

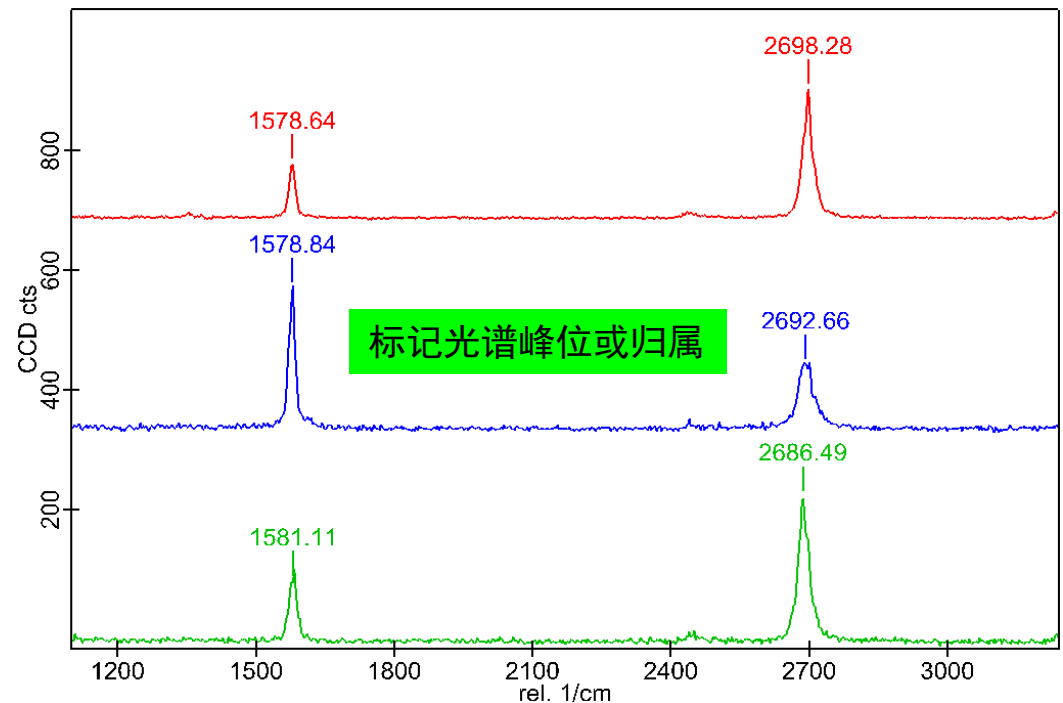
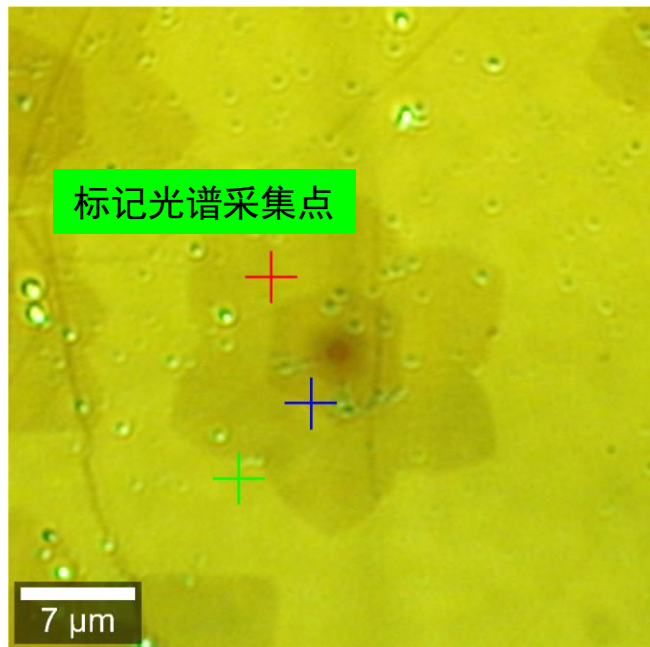
# 德国WITec拉曼数据处理培训资料



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

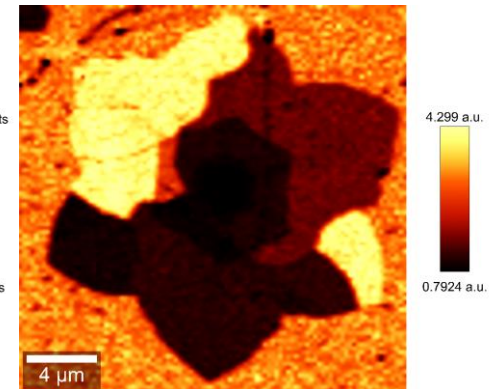
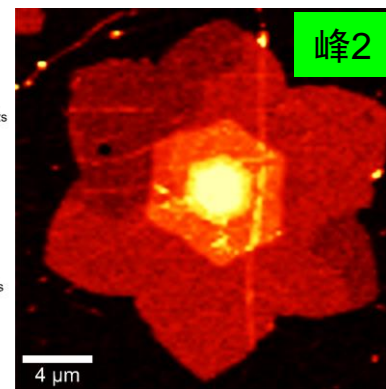
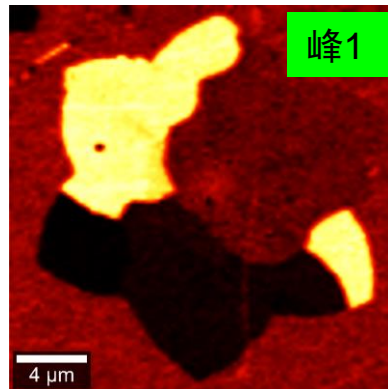
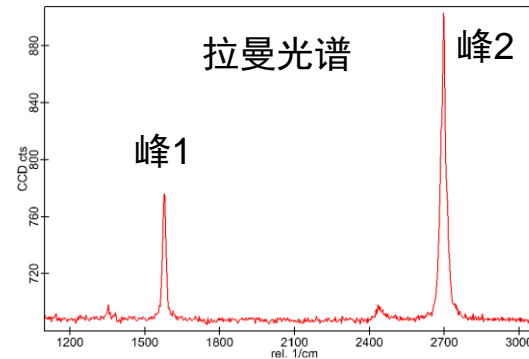
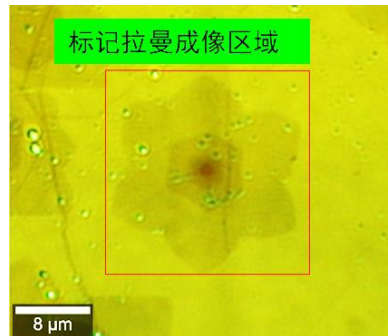


**数据要求：**光学图像 + 高信噪比特征拉曼光谱（对应于特定化学成分）

**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)

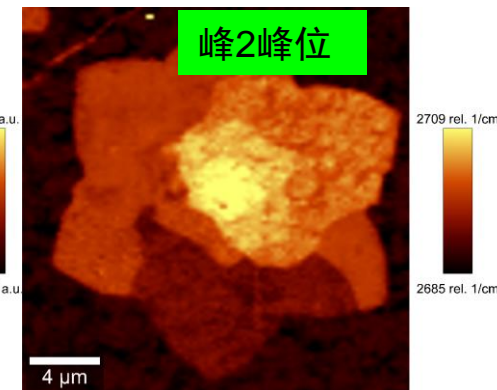
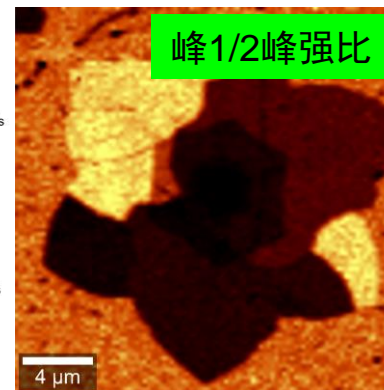
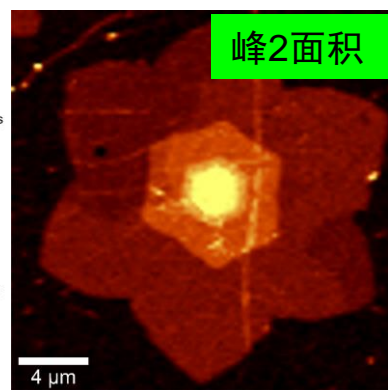
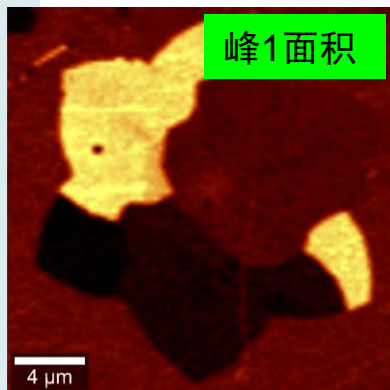
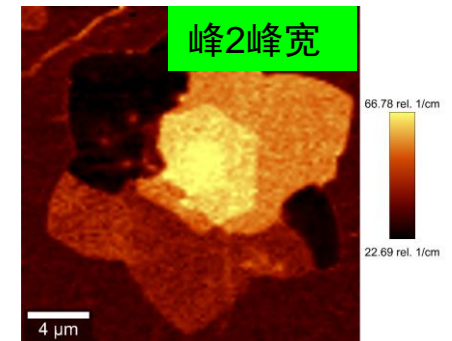
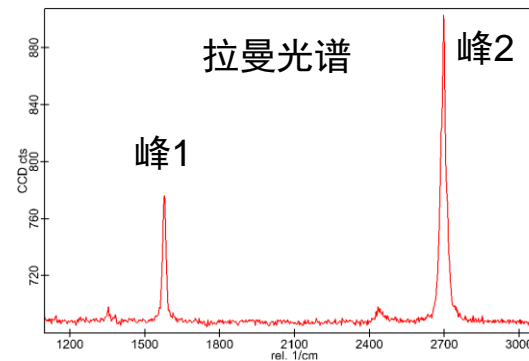
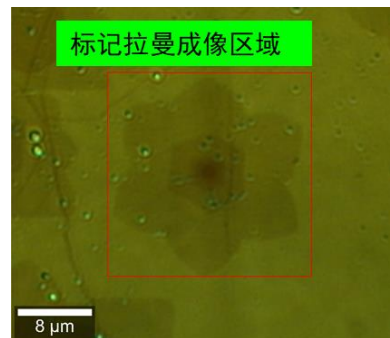


数据要求：光学图像 + 高信噪比单个拉曼光谱 + 特征谱峰的峰面积图像(峰位或峰宽)

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)

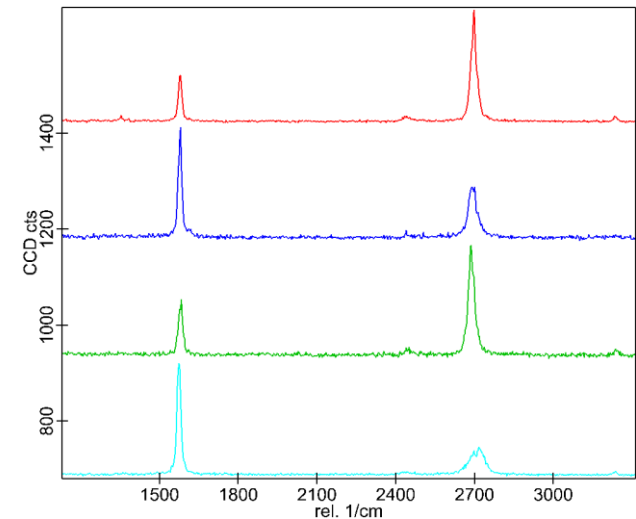
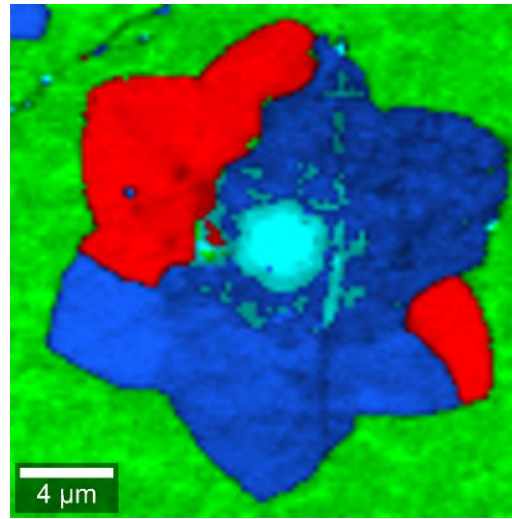
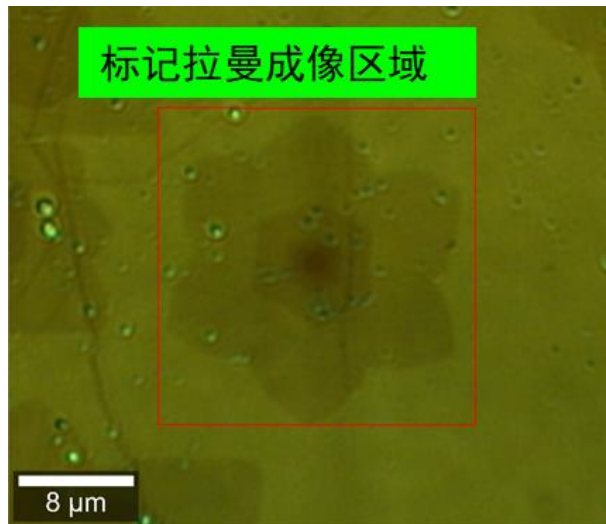


数据要求：光学图像 + 高信噪比单个拉曼光谱 + 特征谱峰的峰面积图像(峰位或峰宽)

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)



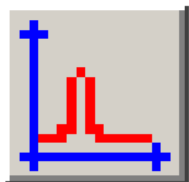
图像与光谱的颜色必须一致

**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

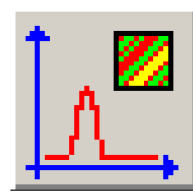
**数据解读：**对比特征拉曼光谱与彩色拉曼图像，分析材料化学成分的种类及空间分布等



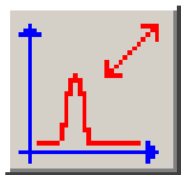
# 认识数据图标



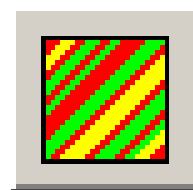
单个拉曼光谱



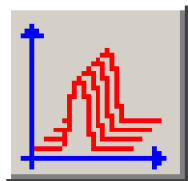
拉曼成像数据







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**

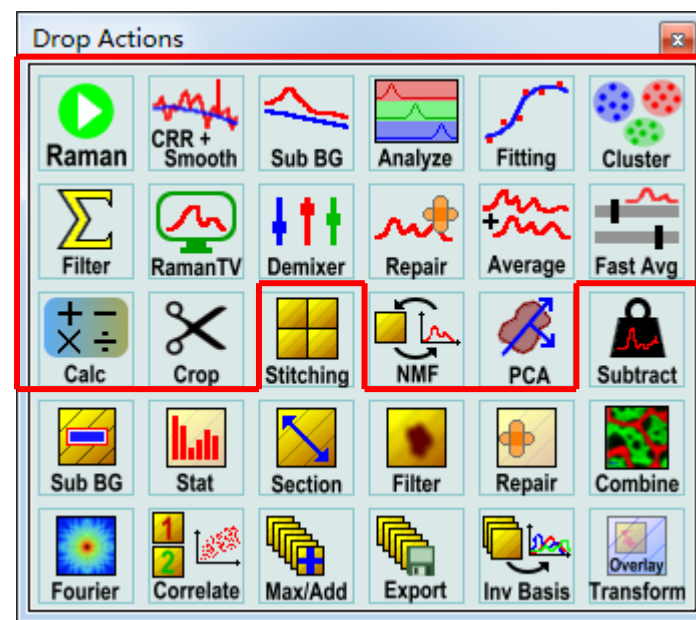
光谱修复**Repair**

### ➤ 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**

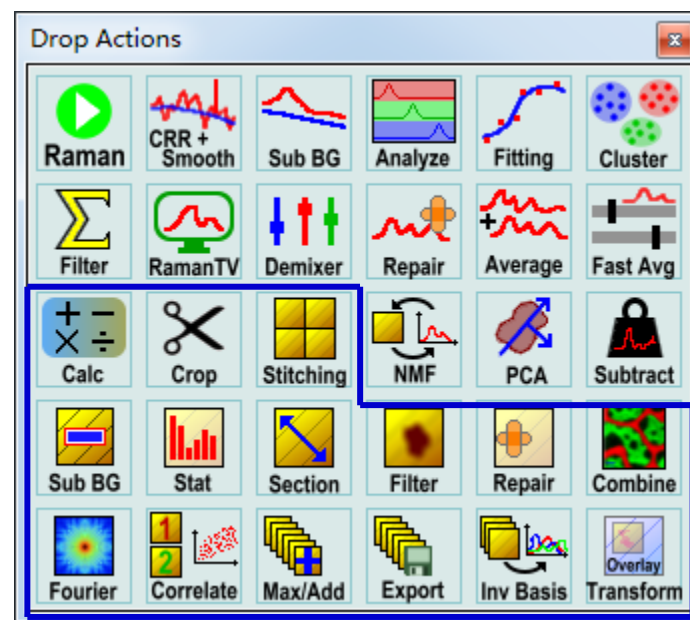
3D图像输出**Export**

### ➤ 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**

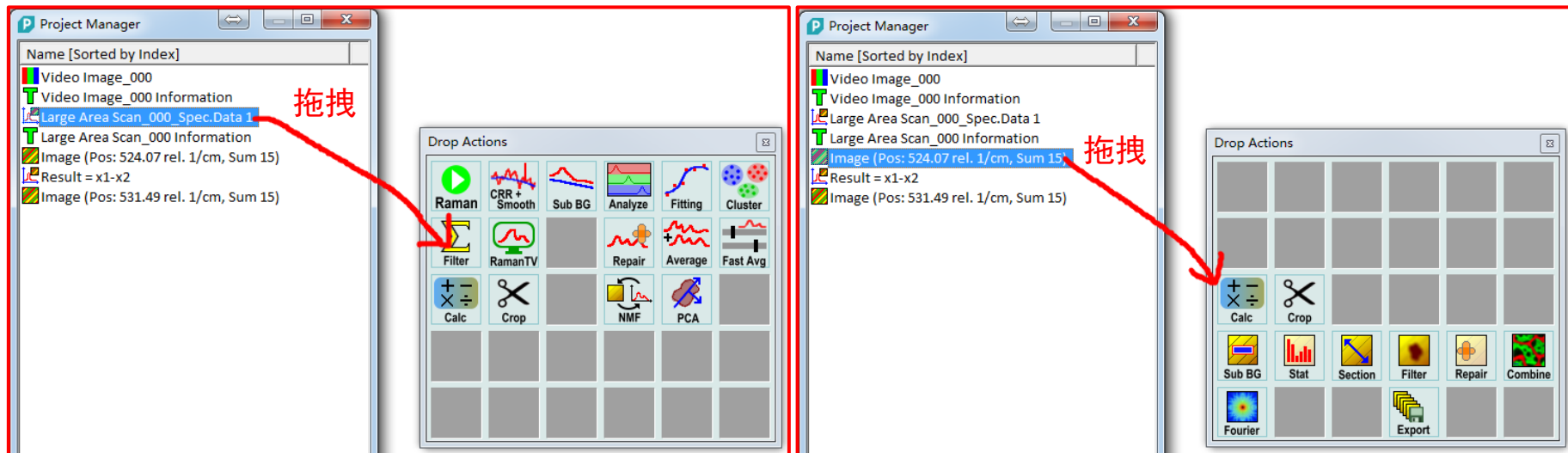
图像空间相关**Transform**





## 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。



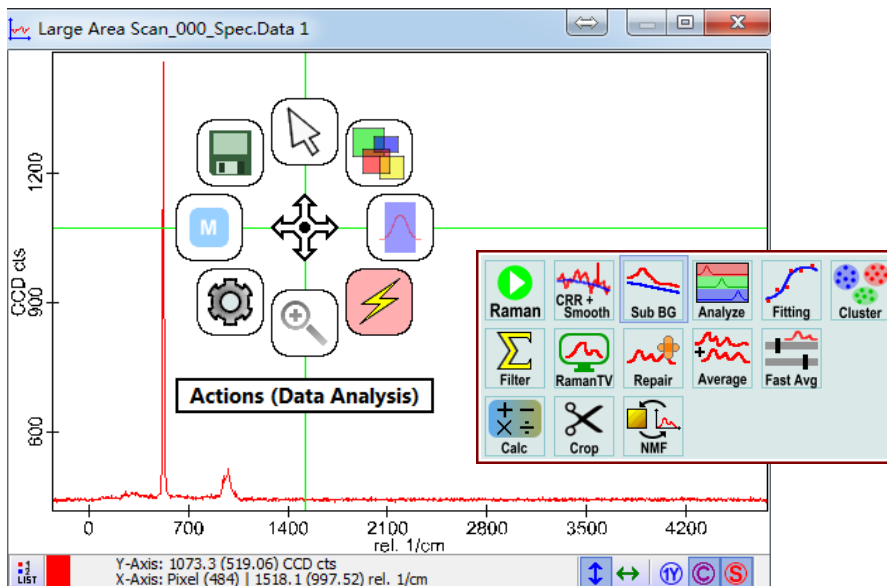
光谱

图像

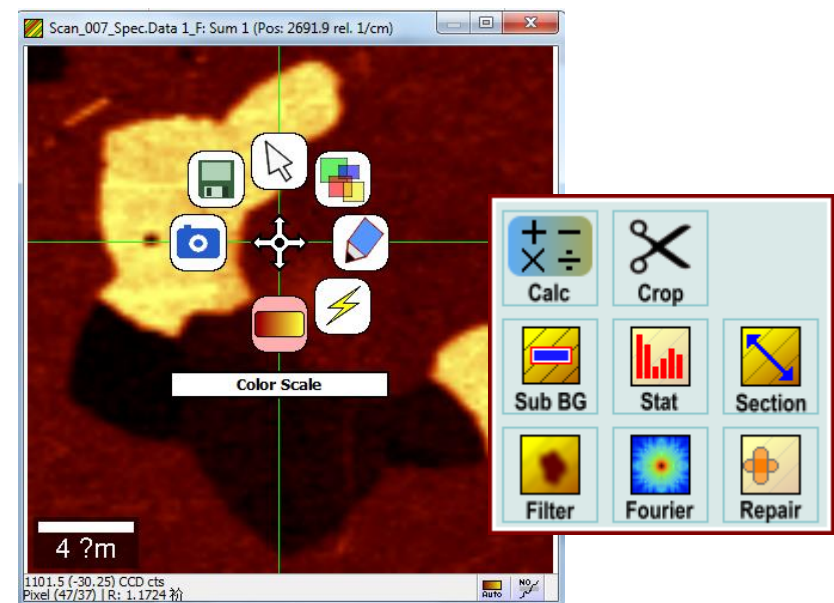
## 数据处理快速处理 2

### • 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

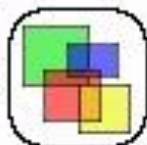
## 圆形导航窗口-光谱

鼠标模式

Mouse Move

输出及保存

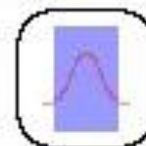
Export



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

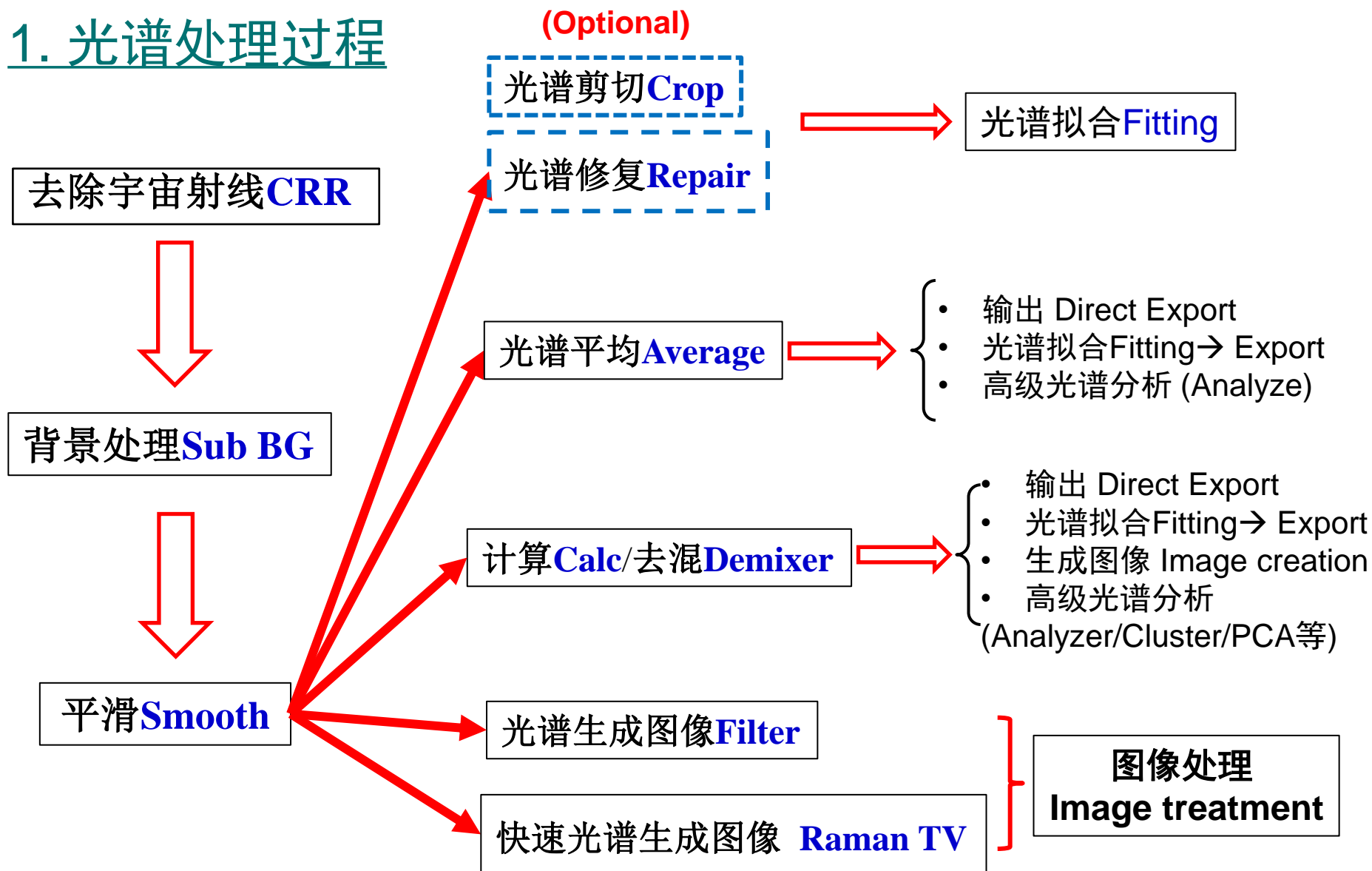
光谱缩放

## 圆形导航窗口-图像



# 光谱数据分析

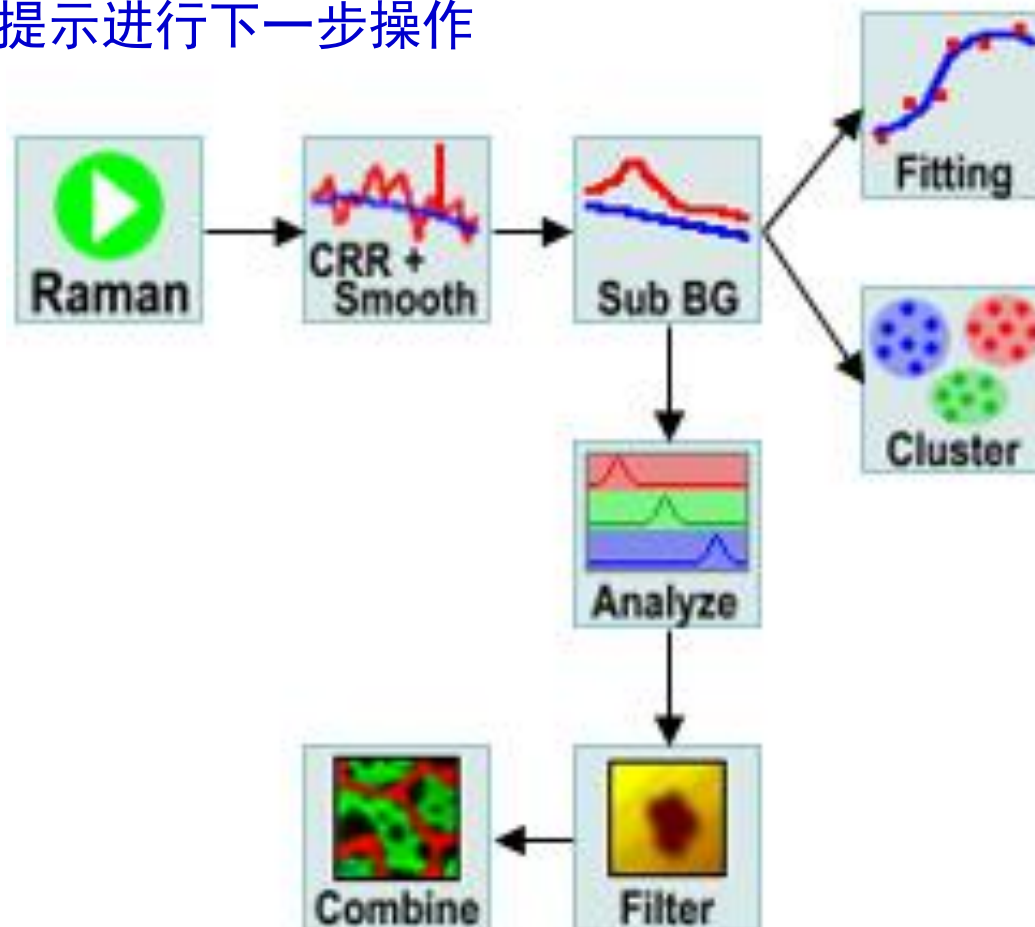
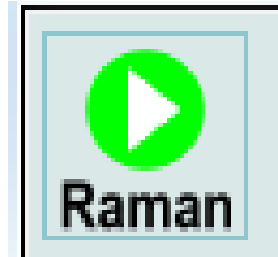
# 1. 光谱处理过程





## 1. 顺序光谱处理:

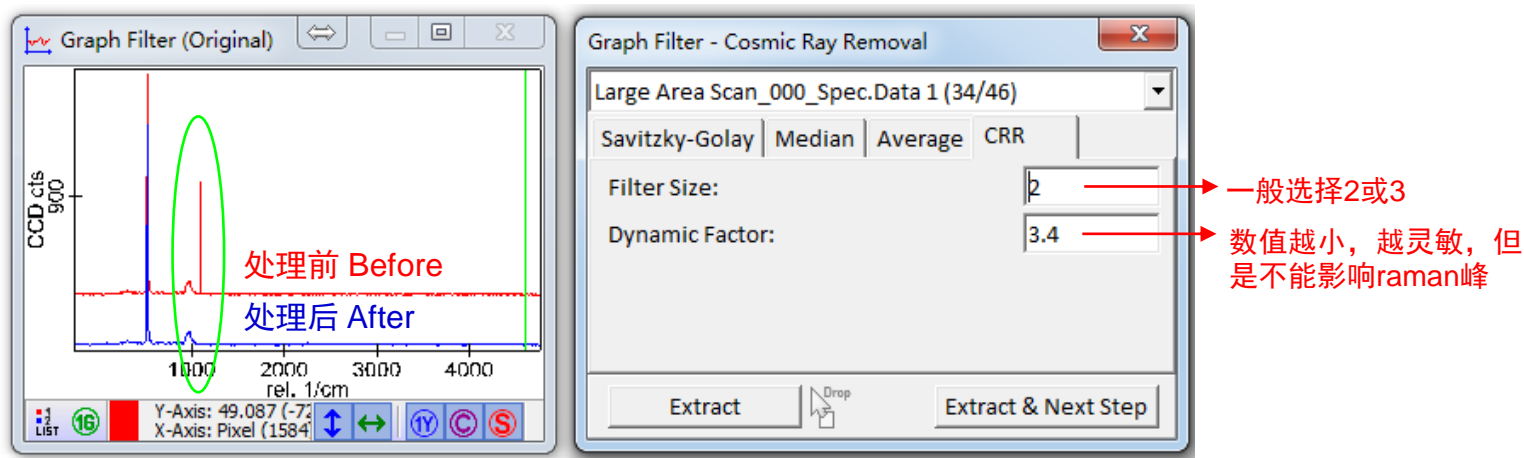
- 操作:** 1. 将光谱数据拖到“Raman”;
2. 按提示进行下一步操作



## 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)

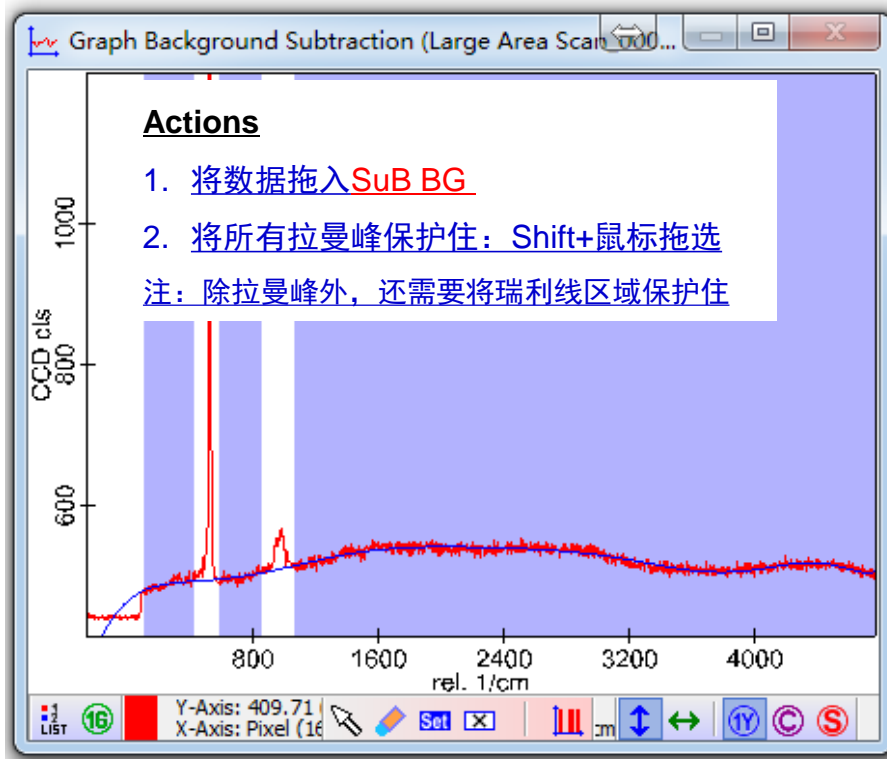


- Filter: spectral region for comparison
- Dynamic Factor:  
 $(\text{test-minimum}) > (\text{Max trust-minimum}) * \text{Dynamic Factor}$

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

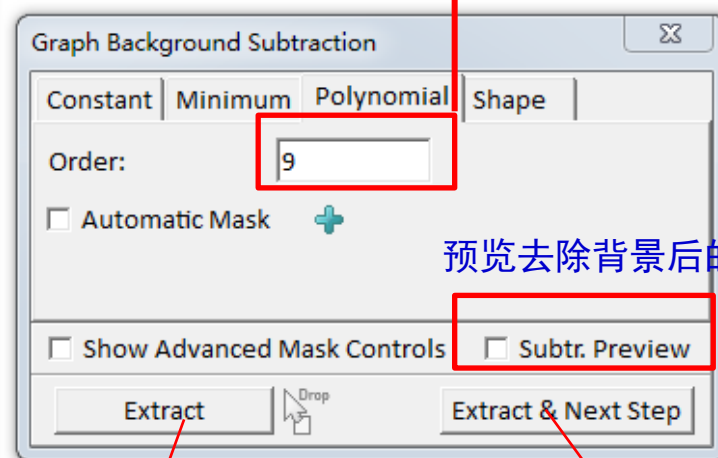
#### Method1: 多项式拟合Polynomial; 操作1-3



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

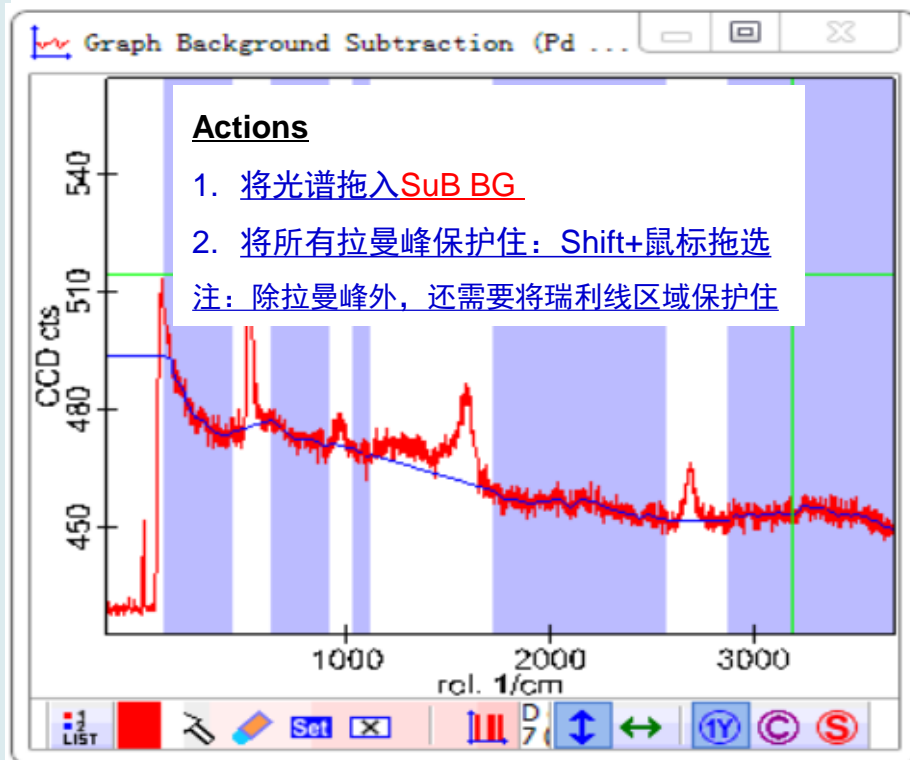


输出  
Extract

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

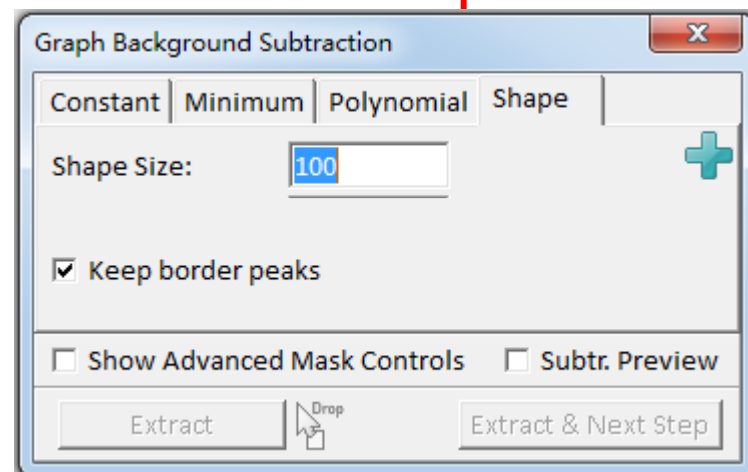
### 3. 光谱去背景处理BG sub: 拉曼光谱往往存在荧光背景, 会影响拉曼强度

#### 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

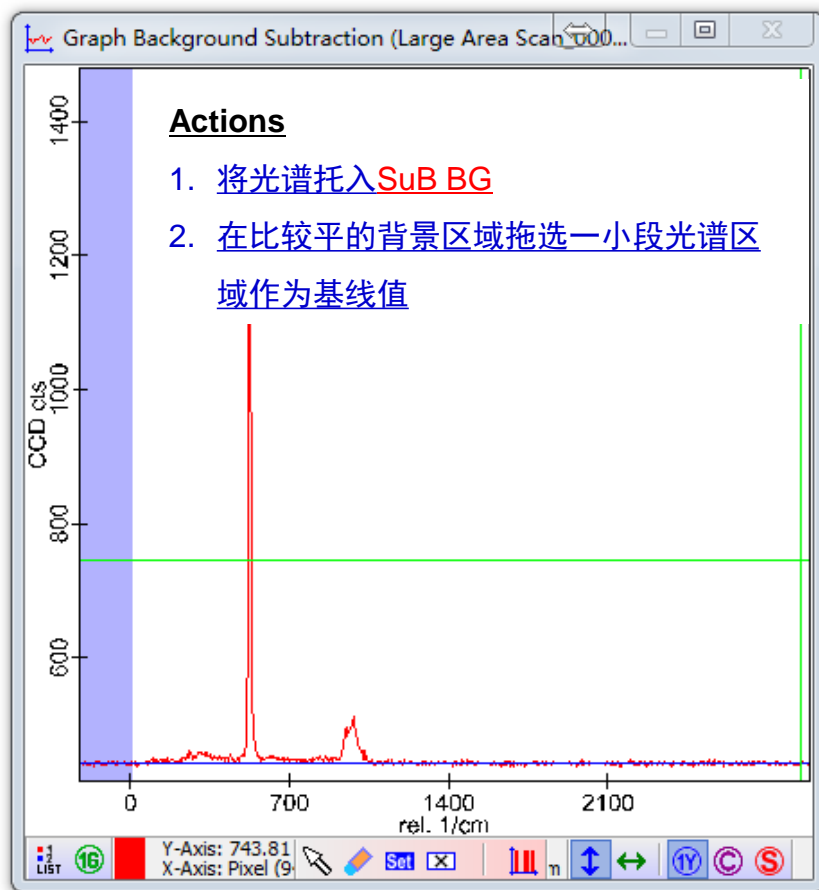


输出

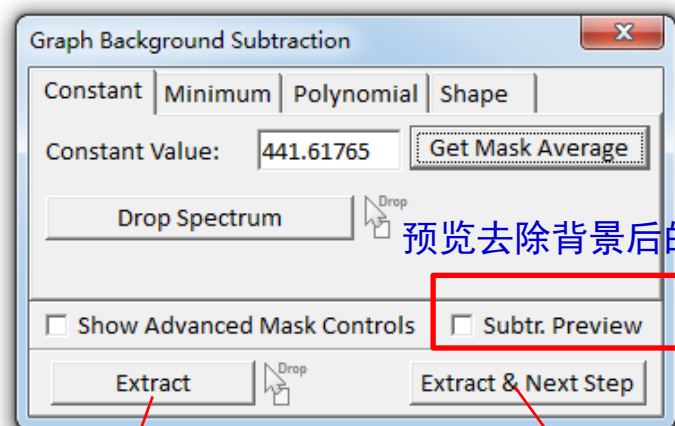
输出并进行下一步处理

### 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



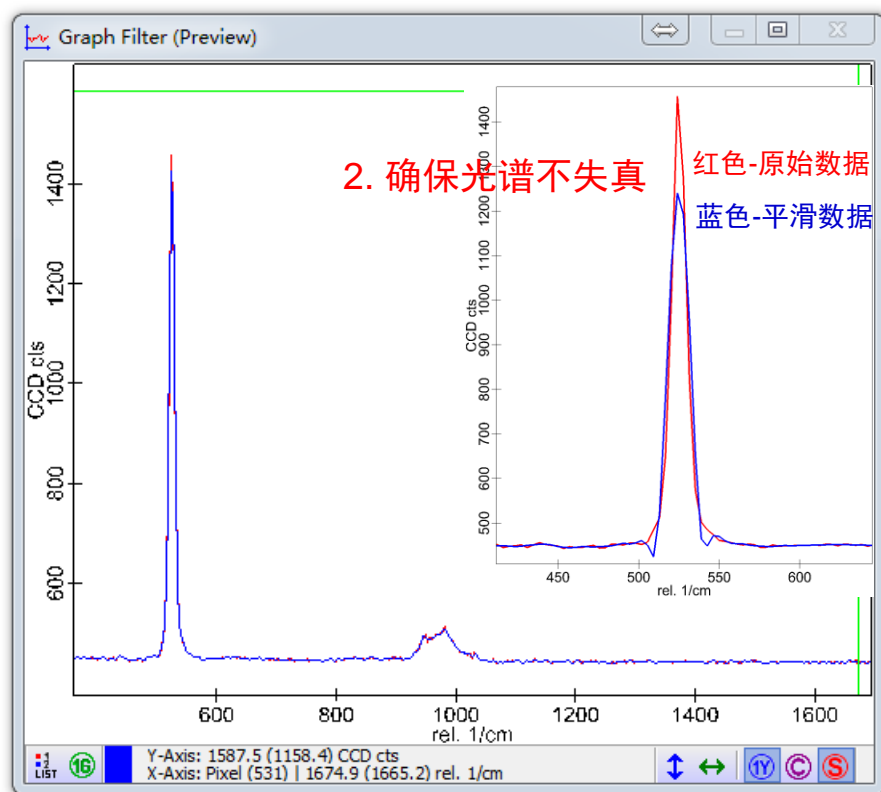
预览去除背景后的光谱

输出

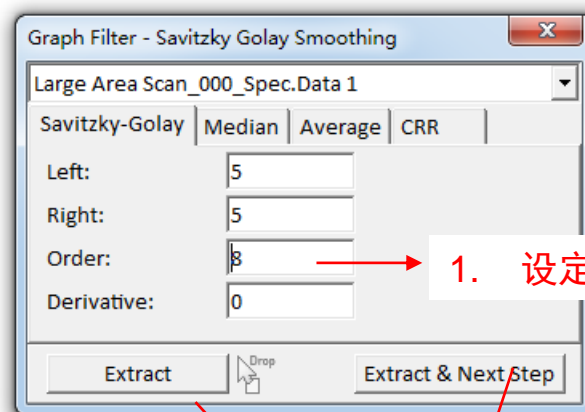
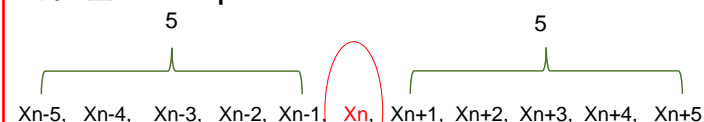
输出并进行下一步处理

## 4. 光谱平滑：提高信噪比

### Method1: SG最小二乘法；操作1-3



#### 原理/Principle

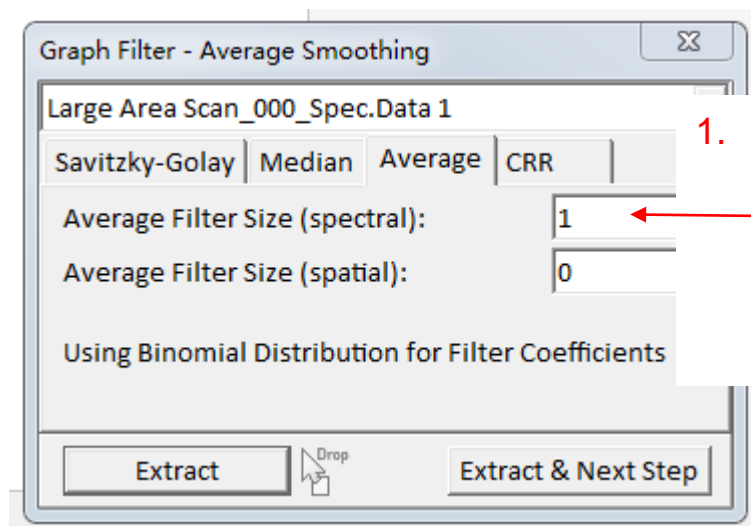
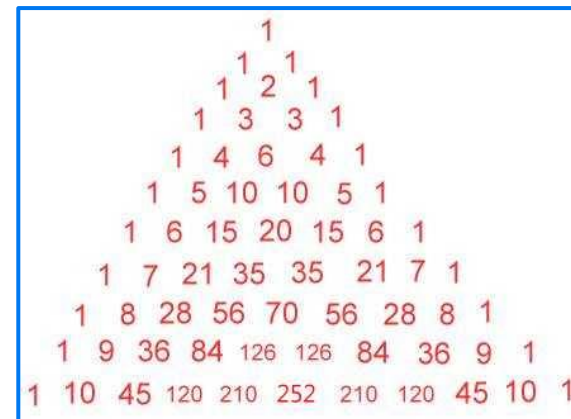
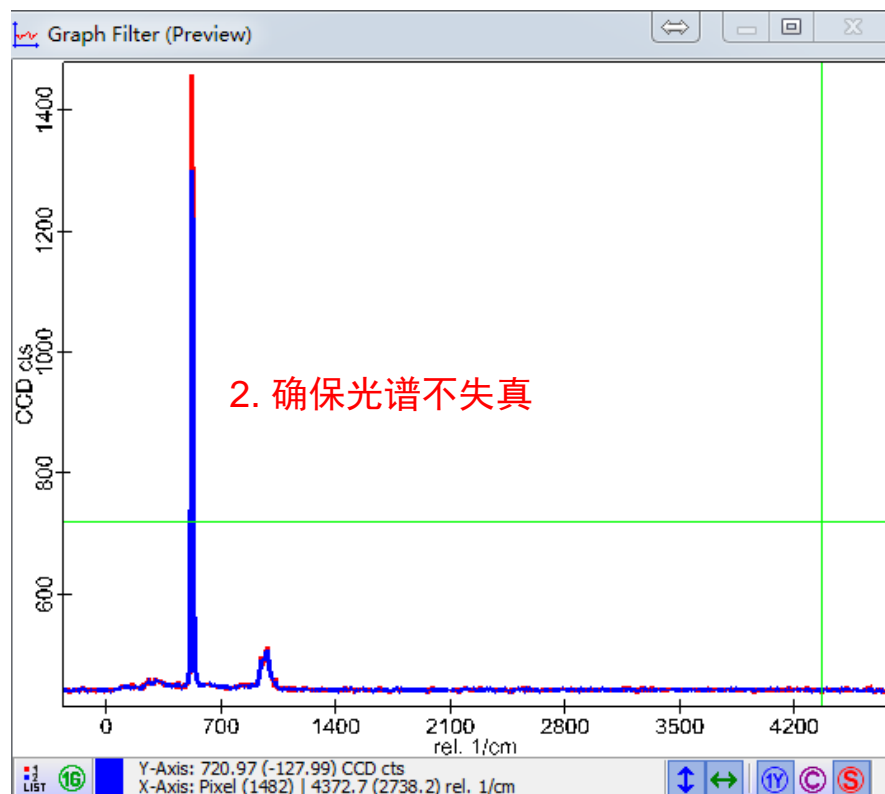


注：由于拉曼谱线较窄，光谱平滑容易造成谱线失真，如插图；荧光光谱可调范围更大些；Median方法不适用于拉曼光谱的平滑



## 4. 光谱平滑：提高信噪比

### Method2: 平均（权重）；操作1-3

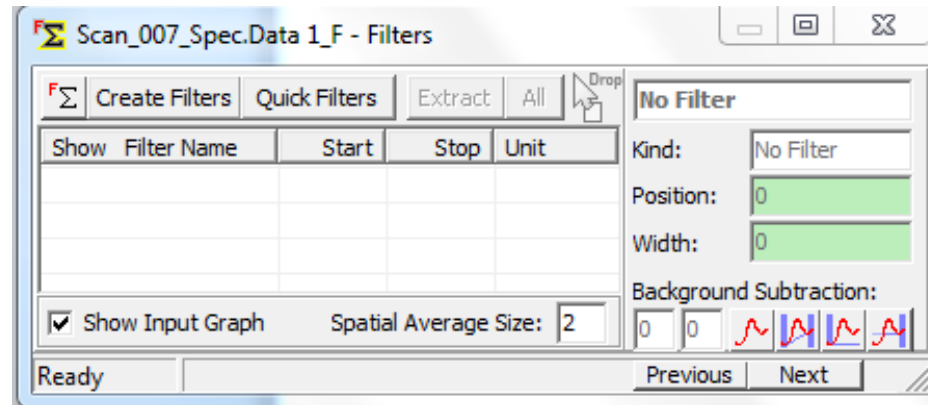


### 3. 输出或进行下一步处理

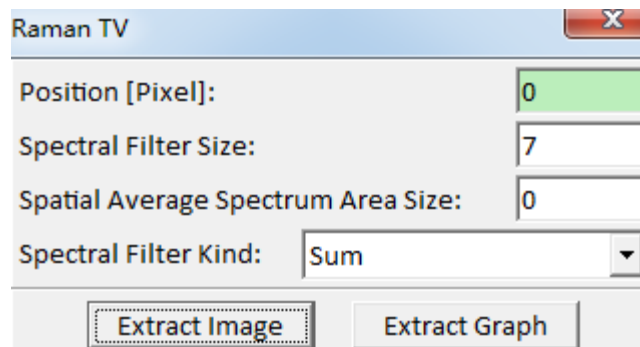
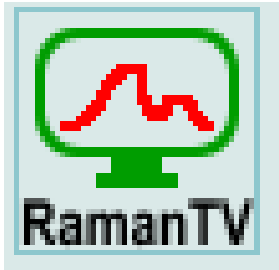
注：由于拉曼谱线较窄，光谱平滑容易造成谱线失真，如插图；荧光光谱的平滑，该参数可以设置数值较大一些可调范围更大些；Median方法不适用

## 8. 如何由光谱生成图像-两种方法

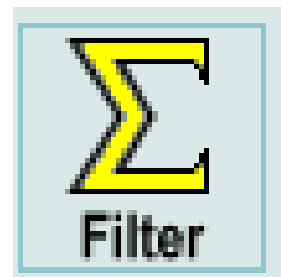
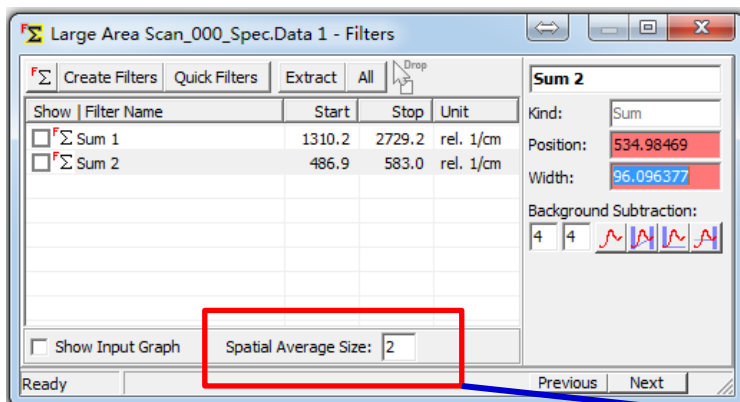
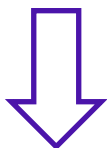
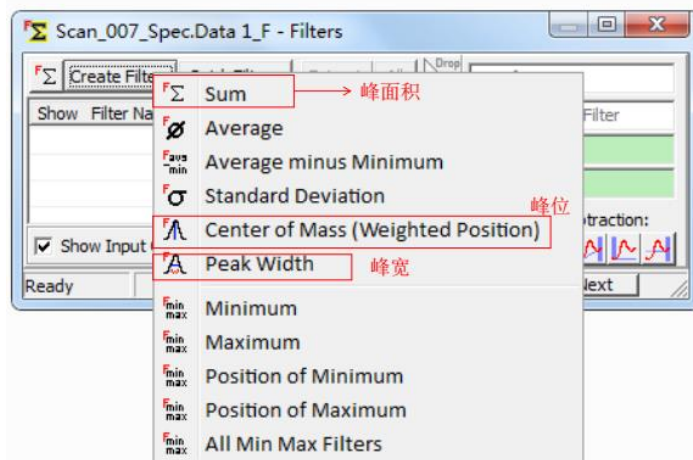
### ➤ Filter 峰面积-峰位-峰宽图像生成



### ➤ Raman TV 快速峰面积图像生成

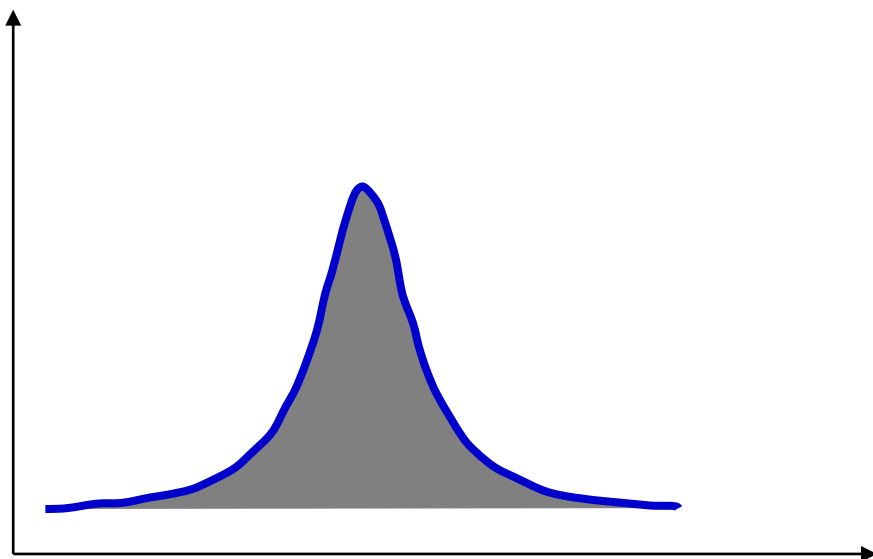


## 光谱生成图像

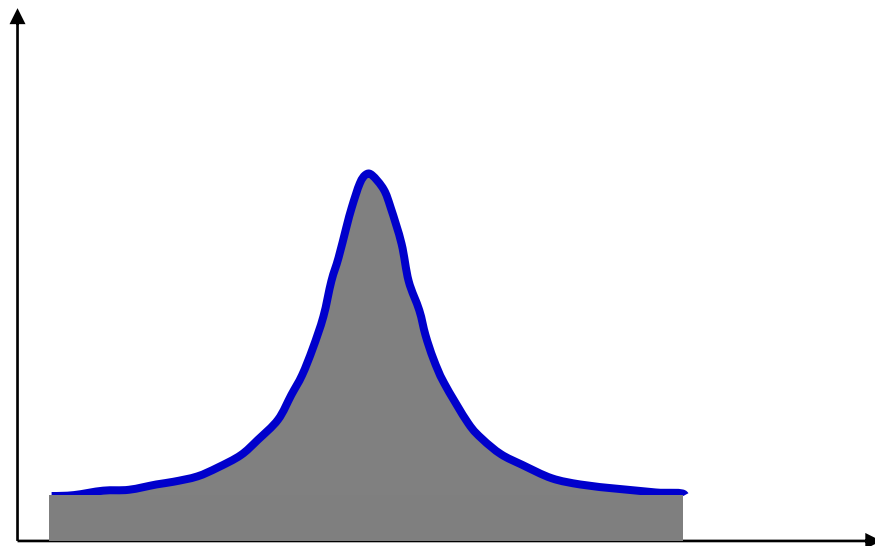


- 在“create filter”中选择峰面积、峰位、峰宽等
- 在Filter窗口右边的“Width”上，鼠标左键双击，由绿色变成红色→在光谱窗口上鼠标左键划动选择区域（**Shift+鼠标左键**为擦除已选择的区域）
- 在Background Subtraction中选择去除光谱的荧光背景
- Quick Filter: 保存/调用Filter参数
- Extract/All: 输出单个/全部图像
- Spatial Average Size: 平均光谱的空间范围

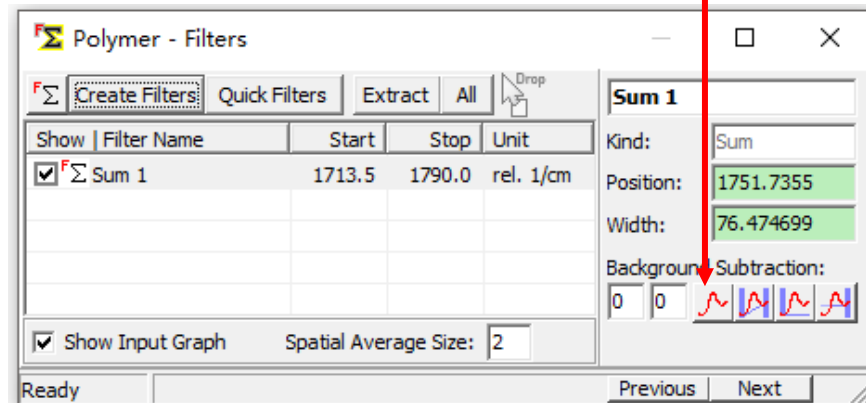
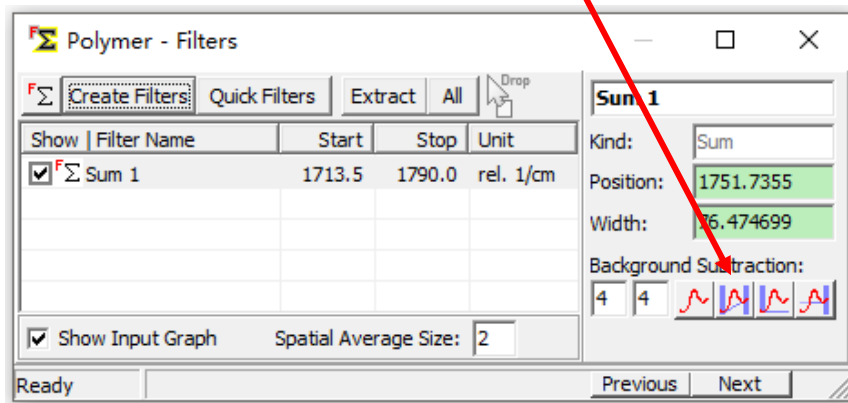
## 拉曼/荧光峰面积计算



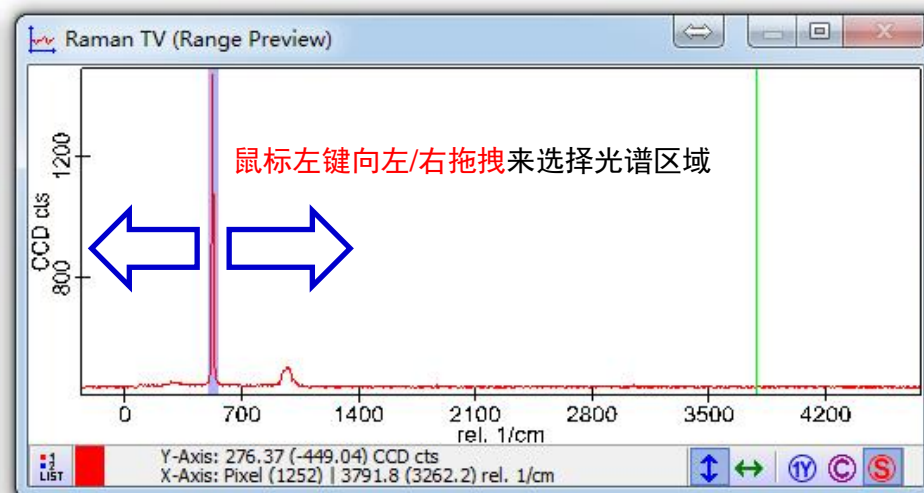
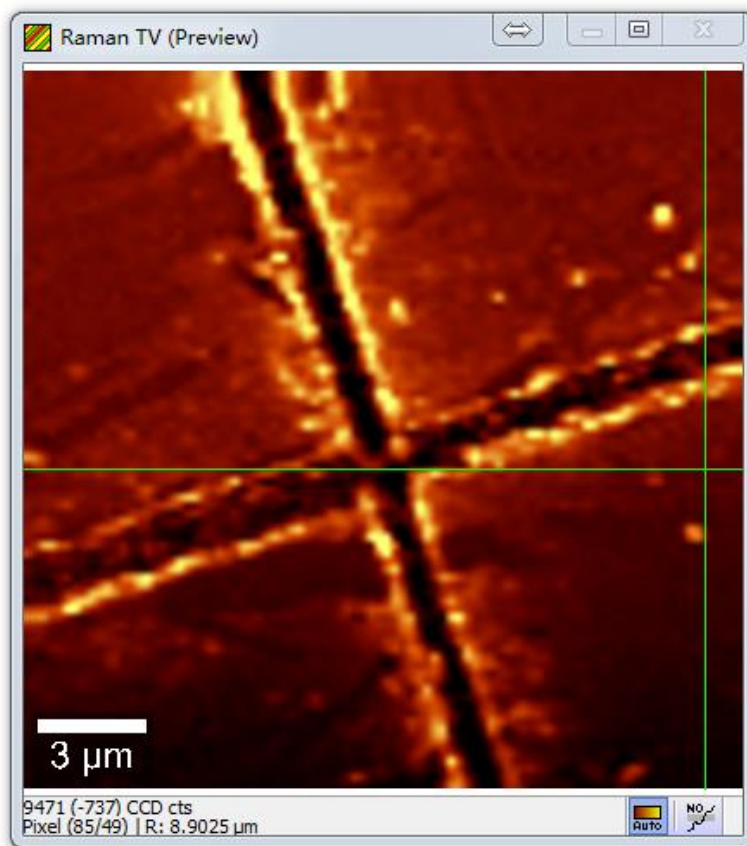
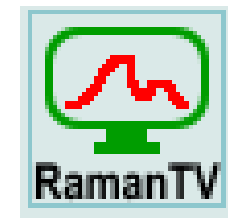
拉曼峰面积(默认值: 4,4)



微弱拉曼信号/荧光峰面积(0,0)



## ➤ 快速峰面积图像生成



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:

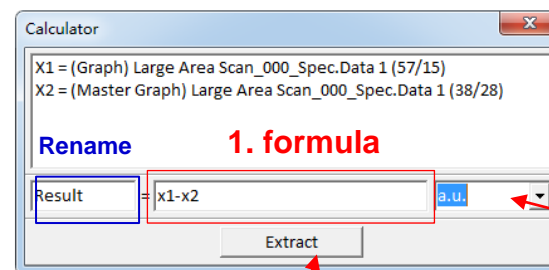
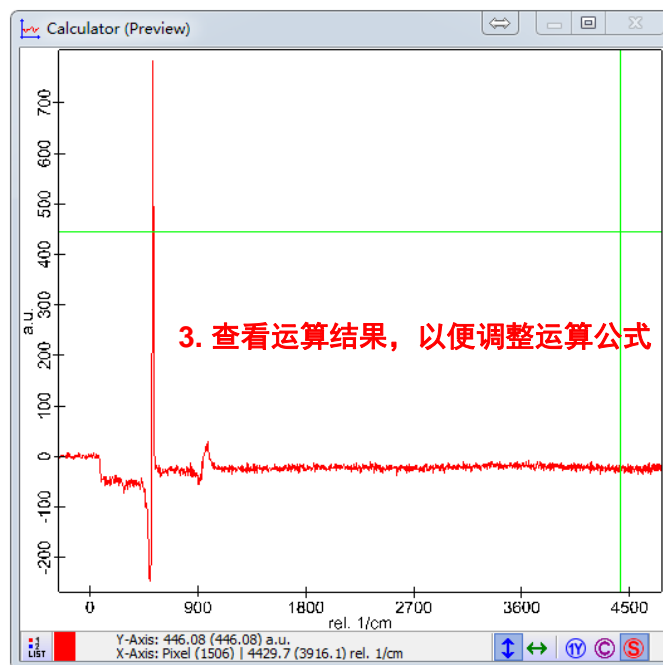
**目的:** 1). 光谱运算: 光谱加和获得总光谱; 光谱加减获得光谱差别; 白光对比/反射/透射谱等

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:

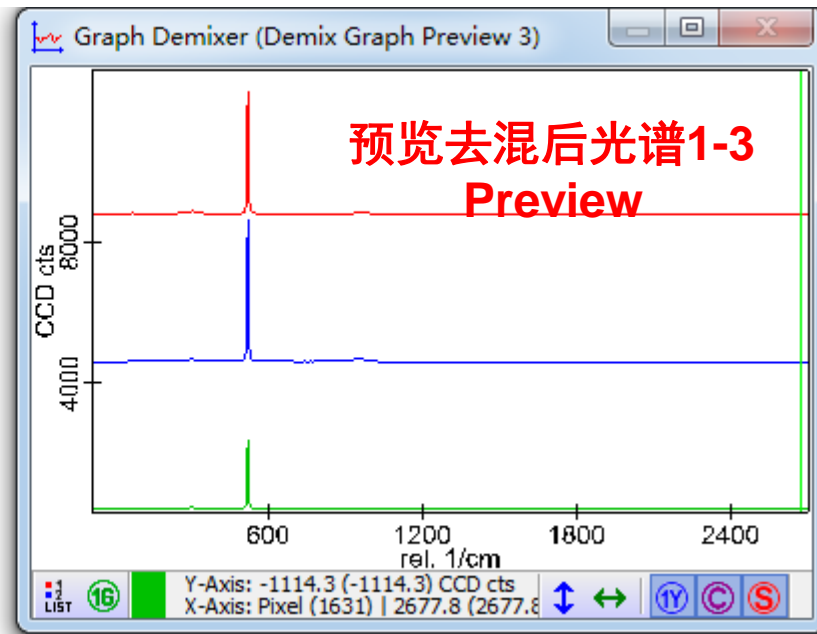
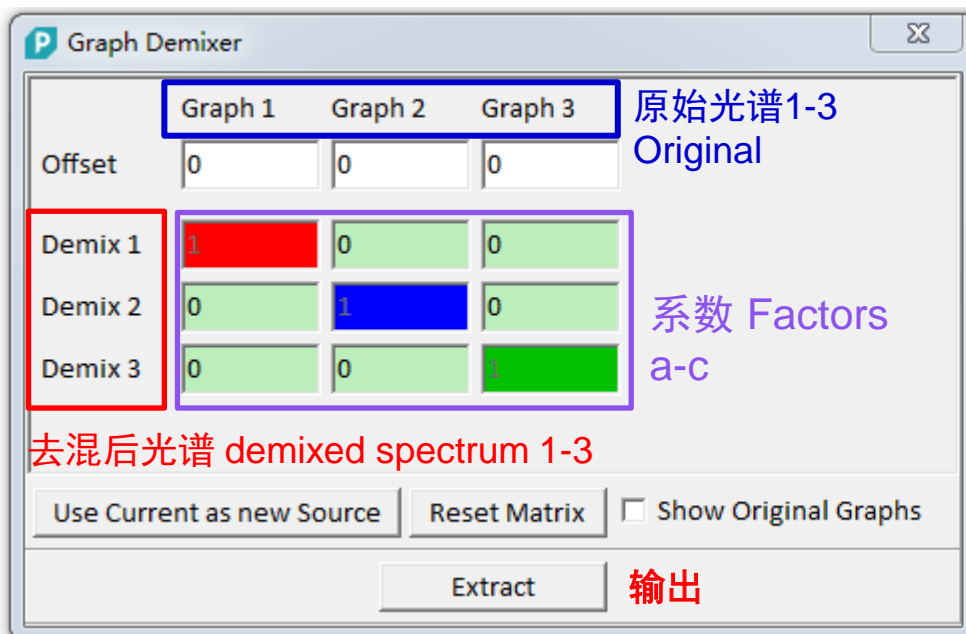
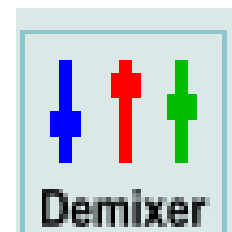
- 更多运算方法请按F1, 获得帮助文件



## 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;



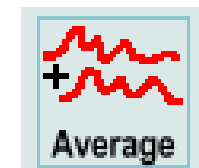
去混后光谱 =  $a \cdot \text{Graph 1} + b \cdot \text{Graph 2} + c \cdot \text{Graph 3}$

a-c 可以为正负系数

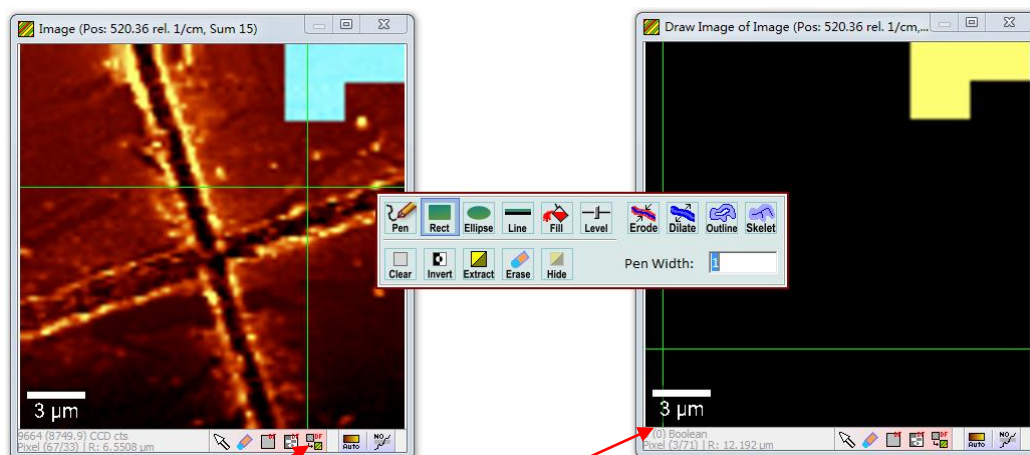
## 6. 光谱平均: 获取高信噪比光谱

**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;

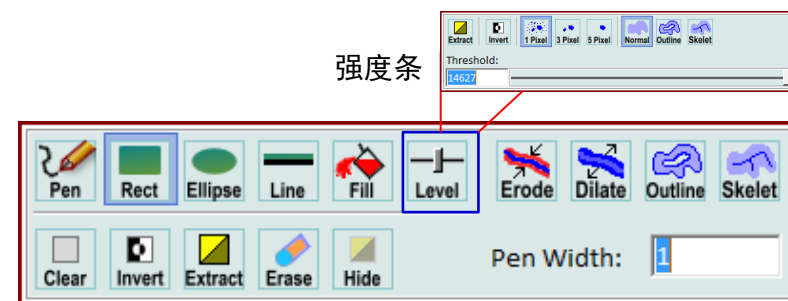
**数据要求:** Raman raw data+ Draw field image



**操作:** 1. Mark area on image by Draw tool

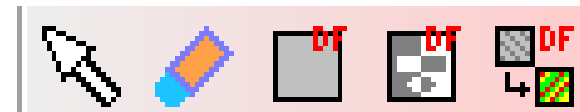


2. Extract as Draw field image



clear Invert Extract

擦除 全部清除 反转 输出



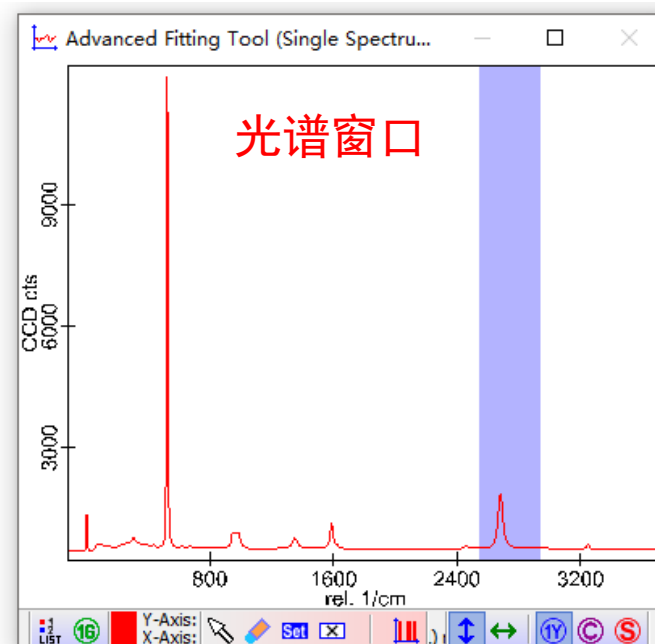
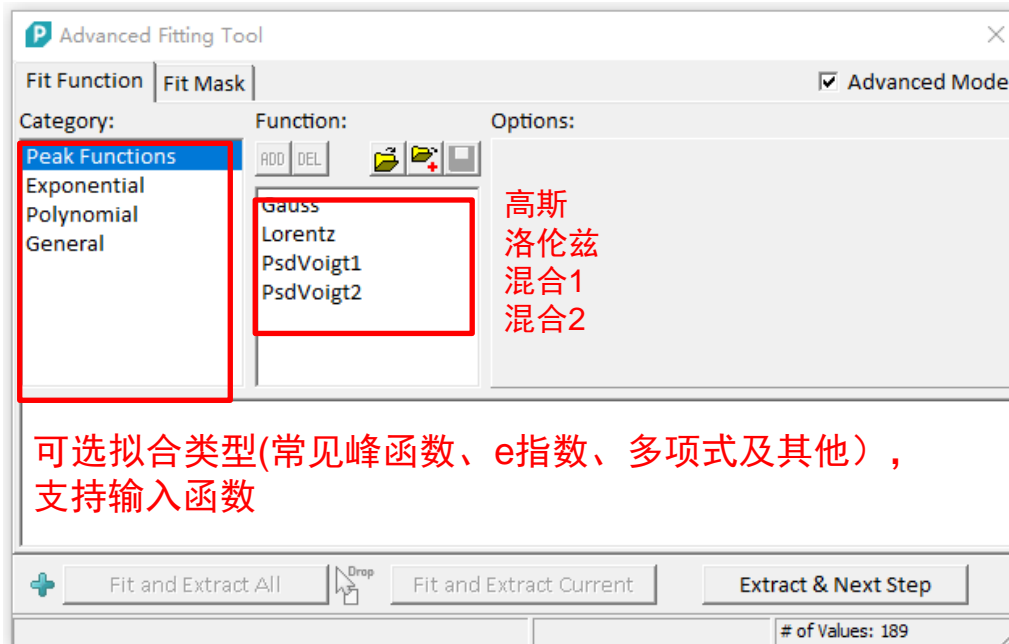
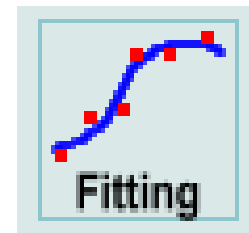
3. 将原始成像数据集和Draw field image同时选中, 拖到“Average”操作中即可

## 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

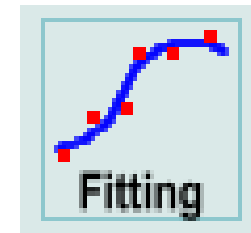
**操作步骤:**

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



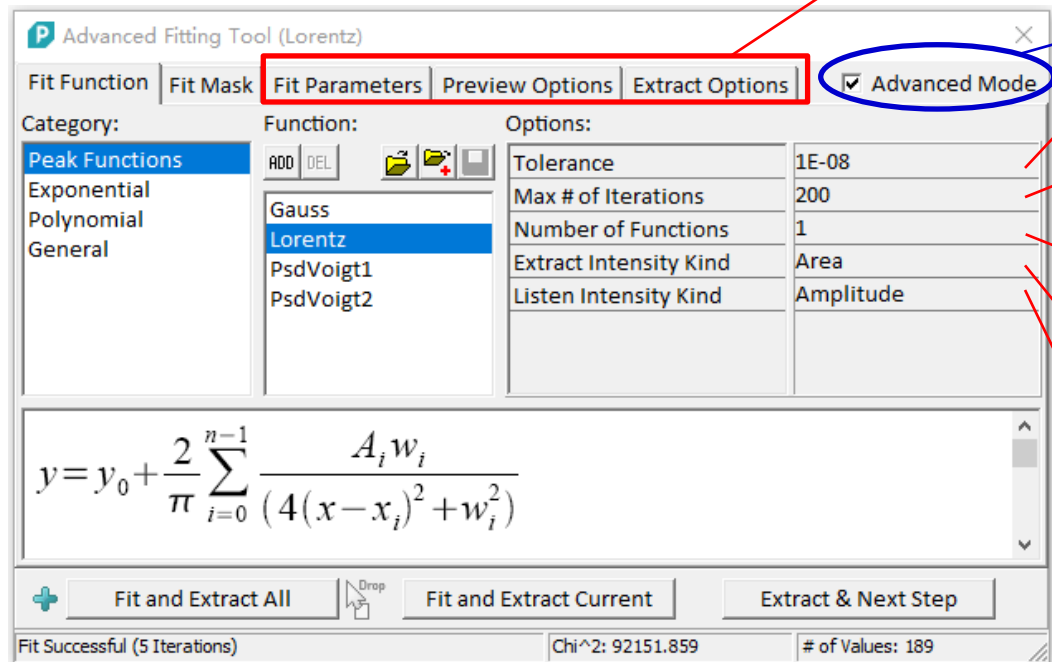
注: 可以在拟合区域两侧较远的基线区域框选一小段, 防止拟合基线漂移

## 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



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

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

Category: Peak Functions | Exponential | Polynomial | General

Function: ADD DEL [Icons] | Gauss | **Lorentz** | PsdVoigt1 | PsdVoigt2

Options: | 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 | [Drop] Fit and Extract Current | Extract & Next Step

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

## 7. 光谱拟合Fitting: 以洛伦兹双峰为例

### 3. 拟合参数设置Fitting Parameter

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

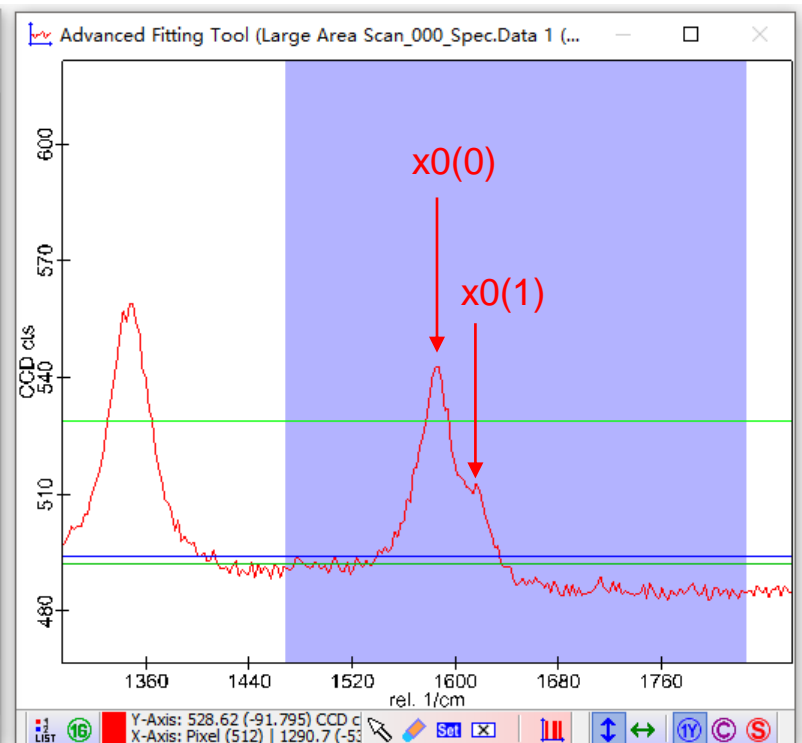
Current Fit Results  
 Chi<sup>2</sup> / DoF: 201.613      Data Points / DoF: 148 / 141  
 R<sup>2</sup>: 0      Average Error: 13.8592  
 Fit Successful (15 Iterations)

Parameters

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

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

Fit Successful (15 Iterations)      Chi<sup>2</sup>: 28427.489      # of Values: 148

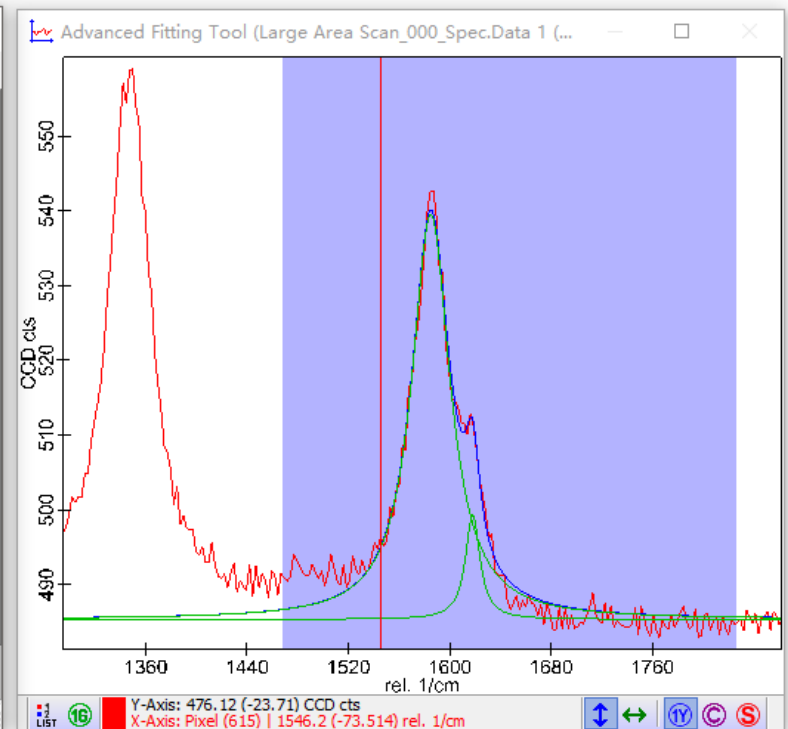
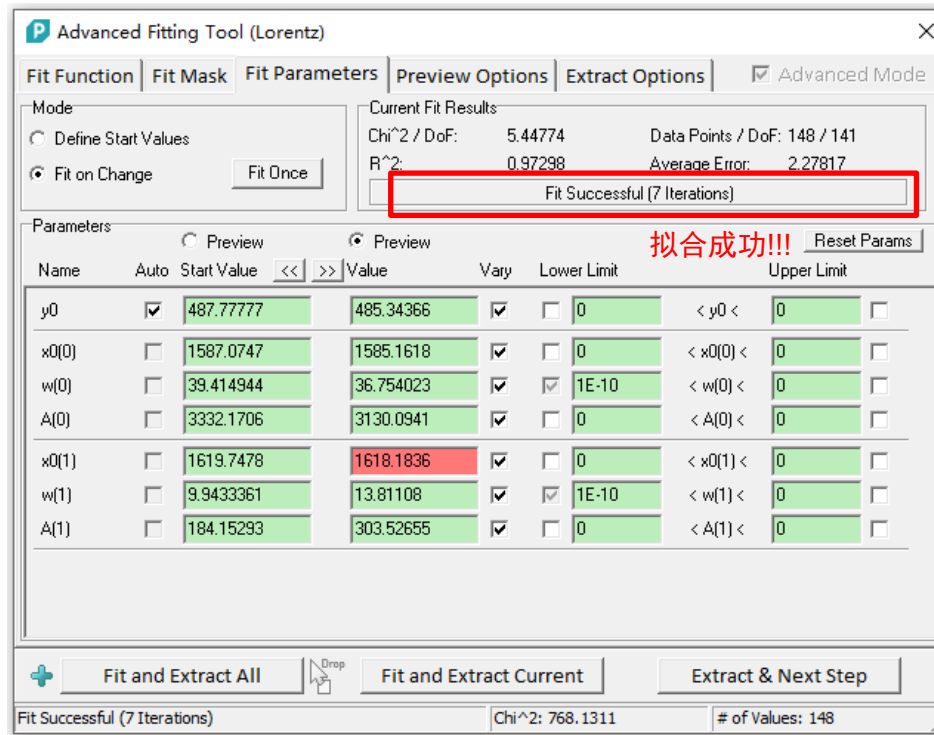


2). 点击<<, 复制红框内所有数值到蓝框内

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

## 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)



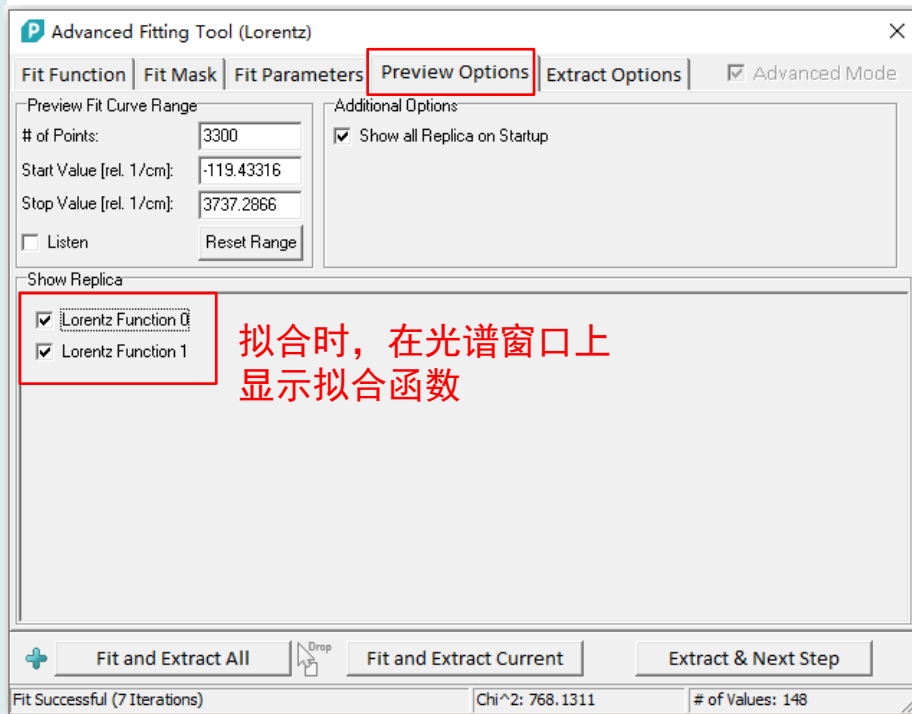
4. 拟合成功后，即可点击Fit and Extract Current(单谱)；Fit and Extract All(成像)输出结果；具体输出哪些参数，请参考下一页



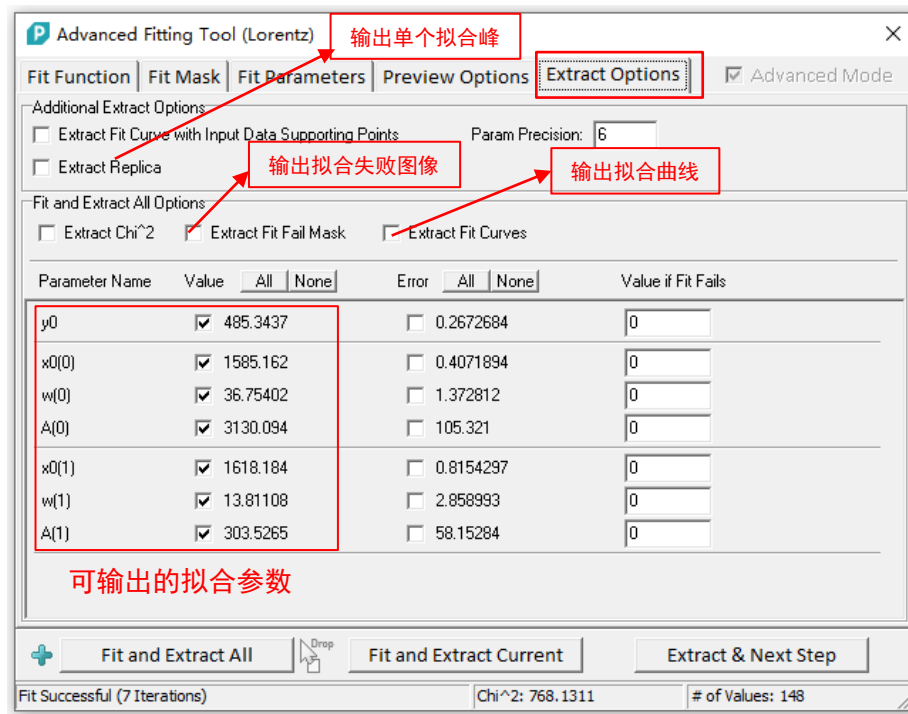
## 7. 光谱拟合Fitting: 以洛伦兹双峰为例

### 3. 拟合参数设置Fitting Parameter (拟合成功)

拟合时预览光谱

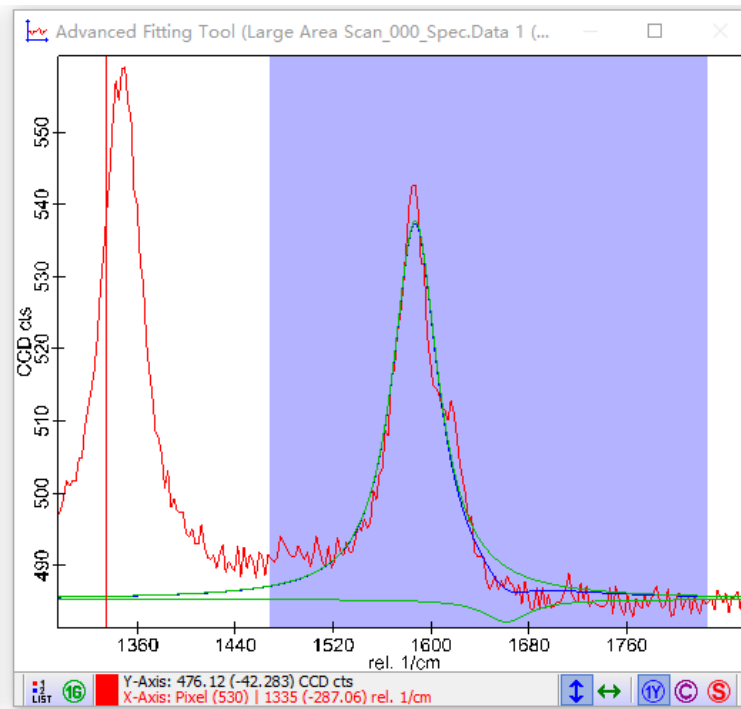
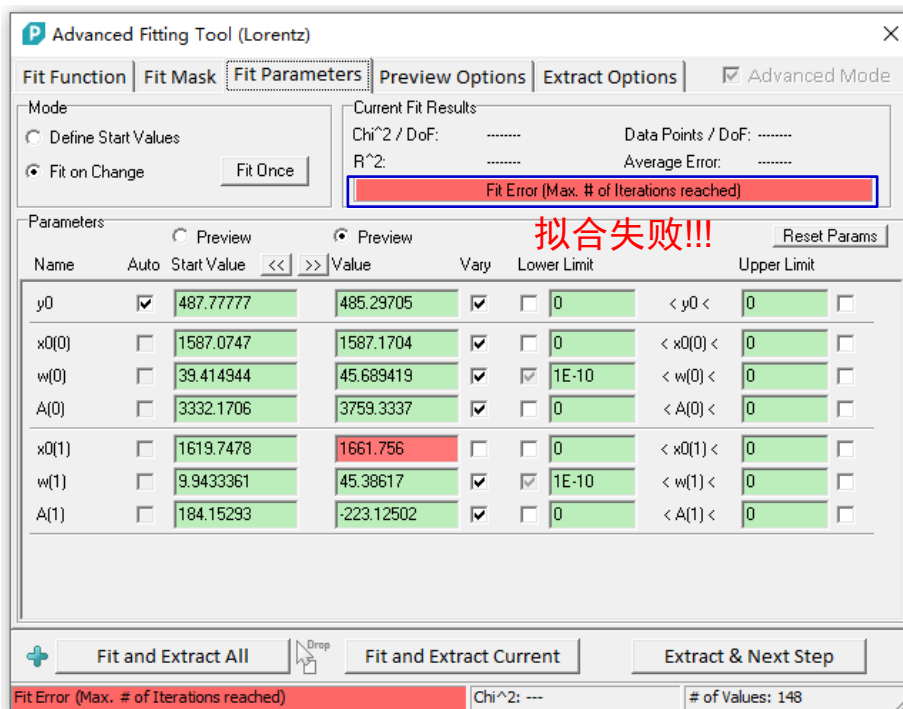


拟合成功后，输出拟合数据



## 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)

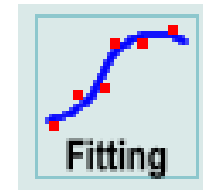


拟合失败时，查看失败是否与光谱上的宇宙射线、荧光背景等有关；如有，请先按照前面方法处理光谱；如再失败，可调节参数有：

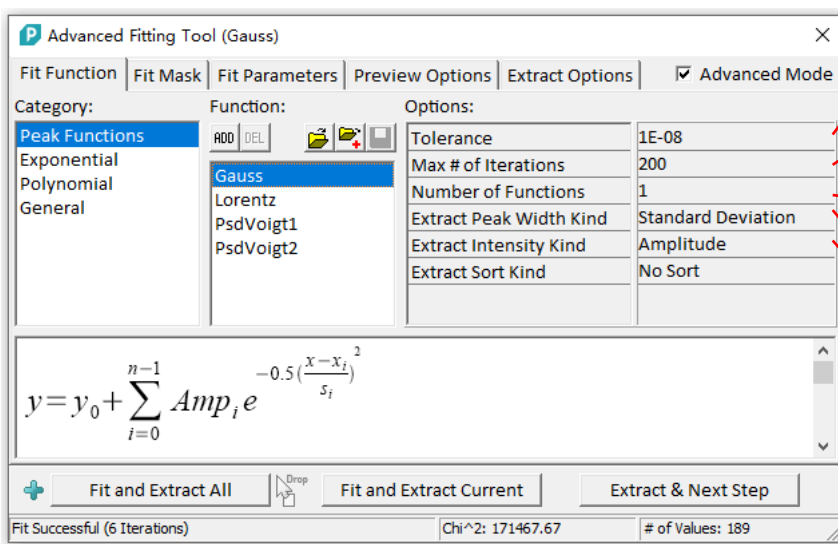
1. 拟合光谱的峰位、半峰宽及强度(峰面积)
2. 函数的最大回归次数
3. 拟合的光谱范围
4. 考虑分峰数目、拟合函数是否合理

## 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

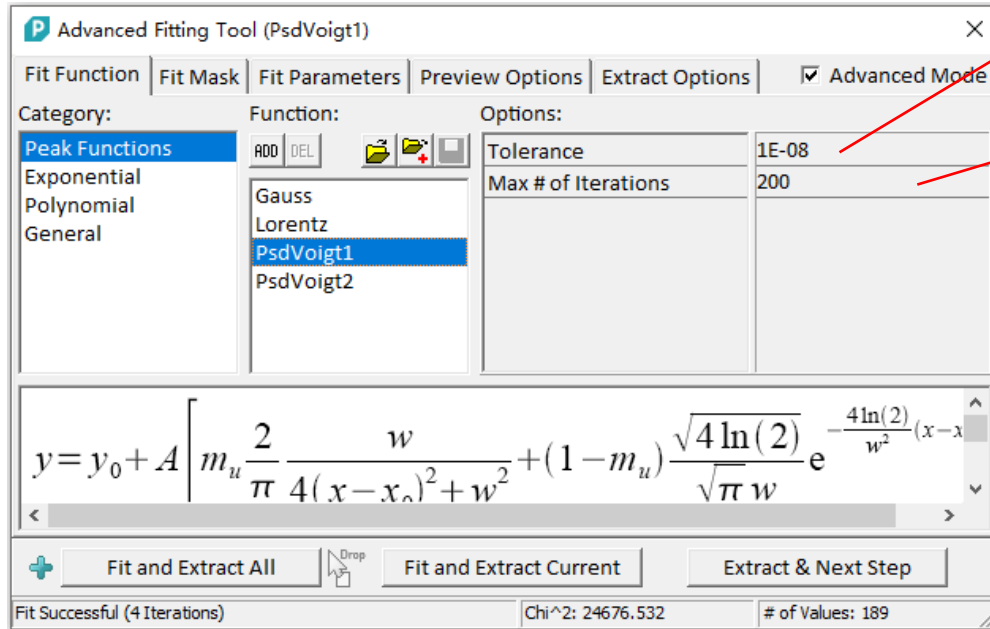
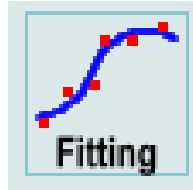
需要拟合峰的个数

输出结果：峰宽-Peak Width；强度-Intensity

峰宽-Peak Width：标准差；FWHM

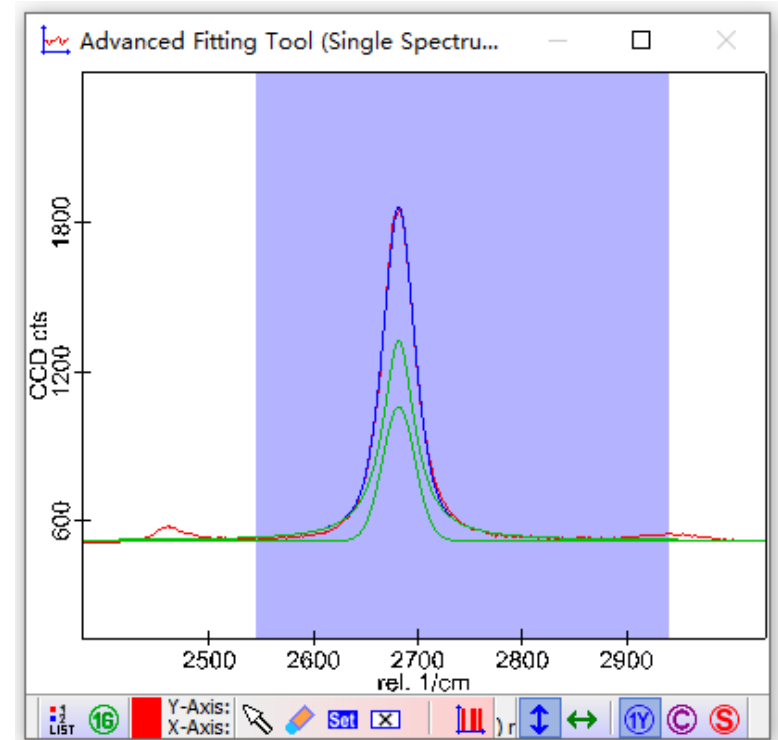
强度-Intensity：峰面积；峰强

## 7. 光谱拟合Fitting: 高斯-洛伦兹混合峰型



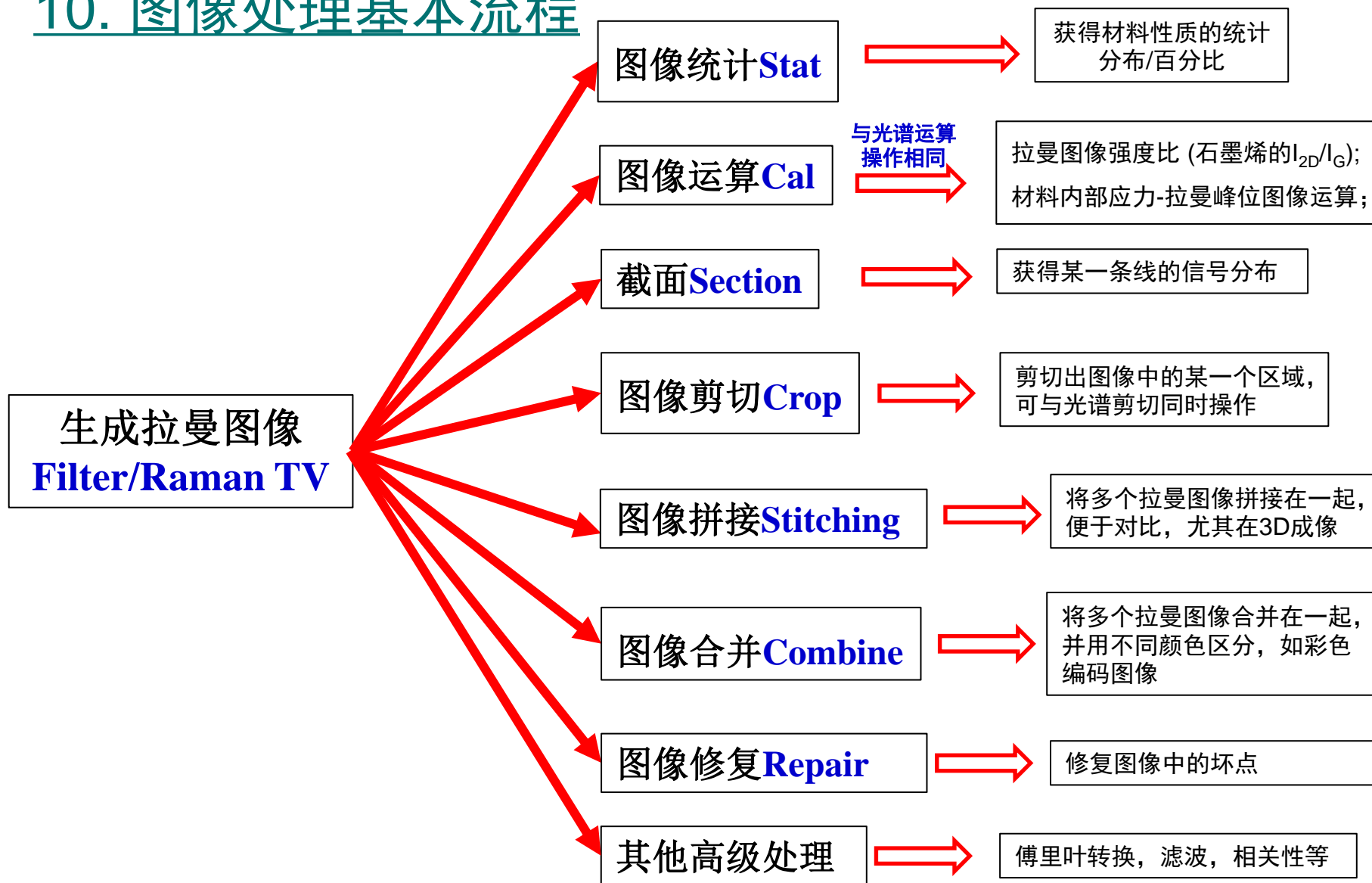
容差：可允许的拟合误差

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

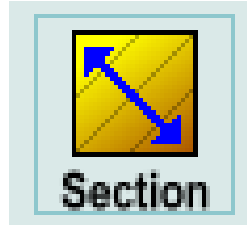
**目的:** 通过拉曼图像截面来分析沿线材料性质: 如种类、晶体结构、缺陷等分布

**操作步骤:** 1. 将拉曼图像拖拽放到

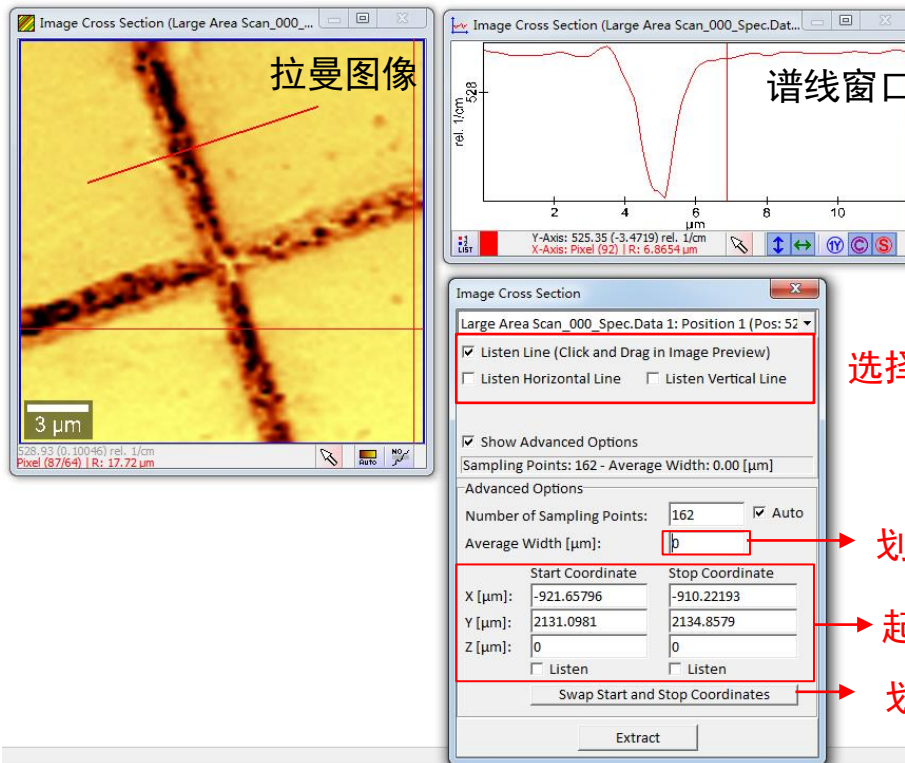


2. 在图像上, 直接用鼠标划线, 在谱线窗口获得统计分布

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



选择如何划线

划线宽度

起始点坐标

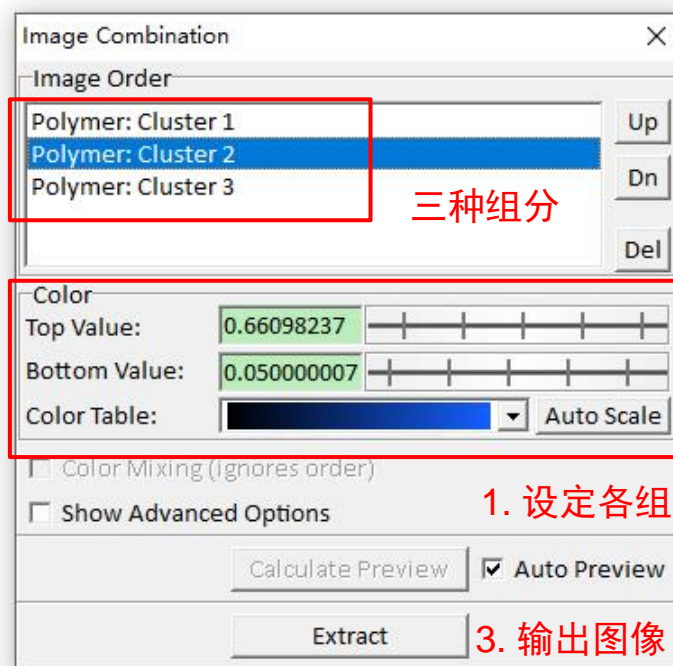
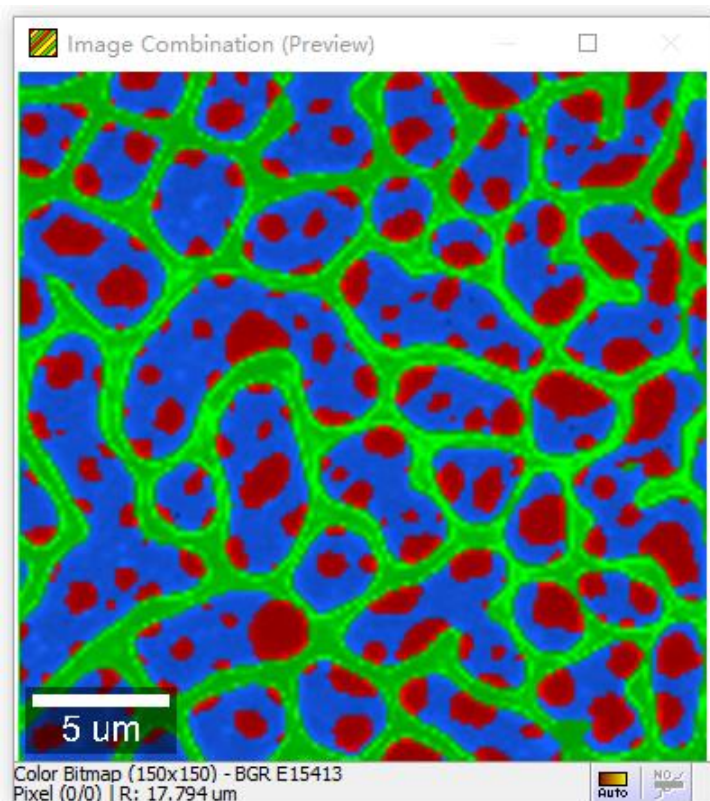
划线方向



## 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

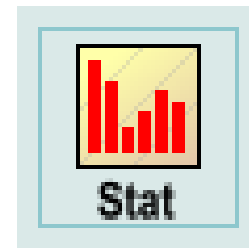
2. 设定各组分的颜色比例尺

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

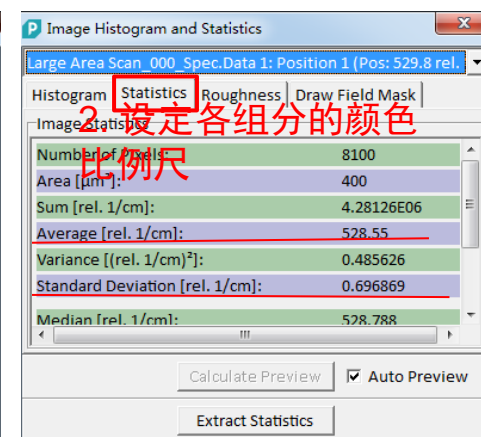
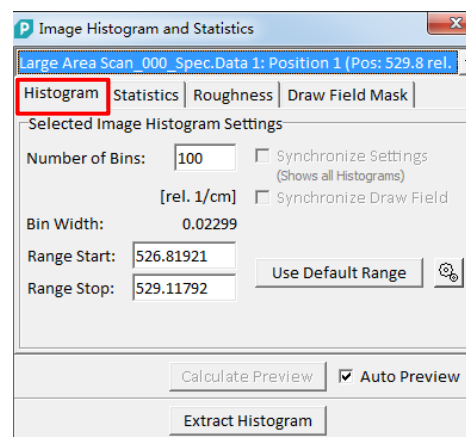
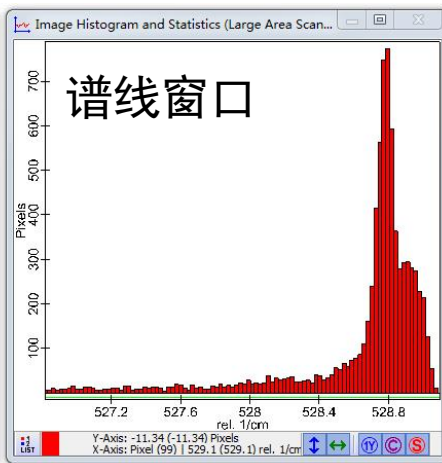
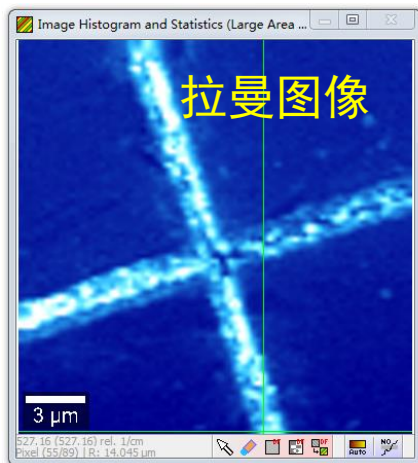


**操作步骤：** 1. 将拉曼图像拖拽放到



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

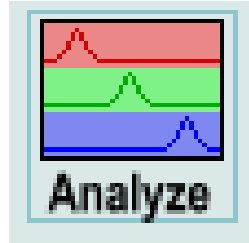
3. 选择Histogram，输出柱状分布曲线；选择Statistics，输出**平均值与标准差**



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

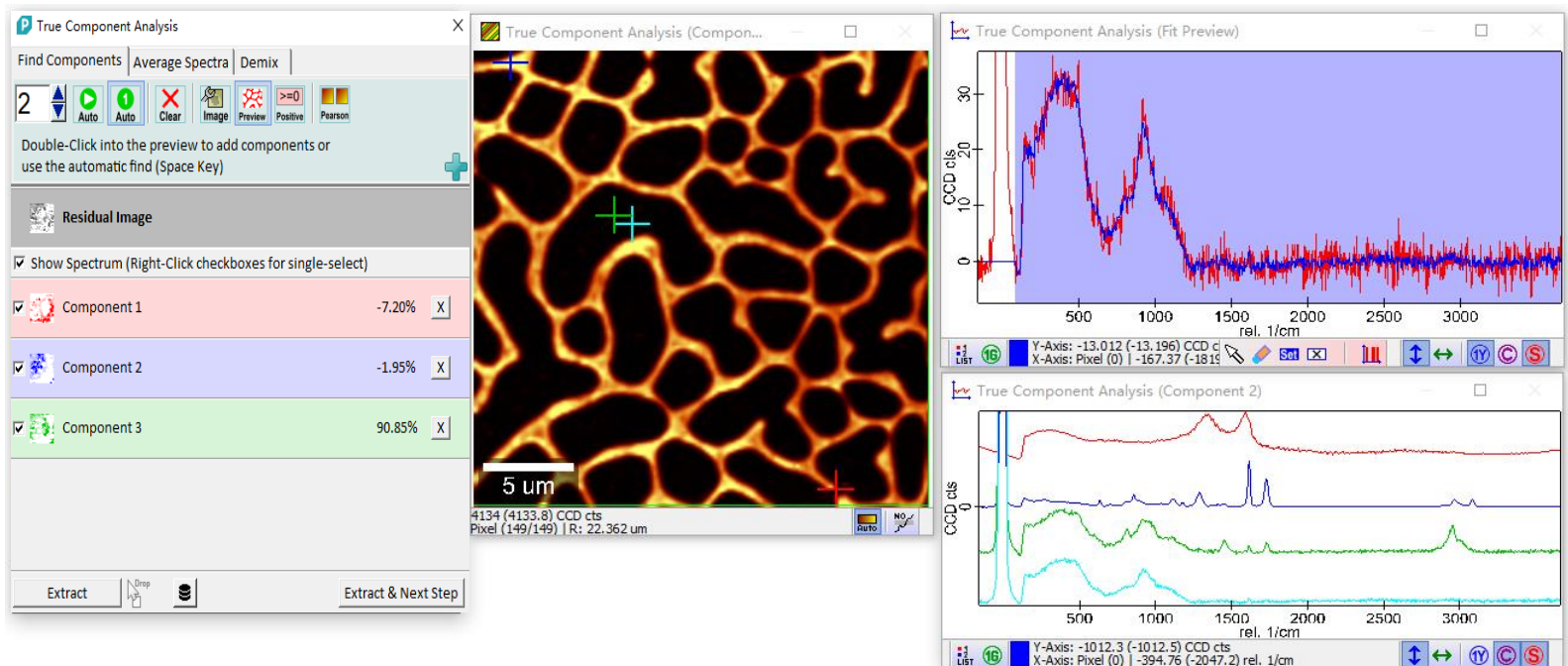
**数据要求：** 纯组分A, B, C的特征拉曼光谱

**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



残余分布



所有纯组分

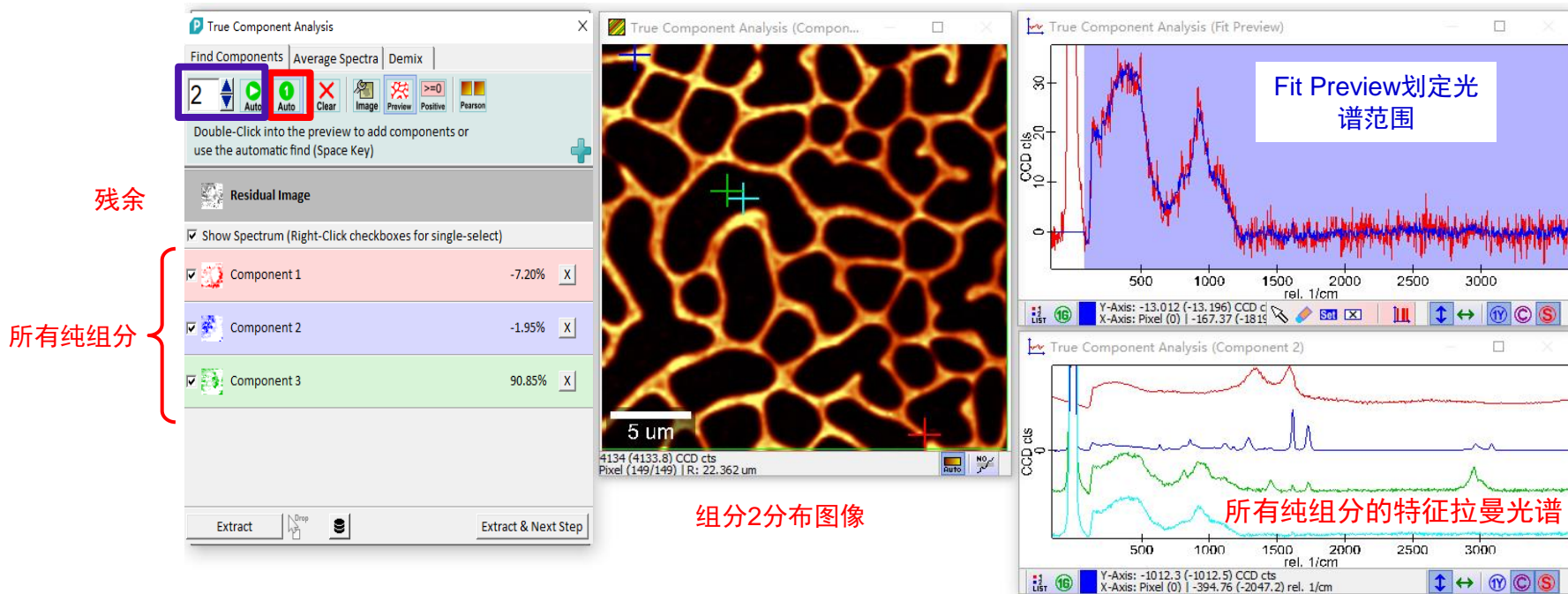
所有纯组分的特征拉曼光谱



# 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

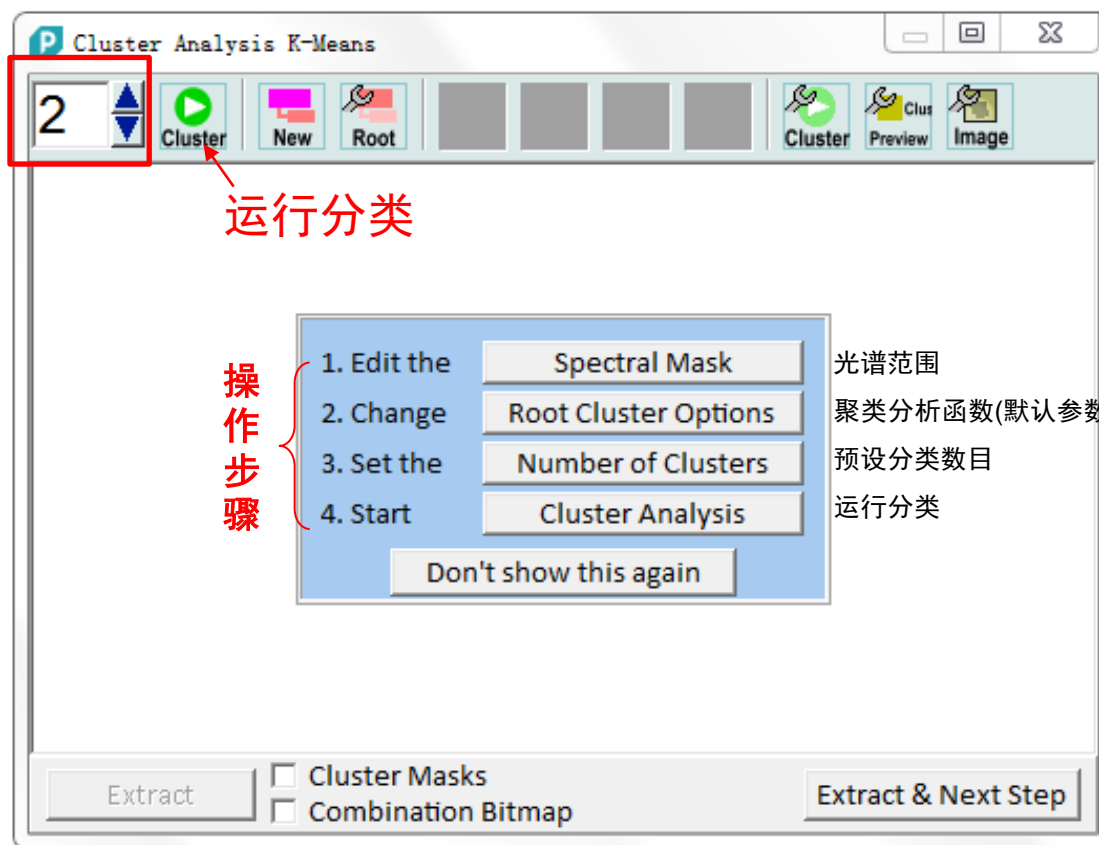


## 15. 聚类分析 K-Means

**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

光谱范围

聚类分析函数(默认参数)

预设分类数目

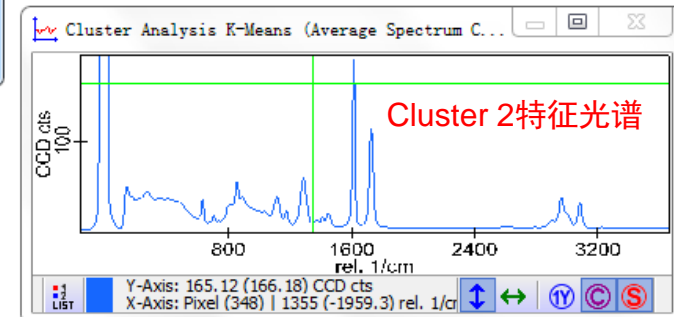
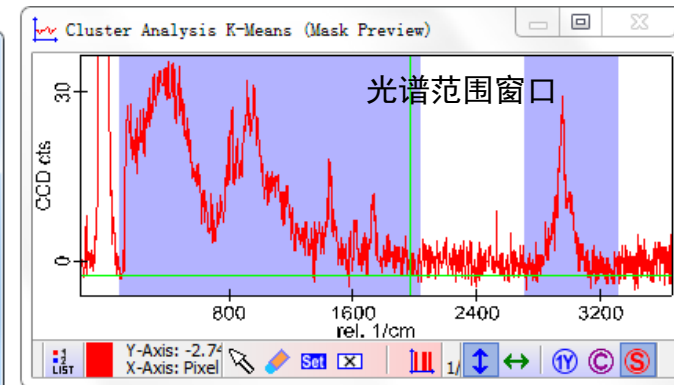
运行分类

# 15. 聚类分析 K-Means



Cluster 2图像

数据输出



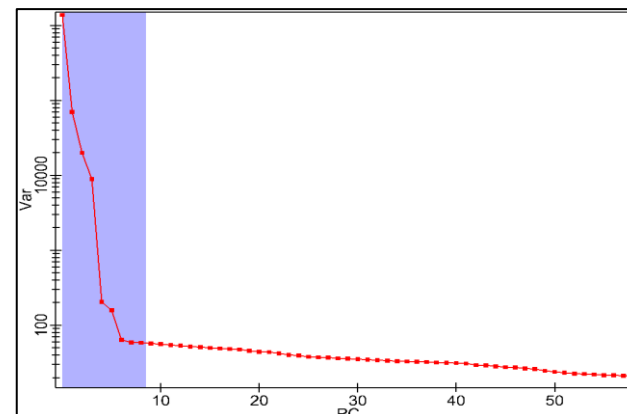
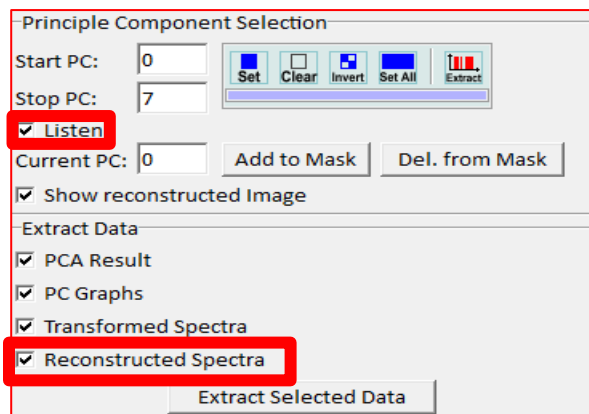
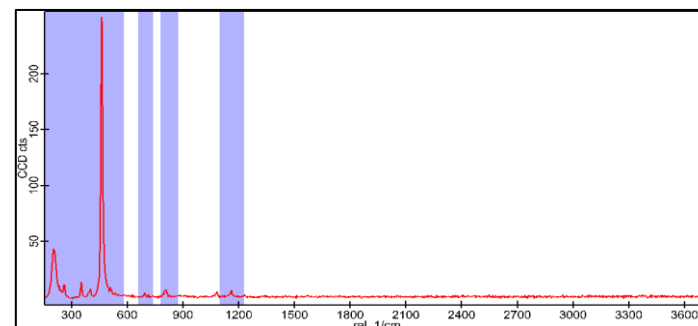
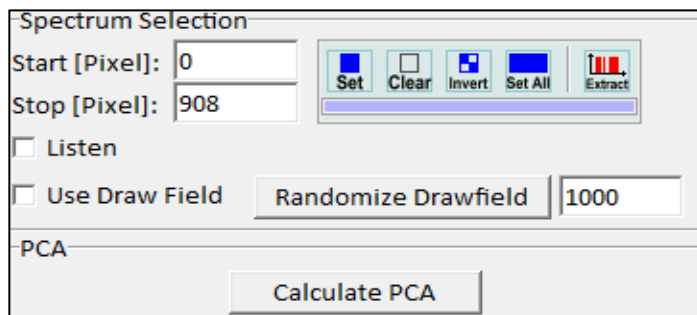


## 16. 主成分分析（PCA）降噪处理



**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

