

基于 Origin 的纳秒级激光闪光 光解三维图像处理

窦大营 徐刚 吴明红 孙康^a

(上海大学射线应用研究所 上海市嘉定区城中路 20 号 201800)

^a(四川教育学院理学院 成都市人民南路 3 段 24 号 610041)

摘要 由纳秒级激光闪光光解初步解谱获得多个 dat 文件, 基于 Origin 对其进行“时间-波长-吸光度”三维图像处理, 并尝试解决对剪贴到 MS-Office 系列文件的三维图像失真问题, 所得三维图像可基本反映微观瞬态动力学规律, 可满足文章发表、图片展示、进一步数值分析等各种需求。

关键词 Origin; 三维图像; 激光闪光光解

中图分类号: O722

文献标识码: A

文章编号: 1004-8138(2009)03-0661-04

1 前言

激光闪光光解(Laser Flash Photolysis)装置是研究凝聚态物质激发态及其衍生物微观、超快瞬态变化动力学机理的重要工具。我国自上世纪 80 年代中科院上海应用物理研究所(原“上海原子核研究所辐射化学开放实验室”)之后^[1], 中科院化学所、大连理工大学、中国科技大学、复旦大学、同济大学等单位也先后成套进口或自行组装了纳秒级激光闪光光解装置, 在生物大分子损伤、环境污染降解、光致变色等超快化学动力学机理研究取得大量成果。

大多数激光光解论文通常只有“时间-吸光度”(Time-OD)或“波长-吸光度”(Wavelength-OD)二维平面图谱, 没有充分利用实验获得的原始瞬态二维数组数据信息。己烯雌酚(DES)是一种典型的环境荷尔蒙药源性污染物, DES 活泼的光自由基活性对研究其生物毒理和降解机理具有重要的意义^[2,3]。本文借助图形功能强大的 Origin 软件^[4,5], 以弱碱性己烯雌酚的纳秒级激光光解为例, 对原始瞬态二维数组进行分析加工, 生成反映实际情况的“时间-波长-吸光度”(Time-Wavelength-OD)三维图形, 在此基础上讨论生成三维瞬态图形的经验和研究意义。

2 实验方法

中科院上海应用物理研究所 KrFns 级激光光解测试 $2 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ 的空气中己烯雌酚(DES)碱性水溶液(PH=11), 得到包含 46 个波长(波长 250—700nm, 步长=10nm)下瞬态动力学 Time-OD 的 dsd 压缩数据。以自编的 HP 软件对 dsd 文件读数并且提取得到包含 46 个波长各自 Time-OD 曲线的 46 个 dat 文件(过去 HP 软件默认还只能先保存于软驱 A 盘上, 现在 Windows 新版已经可以直接在硬盘上)。通常我们可以用以下 2 种 2 维平面图形: 首先由 HP 软件从 dsd 文件提取不同的时间下的“全谱”(图 1A, Wavelength-OD), 判读特征峰谷波长; 如果把不同波长的

废水中难降解有机污染物的电子束照射降解机理(编号: 50578090)

联系人, 电话: (021) 69982744; E-mail: mhwu@staff.shu.edu.cn

作者简介: 窦大营(1970—), 男, 四川省广安市人, 助研, 主要从事辐射环境化学研究工作。

收稿日期: 2008-12-17; 接受日期: 2008-12-25

Time-OD 叠加(图 1B 选取了部分波长), 可以观察各种瞬态的生成—衰减趋势。

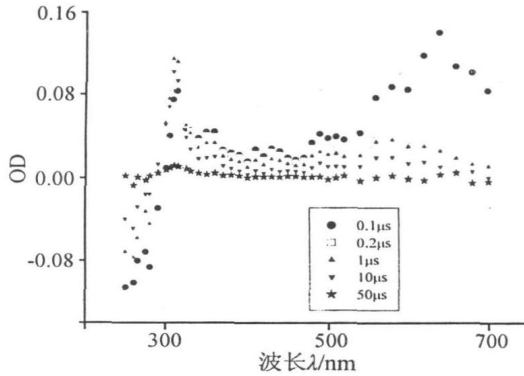


图 1A 不同时间DES 的二维散点瞬态谱

把不同波长的动力学谱原始数据直接叠加得到散点三维图(图 2, 部分波长), 其OD-Time 侧面投影图正是图 1B。图 2 反映了 dsd 原始数据文件的真实结构。

图 2 离散点集不能充分反映瞬态动力学连续变化规律, 必须对 HP 软件得到不同波长的时间-吸光度序列如下进一步拟合处理:

(1) 原始 dsd 数据经过 HP 解压, 得到 250—700nm 不同波长的“时间-波长”序列(每 10nm 一个序列, 共 46 个波长, 每组数据时序必须完全一致)。

(2) 46 组数据叠加在 Origin 的二维矢量数组中显示 92 列原始数据, 按照步长 0.2μs 抽取数据得到 390 行 2 维数组, 删除所有时间数据列, 剩下 46 列每列代表 1 个“时间-波长”序列。

(3) 设定 1—46 列分别代表 250—700nm 的波长(步长 50nm), 1—390 行分别代表 0—78μs 的时间(步长 0.2μs, 表 1 显示初始时间附近的局部数据)。

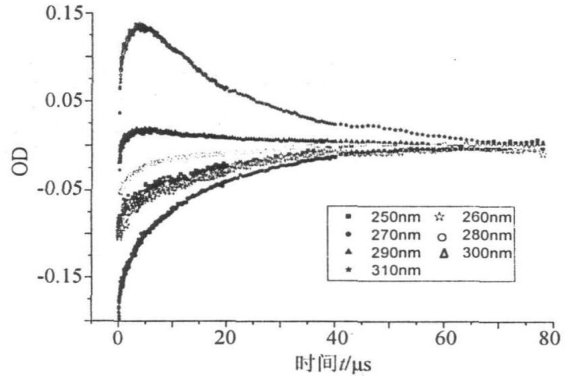


图 1B 不同波长DES 的二维散点瞬态谱

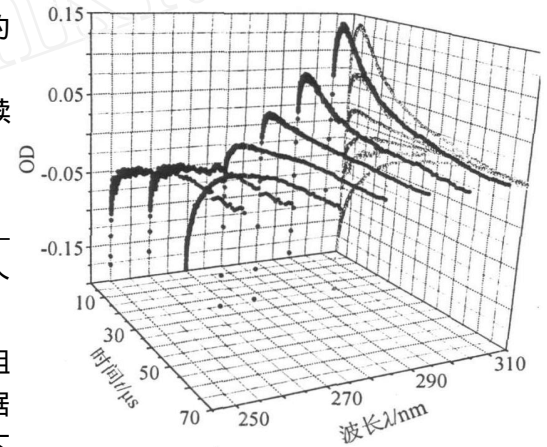


图 2 部分波长的DES 三维散点瞬态谱

表 1 二维矢量数组的局部数据

	1	2	3	4	5
1	0.26809	0.10218	0.41186	0.25996	0.25658
2	0.72654	0.49237	0.41186	0.25996	0.25658
3	0.72654	0.49237	0.41186	0.25996	0.25658
4	0.31053	0.30949	0.41186	0.25996	0.25658
5	0.17712	0.15923	0.41186	0.25996	0.25658
6	0.21207	0.16415	0.38084	0.25996	0.21071
7	0.16559	0.132	0.30979	0.21398	0.14682
8	0.13744	0.11049	0.23135	0.14215	0.08025
9	0.11545	0.09659	0.20379	0.10732	0.0475
10	0.10736	0.10079	0.20379	0.09675	0.03609
11	0.10112	0.1019	0.1975	0.0842	0.02518
12	0.10256	0.10302	0.19019	0.07487	0.01801
13	0.10304	0.10496	0.177	0.06648	0.01662
14	0.10256	0.09939	0.18382	0.06888	0.01342
15	0.09822	0.09715	0.18541	0.06968	0.01676

(4) 作出三维原始图像, 并自己选择配上彩色(图 3A, 投影和三维曲面颜色一致)。图 3 中“漂白区”(Bleaching Area)为己烯雌酚 DES 的稳态特征峰亏损特征区, 该区与 DES 生成的脱质子瞬态自由基主峰(1st peak)和次峰(2nd peak)相关^[3]。

3 结果与讨论

DES 的原始三维动力学图像, 直接以“Cut & Paste”剪贴得到的三维图像为 wmf (Window Meta File, 图 3A) 格式文件, 由于 KrF 激光自身噪声 DES 自身强荧光干扰造成色彩和线型失真很大, 无法直接反映真正的三维动力学图像规律。在去掉 0 时刻等强荧光干扰数据之后, 基于对 Origin 自带功能的分析研究, 本文采用 Origin 自带的 Image Stream^R Graphics and Presentation Filters (2.0.6 版) 插件, 通过菜单中的“export page...”功能操纵来解决上述问题。

采用 Origin 5.0 之后版本 File 菜单下的“export page...”功能可以得到 bmp 格式 (Bitmap) 3D 图像剪贴效果如图 3B, 2M 大的图像文件可满足国内大多数刊物文章投稿的附图要求。原始 dat 数据集是不等距的无规 random 数集, 如果需要尝试由原始 random 数据 (Origin 软件的白底色数组) 直接输出 3D Matrix 拟合数据 (Origin 软件的黄底色矩阵) 并生成三维图, 需要较高性能计算机和专业软件, 本文暂不研究。Origin 的 export page... 插件功能也可以生成国际刊物习惯使用的 TIF (Tag Image File) 格式图像 (高像素格式清晰度)。在 Export 主菜单可以选择“Joint Photographic Expert Group (JPEG)”进行 Export 输出, 所得 JPG 文件 (类似图 3B, 605K) 在普通文章内容和 Powepoint 演示都基本满足要求。

研究超快化学动力学三维图像具有如下意义:

(1) 国内外激光闪光光解实验为了仪器寿命和降低实验成本, 绝大部分采用 10nm 波长步长采集数据 (少数采用 5nm), 但实际上物质的瞬态波长特征峰谷位置不可能总是恰好在这些位置。三维图形数据模拟有助于全面观察激光光解超快动力学图谱的特性, 寻找最佳实验条件, 我们正在努力通过进一步模拟图形细节 (更短时间内) 找到更准确的峰谷位置和动力学时序并在重复实验中对波长/时序等数据采集的控制参数加以修正, 这也是我们自主开发新一代激光光解/脉冲辐解软件包需要努力整合的功能之一。

(2) 二维平面图像的函数只有一个变量具有局限性, 三维立体图像的连续拟合函数有两个变

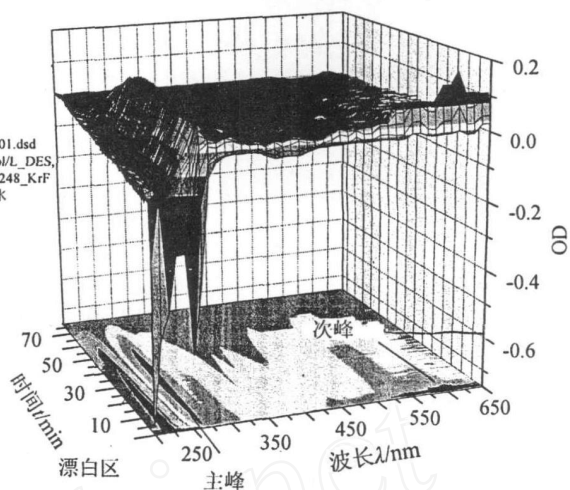


图 3A 由压缩二维数组回归得到的原始彩色三维图形及其投影图(wmf 格式)

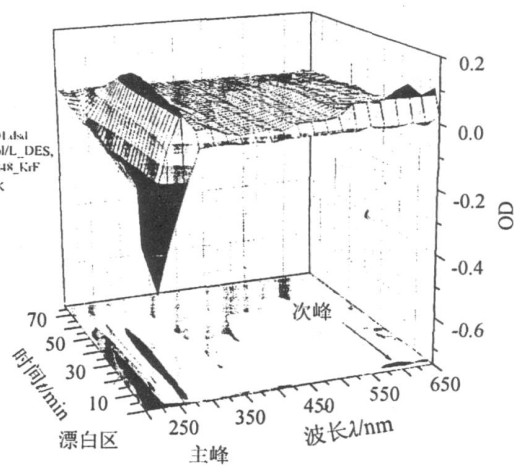


图 3B Image Stream^R 工具回归压缩后输出的彩色三维图形及其投影图(JPG 格式)

量,可能有助于研究换算诸如M axw ell 这样的较复杂的物理化学参数,通过 3D 图像比对进一步与辐射化学的分子超快动力学软件模拟相互验证,有助于深入探索辐射化学基本原理。

(3) 对于 X 射线衍射/散射等其他实验的三维图像处理,本文的三维彩色图像处理方法也可以相互借鉴参考。

本文作者希望未来的超快化学动力学实验装置软件应考虑完善相关功能模块,学习先进的英国 Thermo^R Applied Physics 激光光解装置基于 R isco 操作系统的软件包,每次试验后适时处理非等间距时间三维图像,并且可以实现直接进行多因子分析分峰处理多峰计算等功能,而不是像本文中只能在 dsd 格式数据转换后依靠额外的 O rigin 软件来手工处理等距时间间隔。

参考文献

- [1] Jian L, Wang W F, Zhang Z D, Yao S D, Zhang J S, Lin N Y. Reactive Intermediates in Laser Photolysis of Guanosine[J]. *Res Chem. Intem.*, 1991, 15(2): 293—301.
- [2] Dou D Y, Wu T Y, Miao J L, Zhao H W, Yao S D. Radiolysis Transient Spectra of Diethylstilbestrol in a Flow System[J]. *Journal Radiation Research Radiation Processing*, 2002, 21(4): 232—236.
- [3] Dou D Y, Liu Y B, Zhao H W, Kong L, Yao S D. Radiolysis and Photolysis Studies on Active Transient Species of Diethylstilbestrol[J]. *Journal of Photobiology and Photochemistry C*, 2005, 171(1): 209—214.
- [4] 孙家广, 胡事民. 计算机图形学基础教程[M]. 北京: 清华大学出版社, 2005.
- [5] 叶卫平, 方安平, 于本方. Origin 7.0 科技绘图及数据分析[M]. 北京: 机械工业出版社, 2003.

3D Image of Nano-Second Laser Flash Photolysis Based on Origin Software

DOU Da-Ying XU Gang WU Ming-Hong SUN Kang^a

(Institute of Radiation Application, Shanghai University, Shanghai 201800, P. R. China)

^a(Sichuan College of Education, School of Science, Chengdu 610041, P. R. China)

Abstract A data file of nano-second laser flash photolysis was dealt with Origin software to get time-wavelength-OD 3D images. Smoothing of cut-and-paste 3D images in MS-Office was also studied too. The exported 3D image can be applied to publishing and further studying.

Key words Origin; 3D Image; Laser Flash Photolysis

关于赠送作者样刊和发放稿酬的通知

各有关作者:

从 2007 年第 1 期起,本刊赠送作者发表自己论文的当期刊物(样刊),均按篇赠送 2 本样刊,用普通印刷品邮寄给作者联系人,遗失不再补赠。若遗失或作者另有需要,请在发表之日起 2 个月之内汇款购买(第 1 期 70 元/本;其余 40 元/本,免收挂号邮寄费),逾期不再办理。

由于普通印刷品邮寄的送达时间不稳定,若作者急需,请预交特快专递费(30 元/件)。

给作者发放的稿酬均邮寄给联系人,请各位联系人接到邮局通知后,务必及时到邮局领取。若 2 个月未领,被邮局退回,本刊不再补发。

特此通知

《光谱实验室》编辑部

汇款购买地址:北京市 81 信箱 66 分箱 刘建林,邮编:100095