

# NEW FT/IR Spectra Manager 2 中文操作手册



### Spectra Manager 2

🖉 Spectra Manager		
Program Application <u>V</u> iew <u>H</u> elp		
Instrument JASCO IR Validation Analysis JASCO Canvas Spectra Analysis	<ul> <li> <i>ি</i> ● ▲ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●</li></ul>	
	Inforamtion History	
Ready		.:

圖示: Spectra Manager 2 主畫面

左邊視窗有圖譜測量及圖譜分析兩項,每測量一次,電腦會將測量結果直接 匯集到圖譜分析中去作分析,另外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 Measurement 圖譜測量

### A <u>啟動程式</u>

開啟主機電源後,由電腦程式集中啟動 spectra manager 2

🧬 Spectra Manager		
<u>P</u> rogram <u>Application ⊻i</u> ew <u>H</u> elp		
<ul> <li>Instrument</li> <li>Instrument</li> <li>Spectra Measurement</li> <li>Validation</li> <li>Analysis</li> <li>IASCO Canvas</li> <li>Spectra Analysis</li> </ul>	<ul> <li>         · ● 真面         · ● ●         · ●         · ●</li></ul>	
	Inforamtion History	
Ready		.::

主畫面選擇右邊視窗之 Spectra measurement 選項進入 Spectra measurement 畫面 如下圖所示:

🙀 Spectra measurement - JASCO FTIR/Cl	2961786		
<u>File Measure Settings View H</u> elp			
🗉 🐷 🗊 💿 🕨 🛼 🌉	; <b>5</b> \$; <b>5</b> \$ \$ • • • • • • • • • • • • • • • • •		
Information Bar _ & 🗆 ×	F 🖈 H, 🖫 🖫 🐷 🔟 💭 📟 🦋	Change the layout	Zoom Bar _ æ □ ×
Set the sample and click [Start] button	100		
Sample massurement	-		
Sample measurement	80 -		
Cand the date	-		
Send the data	60 -		
End			
Enu	%T		
	40 -		
000000000000000000000000000000000000000	-		
	20 -		
	-		
000000000000000000000000000000000000000			
Sequence Information	4000 3000	2000 1000 400	
	wavenume	ier [cm-1]	
		Thomband Ba	

點選 Change the layout → standard 讓版面比較精簡化(左邊為參數;右邊 為圖譜顯示區),如下圖所示:

🙀 Spectra measurement - JA	SCO FTIR/C00296	51786								- 7 🛛
<u>File M</u> easure <u>S</u> ettings <u>V</u> iew	<u>H</u> elp									
	) <b>,                                   </b>		学 日本 同一	- 🕠 🕻	- L. Q 🔚	P	-			
Information Bar	_ # 0	×			70 🛄 🏧 🐐		Standard			-
Item	Information	<u> </u>	, -				Standard + Thumhnail			
🖃 🥔 JASCO FTIR	idle		100							
Model	FT/IR-4600typeA						Full Function			
1234 Serial No.	C002961786						Functional Group			
Parameters			-			-	Onick Start			
🖹 Scan Range	7800-350cm-1						Quarsian			
Accumulation	8						Result View			
Resolution	4cm-1		80 -				OC Analysis			
📄 VerticalAxis(Sm	%T					_	Q			
VerticalAxis(Bkg)	Single									
E) Gain	Auto									
Aperture .	Auto									
Scan Speed	Auto									
Filter	Auto									
Apodization	Cosine	_	60							
E ZeroFilling	ON	-								
Source	Standard									
👸 Detector	TGS		%т							
E 📿 Accessory	No accessory									
1234 Serial No.										
E Sequence			4n –							
Quick Start	OFF									
Noise Elimination	OFF									
H2O Reduction	OFF									
CO2 Reduction	OFF									
Auto Baseline C	OFF									
Smoothing	OFF									
ATR Correction	OFF		20							
K/M Conversion	OFF									
A Unit Conversi	OFF									
Arithmetic	OFF		-							
Subtraction	OFF									
Peak Find	OFF									
Peak Height	OFF	~	0							
Seguence Information	OFF	-	4000		3000			2000	1000	400
ned course innormation	vvavenumber [cm+1]									
										NUM
🛃 開始 🔒 🤷 Analyz	eIt IR 🔂 🔁 W	indow	s 🔸 👿 FTIR S	SOP-Sp	🚰 Spectra Mana		🍂 Spectra measu	🦉 Change the la	Сн 🖮 🙎 🅄 🄇	🥵 下午 04:14

### B <u>参數設定</u>

- 由 開啟預覽背景圖譜畫面,右方視窗可設定參數,主要有4個項目:
  - (1) Standard 量測參數設定
  - (2) Optics 光學系統設定
  - (3) FFT/Time 傅立葉轉換設定
  - (4) Sequence 操作系統設定

- 各項參數詳述如後。
  - (1) Standard 量測參數設定



- Number of Scan :圖譜掃瞄次數,使用者可自行設定 (1-32000),亦可由 Auto 選項讓儀器自行判斷
- ▶ Resolution: 光學解析度 (1-16cm<sup>-1</sup>),預設值為 4 cm<sup>-1</sup>
- ▶ Range :圖譜測量範圍
- ▶ Sample: 樣品測量模式 (穿透率%T、吸光度 Abs、反射率%R...)
- ▶ Background:背景測量模式 (single、穿透率%T、吸光度 Abs、反射率%R...)

#### (2) Optics 光學系統設定



- ➢ Source:光源,原為 Standard
- ▶ Detector: 偵檢器選擇,標準為TGS
- ▶ Sample chamber:樣品槽,原設定為 Standard
- ➢ Gain:訊號倍增值(訊號可放大1-1024倍),一般選擇 Auto 由光譜儀自動 判定
- Scan speed:掃瞄速度(干涉儀移動鏡移動速率)一般選擇 Auto 由光譜儀自動判定
- ▶ Filter:檢知器訊號輸出頻率,一般選擇 Auto 由光譜儀自動判定



### (3) FFT/Time 傅立葉轉換設定

傅立葉參數設定因使用者甚少使用此參數設定,在此不予略過討論.



操作數據系統設定因之後會再分析程式中處理數據,在此不予略過討論

#### C 樣品測量

(1) 直接測量:

步驟一: 背景圖譜直接測量

由 建入背景圖譜直接測量



(2) 預覽測量:

步驟一: 背景圖譜測量

若使用者欲測試樣品圖譜,可由 建入背景圖譜測量,如下圖所示:



其中:

右圖為圖譜參數設定

左圖為預視圖譜

使用者必需先設定完圖譜參數設定後才會作圖譜掃瞄

步驟二: 樣品圖譜測量

若使用者欲測試量樣品圖譜, 可由→→進入圖譜測量,如同背景圖譜測量,使用者必先設定完圖譜參數設定後才會作圖譜掃瞄

備註: 背景預視圖譜中能量值 (Energy)的高低代表 FT/IR 光學系統 及圖譜解析度的好壞,能量值愈高則光學系統及圖譜解析度 愈好,能量值愈低則光學系統及圖譜解析度愈差,當能量值 降至 12000×1 時,表示光學系統須維修及校正。

# PART II Spectra Analysis 圖譜分析

### A <u>啟動程式</u>

當樣品測量完成後,圖譜應可自動傳送至 Spectra Analysis;或使用者可由 spectra manager 2 左方程式選取 Spectra Analysis 後開啟



如上圖所示,圖譜分析 (Spectra Analysis)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

### FILE

# 檔案管理

### File 主要目的是檔案處理,其項目包括

開啟檔案 (Open)

疊圖 (overlay)

關閉檔案 (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 Data			? 🔀
搜尋位置(I):	🚞 samples	GAL	<del>ه</del>
fftfilt.jws holmium2.j polystyr.jws pvc.jws pvcmbs.jws rf-kk.jws	ws s		
檔案名稱(N):	6		開啓(0)
檔案類型(I):	Standard Files (*.jws)	<b>·</b>	取消
	Multi View		

#### Overlay (疊圖)

疊圖模式主要是用來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

#### 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 2000)

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



國 文件2 - Mi	crosoft Word						
檔案(日) 續	隆臣 被親田	插入① 格式	(2) 工具(1) 書	(格仏) 親審(型)	院明(H)	輸入電源解答的問題	- ×
	3 5 6 0	🍼 🕺 📾	B	🝓 🔌 新細明體	- 12	• B / U •	A A ≅ "
12 -		- 1/2 p -	<u>/</u> - 🗇 - 🖄 -	<b>□</b> •■■ E	5• 3E H 🖄	<b>.</b>	
- A 121 1	41 161 181	1101 1121 114	1 151 151 120	1 1221 1241 1261	1281 1301 1321	1342 1361 1381 140	1 142
F							
■ 9 8 3 4 神岡(2) • ↓	快取圖案①・	1.00	) M M 4 *	0 6 0 - 2	· <u>·</u> · = =	≓∎₽.	)     
頁1 前1	1/1	於 2.5cm	行1 欄1	REC TRE EXT	OVE 中交(台湾)	Gar	

Step 2: 開啟 Word 2000 並開啟一新文件檔,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.....



#### Scale (坐標軸規格)

由【View】 → 【Scale】修改 X、Y 坐標軸規格,如下圖所示





圖示:修改後X軸坐標 400~3000 cm<sup>-1</sup>

#### Pattern (形式编輯)

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

其中

Item: 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

操作範例:

將圖譜的線條透過 Pattern (形式編輯)由實線改成虛線

- Step 1: 進入【Edit】 → 【Pattern】
- 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

Patterns			×
<u>l</u> tem :	Spectrum 1	<b>~</b> (	ОК
Line ——		(	Cancel
<u>C</u> olor :	<b>•••••••••••••••••••••••••••••••••••••</b>	Sample	
<u>L</u> ine style :			
Line <u>w</u> idth		Set <u>a</u> s d	efault

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: 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)

#### 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.

### Baseline 操作範例

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



圖(A):原始圖譜,因基準線不在同一水平線上,會造成判讀上的困難

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







圖(B):經 Baseline 修正後,基準線在同一水平線上,判讀容易

#### 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.

#### Smoothing 操作範例

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



圖(A):原始圖譜, 在1500cm<sup>-1</sup>~1800 cm<sup>-1</sup>有雜訊存在

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

Step4: 若一切沒問題, 選擇 [OK]鍵即可得到完圖如下圖所示



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

#### <u>Noise Elimination (雜訊消除設定)</u>

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.

#### Noise Elimination 操作範例

Step1:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



圖(A):原始圖譜

Step2:由 [Processing] → [Correction] → [Elimination] 進 入雜訊消除設定畫面,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 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



圖(B):經 Noise Elimination 修正後, 雜訊已被消除

#### 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

#### Deconvolution 操作範例

Step1:由 [File] → [Open] 開啟圖譜,如下圖所示



圖(A):原始圖譜,我們認為是由3支波峰所造成

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 圖(B):經 Deconvolution 修正後,3 支波峰已被釐清

Step4: 若一切沒問題, 選擇 OK 鍵即可得到完圖如下圖所示




## 圖譜計算(Operations)

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.

## Arithmetic 操作範例

I 單一波峰運算



Step2:由 [Processing] → [Operation] → [Arithmetic] 進入 波峰數學運算設定畫面,如下圖所示



1.上視窗為原始圖譜,下視窗為修改後圖譜之預視畫面



Step3: 若波峰欲從 75% 增至 100% 則計算式如下

 $1.0000 \times S_1 + 25.0000 = Memory#2$ 

 $(1.0000 \times 75\% + 25.0000 = 100\%)$ 

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



## II 兩波峰間運算



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



其中



Step3: 假設吾人欲以 S1 加上 S2 則公式計算如下

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

 $(1.0000 \times 75\% + 0.0000) + (1.0000 \times 75\% + 0.0000) = 155\%$ 

按 [Apply]鍵, 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次微分圖譜,如下圖所示.

## Derivatives 操作範例



Step2:由 [Processing] → [Correction] → [Derivatives] 進入 圖譜微分設定設定畫面,如下圖所示



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]鍵即可得到結果,如下圖所示



## 波峰分析(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

## Peak Find 操作範例



Step2:由 [Processing] → [Peak Process] → [Peak Find] 進入 波峰搜尋基設定畫面,如下圖所示



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 [Apply]進入波峰決定畫面,如下 圖所示

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 1946cm-1 處,按[Add]鍵

📈 Peak Find			? - 🗆 🔀
Memory-8			ОК
Wavenum %	T Parame	ters	
539.971 6.9	98837 <u>P</u> eak:	Bottom V Noise Level: 50	Cancel
702.926 -0.4	471155		Print
754.031 0.2	253495 Upp	er Limit 100 📃 Lower Limit -10 Apply	<u> </u>
1027.87 13	146776		Scale
1402.14 -0.	113324 1946.7	79 cm-1 58.1027	
1600.63 5.6	65571		Add
1946.79 58	1027	00	Delete
2925.48 -0.1	0833388	monorman and MMM Like in M	Delete
3024.8 -0.	10958 %T	50 	

(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



將游標移至 539.97cm-1 處按 [Delete]鍵

Step4: 若一切沒問題, 選擇 OK 鍵即可得到完圖如下圖所示



#### 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

## Peak Height 操作範例



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 [Calculation Method] 進入波峰高度設定模式,如下圖所示



- 1. 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
- 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
- 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 1.173, P2 高度

為 0.4276; 且高度比 P1/P2=2.743, P2/P1=0.364

#### 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

圖示: 2631cm<sup>-1</sup> 波~3152 cm<sup>-1</sup> 波峰面積為 58.5249; 1397cm<sup>-1</sup> 波~1497 cm<sup>-1</sup> 波峰面積為 28.3348

Peak Area 操作範例



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



P1, P2, Range (base) 位置可由使用者決定





其中 面積計算模式有3種





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 12.751 P2 面積為 1.9245; 面積比 P1/P2=6.6256 P2/P1=0.1509

## 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



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

## 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.



圖 A

圖 B

Subtraction 主要是將兩圖譜相減,以比較其間之差異性









## Subtraction 操作範例





先選擇欲相減之圖譜,將圖譜重疊,如下圖所示:



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



- 1. 上視窗為原始圖譜, 下視窗為修改後圖譜之預視畫面
- 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)

#### Y 軸單位轉換操作範例 (%T →→ Abs)



**Step2**:由 [Processing] → [Y unit conversion]] 進入單位轉換畫面,如下圖所



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)
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.



Title(並排顯示)

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.



## 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.

📇 Spect	ra Analysis				
<u>F</u> ile <u>V</u> ie	w <u>O</u> ther <u>H</u> elp				
🖻 🖬	5 Q. 🤋				
XY	( ++ ++ ++ )	$\Leftrightarrow \Leftrightarrow \not \in$	从匈从器		
	<u>k</u>	tt	ただ	-42	FFT
	- 🍽 🏢 🎼 🎊				
📇 Spect	ra Analysis				
Г Тта					
Ready					