 Period 達到 15 cm<sup>-1</sup>,如(B)上圖),並按 [Apply]得預示圖譜,如(B)下圖 所示



圖(A): x 為 1638.4 時, Period 極限值為 9.64525



圖(B):上圖 x 為 1035.64 時, Period 極限值為 15.2589

下圖為預視圖譜

Step4:Y 為圖形之壓縮程度, Y=0.9 表所得圖譜之穿透率將為原來的



90%, 如下圖所示



Y為 0.5 時,所得圖譜起點穿透率為 42.5%



Step5: 若一切沒問題, 選擇 [OK]鍵即可得到完圖如下圖所示

# 圖譜校正(Correction)

Arithmetic (波峰數學運算)

Derivatives (圖譜微分設定)

#### Arithmetic (波峰數學運算)

Arithmetic 的目的主要作波峰Y軸之數學運算,使用者可以對單 一光譜圖波峰作數學運算,亦可對兩光譜圖波峰作數學運算.下圖(A) 為一光譜圖,下圖(B)則為圖(A)乘以2之結果.



圖(B):圖(A)乘以2,起始點穿透率為170%

### Arithmetic 操作範例

### I 單一波峰運算

Step1:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Operation] → [Arithmetic] 進入



波峰數學運算設定畫面,如下圖所示



Step3: 若波峰欲從 90%增至 250%則計算式如下

 $3.0000 \times S_1 + 70.0000 = Memory#2$ 

 $(2.0000 \times 85\% + 80.0000 = 250\%)$ 



按 [Apply]鍵得預視圖譜, 如下圖所示

其中



Step4: 若一切沒問題, 選擇 [OK]鍵即可得到完圖如下圖所示

#### II 兩波峰間運算

Step1:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示





#### Step2:由 [File] ──►[Overlay] 開啟另一圖譜,與上一圖譜重疊

Step3:由 [Processing] → [Operation] → [Arithmetic] 進入

波峰數學運算設定畫面,如下圖所示





Step3: 假設吾人欲以2倍 $S_1$ 加上 $S_2$ 則公式計算如下

 $(2.0000 \times S_1 + 0.0000) + (1.0000 \times S_2 + 0.0000) = memory #2$ 

 $(2.0000 \times 85\% + 0.0000) + (1.0000 \times 85\% + 0.0000) = 255\%$ 



按 [Apply]键, 結果如下圖所示



Step4: 若一切沒問題, 選擇 OK 鍵即可得到完圖如下圖所示

### Derivatives (圖譜微分設定)

Derivatives 的目的主要是將光譜圖作1~3次微分,形成1~3次微分。分圖譜,如下圖所示.



圖(A):原始圖譜



圖(B):一次微分圖譜

#### Derivatives 操作範例

Step1:由 [File]→ [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Correction] → [Derivatives] 進入

圖譜微分設定設定畫面, 如下圖所示



其中

1.上視窗為原始圖譜,下視窗為修改後圖譜之預視畫面

2.圖上左上方 Order 為圖譜微分次數

#### Interval 為微分區間 (dy/dx 之 dx)

Step3: 當選定圖譜微分次數及微分區間之後, 按 [Apply]鍵得預視



圖譜,如下圖所示



Step4: 若一切沒問題, 選擇 [OK]鍵即可得到完圖如下圖所示

## 波峰處理(Peak Process)

Peak Find (波峰搜尋)

Peak Height (波峰高度)

Peak Area (波峰面積)

Peak Width (半波峰寬度)

#### Peak Find (波峰搜尋)

Peak Find 的目的主要是設定所要搜尋之特定波峰,如下圖所示





圖(B):經 Peak Find 所定義出特定之波峰

#### Peak Find 操作範例



Step1: 由 [File]— →[Open] 開啟圖譜,如下圖所示

Step2:由 [Processing] → [Peak Process] → [Peak Find] 進入

波峰搜尋基設定畫面,如下圖所示



其中

Peak 為波峰搜尋模式

1. Top: 以波峰為搜尋對像

2. Buttom:以波谷為搜尋對像

3. Both:以波峰及波谷為搜尋對像

Noise Level:雜訊參數,當波之高度超過雜訊參數之設限值為波

峰,否則為雜訊

Step3: 當決定雜訊參數之後,按 [execute]進入波峰決定畫面, 如下



圖所示

其中

Add: 增加波峰

Delete: 刪減波峰

Print:列印結果

Add 及 Delete 之用意在使使用者以手動方式決定波峰,當使用

者透過雜訊參數 (Noise level)仍無法得到欲得到之波峰,則可利

用 Add 或 Delete 以手動方式決定波峰

(A) Add (增加波峰)

如下圖所示,以滑鼠移動圖譜之直線到所欲增加波峰之位置後按 [Add]即可增加波峰



將垂直線移至 1780cm-1 處,按[Add]鑑

(B) Delete(刪減波峰)

如下圖所示,以滑鼠指到所欲刪減波峰之位置後按 [Delete]即可 刪減波峰



Step4: 若一切沒問題, 選擇 OK 鍵即可得到完圖如下圖所示



Step5:由 [View] → [Peak] → [Bar X,Y]即可看到所搜尋出



之波峰,如下圖所示

## Peak Height (波峰高度)

Peak Find 的目的主要是計算特定波峰之高度,亦可比較不同波峰高度之比值,如下圖所示



圖示: 2899cm<sup>-1</sup>處波峰高度為 0.4097, 1722cm-1處波峰高度為 0.0351

#### Peak Height 操作範例

Step1:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Peak Process] → [Peak Height] 進入

波峰高度畫面,如下圖所示



P1, P2 分為兩支使用者指定之特定波峰

Base1, base2 則為決定 P1, P2 高度之基準點

波峰高度計算如下



P1, P2, base1, base2 位置均由使用者決定

Step3:由[setting]進入波峰高度設定模式,如下圖所示



- 使用者可於 baseline 選項中選擇單基準點 (1 point base)或 雙基準點 (2 point base)計算波峰高度
- 2. 另外在計算上可採手動 (manual)或自動 (Auto)計算

手動 (manual) : P1, P2, base1, base2 位置均由使用者決定

自動 (Auto) : P1, P2, 由使用者決定, base1 及 base2 則由電腦

判斷

3. 決定波峰高度設定模式之後,按 [OK]回到波峰高度畫面, 如下圖

所示



➡→由上圖波峰高度畫面我們得知 P1 高度為 0.4097, P2 高度

為 0.0351; 且高度比 P1/P2=11.6830, P2/P1=0.0956
#### Peak Area (波峰面積)

Peak Find 的目的主要是計算特定波峰之面積,亦可比較不同波峰面積之比值,如下圖所示



波峰面積為 28.3348

#### Peak Area 操作範例





Step2:由 [Processing] → [Peak Process] → [Peak Area] 進入

\_ 8 ×

\_ 8 ×



波峰面積畫面,如下圖所示



P1, P2 分為兩支使用者指定之特定波峰範圍

Range (base) 則為決定 P1, P2 面積之基準點

波峰面積計算如下

其中



P1, P2, Range (base) 位置可由使用者決定

Step3:由[setting]進入波峰面積設定模式,如下圖所示

| 🚜 Spe<br>💷 Fi | ectra Analysis - [View (pv<br>le <u>E</u> dit <u>V</u> iew <u>P</u> roces   | rc.jws)]<br>sing <u>W</u> indow <u>O</u> the  | r <u>H</u> elp  |  |   | _ 8 ×    |
|---------------|---|---|---|--|---|----------|
| -             | — pvc.jws   | · X Y *   | + ++ +  | 🔶 t 🐼 🔀 🕄  |   |          |
| 1             | 🙀 Peak Area   |   |   |  | ×   |          |
| Abs           | Area<br>P1 -455.0782<br>P2 -455.0782<br>Ratio<br>P1/P2 1.0000<br>P2/P1 1.0000<br><u>Print</u><br><u>Scale</u><br>OK<br>Cancel | Range(Are   P   Peak Area - S   Data:   P1:   P2:   Baseline   © 2 Poir   C No Ba   C Arbitra | a) Range(Ba<br>[1479.58<br>et<br>2 Point Base -<br>2 Point Base -<br>t Base<br>ise<br>iny Base<br>A | Seline)<br>2313.62<br>OK<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculation<br>Calculati | Cancel<br>Region<br>e Ragion<br>agion       | h        |
|               | 0   | 3000  | 1.3   | 2000   |   | 400      |
|               | 4000  | 5000  | Wavenumb  | er[cm-1]   | 1000  | 400      |
| ● 開開          | 🗯 🛛 🕎 Microsoft Word  | d   | ager 🛛 🌆 Spectra  | Anal <b>愛</b> 未命名 - 小  | -畫家 ┃ - • • • • • • • • • • • • • • • • • • | PM 11:43 |

其中



- 另外在計算上亦有3種
  - a. Ignore Under baseline Region (基準線下面積忽略不計)
  - b. Subtract Under baseline Region (基準線下面積於以扣除)
  - c. Add Under baseline Region (基準線下面積於以合併計算)



Under baseline Region

決定波峰面積設定模式之後,按 [OK]回到波峰面積畫面, 如下圖

所示



▶ 由上圖波峰面積畫面我們得知 P1 面積為 54.0080

P2 面積為 28.3561; 面積比 P1/P2=1.9046 P2/P1=0.5250

#### Peak Width (半波峰寬度)

Peak Width 的目的主要是計算特定波峰半波峰寬度 (FWHM),

如下圖所示



#### Peak Width 操作範例

Step1:由 [File]→ [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Peak Process] → [Peak Width]進入

半波峰寬度設定畫面, 如下圖所示



Xaxis(R),及Xaxis(L)為決定特定波峰半波峰寬度之基準線,使 用者可利用滑鼠去拉上視窗之基準線

➡▶ 由上圖半波峰寬度畫面我們得知, FWHM 為 42.2476

## 波峰相減(Subtraction)

波峰相減(Subtraction)基本上是 Arithmetic (波峰數學運算)其 中一項功能,因使用率極高,尤其是比較兩圖譜間之差異性, 因此在此專章說明.



Subtraction 主要是將兩圖譜相減,以比較其間之差異性



圖 B





#### Subtraction 操作範例

Step1:由 [File]→ [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Subtraction]進入波峰相減畫面,如下



圖所示

選擇欲相減之圖譜



其中

- 1. 上視窗為原始圖譜, 下視窗為修改後圖譜之預視畫面
- 2. 圖左上方 [Factor]表原始圖譜(即 圖 A)之放大倍數; [Step]表 原始圖譜(即 圖 A)放大時每次增加之倍數[Exchange]表 圖 A 與圖 B 對調 (原來是 A-B 後來 B-A)

Step3:選擇完 [factor]後, 按[OK]鍵相減後圖譜,如下圖所示



#### YAxis Conversion (圖譜Y軸單位轉換)

Spectra Manager 為一整合性軟體,因此不論是 UV/VIS(紫外光) 圖譜, FT/IR(紅外光)圖譜或是 FP(螢光) 圖譜皆可作 Y 軸單位轉換 (%T, ABS, %R, KM....等)



圖(A):原始圖譜,Y軸單位為 %T



圖(B):經單位轉換,Y軸單位變為 Abs

#### Y 軸單位轉換操作範例 (%T ──→ Abs)

Step1:由 [File]→ [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



Step2:由 [Processing] → [Y unit conversion]] 進入單位轉換畫

面,如下圖所示



#### Step3:選擇完所欲轉換之單位(Abs) 後按[OK]鍵即可



經單位轉換,Y 軸單位變為 Abs

### WINDOW

# 視窗排列

Window 主要目的是排列已開啟之圖譜視窗,

### 其項目包括

重疊排列 (Cascade) 並列排列 (Title) 關閉所有圖譜(Close All)

89

Window (視窗)主要是對已開啟之圖譜視窗作適當之安排,當使用 者同時開啟數個圖譜,可利用 Window (視窗)作適當之排列,如下圖 所示, Window (視窗)的功能主要有 Cascade(重覆排列), Title(並列排 列),以及 Close All(關閉所有圖譜)



#### Cascade(重覆排列)

Cascade(重覆排列)主要是對已開啟之數個圖譜視窗作 3D 排列, 如下圖所示.





Cascade(重覆排列)顯示

Title(並排顯示) 主要是對已開啟之數個圖譜視窗作堆疊排列, 如下圖所示.





Title(並排顯示)顯示

#### Close All (關閉所有圖譜)

Close All (關閉所有圖譜)主要是關閉所有已開啟之圖譜視窗,如下圖所示.





### **OTHER**

# 其它設定

Other 主要目的是雜項參數設定,

### 其項目包括

工具列顯示 (Tool Bar)

喜好設定 (Customize)

#### Tool Bar (工具列顯示)

所謂工具列就是軟體本身將較常用之功能選項以圖形顯示讓使 用者直接點選,而不用再透過選單點選. Spectra Analysis 就如同 Word, Excel...等 Windows 軟體一般,亦提供常用之工具列方便使用者 使用.如下圖所示



工具列

除了工具列顯示外, Spectra Analysis 亦提供工具列编輯功能,

使用者可依需要自由編排.

工具列编辑

操作範例:

Step 1: 由【Other】→【Tool Bar】→ 【Edit】, 如下圖所示



無工具列

工具列編輯視窗,其中左視窗為 Spectra Analysis 所提供之所有工具列,而右視窗則為所點選之工具列

Step 2: 於左視窗點選所欲使用之工具列,如下圖所示.

|                | Desistand Test Dutters   |                |
|----------------|--------------------------|----------------|
| ool Buttons:   | Registered Tool Buttons: |                |
| 🝌 Baseline     | 🔺 🛛 📈 Baseline           | <u>S</u> elect |
| 💑 Smoothing    | Smoothing                | <u>R</u> emove |
| بر Peak Find - |                          |                |
| 🕂 Peak Height  |                          | OK             |
| 🔔 Peak Area    | -                        | Cancel         |

選擇基準線校正及圖譜平滑處理兩個工具列

Step 3: 按【OK】後,在 Spectra Analysis 則出現基準線校正及圖譜

平滑處理兩個工具列, 如下圖所示



出現基準線校正及圖譜平滑處理兩個工具列

喜好設定 (Customize)

所謂喜好設定 (Customize), 就是使用者設定開啟圖譜, 或列印 圖譜時一些偏好設定, 如下圖所示

| View                                     | ОК    |
|--|-------|
| Apply scale setting to all view.         | Cance |
| 🔽 Auto Scale in Open, Overlay            |       |
| Print<br>Use Standard <u>F</u> orm       |       |
| 🔽 Ask the <u>T</u> itle before printing. |       |
| 🔟 Don't display "Print" Dialog.          |       |
| Legend                                   |       |
| C Allways C Only Plural Data 🗿           | Never |

其中, 在開啟圖譜時檢視 (View)部份

1. Apply view setting to all - 將目前檢示之模式適用於以

後所啟之所有圖譜

2. Apply scale setting to all view - 將目前座標之格式適用於以

後所開啟之所有圖譜

3. Auto scale in Open, Overlay to all view - 當開啟圖譜或疊圖,

電腦自動將座標軸最

佳化

### 在列印圖譜 (Print)部份

- 1. Use standard form 使用標準格式列印 (附圖一)
- 2. Ask title before printing 列印前輸入列印抬頭,如下圖

| 1 |
|---|
|   |

| Print <u>T</u> itle          | OK            |
|------------------------------|---------------|
| 列印前輸入列印抬頭                    | Cancel        |
| Legend                       |               |
| C Allways 🔿 Only Plural Data | <u>S</u> etup |
| Never                        |               |

3. Don't display "Print" dialog - 列印時不顯示列印對話視窗

### HELP

### 說明

Help 主要是軟體版本及版權說明,

### 其項目包括

版本及版權宣告 (About)

#### 版本與版權宣告(About)

Help 是 Jasco Spectra Manager 版本說明與版權宣告, 如下圖所 示, Spectra Manager for win95, 1.27.00 版, 版權隸屬於 Jasco...等

