

AI 辅助 XRD 物相分析系统——操作手册

面向用户：测试中心师生

版本：v1.0

一 快速开始

1.1 打开系统

在浏览器地址栏输入：

分析测试中心网站 → AI for Science → AI 辅助 XRD 物相分析系统

1.2 三步完成分析

- ① 上传 XRD 文件 →
- ② 点击"开始分析" →
- ③ 查看物相鉴定结果

1.3 界面概览

XRD 多相解析与鉴定系统		[状态： 就绪]
侧边栏	主面板	
📁 数据导入	预处理衍射图谱（附峰位标记）	
检索范围	数据质量评估（峰数/信噪比/质量等级）	
元素限定	物相鉴定结果卡片	
分析参数	└ 物相 1（主相）： 匹配度/解释率	
[开始分析]	└ 物相 2（次相）： 匹配度/解释率	
数据库统计	└ 候选列表	
标准库搜索	峰列表（含状态/SNR）	
	搜索过程时间轴	
	[生成分析报告]	



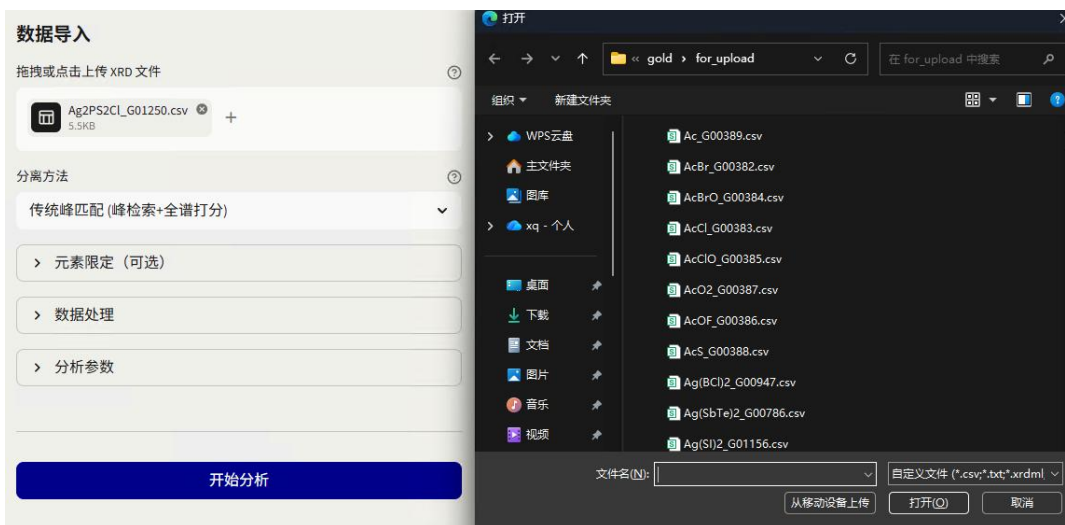
二 上传数据

2.1 支持的文件格式

格式	扩展名	来源仪器
CSV / TXT	.csv .txt	通用双列表
XRDML	.xrdml	Bruker D8 系列

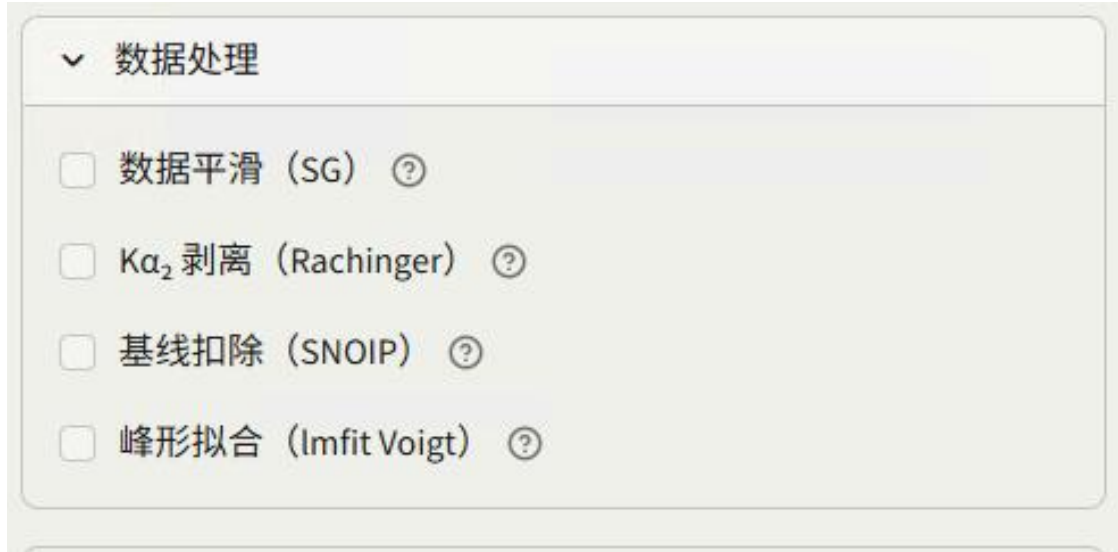
2.2 上传方式

1. 点击左侧“拖拽或点击上传 XRD 文件”
2. 选择实验数据文件
3. 系统自动识别格式并加载



2.3 数据预处理选项

选项	说明	建议
平滑降噪	减少毛刺	噪声大时开启
K α_2 剥离	去除 Cu 靶 K α_2 峰	Cu 靶推荐开启
基线扣除	去除荧光/非晶背景	有鼓包时开启



三 分析设置

3.1 检索范围

模式	说明	推荐场景
标准库 (推荐)	仅使用标准参考谱	常规分析
标准库 + ICDD	加入经典数据库	标准库未命中时
标准库 + RRUFF	加入实测谱库	矿物分析
全部数据库	所有数据库	疑难样品



3.2 元素限定

展开侧边栏“元素限定”，可设置三重规则：

规则	作用
必须包含	物相必须含有选定元素
必须排除	含选定元素的物相直接过滤
允许包含	不参与过滤，预留

建议： 已知样品元素时开启“必须包含”以提高准确率。



3.3 分析参数

参数	默认值	说明
识别阈值	0.50	匹配度高于此值判定为有效
候选数	5	每个物相显示前 N 个候选

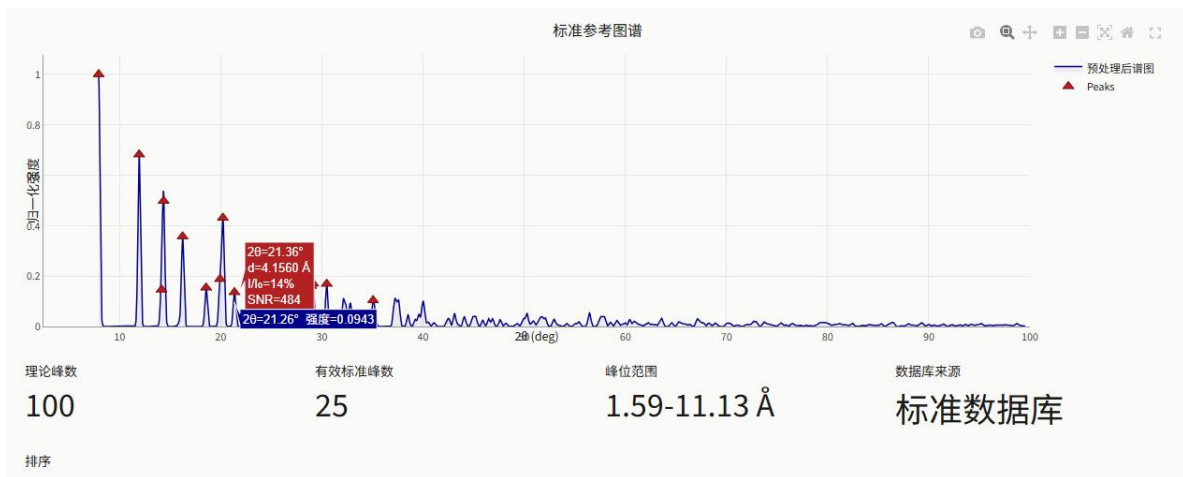
四 查看结果

4.1 预处理图谱

图谱上直接标注检测到的峰位：

- 绿色三角：已解释峰（有物相匹配）
- 黄色三角：共享峰（多个物相共用）
- 红色三角：未解释峰（无匹配）

鼠标悬停显示角度、面间距、强度等信息。



4.2 数据质量评估

指标	含义
检测峰	算法识别出的峰总数
检索峰	实际用于匹配的峰数 (Top20)
信噪比	信号质量 (越高越好)
数据质量	良好/一般/差

4.3 物相鉴定卡片

每个检出物相显示：

- 物相名称（中文优先，如“石英 (SiO₂)”）
- 匹配度（百分比）
- 峰解释率（进度条）

展开“峰匹配详情”可查看每个参考峰与实验峰的比对。

物相 1

Ag5 (P 54) Cl2 (Ag2PS2Cl)

- | - | 置信度: 高 (1.00)

峰解释率: 31% 强度解释率: 81%

已解释 30 峰 | 共享 0 | 未解释 68

▼ 候选列表 (1 个)

#1 1.00 [GOLD] Ag5 (P 54) Cl2 (Ag2PS2Cl)

▼ 峰匹配详情

已匹配	最强峰匹配	平均偏差	覆盖率
20/20	是	0.002 Å	100%

参考 d	参考 I	实验 d	实验 I	偏差	匹配
11.1260	100%	11.1260	100%	0.000	是
7.4062	68%	7.4062	68%	0.000	是
6.1802	58%	6.1716	54%	0.009	是
4.4011	50%	4.3882	44%	0.013	是
5.4536	36%	5.4536	36%	0.000	是

4.4 峰列表

表格包含：编号、2θ角、面间距 d、强度、信噪比、解释状态。

支持按强度或角度排序，可导出 CSV。

匹配	d (Å)	I/I ₀ %	2θ	FWHM(°)	面积	匹配物相	Δd
✓	11.1260	100	7.9°	-	-	G01250	0.000
✓	7.4062	68	11.9°	-	-	G01250	0.000
✓	6.1716	54	14.3°	-	-	G01250	0.009
✓	4.3882	44	20.2°	-	-	G01250	0.013
✓	5.4536	36	16.2°	-	-	G01250	0.000
✓	3.0724	23	29.0°	-	-	G01250	0.000
✓	3.6246	19	24.5°	-	-	G01250	0.000
✓	3.1885	18	28.0°	-	-	G01250	0.000
✓	2.9304	17	30.5°	-	-	G01250	0.000
✓	4.7768	15	18.6°	-	-	G01250	0.000

导出峰列表 (CSV)

4.5 搜索过程

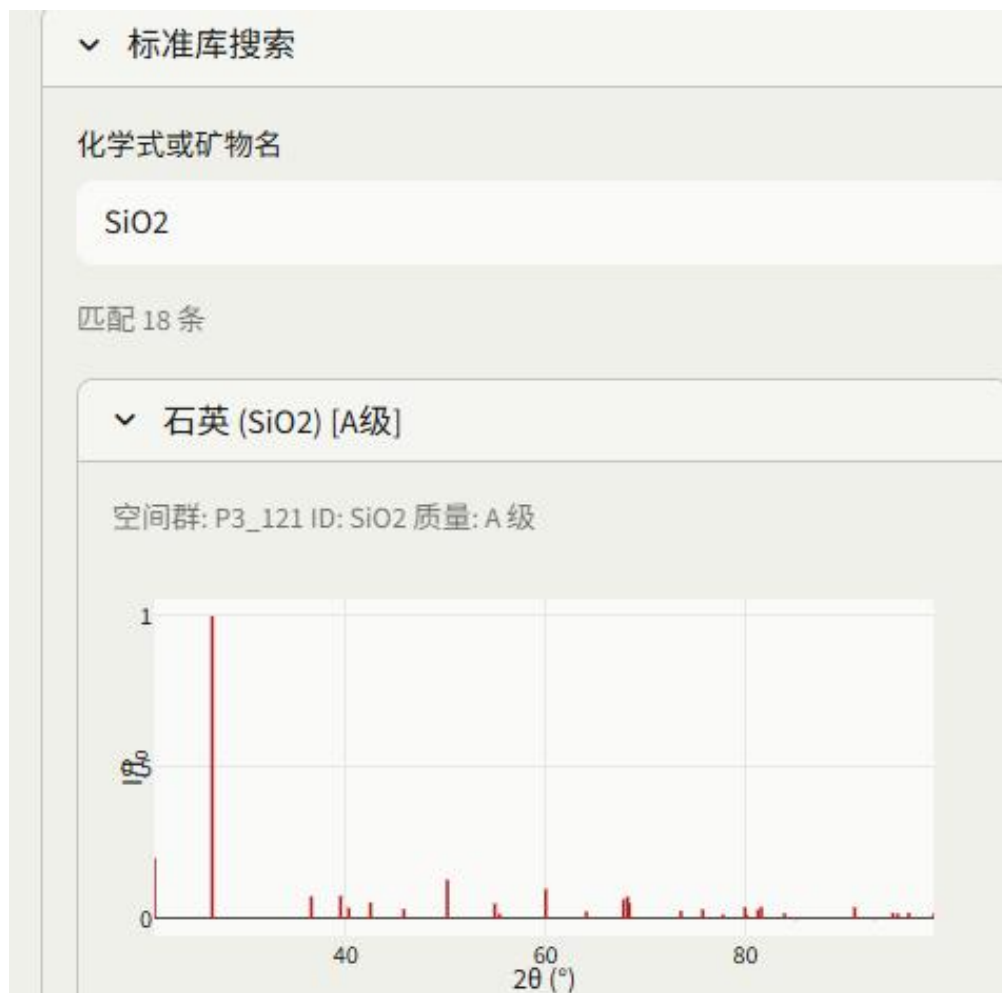
展开“**搜索过程**”查看每轮搜索的时间轴：第几轮、检出物相、新增解释峰数、累计解释率。

五 标准库使用

5.1 浏览标准库

侧边栏展开“**标准库搜索**”，输入化学式或矿物名（如 SiO₂ 或 石英），查看匹配的标准谱。

展开条目可查看： - 标准峰图谱（竖线谱） - 峰列表（d/2θ/强度/hkl） - 导出峰列表 CSV



5.2 标准数据库统计

侧边栏展开“标准数据库统计”查看：总条目数、A/B/C 质量分级、独立化学式数、数据来源。

六 生成分析报告

6.1 生成报告

完成分析后，点击“生成分析报告”，系统自动生成包含以下内容的完整报告：

1. 样品信息（文件名、时间、数据库来源）
2. 检测结果（主相、次相、匹配度）
3. 峰统计（峰数、信噪比）
4. 峰解释率（已解释/共享/未解释）

5. 自动分析意见（可信度评估）
6. 系统说明

6.2 导出

支持导出 **HTML**（浏览器打开）和 **Markdown**（文本）格式。

XRD 物相分析报告

苏州大学分析测试中心

样品信息

文件名	Ag2PS2Cl_G01250.csv
生成时间	2026-06-30 16:01:49
数据库来源	标准库 (推荐)
分析引擎	传统峰匹配 (峰检索+全谱打分)
参考库条目	48068 条

检测结果

物相	匹配度	检出轮次
主相: [GOLD] G01250	100%	第1轮

峰统计

检测峰数	98
全谱信噪比	121
数据质量	一般

峰解释率

解释率	31%
已解释峰	30
共享峰	0
未解释峰	68

峰匹配依据

物相 1: [GOLD] G01250 (1.000)

参考峰 d(Å)	实验峰 d(Å)	偏差(Å)
11.1260	—	—
7.4062	—	—
6.1802	—	—
4.4011	—	—
5.4536	—	—

自动分析意见

- 主相识别可信度较高 (100%)。
- 本次共识别 1 种物相。
- 峰解释率 31%，存在较多未解释峰，建议进一步分析。
- 存在 68 个未解释峰，可能为次要物相、杂质或噪声。

系统说明

- 本系统基于峰匹配参考库进行物相鉴定，标准库模式下准确率较高。
- 低占比物相 (<30%) 建议结合人工核验。
- 报告由 XRD 多相分析平台自动生成，规则引擎版本 V1。

第七章 常见问题 (FAQ)

Q1: 为什么识别出的物相不止一个?

XRD 分析的是混合样品，一个样品可能含有多种物相。系统按匹配度从高到低排列。

Q2: 识别结果不准确怎么办?

- 调整**元素限定**：如果知道样品含哪些元素，开启“必须包含”
- 降低**识别阈值**：从 0.5 降至 0.35
- 切换**检索范围**：尝试“标准库+RRUFF”或“全部数据库”
- 检查数据质量：如果显示“差”，建议重新采集

Q3: 为什么图谱上有红色三角?

红色三角标注的是**未解释峰**——系统没有找到匹配的物相。可能原因： - 样品含有系统中没有的物相（数据库待扩充） - 峰强度过低，被算法过滤 - 噪声或干扰峰

Q4: 标准库和全部数据库有什么区别?

标准库	全部数据库
仅 COD 标准谱，干净	含 ICDD 和 RRUFF，数量大
主相检出率高	可能检出更多次相
推荐默认使用	疑难样品尝试

Q5: 生成的分析报告可以发给别人吗?

可以。导出 HTML 文件可用任何浏览器打开，适合微信/邮件发送。

Q6: 系统支持哪些仪器格式?

见附录。如遇到不支持格式，请在仪器软件中导出为标准双列 CSV (2 θ , Intensity)。

Q7: 网站打不开怎么办?

- 检查电脑是否开机、网络是否连通
- 通过分析测试中心网站入口访问（或联系管理员获取访问地址）
- 如仍无法访问，联系管理员重启服务

Q8: 数据加载后一直转圈?

首次加载需要构建数据库（约 30 秒，仅一次）。后续分析在 1 秒内完成。

附录 支持的仪器格式

格式	扩展名	仪器/软件
双列文本	.csv .txt .xy .dat	通用导出
XRDML	.xrdml	Bruker D8 Advance / D8 Discover

建议：如不确定格式，在仪器软件中选择“导出为文本文件（2 列）”即可。

本手册适用于 XRD 多相分析平台 v1.0
苏州大学分析测试中心