

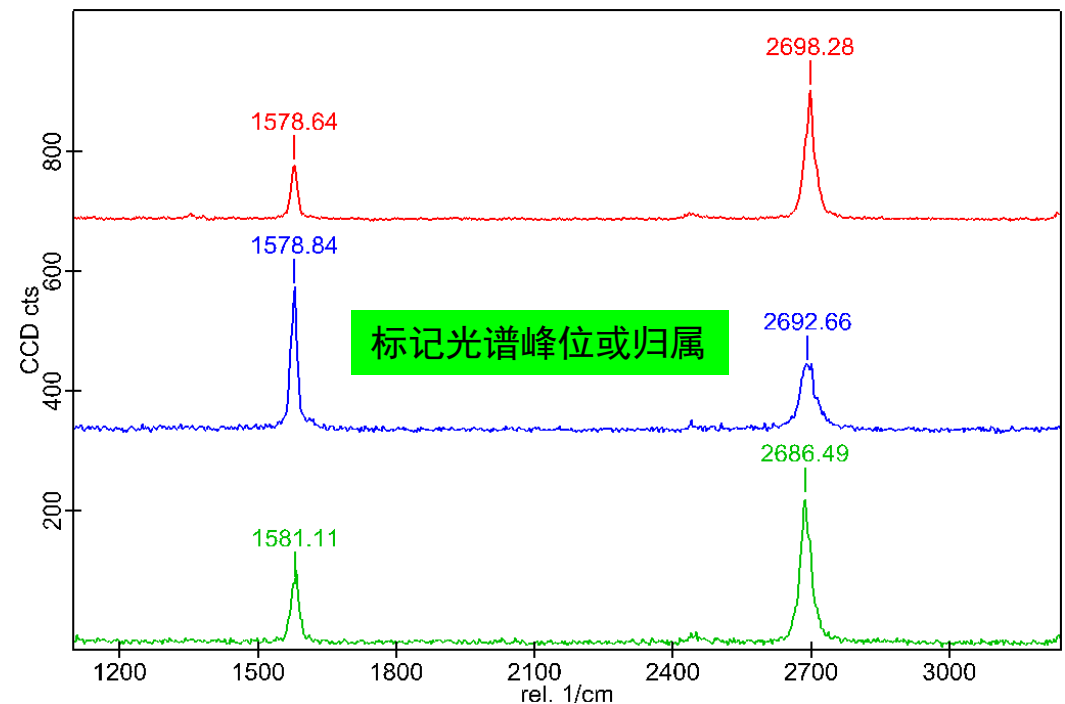
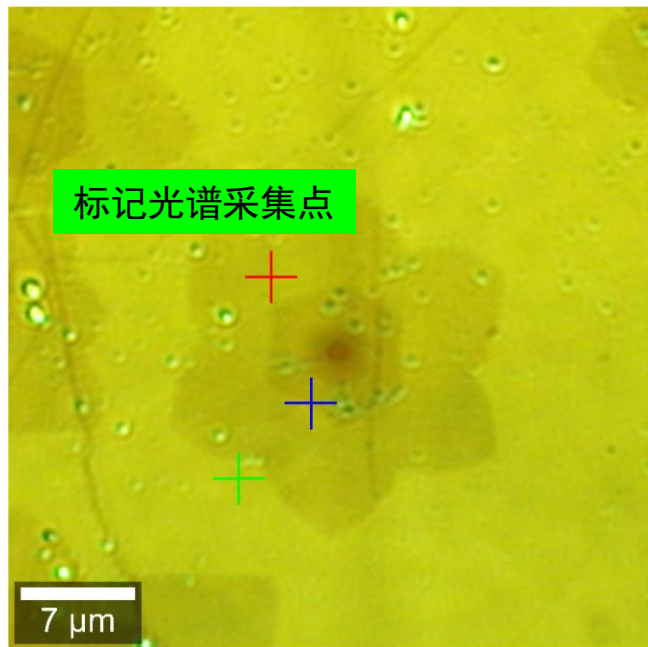
德国WITec拉曼数据处理培训资料



made
in
Germany

常见模板：文献中的拉曼数据

1. 单个或多个拉曼光谱

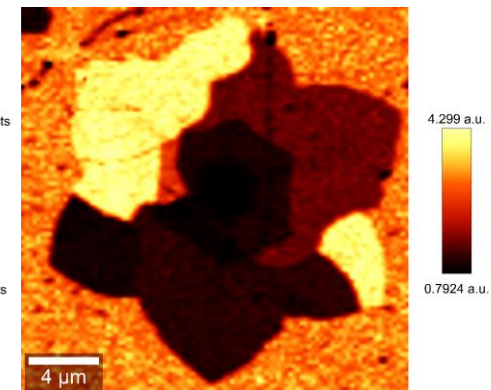
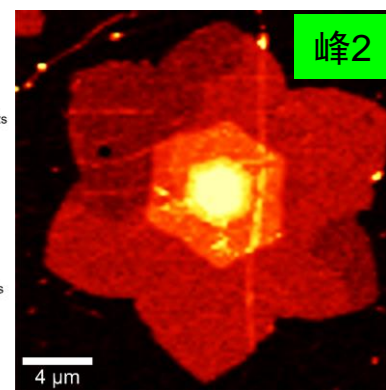
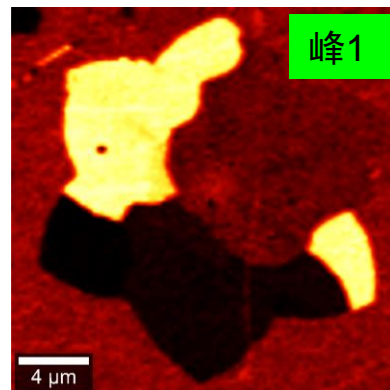
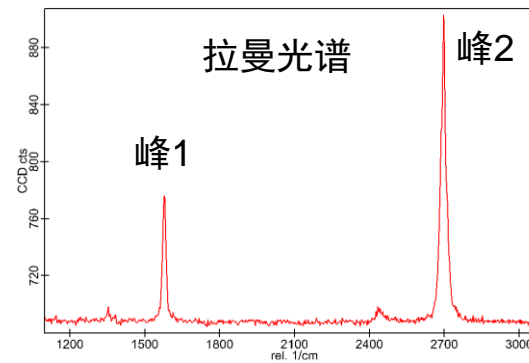
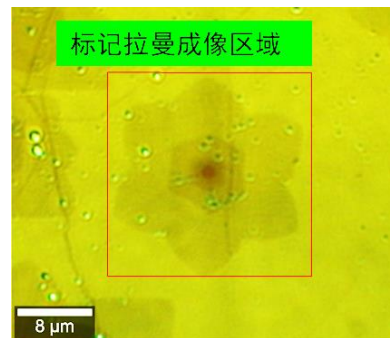


数据要求：光学图像 + 高信噪比特征拉曼光谱（对应于特定化学成分）

数据解读：根据特征光谱峰位、峰强及半峰宽，分析材料化学结果、均匀性、变化等

常见模板：文献中的拉曼数据

2. 拉曼成像(峰面积、峰强比、峰位及峰宽)

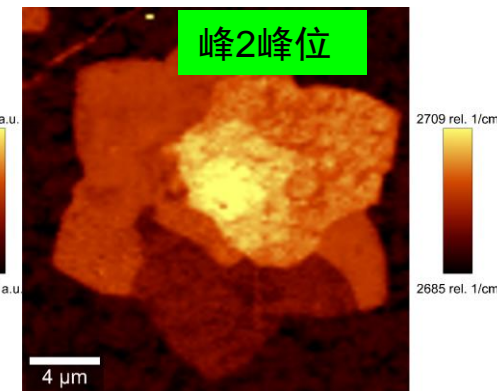
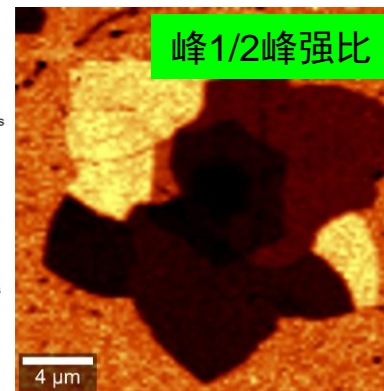
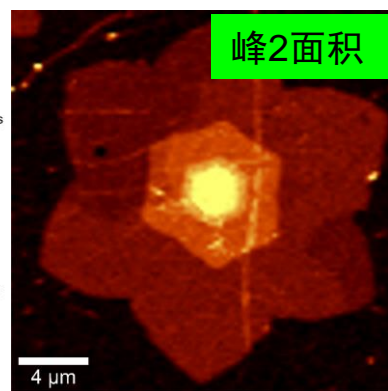
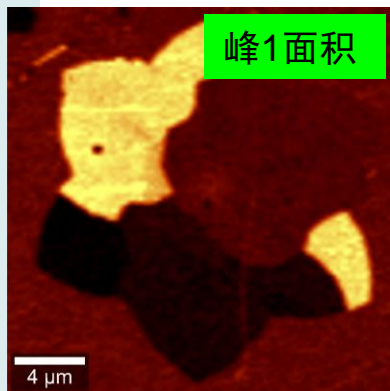
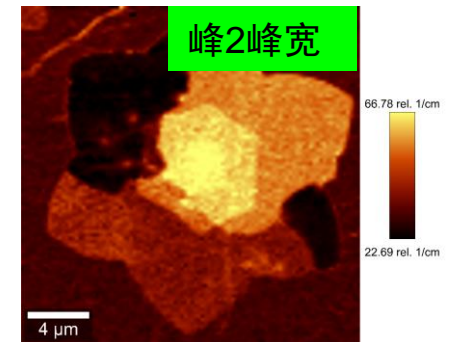
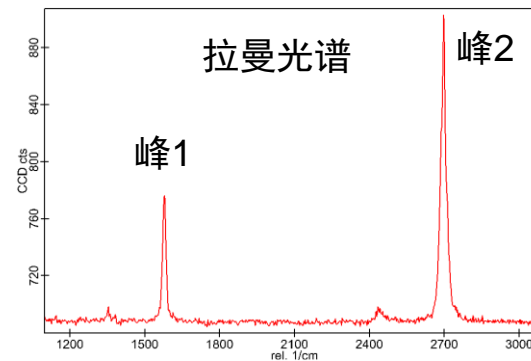
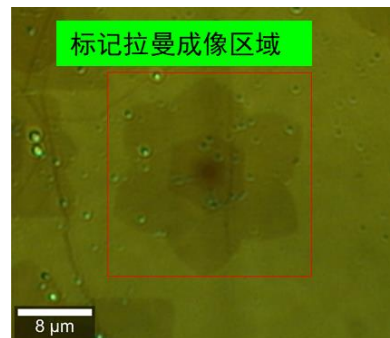


数据要求：光学图像 + 高信噪比单个拉曼光谱 + 特征谱峰的峰面积图像(峰位或峰宽)

数据解读：根据特征峰的拉曼图像，分析材料分布、均匀性、变化等

常见模板：文献中的拉曼数据

2. 拉曼成像(峰面积、峰强比、峰位及峰宽)

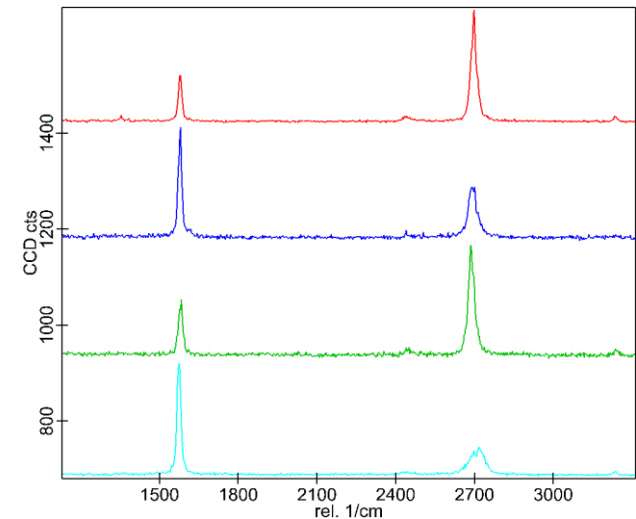
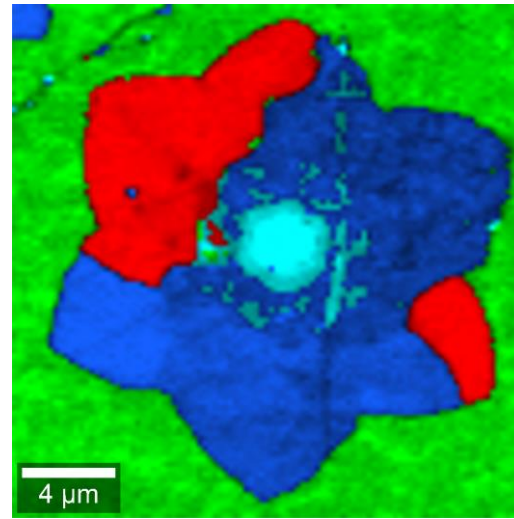
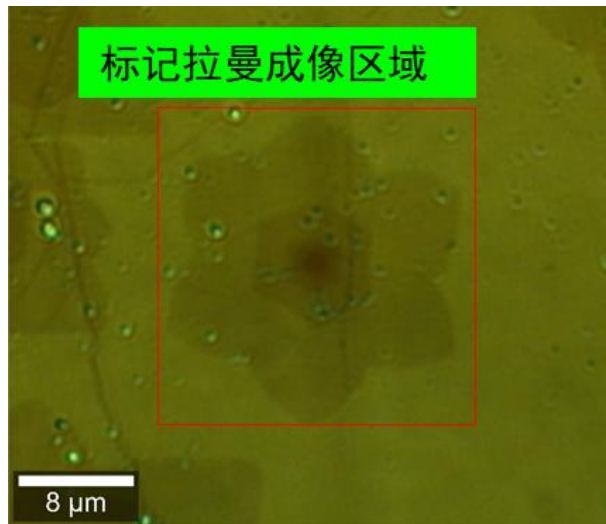


数据要求：光学图像 + 高信噪比单个拉曼光谱 + 特征谱峰的峰面积图像(峰位或峰宽)

数据解读：根据特征峰的拉曼图像，分析材料分布、均匀性、变化等

模板：文献中的拉曼数据

3. 彩色编码的拉曼图像(利用Analyze分析)

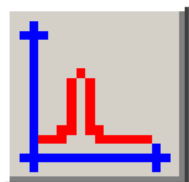


图像与光谱的颜色必须一致

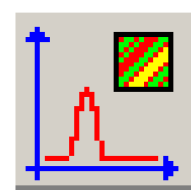
数据要求：光学图像 + 高信噪比特征拉曼光谱 + 彩色编码拉曼图像

数据解读：对比特征拉曼光谱与彩色拉曼图像，分析材料化学成分的种类及空间分布等

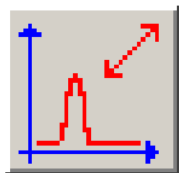
认识数据图标



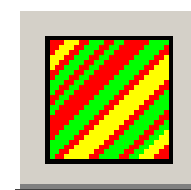
单个拉曼光谱



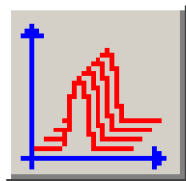
拉曼成像数据







线扫描拉曼数据



拉曼图像



时间序列扫描拉曼数据

-  [Image Data](#)
-  [Bitmap Data](#)
-  [Graph Data](#)
-  [Text Data](#)

光谱处理：红框

➤ 基础：

光谱 **Average, Smooth,**

背景处理**Sub BG**, 计算**Calc/去混Demixer,**

光谱剪切**Crop**, 光谱生成图像**Filter**

快速光谱生成图像 **Raman TV**

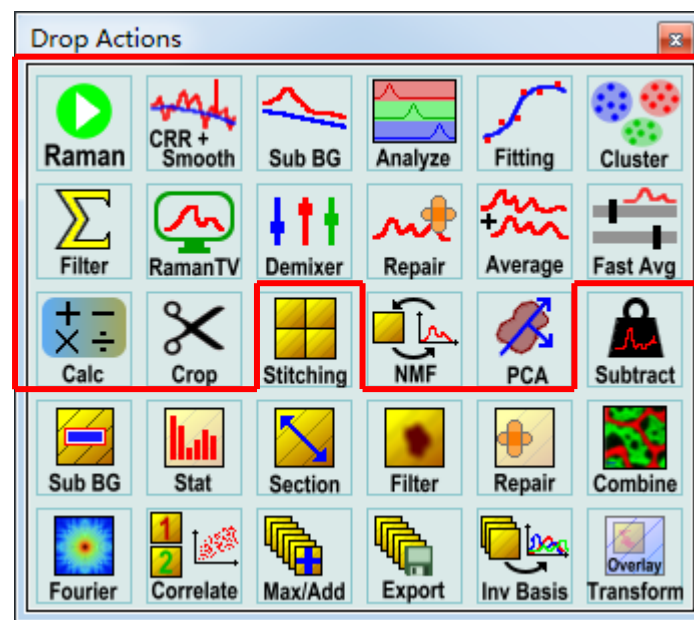
光谱修复**Repair**

➤ 高级：

光谱拟合**Fitting**, 化学分析**Analyze,**

聚类分析**Cluster** 非负矩阵分析 **NMF**

主成分分析 **PCA**



成像处理: 蓝框

➤ 基础:

图像运算 **Calc** 图像剪切 **Crop**

图像拼接 **Stitching** 截面 **Section**

数据统计 **Stat** 图像合并 **Combine**

3D图像输出 **Export**

➤ 高级:

图像修复 **Repair** 图像傅里叶滤波 **Fourier**

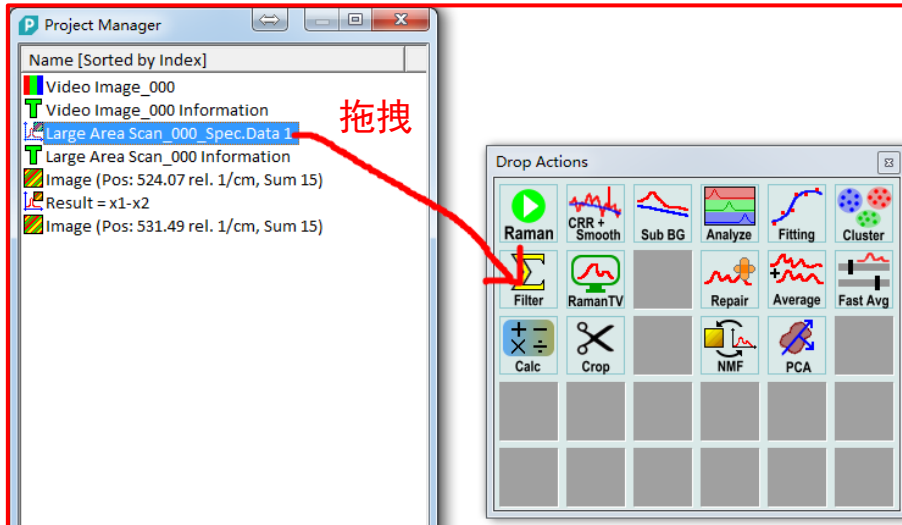
图像平滑 **Filter** 图像相关性 **Correlate**

图像空间相关 **Transform**

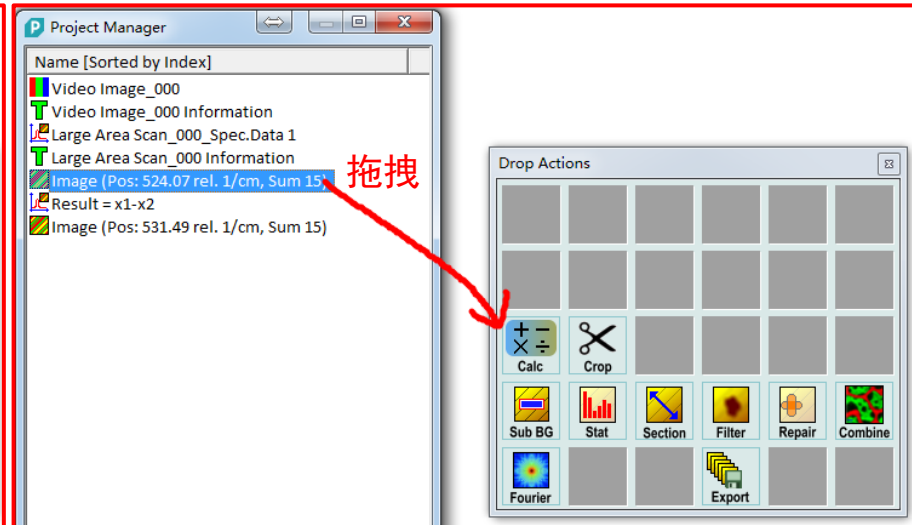


数据处理快速处理 1

- 操作：** 在Project Manager窗口上，单击按住鼠标左键拖拽移动任意方向；Drop Actions会自动弹出，拖拽放到到相应的图标上。



光谱

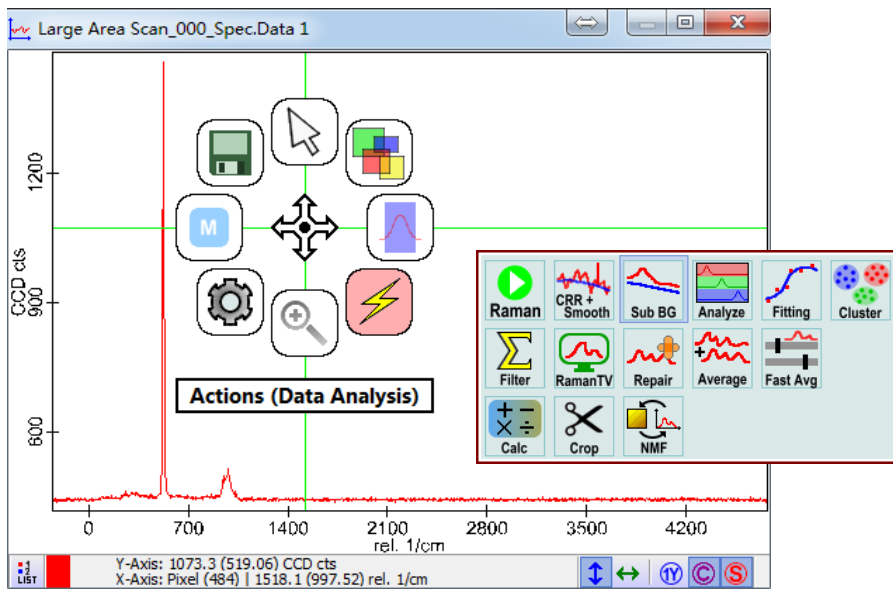


图像

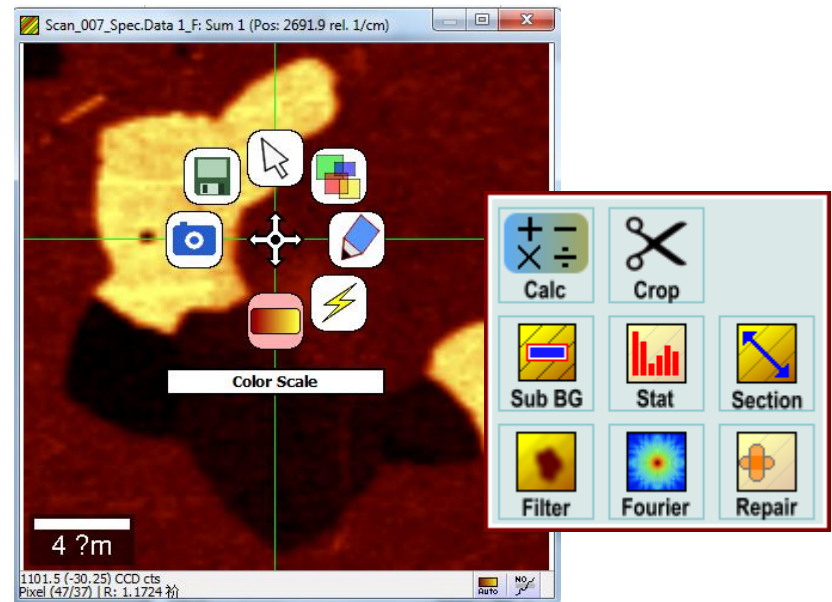
数据处理快速处理 2

• 操作

- 1. 在光谱或者图像窗口上，单击按住鼠标右键；移动鼠标到相应的图标
- 2. 在弹出的窗口选择需要相应的处理



光谱



图像

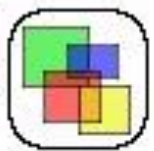
圆形导航窗口-光谱

鼠标模式

Mouse Move

输出及保存

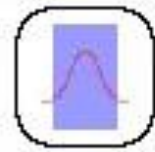
Export



Misc Visuals

自动寻峰

Modes



Mouse Marker

光谱阴影标记

Actions (Data Analysis)



数据分析快速接入

Scale and Zoom

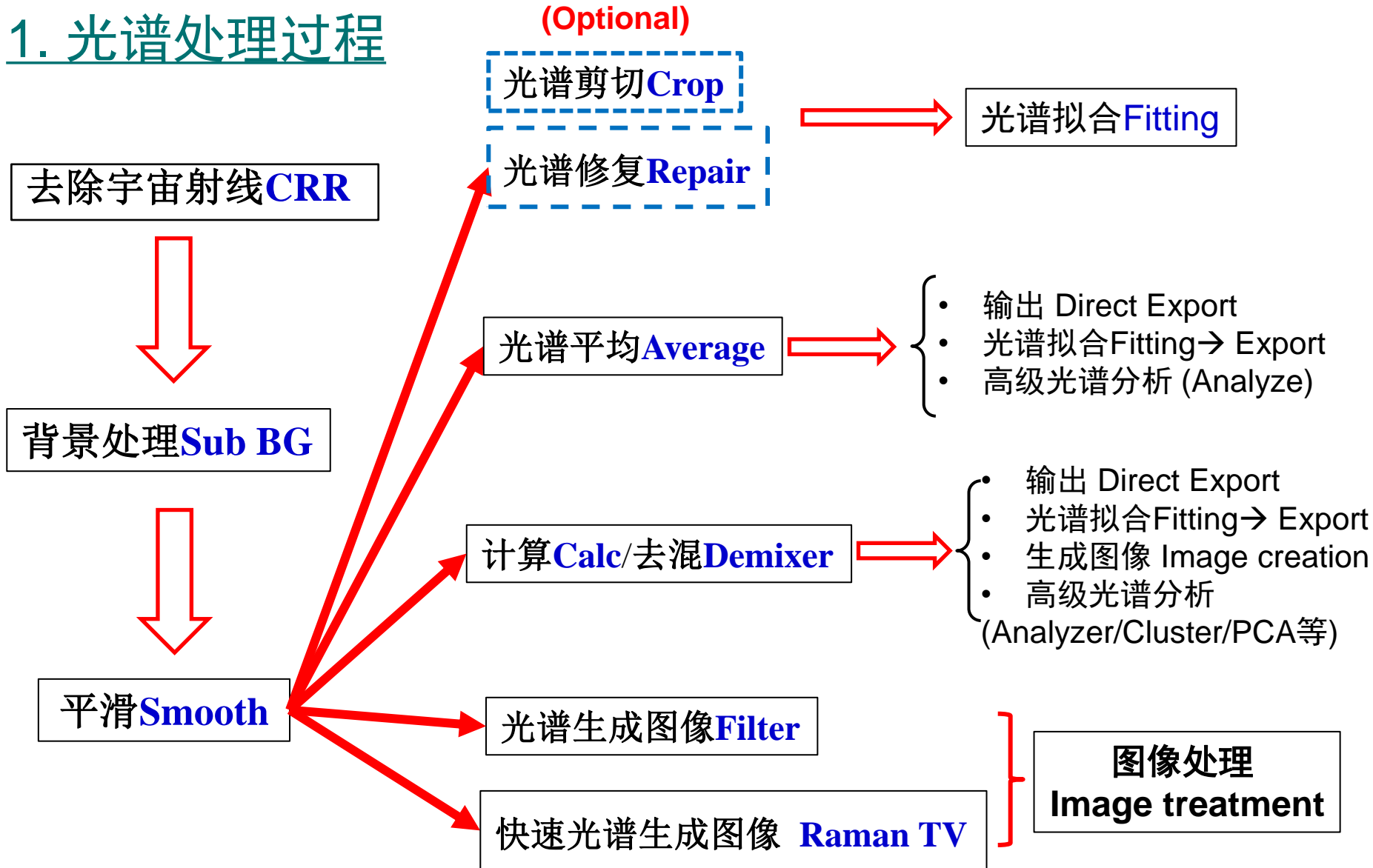
光谱缩放

圆形导航窗口-图像



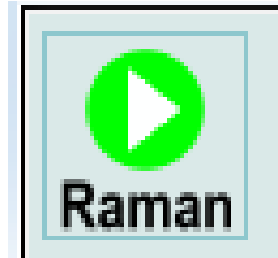
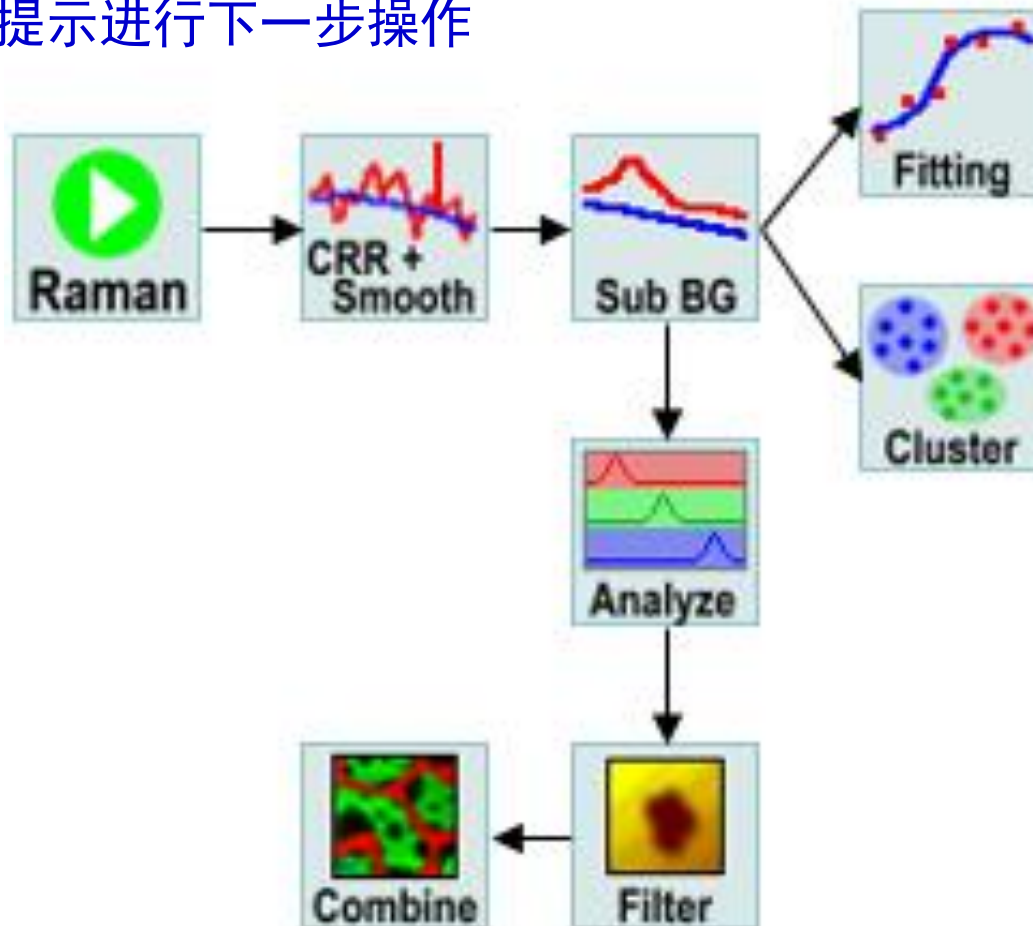
光谱数据分析

1. 光谱处理过程



1. 顺序光谱处理：

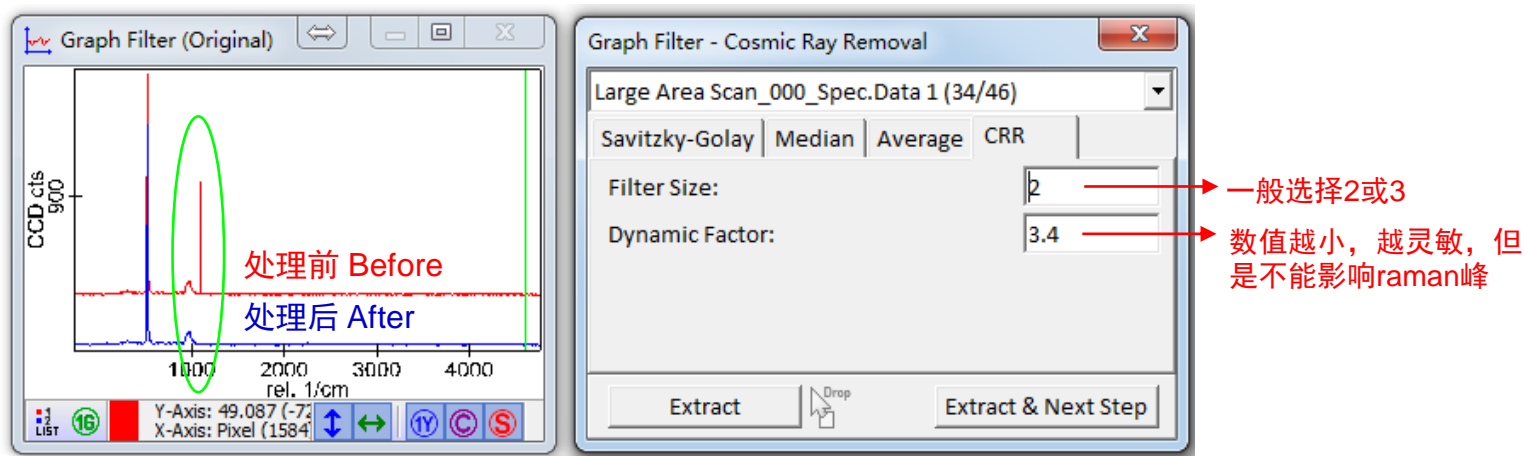
- 操作：** 1. 将光谱数据拖到“Raman”；
2. 按提示进行下一步操作



2. 去除宇宙射线CRR

宇宙射线特点: Sharp, strong, not repeatable

处理方法: Mathematical comparison(数学比对方法去除)

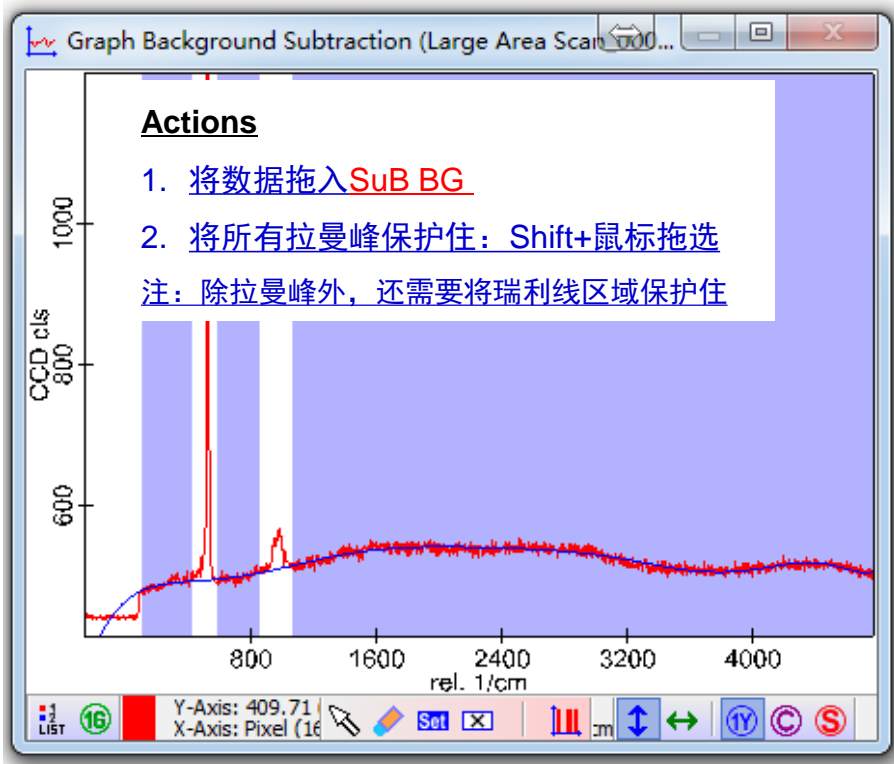


- Filter: spectral region for comparison
- Dynamic Factor:
(test-minimum) > (Max trust-minimum) * Dynamic Factor

注: 如无法完全去除, 可采用光谱修复Repair方法去除

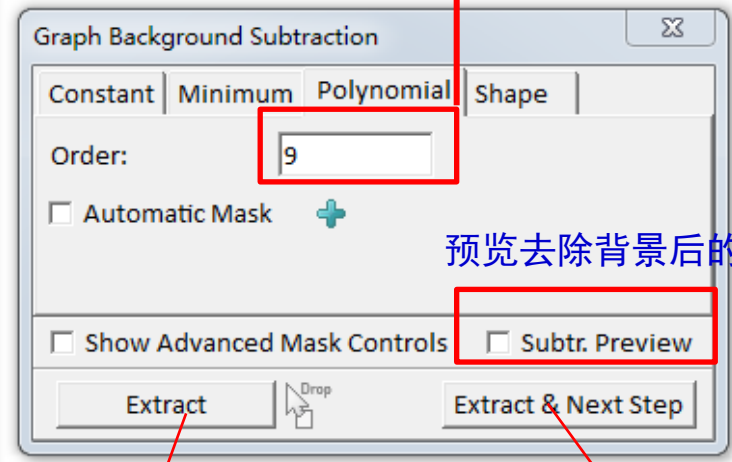
3. 光谱去背景处理BG sub: 拉曼光谱往往存在荧光背景, 会影响拉曼强度

Method1: 多项式拟合Polynomial; 操作1-3



红色曲线为原始拉曼光谱
蓝色曲线为拟去除的背景

3. 调节参数: 去除的背景曲线与原始光谱背景的吻合度



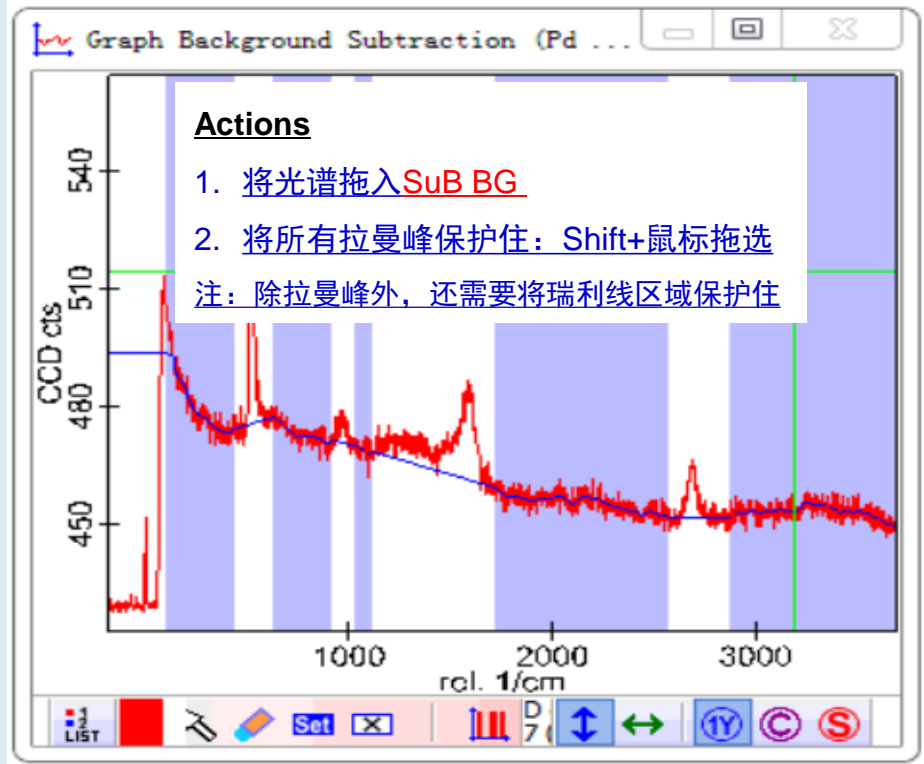
预览去除背景后的光谱

输出
Extract

输出并进行下一步处理
Extract and go to next treatment

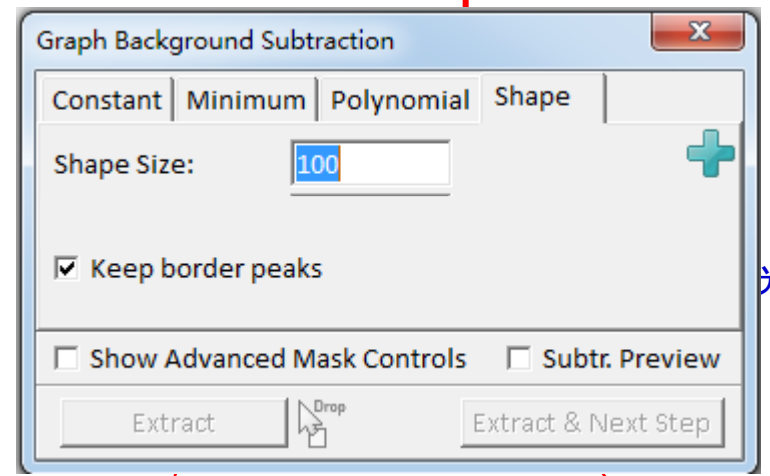
3. 光谱去背景处理BG sub: 拉曼光谱往往存在荧光背景, 会影响拉曼强度

Method2: Shape; 操作1-3



红色曲线为原始拉曼光谱
蓝色曲线为拟去除的背景

3. 调节参数: 去除的背景曲线与原始光谱背景的吻合度



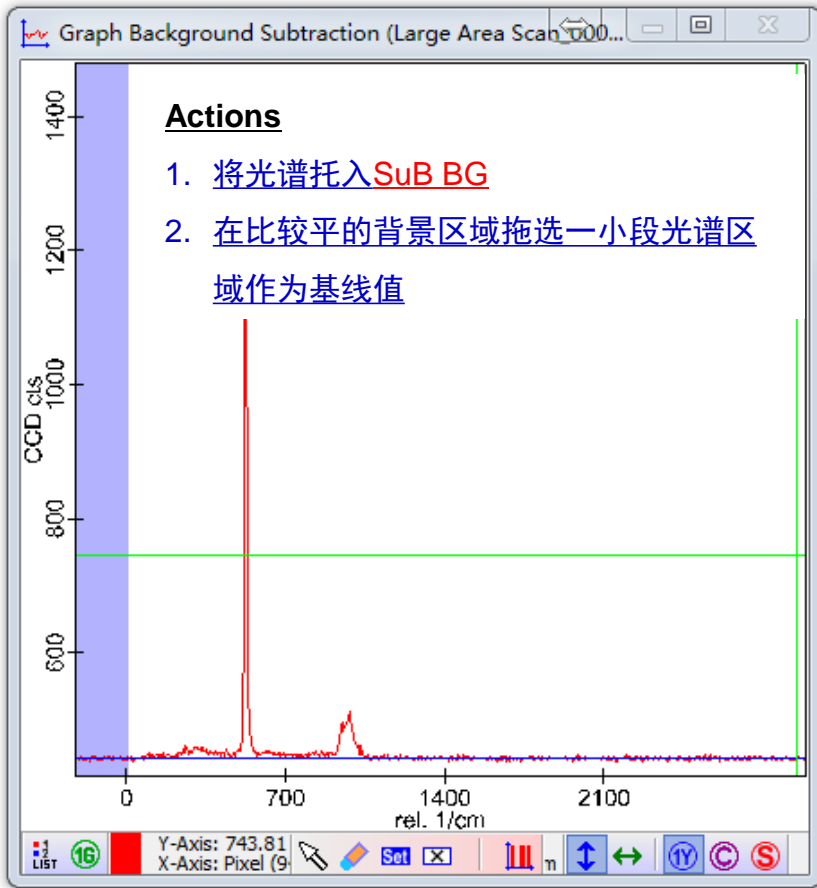
输出

输出并进行下一步处理

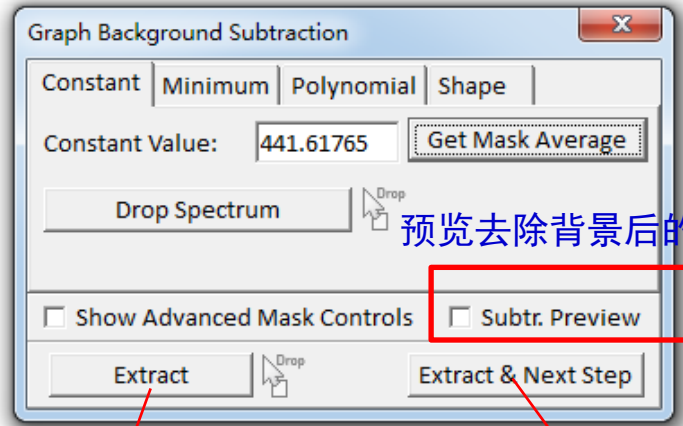
光谱

3. 光谱去背景处理BG sub: 基线成0

Method3: Constant; 操作1-3



3. 点击“Get Mask Average”获取该区域的平均值作为基线值



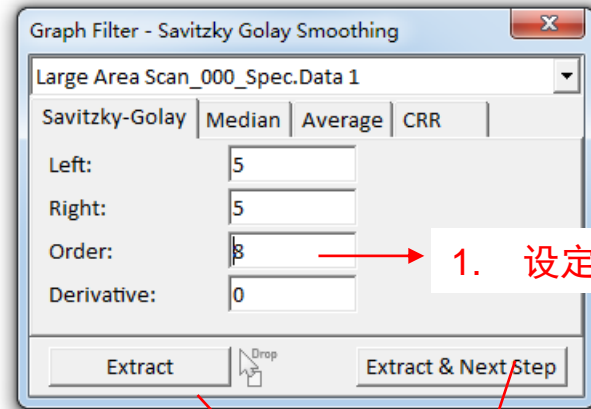
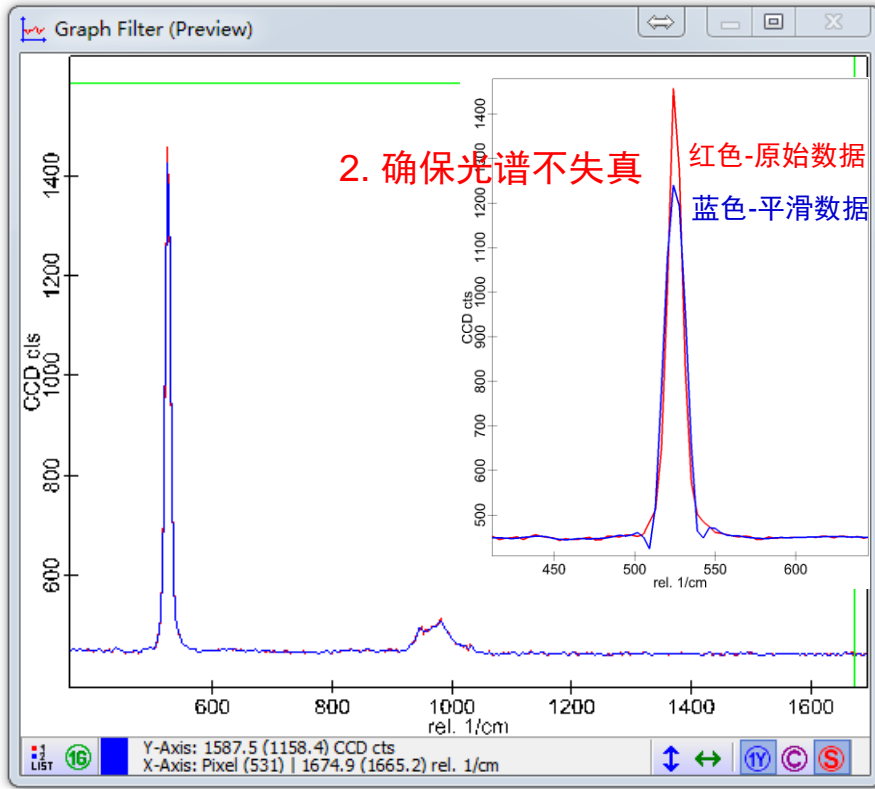
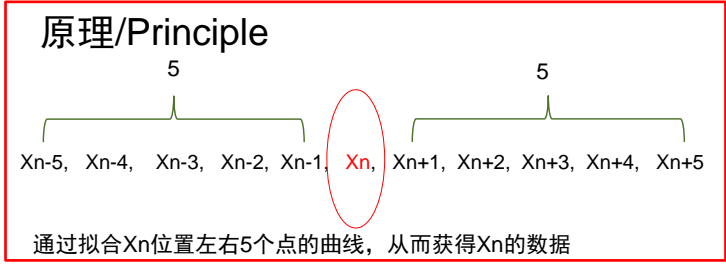
预览去除背景后的光谱

输出

输出并进行下一步处理

4. 光谱平滑：提高信噪比

Method1: SG最小二乘法；操作1-3



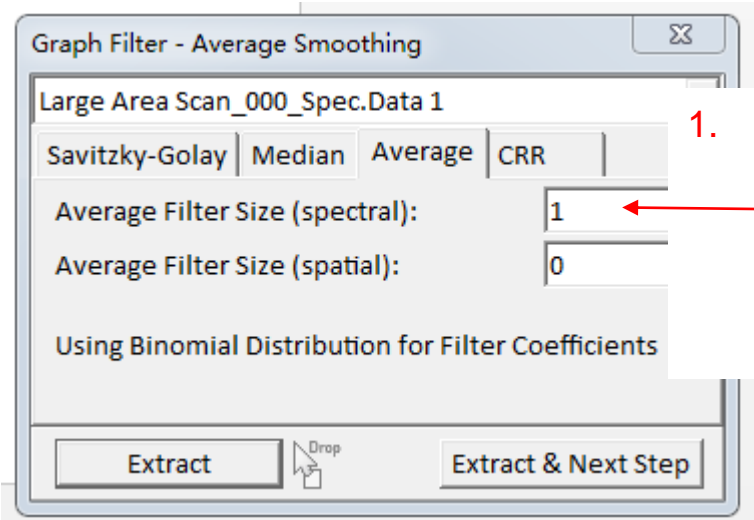
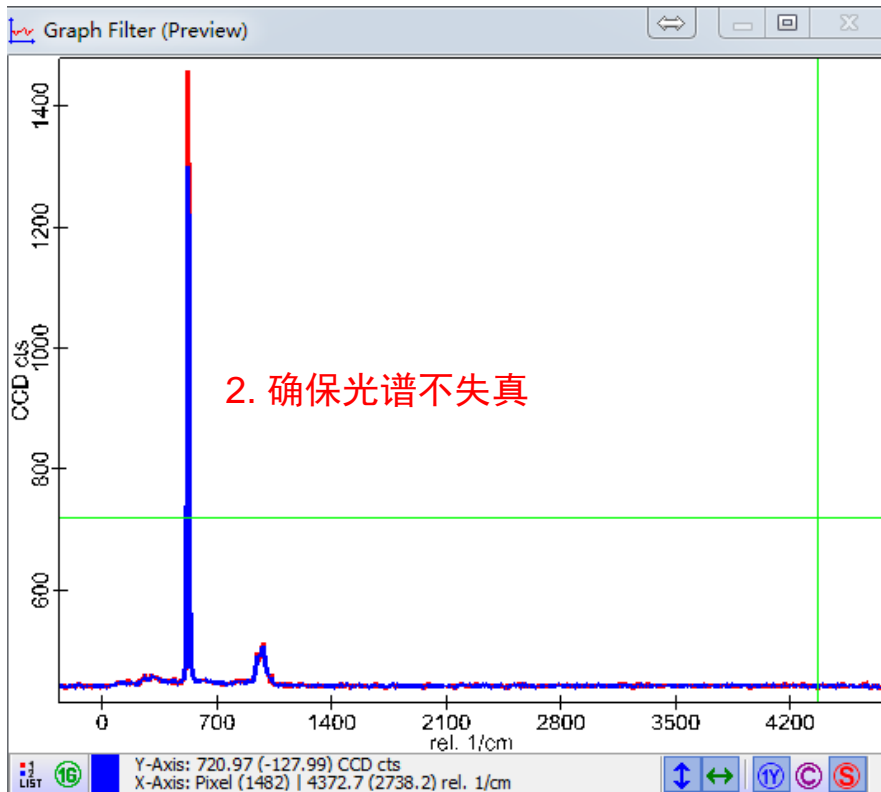
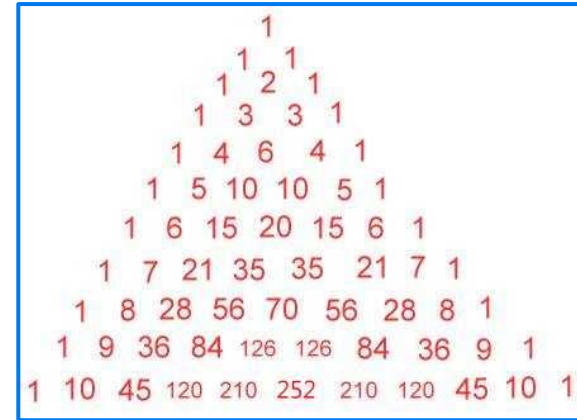
1. 设定曲线拟合阶数

3. 输出或进行下一步处理
Extract/Next

注：由于拉曼谱线较窄，光谱平滑容易造成谱线失真，如插图；荧光光谱可调范围更大些；Median方法不适用于拉曼光谱的平滑

4. 光谱平滑：提高信噪比

Method2: 平均（权重）；操作1-3



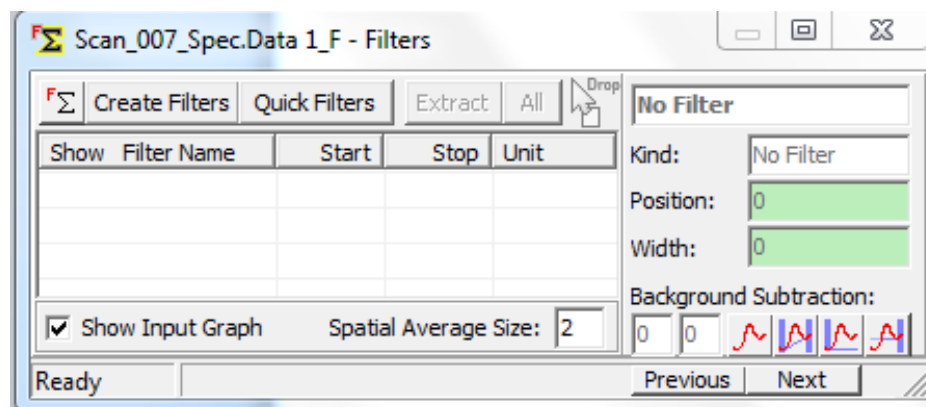
1. 设定拟合阶数（建议选择1，大于1非常容易过度拟合）

3. 输出或进行下一步处理

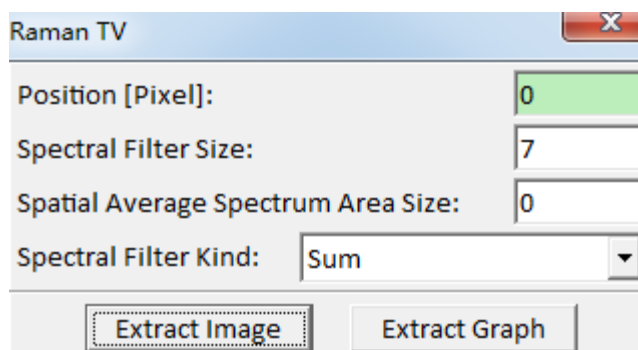
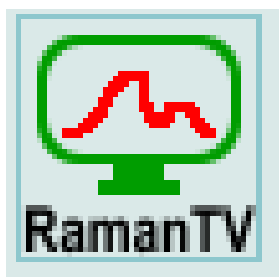
注：由于拉曼谱线较窄，光谱平滑容易造成谱线失真，如插图；荧光光谱的平滑，该参数可以设置数值较大一些可调范围更大些；Median方法不适用

8. 如何由光谱生成图像-两种方法

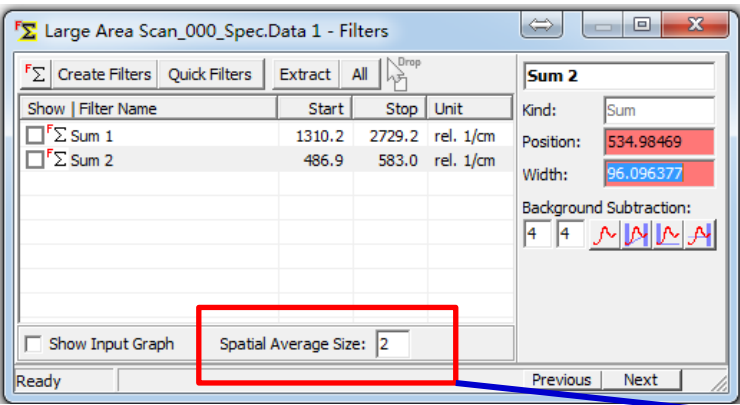
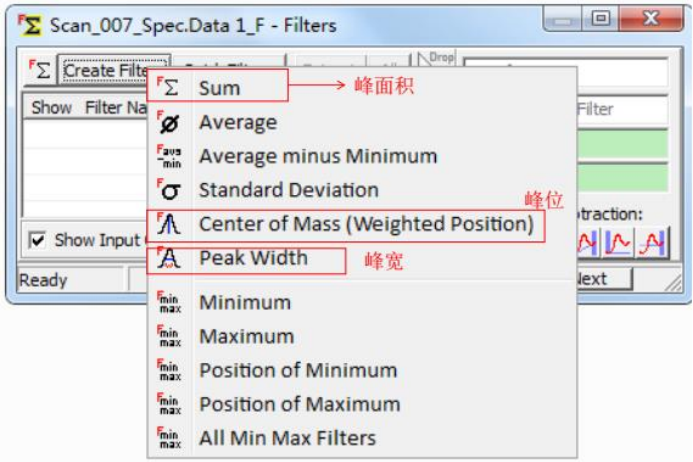
➤ Filter 峰面积-峰位-峰宽图像生成



➤ Raman TV 快速峰面积图像生成

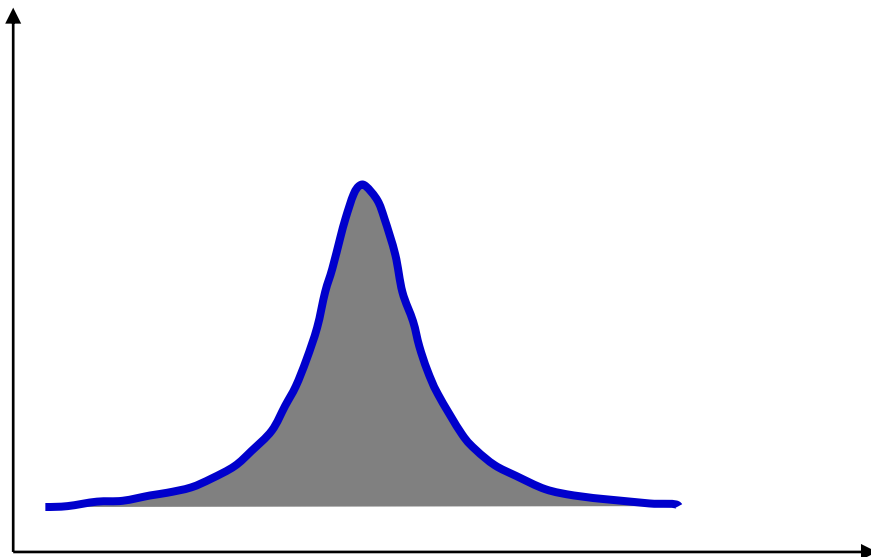


光谱生成图像

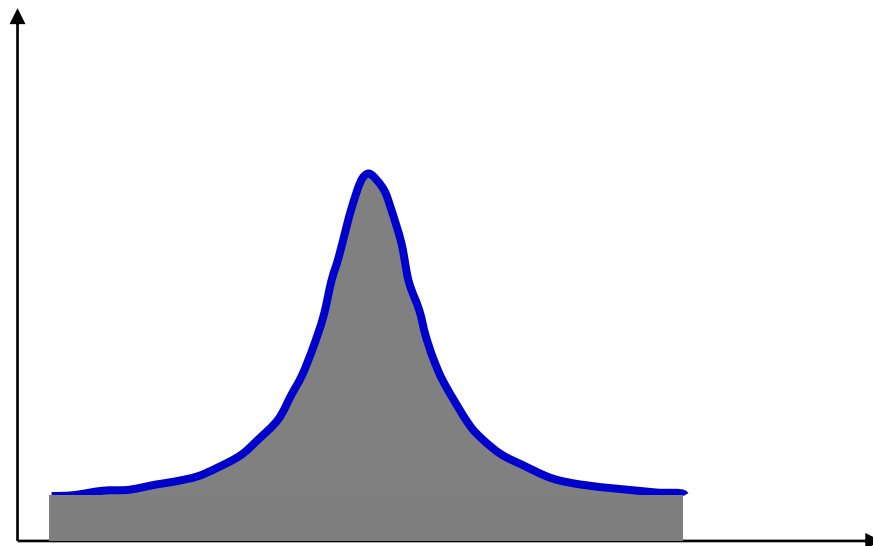


- 在“create filter”中选择峰面积、峰位、峰宽等
- 在Filter窗口右边的“Width”上，鼠标左键双击，由绿色变成红色→ 在光谱窗口上鼠标左键划动选择区域（Shift+鼠标左键为擦除已选择的区域）
- 在Background Subtraction中选择去除光谱的荧光背景
- Quick Filter：保存/调用Filter参数
- Extract/All：输出单个/全部图像
- Spatial Average Size：平均光谱的空间范围

拉曼/荧光峰面积计算



拉曼峰面积(默认值: 4,4)



微弱拉曼信号/荧光峰面积(0,0)

Polymer - Filters

Σ Create Filters Quick Filters Extract All Drop

Show	Filter Name	Start	Stop	Unit
<input checked="" type="checkbox"/>	Σ Sum 1	1713.5	1790.0	rel. 1/cm

Kind: Sum
Position: 1751.7355
Width: 76.474699

Background Subtraction:
4 4

Show Input Graph Spatial Average Size: 2

Ready Previous Next

Polymer - Filters

Σ Create Filters Quick Filters Extract All Drop

Show	Filter Name	Start	Stop	Unit
<input checked="" type="checkbox"/>	Σ Sum 1	1713.5	1790.0	rel. 1/cm

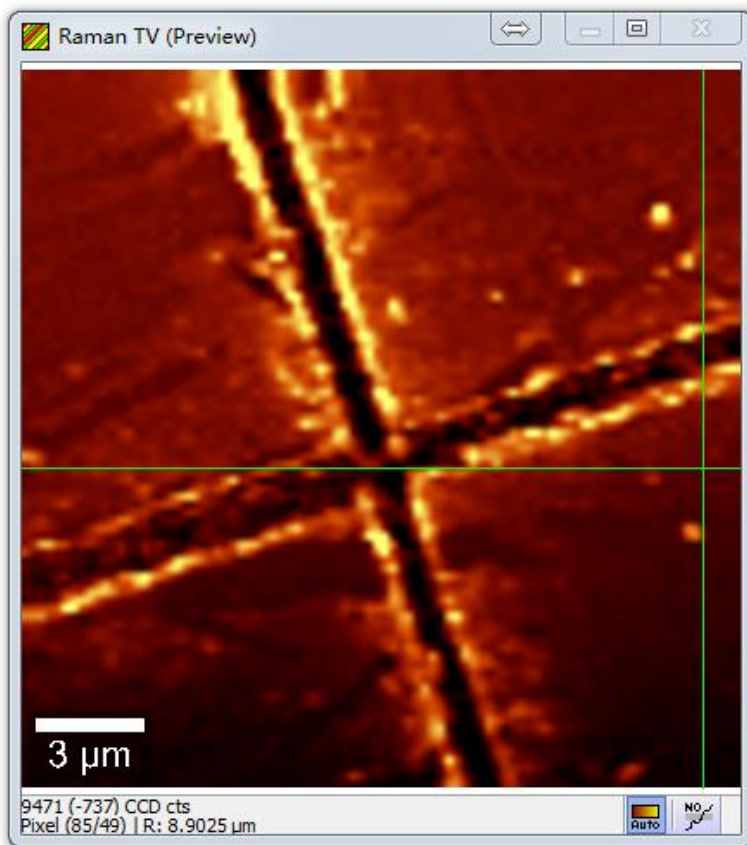
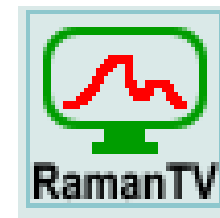
Kind: Sum
Position: 1751.7355
Width: 76.474699

Background Subtraction:
0 0

Show Input Graph Spatial Average Size: 2

Ready Previous Next

快速峰面积图像生成



Position [Pixel]:	204
Spectral Filter Size:	7
Spatial Average Spectrum Area Size:	0
Spectral Filter Kind:	Sum

改变光谱区域尺寸

平均光谱空间范围

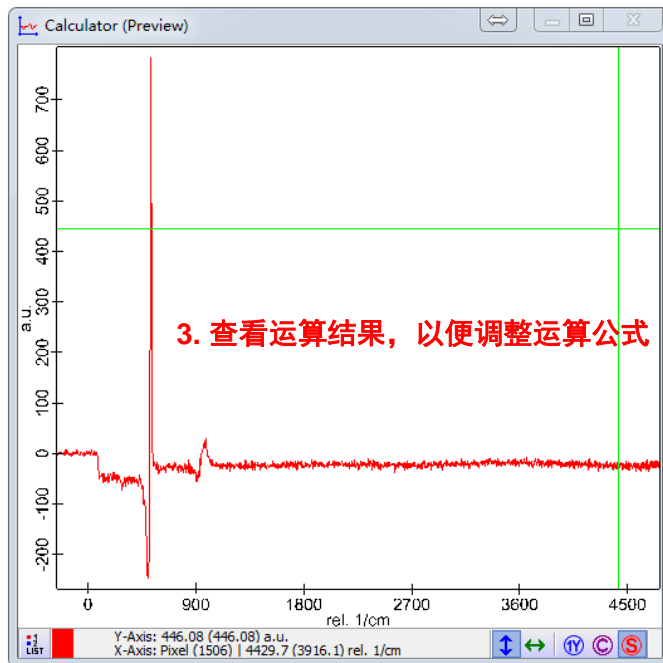
输出图像

输出光谱

5. 光谱/图像运算处理:

目的: 1). 光谱运算: 光谱加和获得总光谱; 光谱加减获得光谱差别; 白光对比/反射/透射谱等
2). 图像运算: 拉曼图像强度比 (石墨烯的 I_{2D}/I_G);

目标数据: 1). 拉曼单谱自身或多个谱之间运算 (即两个光谱的每个像素值之间对应的进行运算, **要求光谱中心和光谱范围必须一致**);
2). 拉曼成像光谱数据与拉曼单谱/多个谱之间的运算, 也包括线扫描与时间序列数据 (同上);
3). 同一次拉曼成像的图像之间运算 (**即每个图像的对应的点的数据相运算, 要求成像大小和步长/点数一致**)



2. 选择或者修改单位

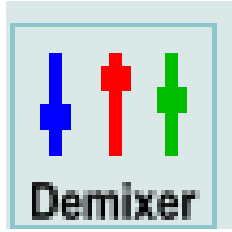
4. 输出Extract

注:
• 更多运算方法请按F1, 获得帮助文件

5.1 光谱去混处理:

目的: 1). 混合样品的光谱提纯, 获得纯物质光谱; 或去除样品衬底拉曼信号等
2). 获取光谱的细微差异性;

可运算数据: 1). 拉曼单谱多个谱之间运算;



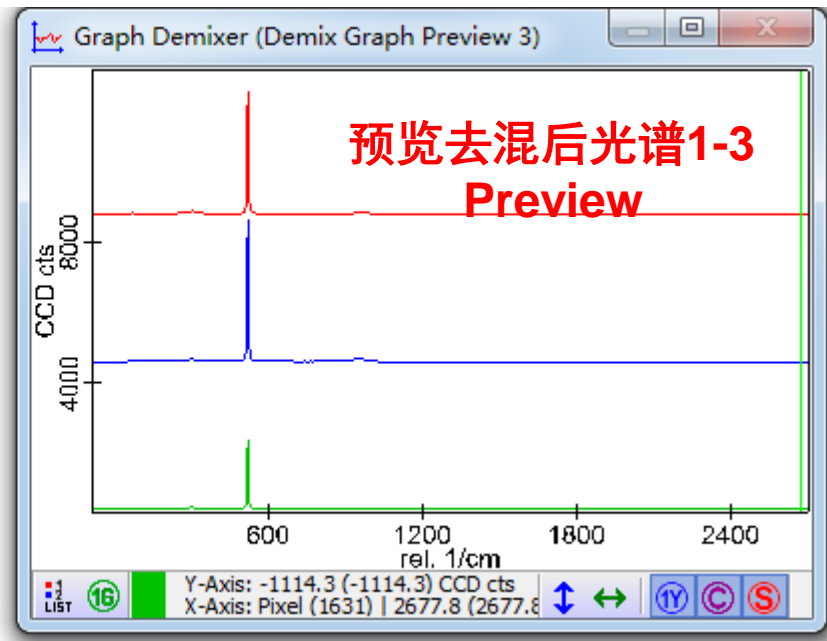
Graph Demixer

	Graph 1	Graph 2	Graph 3	
Offset	0	0	0	原始光谱1-3 Original
Demix 1	1	0	0	系数 Factors a-c
Demix 2	0	1	0	
Demix 3	0	0	1	

去混后光谱 demixed spectrum 1-3

Use Current as new Source Reset Matrix Show Original Graphs

Extract 输出



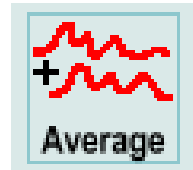
去混后光谱= a*Graph 1 + b* Graph 2 + c* Graph 3

a-c可以为正负系数

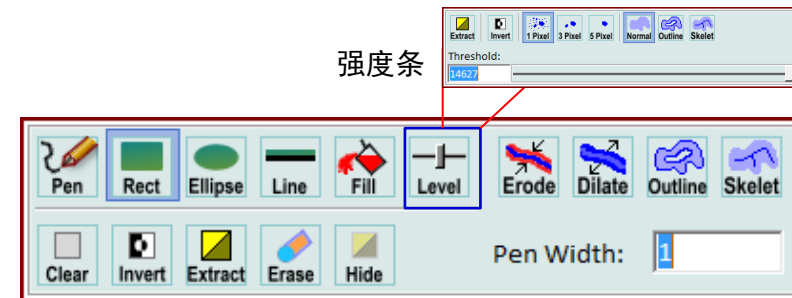
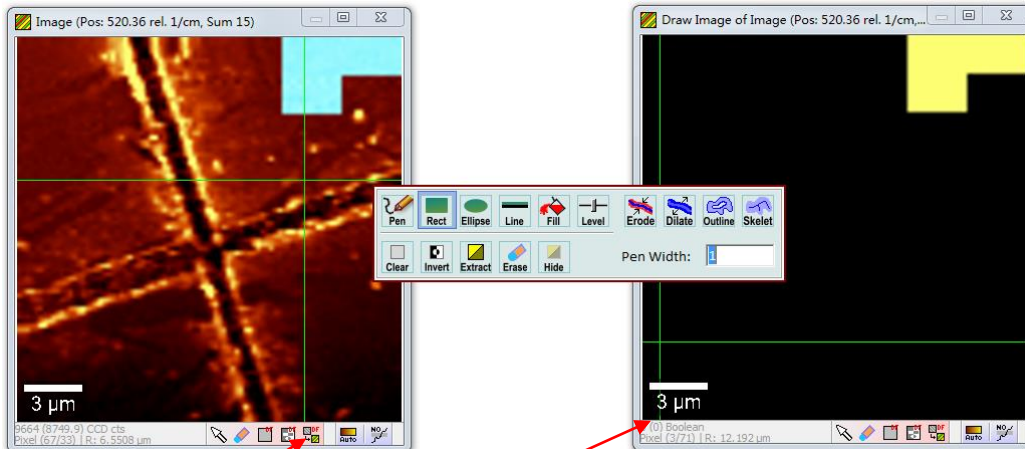
6. 光谱平均: 获取高信噪比光谱

目的: 当拉曼成像中的光谱信噪比不理想时, 可以在局域范围内进行光谱平均, 获得高信噪比特征光谱;

数据要求: Raman raw data+ Draw field image

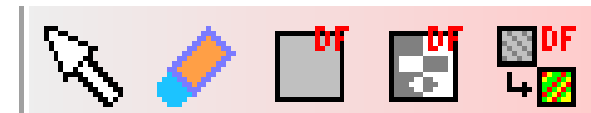


操作: 1. Mark area on image by Draw tool



clear Invert Extract

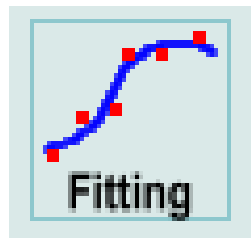
擦除 全部清除 反转 输出



2. Extract as Draw field image

3. 将原始成像数据集和Draw field image同时选中, 拖到“Average”操作中即可

7. 光谱拟合Fitting: 高斯/洛伦兹及其混合拟合



可拟合数据: single spectrum; Raman imaging; Stastic等

操作步骤:

- 1. 划选目标拟合光谱 (非常重要)
- 2. 选择拟合函数
- 3. 拟合初始参数设置

Advanced Fitting Tool

Fit Function | Fit Mask | Advanced Mode

Category: **Peak Functions**
Exponential
Polynomial
General

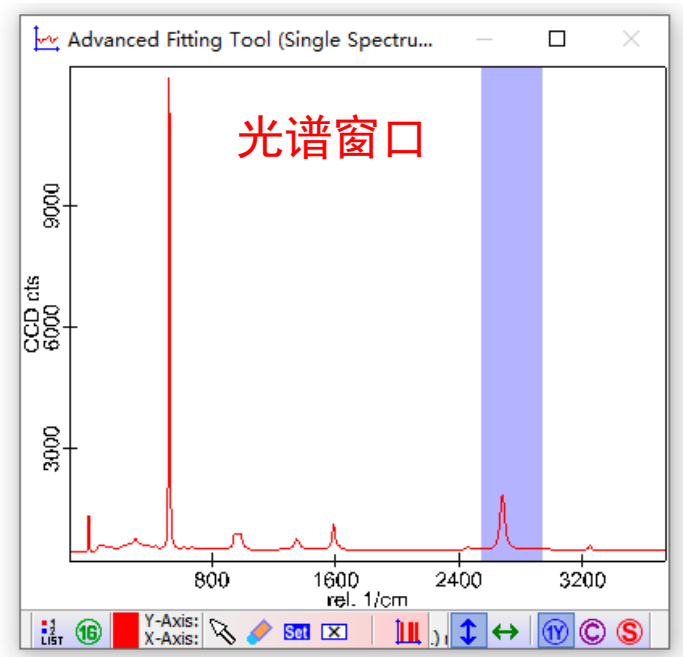
Function: ADD DEL
Gauss
Lorentz
PsdVoigt1
PsdVoigt2

Options:
高斯
洛伦兹
混合1
混合2

可选拟合类型(常见峰函数、e指数、多项式及其他), 支持输入函数

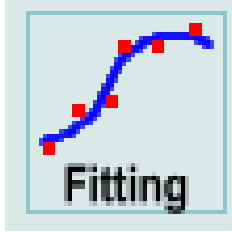
Fit and Extract All | Fit and Extract Current | Extract & Next Step

of Values: 189



注: 可以在拟合区域两侧较远的基线区域框选一小段, 防止拟合基线漂移

7. 光谱拟合Fitting: 以拉曼洛伦兹双峰为例



2. 选择拟合类型及函数; 设置函数参数

如没有出现, 请勾选Advanced Mode

Advanced Fitting Tool (Lorentz)

Fit Function | Fit Mask | **Fit Parameters** | Preview Options | Extract Options

Advanced Mode

Category: Peak Functions

Function: Gauss, **Lorentz**, PsdVoigt1, PsdVoigt2

Tolerance	1E-08
Max # of Iterations	200
Number of Functions	1
Extract Intensity Kind	Area
Listen Intensity Kind	Amplitude

$$y = y_0 + \frac{2}{\pi} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{A_i w_i}{(4(x - x_i)^2 + w_i^2)}$$

Fit and Extract All | Fit and Extract Current | Extract & Next Step

Fit Successful (5 Iterations) | Chi^2: 92151.859 | # of Values: 189

容差: 可允许的拟合误差

最大回归次数: 拟合不成功时, 可以增加回归次数

需要拟合峰的个数: 1,2,3...

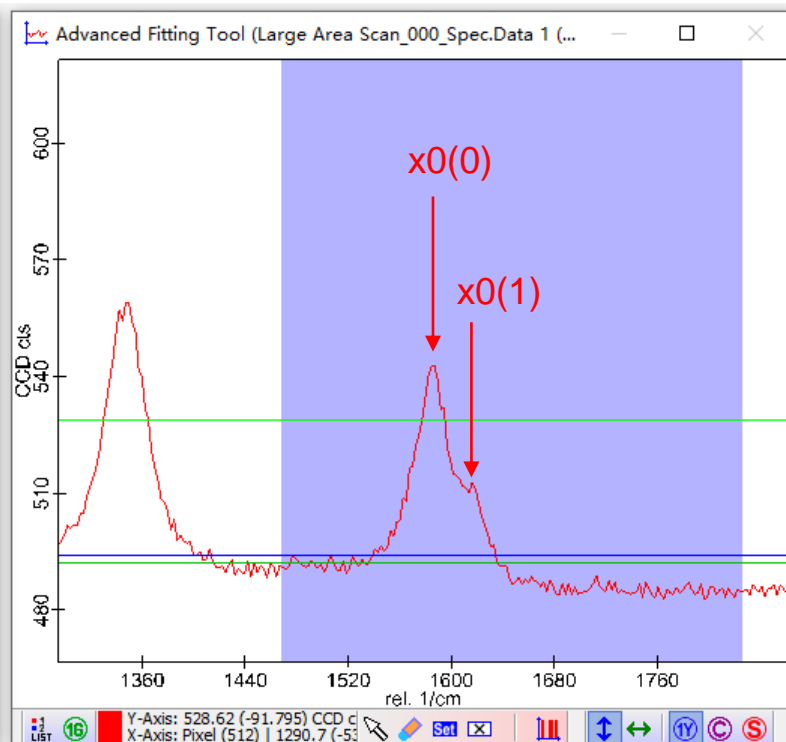
输出结果: 强度-Intensity(峰面积; 峰强)

Listen赋值

7. 光谱拟合Fitting: 以洛伦兹双峰为例

3. 拟合参数设置Fitting Parameter

Name	Auto	Start Value	Value	Vary	Lower Limit	Upper Limit
y0	<input checked="" type="checkbox"/>	487.77777	489.96197	<input checked="" type="checkbox"/>	0	0
x0(0)	<input type="checkbox"/>	0	1.0374339E8	<input checked="" type="checkbox"/>	0	0
w(0)	<input type="checkbox"/>	10	17010827	<input checked="" type="checkbox"/>	1E-10	0
A(0)	<input type="checkbox"/>	5000	8.4945793E9	<input checked="" type="checkbox"/>	0	0
x0(1)	<input type="checkbox"/>	0	1.0374339E8	<input checked="" type="checkbox"/>	0	0
w(1)	<input type="checkbox"/>	10	17010827	<input checked="" type="checkbox"/>	1E-10	0
A(1)	<input type="checkbox"/>	5000	8.4945793E9	<input checked="" type="checkbox"/>	0	0



2). 点击<<, 复制红框内所有数值到蓝框内

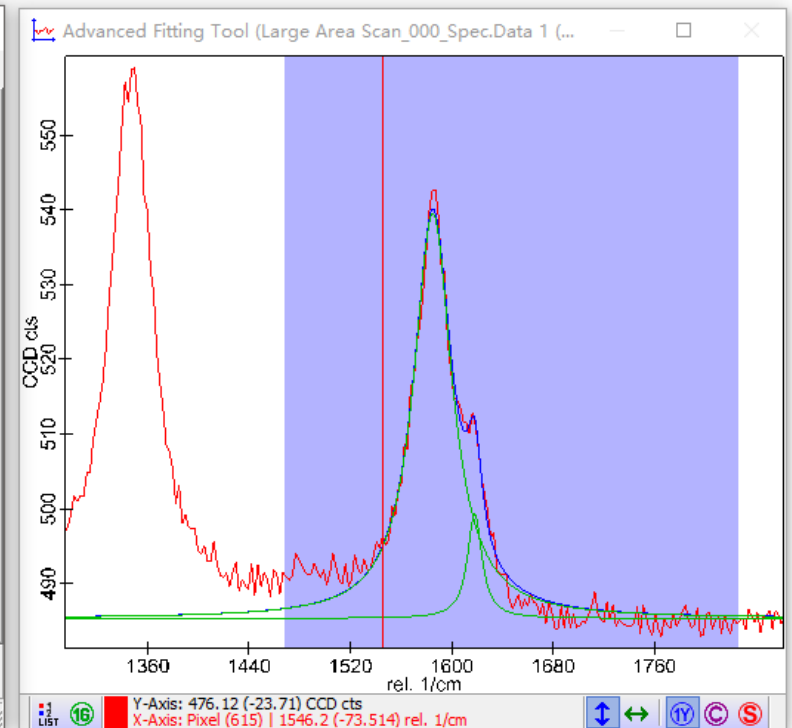
1). 双击峰位x0(0), 然后在光谱上点击光谱峰位置; 同样操作对x0(1)赋值
如未出现拟合峰, 可再对峰宽w(0), w(1)及峰强度A(0), A(1)赋值

3). 勾选全部拟合参数为Vary, 自动优化参数

7. 光谱拟合Fitting: 以洛伦兹双峰为例

3. 拟合参数设置Fitting Parameter (拟合成功)

Name	Auto	Start Value	Value	Vary	Lower Limit	Upper Limit
y0	<input checked="" type="checkbox"/>	487.77777	485.34366	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< y0 < 0
x0(0)	<input type="checkbox"/>	1587.0747	1585.1618	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< x0(0) < 0
w(0)	<input type="checkbox"/>	39.414944	36.754023	<input checked="" type="checkbox"/>	1E-10	< w(0) < 0
A(0)	<input type="checkbox"/>	3332.1706	3130.0941	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< A(0) < 0
x0(1)	<input type="checkbox"/>	1619.7478	1618.1836	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< x0(1) < 0
w(1)	<input type="checkbox"/>	9.9433361	13.81108	<input checked="" type="checkbox"/>	1E-10	< w(1) < 0
A(1)	<input type="checkbox"/>	184.15293	303.52655	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< A(1) < 0



4. 拟合成功后，即可点击Fit and Extract Current(单谱)；Fit and Extract All(成像)输出结果；具体输出哪些参数，请参考下一页

7. 光谱拟合Fitting: 以洛伦兹双峰为例

3. 拟合参数设置Fitting Parameter (拟合成功)

拟合时预览光谱

拟合成功后，输出拟合数据

Advanced Fitting Tool (Lorentz)

Fit Function | Fit Mask | Fit Parameters | **Preview Options** | Extract Options | Advanced Mode

Preview Fit Curve Range

of Points: 3300

Start Value [rel. 1/cm]: -119.43316

Stop Value [rel. 1/cm]: 3737.2866

Listen

Additional Options

Show all Replica on Startup

Show Replica

Lorentz Function 0

Lorentz Function 1

拟合时，在光谱窗口上显示拟合函数

Fit Successful (7 Iterations) Chi²: 768.1311 # of Values: 148

Advanced Fitting Tool (Lorentz)

Fit Function | Fit Mask | Fit Parameters | Preview Options | **Extract Options** | Advanced Mode

Additional Extract Options

Extract Fit Curve with Input Data Supporting Points Param Precision: 6

Extract Replica

Fit and Extract All Options

Extract Chi² Extract Fit Fail Mask Extract Fit Curves

Parameter Name	Value	All	None	Error	All	None	Value if Fit Fails
y0	<input checked="" type="checkbox"/> 485.3437	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 0.2672684	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="0"/>
x0(0)	<input checked="" type="checkbox"/> 1585.162	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 0.4071894	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="0"/>
w(0)	<input checked="" type="checkbox"/> 36.75402	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 1.372812	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="0"/>
A(0)	<input checked="" type="checkbox"/> 3130.094	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 105.321	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="0"/>
x0(1)	<input checked="" type="checkbox"/> 1618.184	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 0.8154297	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="0"/>
w(1)	<input checked="" type="checkbox"/> 13.81108	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 2.858993	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="0"/>
A(1)	<input checked="" type="checkbox"/> 303.5265	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 58.15284	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="text" value="0"/>

可输出的拟合参数

Fit Successful (7 Iterations) Chi²: 768.1311 # of Values: 148

7. 光谱拟合 Fitting: 以洛伦兹双峰为例

3. 拟合参数设置 Fitting Parameter (拟合失败)

Advanced Fitting Tool (Lorentz)

Fit Function | Fit Mask | **Fit Parameters** | Preview Options | Extract Options | Advanced Mode

Mode
 Define Start Values
 Fit on Change Fit Once

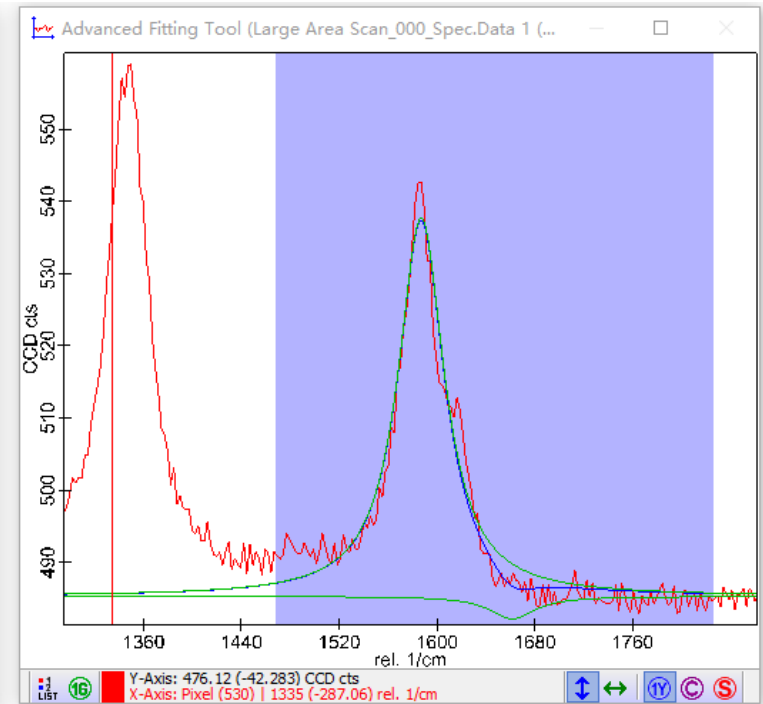
Current Fit Results
 Chi² / DoF: Data Points / DoF:
 R²: Average Error:
 Fit Error (Max. # of Iterations reached)

Parameters
 Preview Preview 拟合失败!!! Reset Params

Name	Auto	Start Value	Value	Vary	Lower Limit	Upper Limit
y0	<input checked="" type="checkbox"/>	487.77777	485.29705	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< y0 < 0
x0(0)	<input type="checkbox"/>	1587.0747	1587.1704	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< x0(0) < 0
w(0)	<input type="checkbox"/>	39.414944	45.689419	<input checked="" type="checkbox"/>	1E-10	< w(0) < 0
A(0)	<input type="checkbox"/>	3332.1706	3759.3337	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< A(0) < 0
x0(1)	<input type="checkbox"/>	1619.7478	1661.756	<input type="checkbox"/>	0	< x0(1) < 0
w(1)	<input type="checkbox"/>	9.9433361	45.38617	<input checked="" type="checkbox"/>	1E-10	< w(1) < 0
A(1)	<input type="checkbox"/>	184.15293	-223.12502	<input checked="" type="checkbox"/>	0	< A(1) < 0

Fit and Extract All Drop Fit and Extract Current Extract & Next Step

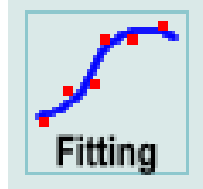
Fit Error (Max. # of Iterations reached) Chi²: --- # of Values: 148



拟合失败时，查看失败是否与光谱上的宇宙射线、荧光背景等有关；如有，请先按照前面方法处理光谱；如再失败，可调节参数有：

1. 拟合光谱的峰位、半峰宽及强度(峰面积)
2. 函数的最大回归次数
3. 拟合的光谱范围
4. 考虑分峰数目、拟合函数是否合理

7. 光谱拟合 Fitting: 高斯拟合



适合光谱: 荧光光谱

高斯

容差: 可允许的拟合误差

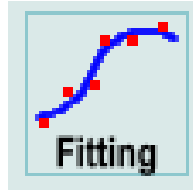
最大回归次数: 拟合不成功时, 可以增加回归次数

需要拟合峰的个数

输出结果: 峰宽-Peak Width; 强度-Intensity

峰宽-Peak Width: 标准差; FWHM
强度-Intensity: 峰面积; 峰强





7. 光谱拟合 Fitting: 高斯-洛伦兹混合峰型



Advanced Fitting Tool (PsdVoigt1)

Fit Function | Fit Mask | Fit Parameters | Preview Options | Extract Options | Advanced Mode

Category: Peak Functions | Exponential | Polynomial | General

Function: ADD DEL    

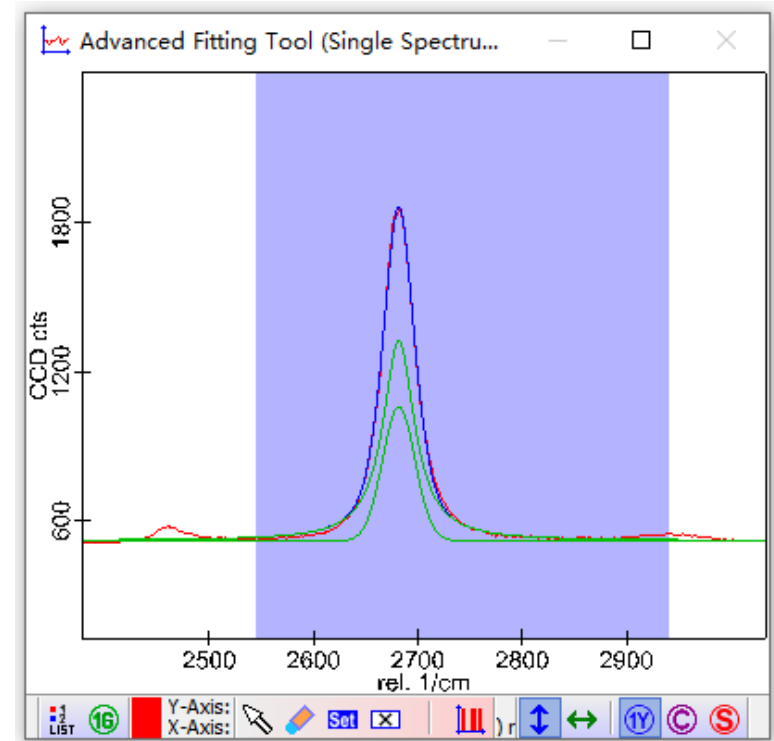
Options:	
Tolerance	1E-08
Max # of Iterations	200

$$y = y_0 + A \left[m_u \frac{2}{\pi} \frac{w}{4(x-x_0)^2 + w^2} + (1-m_u) \frac{\sqrt{4 \ln(2)}}{\sqrt{\pi} w} e^{-\frac{4 \ln(2)}{w^2}(x-x_0)^2} \right]$$

Fit Successful (4 Iterations) Chi^2: 24676.532 # of Values: 189

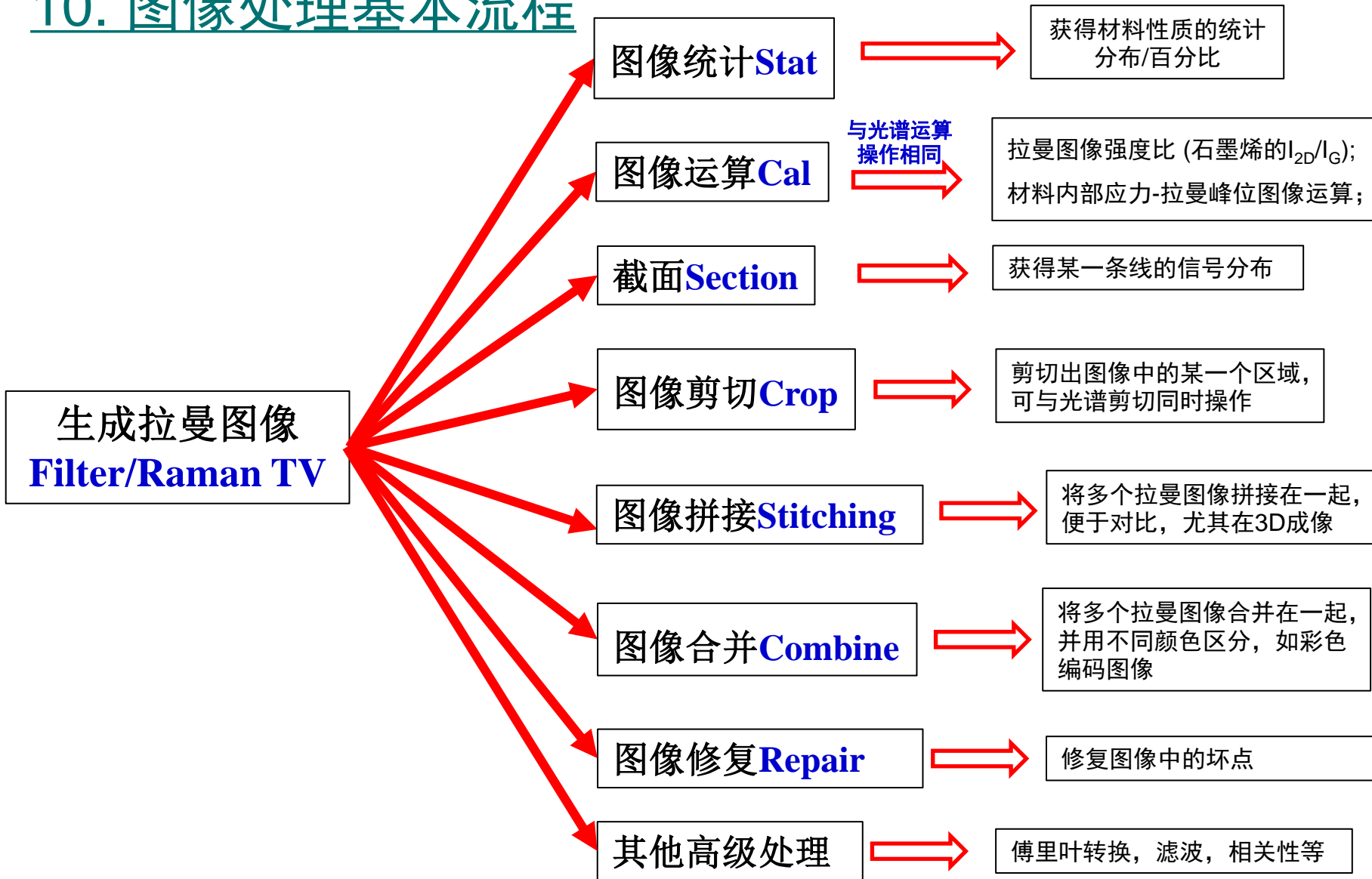
容差: 可允许的拟合误差

最大回归次数: 拟合不成功时, 可以增加回归次数



图像处理基本流程

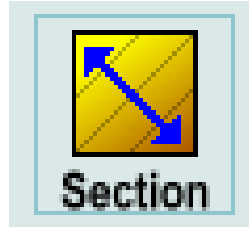
10. 图像处理基本流程



11. 拉曼图像截面Section: 获得某一条线的信号分布

目的: 通过拉曼图像截面来分析沿线材料性质: 如种类、晶体结构、缺陷等分布

操作步骤: 1. 将拉曼图像拖拽放到



2. 在图像上, 直接用鼠标划线, 在谱线窗口获得统计分布

3. 在Advanced Options中, 调节划线宽度、起始点坐标及划线方向

注: 可以同时多个拉曼图像做截面

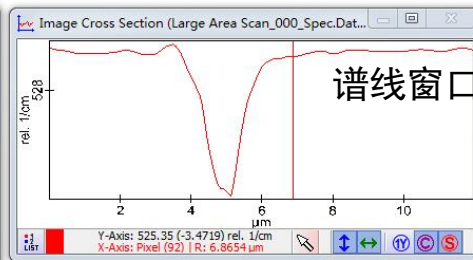
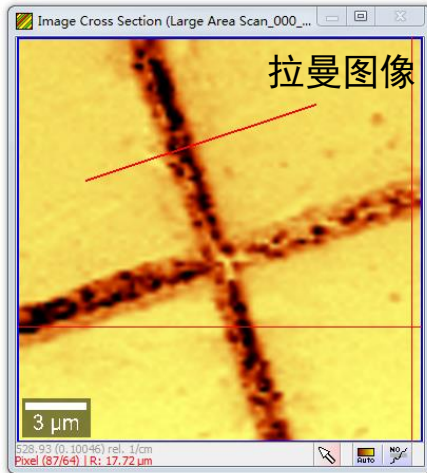


Image Cross Section

Large Area Scan_000_Spec.Data 1: Position 1 (Pos: 52)

Listen Line (Click and Drag in Image Preview)

Listen Horizontal Line Listen Vertical Line

Show Advanced Options

Sampling Points: 162 - Average Width: 0.00 [μm]

Advanced Options

Number of Sampling Points: 162 Auto

Average Width [μm]: 0

	Start Coordinate	Stop Coordinate
X [μm]:	-921.65796	-910.22193
Y [μm]:	2131.0981	2134.8579
Z [μm]:	0	0

Listen Listen

Swap Start and Stop Coordinates

Extract

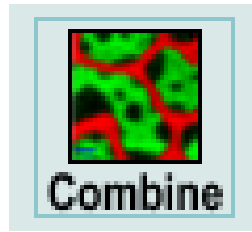
选择如何划线

划线宽度

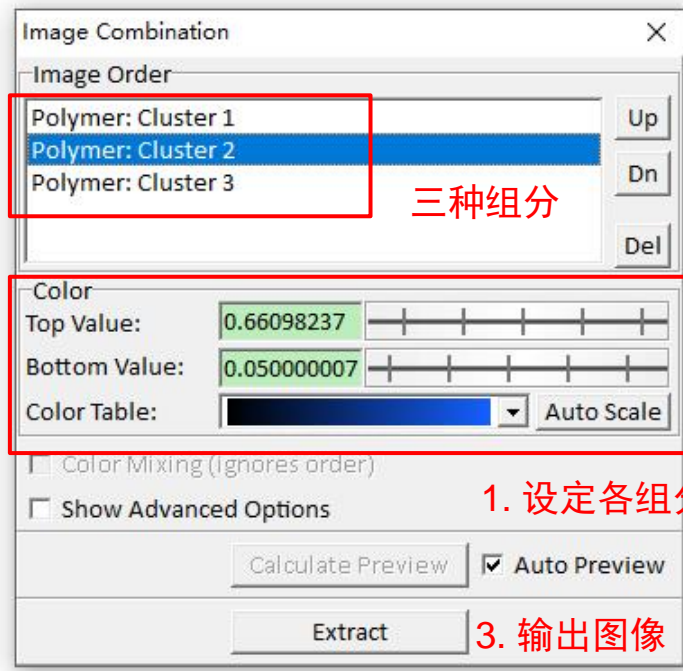
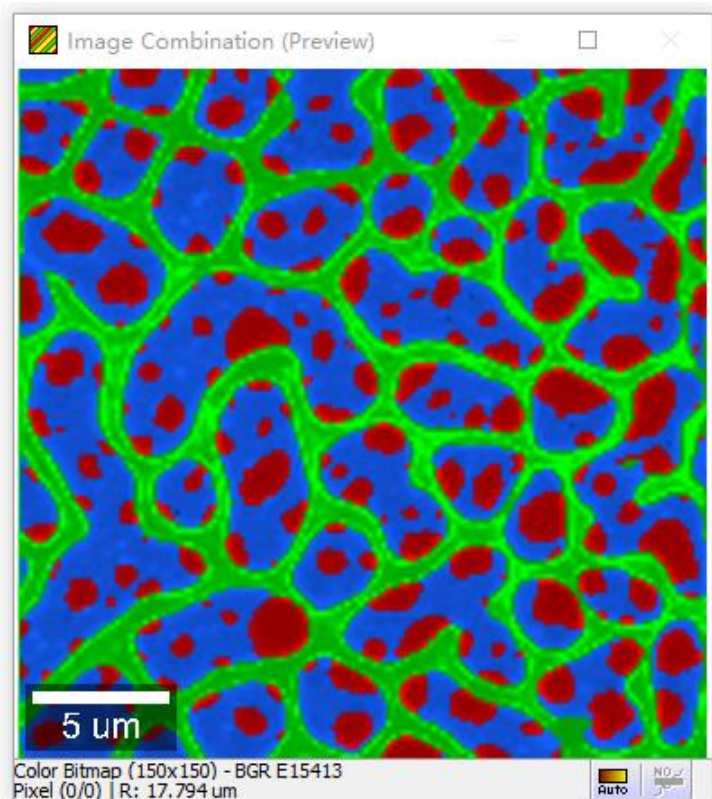
起始点坐标

划线方向

12. 拉曼图像合并Combine: 获得彩色编码图像



目的: 拉曼成像数据经过Filter/Analyzer的化学成分分析之后, 获得组分分布图像, 利用Combine可以构筑成彩色编码图像



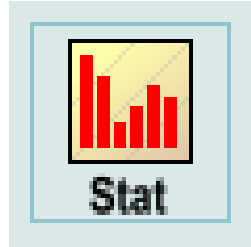
三种组分

2. 设定各组分的颜色比例尺

1. 设定各组分的颜色

3. 输出图像

13. 拉曼图像统计： 获得数据全部或局部的统计分布



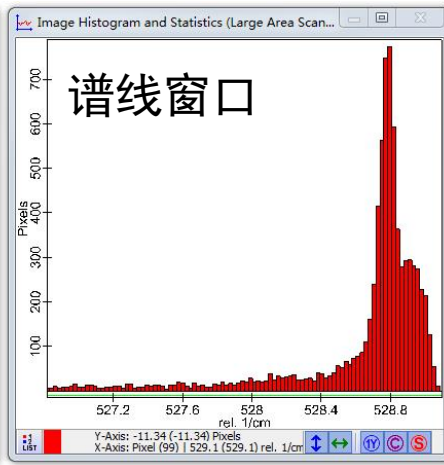
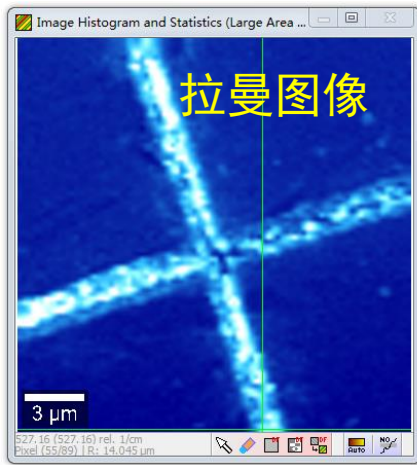
目的：通过拉曼(强度，峰强比，峰位及峰宽)图像统计来分析材料性质：如种类、晶体结构、缺陷等分布

操作步骤： 1. 将拉曼图像拖拽放到



2. 在图像上，利用Draw tool来选择区域；在谱线窗口获得统计分布

3. 选择Histogram，输出柱状分布曲线；选择Statistics，输出**平均值与标准差**



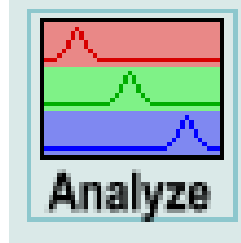
Statistic	Value
Number of Pixels	8100
Area [μm²]	400
Sum [rel. 1/cm]	4.28126E06
Average [rel. 1/cm]	528.55
Variance [(rel. 1/cm)²]	0.485626
Standard Deviation [rel. 1/cm]	0.696869
Median [rel. 1/cm]	528.788

X坐标： 图像数据pixel

Y坐标： 某一个拉曼数据的数目，可以换成为百分比

注：可以同时统计多个拉曼图像

14. 化学成分分析Analyze-拉曼成像全自动归类



原理： $S = a \cdot S_A + b \cdot S_B + c \cdot S_C + \dots + \text{Residual}$

S-拉曼成像的光谱； S_A, S_B, S_C 为**纯组分A, B, C**的特征拉曼光谱；

a,b,c为相应组分的系数，可代表含量分布；Residual为残余光谱

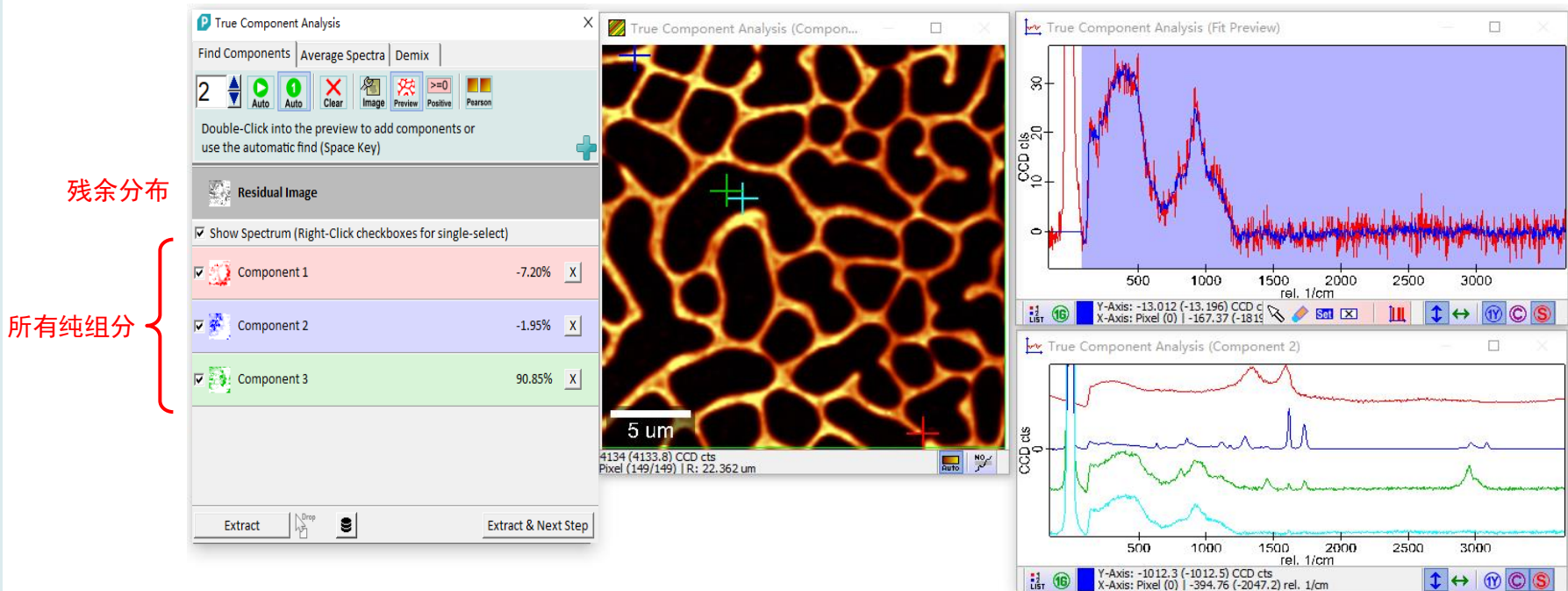
数据要求： 纯组分A, B, C的特征拉曼光谱

分析处理的目标： 获得各组分的系数，即含量分布

14. 化学成分分析Analyze-拉曼成像全自动归类



方法1:

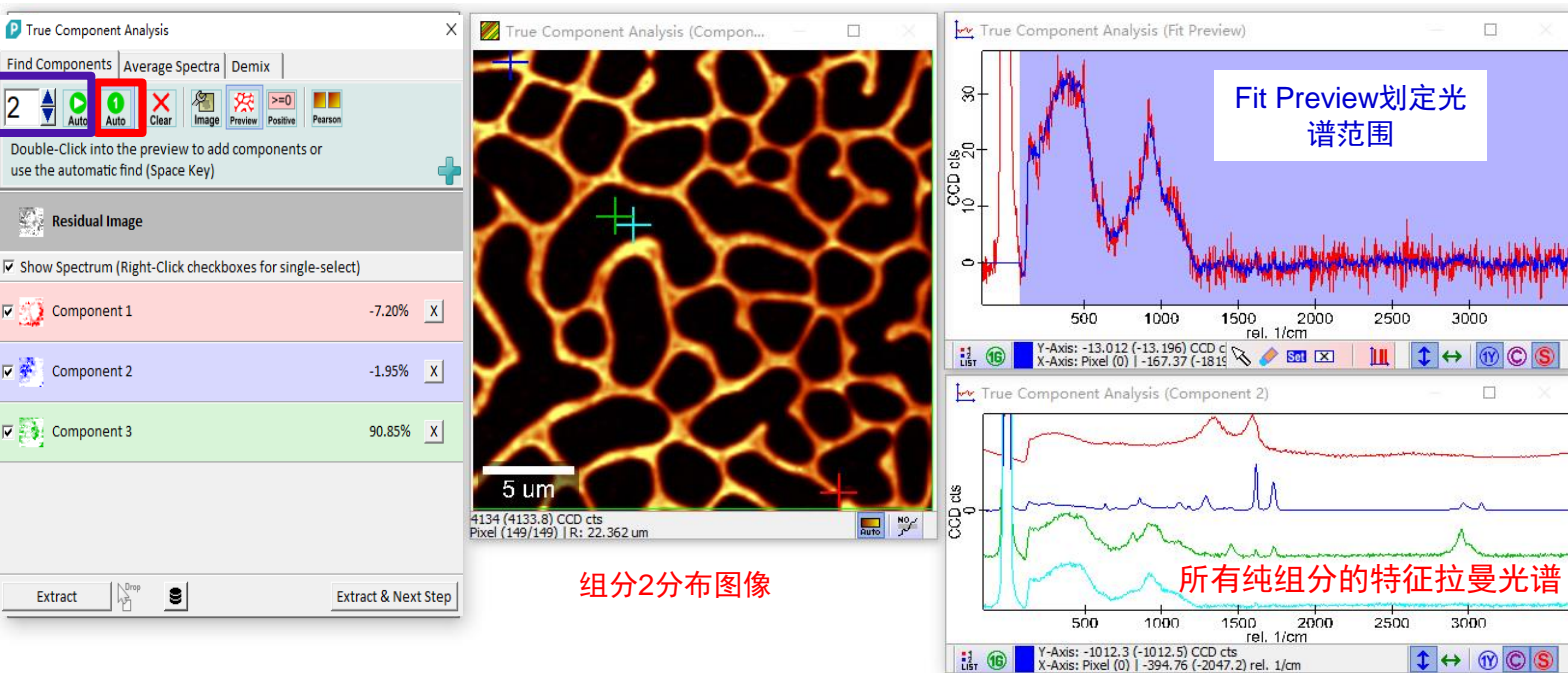
1. 同时选择所有**纯组分拉曼单光谱** + **拉曼成像数据**，拖放到Analyze中；
2. 在Fit Preview 光谱窗口上，划定拉曼光谱范围，无拉曼光谱区域可不选
3. 系统自动运算后，输出结果



14. 化学成分分析Analyze-拉曼成像全自动归类

方法2:

1. 将拉曼成像数据拖放到Analyze中;
2. 在Fit Preview 光谱窗口上, 划定拉曼光谱范围, 无拉曼光谱区域可不选
3. 设定预分类的数目, 点击 , 系统自动运算后, 输出结果(Extract); 或者不断点击 , 逐个自动搜索组分并实时分析合理性。
4. 如需添加组分, 可直接左键双击残余分布图像中最亮区域



残余

所有纯组分

组分2分布图像

Fit Preview划定光谱范围

所有纯组分的特征拉曼光谱

15. 聚类分析 K-Means

原理: 根据拉曼光谱相似度进行光谱分类，找寻扫描结果中化学组分种类及细微变化；
在微纳米材料、生物病理分析及地质分析等领域应用非常重要

目的: 获得组分种类及分布及其特征光谱

预设分类数目

运行分类

操作步骤

1. Edit the Spectral Mask 光谱范围
2. Change Root Cluster Options 聚类分析函数(默认参数)
3. Set the Number of Clusters 预设分类数目
4. Start Cluster Analysis 运行分类

Don't show this again

Extract Cluster Masks Combination Bitmap Extract & Next Step

15. 聚类分析 K-Means

Cluster Analysis K-Means

Root Cluster 1

Cluster 1

Cluster 2

两个分类

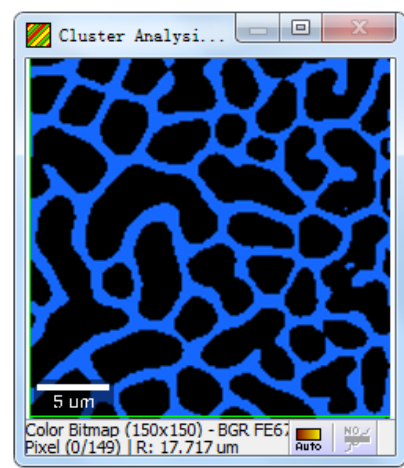
如需添加种类，可直接在Cluster 1或2直接双击

Extract

Cluster Masks

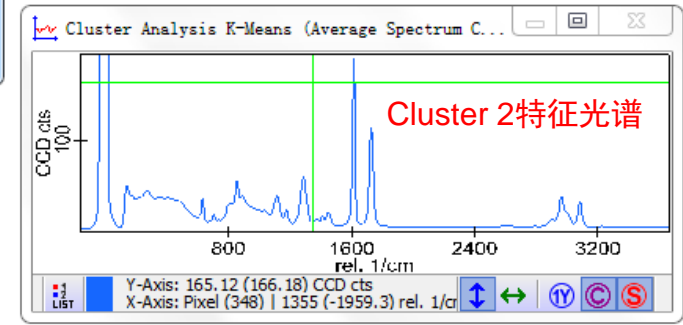
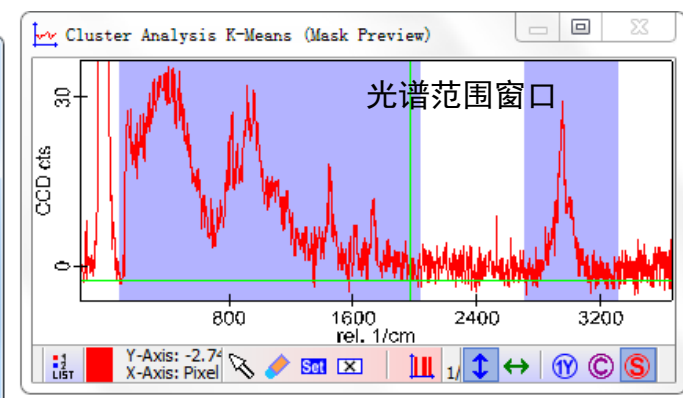
Combination Bitmap

Extract & Next Step



Cluster 2图像

数据输出

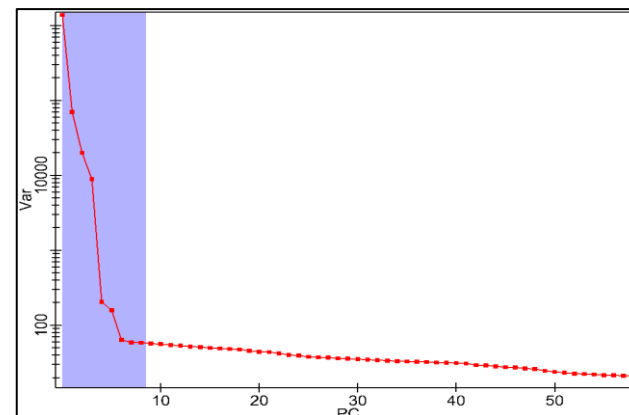
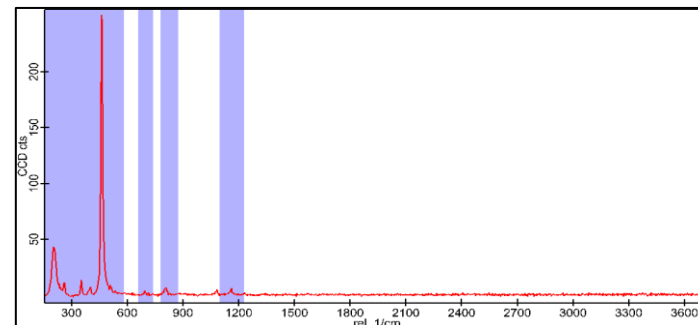


16. 主成分分析 (PCA) 降噪处理



原理: 根据主成分分析基本原理对成像数据进行降维处理, 实现对光谱的降噪, 获得更高信噪比的光谱结果 (针对的是信号较弱的的数据结果)

目的: 获得高信噪比的光谱, 以便获取更好的成像结果



注: 进行PCA前, 必须完全扣除宇宙射线、合理扣除背景

光谱处理基本流程

