ChemPlot 用户手册

面向化学领域的 Mac 科学绘图软件 · 版本 1.0.4 · 中文版

ChemPlot 是一款原生 macOS 科学绘图与数据分析软件，专门为化学实验数据设计：光谱（紫外—可见、红外、拉曼）、XRD、热分析（TGA / DTG）、电化学（CV）、动力学等。它的操作方式尽量贴近 Origin，Origin 老用户可以很快上手；界面支持中文、日本語、English。

目录

1. 安装、试用与激活
2. 界面概览
3. 快速入门：5 分钟画出第一张图
4. 导入数据
5. 工作表
6. 绘图
7. 化学常用图型与数据换算
8. 修改图的格式
9. 数据处理
10. 基线校正
11. 找峰
12. 曲线拟合
13. 多峰拟合
14. 多图拼版
15. 导出与投稿
16. 项目、撤销与语言
17. 快捷键一览
18. 常见问题
19. 附录：示例数据、文件格式、已知限制
20. 软件许可协议

1　安装、试用与激活

系统要求

- macOS 14（Sonoma）或更新版本，Apple 芯片或 Intel 芯片的 Mac 均可。
- 不需要安装 Excel 或 Origin。

安装

1. 双击 `ChemPlot-版本号.dmg`，打开安装窗口。
2. 把 **ChemPlot** 图标拖到旁边的 **Applications（应用程序）** 文件夹。
3. 窗口里的 **示例数据 Samples** 文件夹和 **用户手册 PDF** 可以拷贝到任意位置留作参考。

第一次打开时被 macOS 拦截

当前版本没有使用 Apple 开发者证书签名，第一次打开时 macOS 可能提示“无法验证开发者”。处理方法：

1. 打开 **系统设置 → 隐私与安全性**。
2. 在页面下方找到“已阻止使用 ChemPlot”，点击 **仍要打开**，再输入开机密码确认。
3. 之后就可以像普通软件一样直接打开了。

> 这一步只在第一次打开时需要。把软件发给同事时，对方也需要做一次。

试用与激活

ChemPlot 可以免费试用 **7 天**，试用期内全部功能都能使用，窗口标题会显示剩余天数。试用期结束后，仍然可以打开项目、查看和分析数据，但 **保存项目、导出图、复制图** 需要购买授权。

1. 打开 **帮助 → 购买与激活…**（或 **ChemPlot → 购买与激活…**）。
2. 点 **复制**，把窗口里的 **本机机器码**（形如 `CP-XXXX-XXXX-XXXX-XXXX`）发给软件作者（**hongtaochen412@gmail.com**）。
3. 付款后会收到一段 **激活码**（以 `CPL1.` 开头的一长串字符）。把整段粘贴到“激活码”框里，点 **激活**。
4. 显示“已激活”和您的姓名即完成，之后不需要联网。

- 激活即表示您同意 软件许可协议。
- 激活码只对这一台电脑有效；重装系统、升级软件都不需要重新激活。

- **换电脑**时，新电脑的机器码不同，请把新机器码发给作者重新获取激活码。
- 激活码请妥善保存。如果是有期限的授权，到期后需要续期。

2　界面概览

主窗口分为三栏：

区域	作用
左侧栏	列出项目里的 **工作表**、**图** 和 **多图拼版**。单击切换；右键可以复制、删除。底部的 **+ 新建工作表** 新建一张空表。
中间主区域	选中工作表时显示表格；选中图时显示整页图（所见即所得，和导出结果一致）；选中拼版时显示整页拼版。
右侧检查器	显示当前对象的所有设置：列类型、坐标轴、曲线样式、图例、拼版布局等。工具栏最右边的按钮（或双击图中元素）可以显示 / 隐藏检查器。

窗口顶部工具栏依次是：**导入数据**、**绘图**（下拉菜单）、**分析**（下拉菜单）、**导出图** 和 **显示 / 隐藏检查器**。菜单栏中的 **绘图**、**列**、**分析**、**语言**、**帮助** 菜单提供全部功能。

> 把数据文件直接拖进 ChemPlot 窗口，就能导入；把 `.chemplot` 项目文件拖进来，就能打开项目。

3　快速入门：5 分钟画出第一张图

下面用软件自带的 TiO_2 XRD 实测数据，走一遍完整流程。

1. **导入数据**：选择 **文件 → 打开示例数据 → XRD_TiO2_rutile_anatase.csv**。左侧栏出现一张工作表，A 列是 2θ（X），B 列是强度（Y）。
2. **绘图**：按 `⌥⌘1`（折线图），在弹出的“绘图设置”里确认勾选了 B 列，点 **绘图**。
3. **改格式**：双击图中的 X 轴，右侧检查器切到“X 轴”，可以修改标题、范围、刻度；双击曲线可以改颜色和线宽。
4. **找峰**：按 `⌥⌘P`，最小突出度保持 5 %，点 **确定**。图上会用红色三角标出各个衍射峰的位置。
5. **套用期刊尺寸**：在 **绘图 → 期刊预设** 里选择“ACS · 单栏 · 8.25 cm”。
6. **导出**：按 `⌘E`，选择 TIFF、600 dpi，点 **导出…**，保存即可直接投稿。
7. **保存项目**：按 `⌘S`，保存为 `.chemplot` 文件，下次打开时数据、图和所有设置都在。

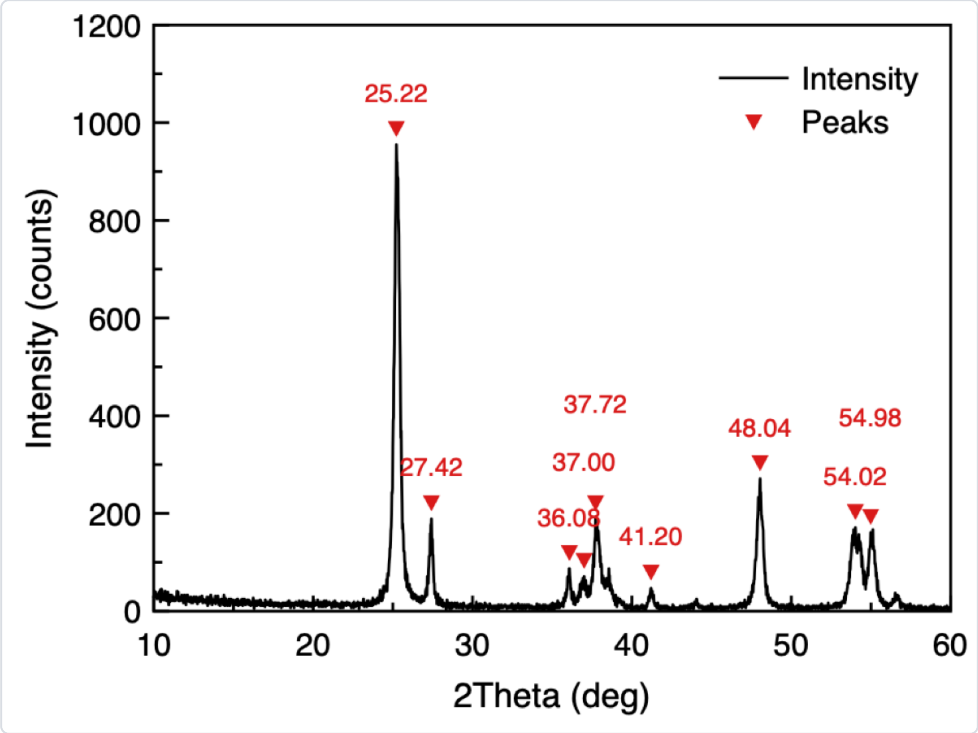


图 3–1　快速入门的结果：TiO_2 XRD 谱，自动标出峰位

4　导入数据

导入方式

- **文件 → 导入数据…**（`⌘I`），可以一次选多个文件，每个文件成为一张工作表。
- 把文件拖进窗口。
- 在 Excel 里选中一块数据、复制，然后在 ChemPlot 里按 `⇧⌘V`（**编辑 → 从剪贴板粘贴数据**）。当前工作表是空的时，数据会直接填进去。

支持的文件格式

格式	说明
CSV / TXT / DAT / XY	自动识别分隔符（逗号、制表符、分号、空格）和小数逗号（如 `0,25`）。仪器导出文件开头的说明行会被跳过，并保存在工作表的“文件头信息”里。
Excel `.xlsx`	不需要安装 Excel。工作簿里每一张含有数值的工作表导入成一张 ChemPlot 工作表；空列自动去掉，错误值（如 `#DIV/0!`）当作空格子。旧版 `.xls` 请先在 Excel 里另存为 `.xlsx` 或 CSV。
JCAMP-DX（`.jdx` / `.dx`）	光谱交换格式，NIST 等数据库常用，支持压缩编码（SQZ / DIF / DUP）。样品名放在注释里，作为图例文字。
文本编码	自动识别 UTF-8、GB18030（中文 Windows）、Shift-JIS（日文 Windows）。

表头怎样被识别

ChemPlot 会在数据上方寻找表头行，规则和 Origin 的工作表一致：

数据上方的行	识别结果
一行	长名称。如果写成 `Wavelength (nm)`、`Potential/V`、`Current [A]`，括号或斜杠后的部分自动拆成单位。
两行（第二行是短字段）	第一行长名称，第二行单位。TGA 等仪器的原始文件通常是这种格式。
三行	长名称 / 单位 / 注释（Origin 工作表的标准表头）。注释常用来写样品名，会作为图例文字。

单位里的 `cm-1`、`m2/g`、`K^-1` 等会自动变成上标形式。

列类型的自动设置

- 第一列设为 **X**，其余为 **Y**。
- 名称为 SD、SEM、Std、Error、yErr、误差、标准偏差等的列（从第三列起）设为 **Y 误差**，绘图时自动画成误差棒。
- X Y X Y 交替排列的表格（和第一列同名同单位的列）自动设为 X，每条 Y 配自己左边的 X。
- 大部分格子是文字的列（样品名、催化剂名称）保存为文字：在第一列时作为分类 X 轴，其他位置作为标签。
- 名为 xErr、X error、SD x 的列设为 **X 误差**。

> 自动识别不对时，在右侧检查器里改列类型、长名称、单位即可，也可以选中列后用 **列** 菜单批量设置。

5　工作表

- 表格前三行是 **长名称**、**单位**、**注释**，从第四行起是数据。双击格子即可编辑，按回车确认。数据格子里输入的不是数字时，会发出提示音并保留原值。
- 点击列标题选中列（按住 ⌘ 多选）。选中后可以在 **列** 菜单里设为 X、Y、Y 误差、标签或忽略，也可以添加或删除列。
- 列类型的含义：**X** 为自变量；**Y** 画在它左边最近的 X 列上；**Y 误差** 紧跟在 Y 后面时作为误差棒；**标签** 和 **忽略** 不参与绘图。
- 分析结果（平滑、微分、基线校正等）会作为新列插在原数据列右边，处理方法和参数记在工作表备注里，便于日后查看。

6　绘图

图型

图型	快捷键	适用
折线图	⌥⌘1	光谱、XRD、TGA、CV 等连续数据
散点图	⌥⌘2	测量点、标准曲线、动力学数据（可带误差棒）
点线图	⌥⌘3	点数较少的趋势
柱状图	⌥⌘4	不同样品 / 条件的比较，支持误差棒和多组并排
双 Y 轴	⌥⌘5	第二条及以后的曲线画在右侧 Y 轴上，例如 TG + DTG

在“绘图设置”窗口中选择工作表，勾选要画的 Y 列（每列后面会显示它对应的 X 列）。如果先在工作表里选中了列，就只画选中的列。勾选 **添加到当前图**，可以把新曲线加到正在编辑的图里，用来比较不同样品。

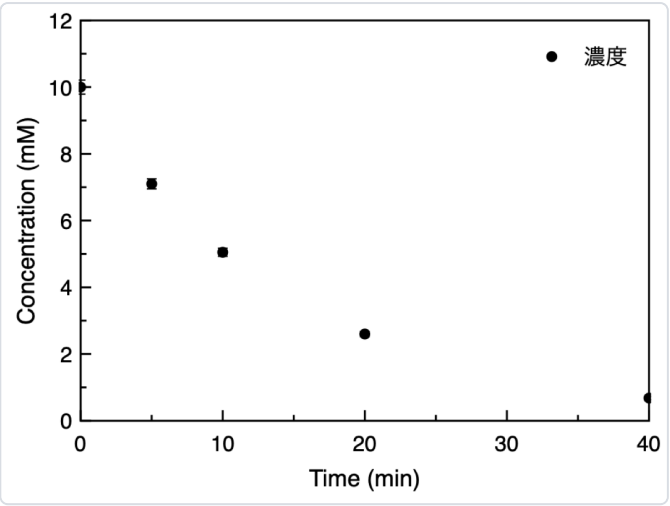


图 6–1　散点图 + 误差棒（数据来自 Excel 文件）

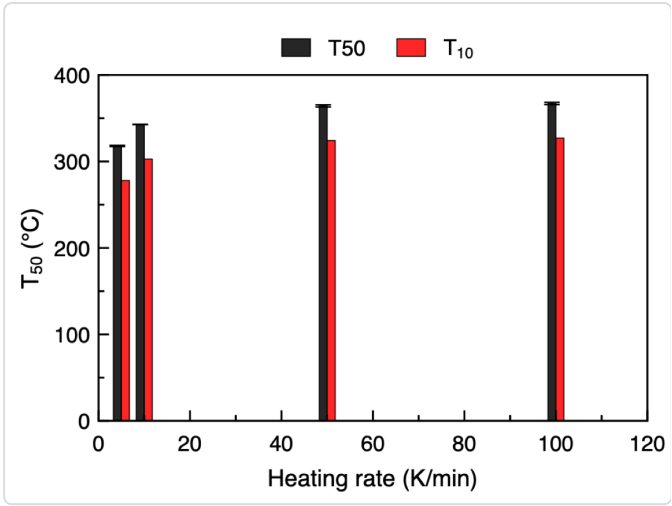


图 6–2　两组并排的柱状图，图例自动放在上方

堆叠谱图

多条光谱画在同一张图里时，双击每条曲线，在检查器的 **Y 偏移** 里分别填 0、0.5、1.0……，曲线就会依次错开。红外光谱的 X 轴（波数）会自动从大到小显示。

7　化学常用图型与数据换算

除了折线、散点、柱状图，ChemPlot 还提供化学论文里常见的专用图型，都在 **绘图** 菜单和“绘图设置”的“图型”里：

图型	快捷键	典型用途
堆积柱状图	⌥⌘6	产物分布、法拉第效率（FE）、选择性；勾选的各 Y 列在同一个 X 处依次叠加
面积图	⌥⌘7	曲线下方填充：XPS / 拉曼分峰组分、积分区域示意
棒状图（垂线）	⌥⌘8	XRD 标准卡片（PDF 卡片）、质谱；把强度取负值即可画在实测谱下方
能级 / 自由能台阶图	—	DFT 反应路径（HER、OER、ORR、CO_2RR 自由能图）：每个点一条水平短线，相邻台阶虚线相连
热图 / 等高线图	⌥⌘9	原位 / 变温 / 时间分辨光谱和 XRD、二维相关谱：每个 Y 列是一条扫描
直方图	⌥⌘H	TEM / SEM 粒径分布，可叠加正态或对数正态分布曲线
箱线图	⌥⌘0	重复实验、批次之间的比较
饼图 / 环形图	—	组成、产物分布
极坐标图	—	偏振拉曼、角分辨测量
三元相图	—	三组分组成（合金、正极材料、溶剂体系）

分类柱状图（样品名作为 X 轴）

工作表第一列写样品或催化剂名称（文字），导入后自动成为 **分类 X 轴**：每个名称一个刻度。适合比较不同催化剂的活性、不同样品的比表面积等。标准差列（SD）照常作为误差棒。

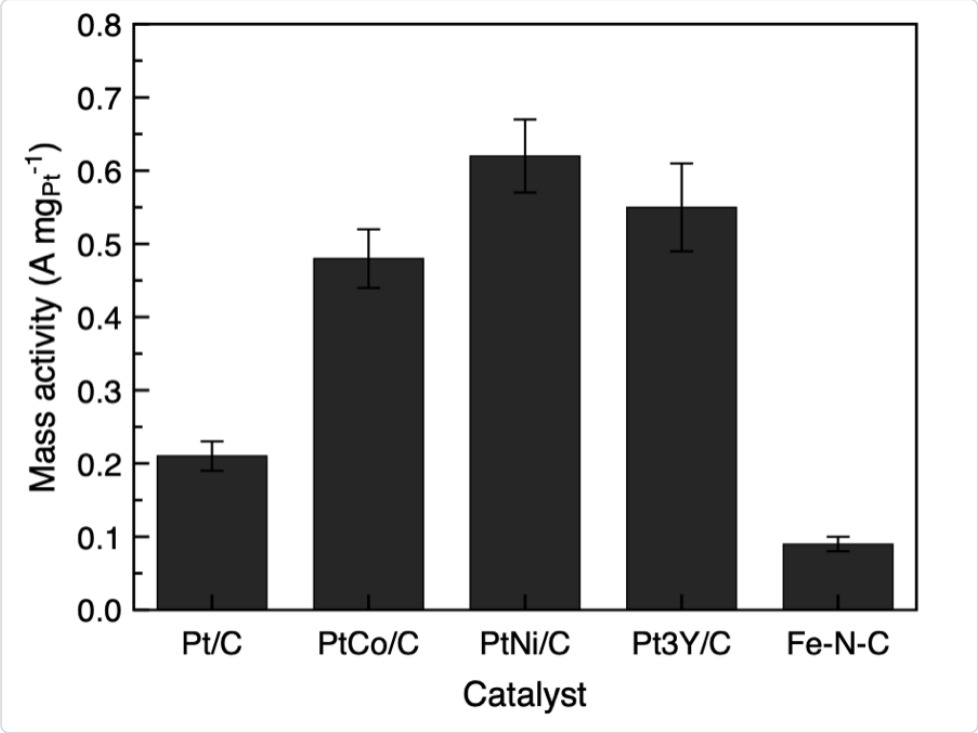


图 7–1　以催化剂名称为 X 轴的柱状图 + 误差棒

X 方向误差棒

把 X 列右边的一列设为 **X 误差**（**列 → 设为 X 误差**，或列名写成 xErr / X error），绘图时自动画水平误差棒；Y 误差列可以紧跟在后面（X、Y、xErr、yErr 的顺序也可以）。

箱线图

每个 Y 列一个箱子（重复实验、不同批次）。箱子为四分位数，横线为中位数，方块为平均值，须线延伸到 1.5 倍四分位距（Tukey 规则），圆圈为离群点；可以叠加原始数据点。快捷键 `⌥⌘0`。

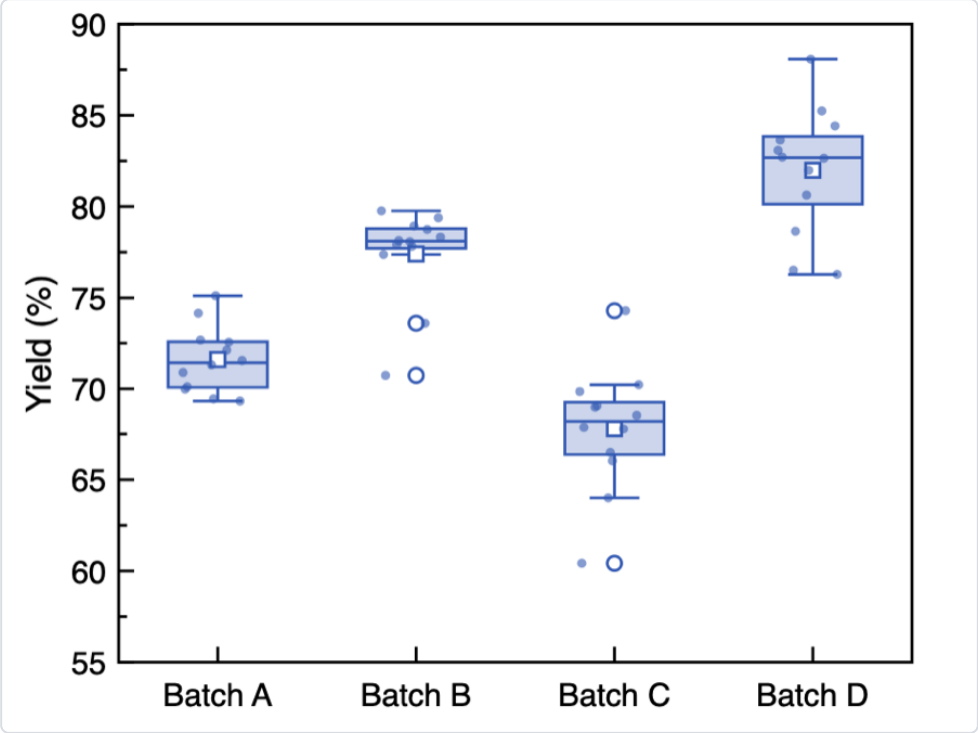


图 7–2　四个批次产率的箱线图（含数据点）

饼图 / 环形图

一列数值 + 一列文字名称（作为 X）。在曲线检查器里调大“中心空洞”就变成环形图。扇区里写百分比，右侧图例列出名称和百分比。

极坐标图

X 为角度（°），Y 为半径，例如偏振拉曼、角分辨测量。0° 在右侧，逆时针为正；在 X 轴设置里勾选“反向”变为顺时针。

三元相图

X 列和两个 Y 列分别是三个组分（例如 Ni、Mn、Co 的摩尔比），每行自动归一化到 100 %。三角形三个顶点分别是三个组分，网格每 10 %。

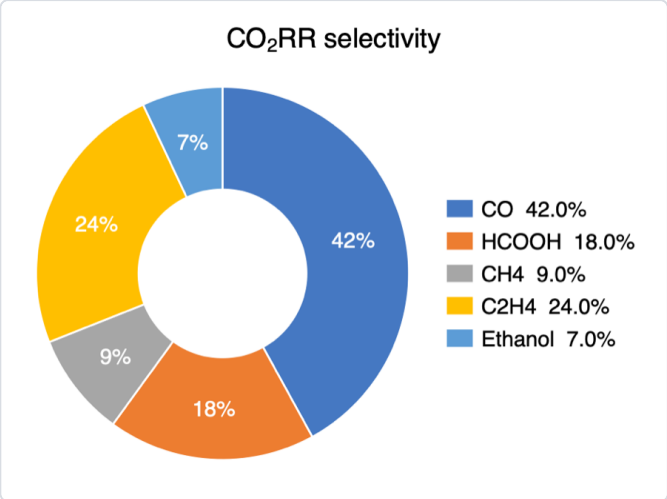


图 7–3　产物选择性环形图

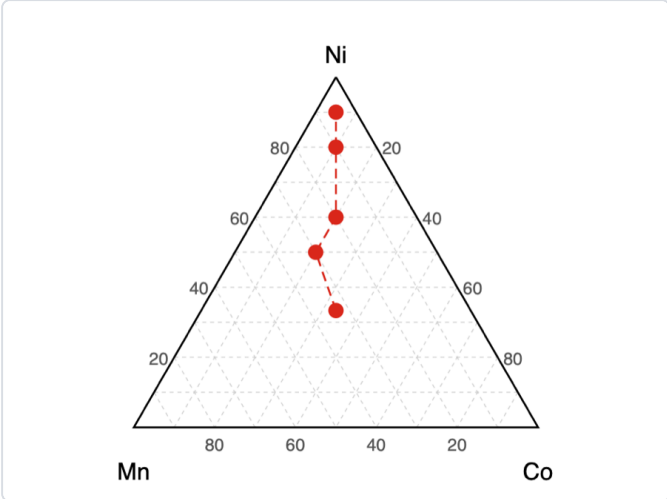


图 7–4　NMC 正极组成的三元相图

顶部第二 X 轴（换算单位）

在图的检查器“页面 → 坐标轴 → 顶部 X 轴”里选择换算：波长 nm → 能量 eV、波数 cm^{-1} → 波长 nm / μm、°C ↔ K、min → h，或者与底部相同（镜像刻度）。顶部刻度按换算后的数值取整，位置随底部坐标轴精确对应。

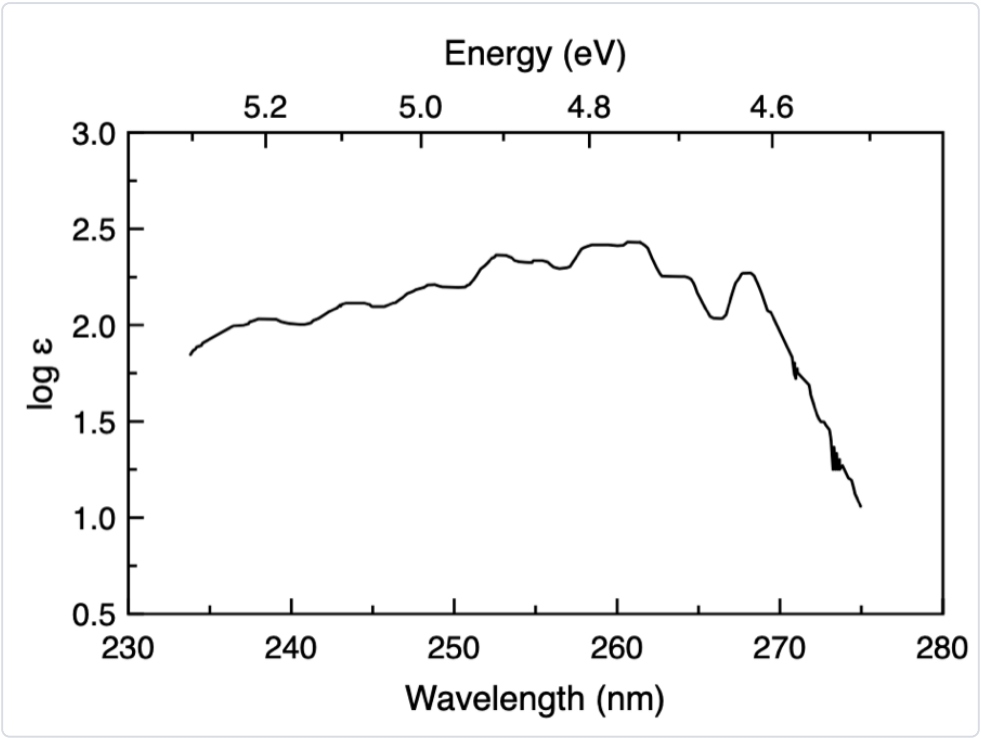


图 7–5　紫外光谱：底部波长、顶部光子能量

嵌入小图（inset）

先单独做好要嵌入的图（例如把 X 范围设成局部放大），然后在大图的检查器“页面 → 嵌入小图”里选择它，可以选择放在四个角并调整大小。X 轴范围手动设定时，Y 轴的自动范围只按可见部分的数据计

算，所以局部放大图会自动拉伸。

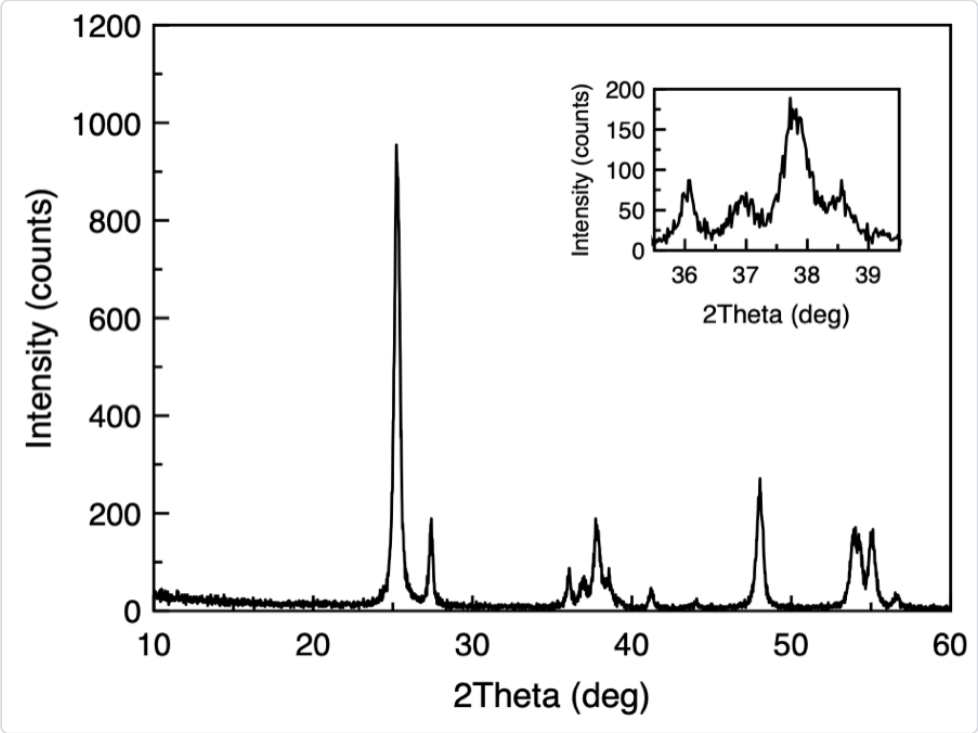


图 7–6　XRD 全谱中嵌入 36–39.5° 的局部放大

设置列值（公式）与化学换算

列 → 设置列值…（⌥⌘=）用公式计算一列，和 Origin 的 Set Column Values 相同：用 `col(A)` 或 `col("长名称")` 引用列，`i` 是行号；支持 + − × ÷ ^、ln、log、exp、sqrt、abs、三角函数、pow 等，以及常数 pi、e、h、c、kB、R、F、NA、qe。

“化学常用换算”菜单里预置了常用公式（选好 X 列、Y 列后点一下即可填好公式、长名称和单位）：

- 波长 → 光子能量：`1240/col(A)`（eV）
- Tauc 作图（直接 / 间接带隙）：`(2.303*col(B)*1240/col(A))^2`；漫反射数据先用 Kubelka–Munk 换算
- Arrhenius：1000/T、ln k；°C → K
- Tafel：log|j|；Mott–Schottky：$1/C^2$；Lineweaver–Burk：1/x、1/y
- 透过率 → 吸光度：2 − log(%T)；波数 → 波长；Ag/AgCl → RHE（请把公式里的 pH 改成实际值）

> **Tauc 法求带隙**：用预设算出 hν 和 $(\alpha h\nu)^2$ 两列，以 hν 为 X 画图；“曲线拟合 → 线性”，勾选“只拟合一段 X 范围”（吸收边的直线段）和“把直线延长到 X 轴”，结果中的 **x-intercept** 就是带隙 E_g。同样的方法可以求 DSC / TGA 的起始温度。

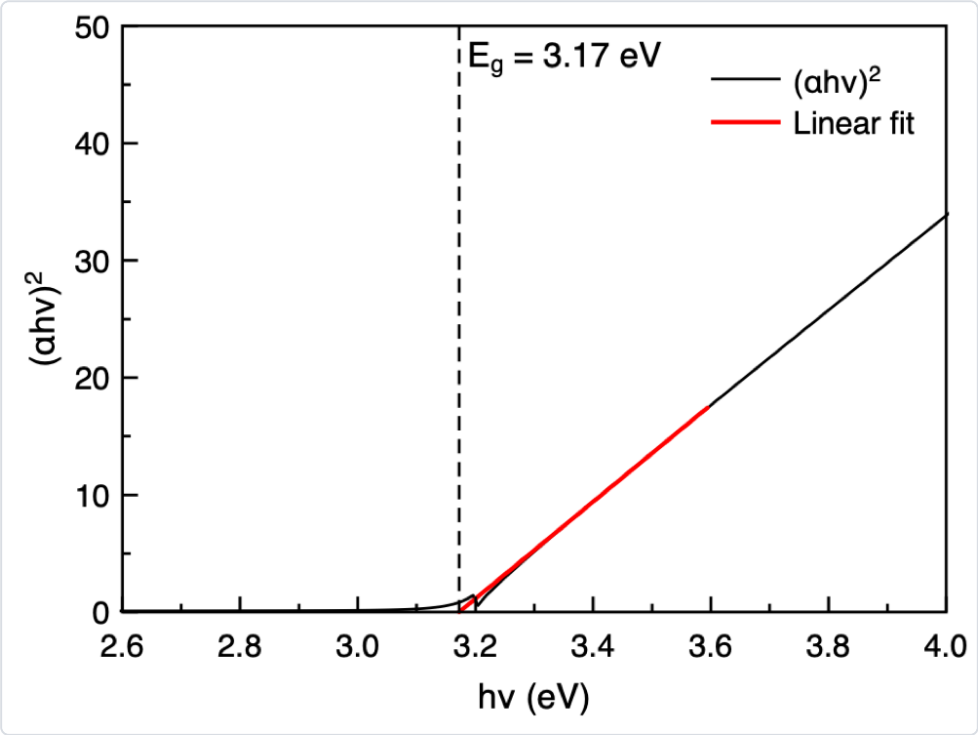


图 7–7　Tauc 作图：线性拟合延长到 X 轴得到 E_g，竖直参考线标注数值

XRD 与标准卡片

把卡片的 2θ 和相对强度输入一张工作表（强度乘以一个负系数，例如 −2.5，就会画在实测谱下方），用 **棒状图** 添加到 XRD 图中（绘图设置里勾选“添加到当前图”）。

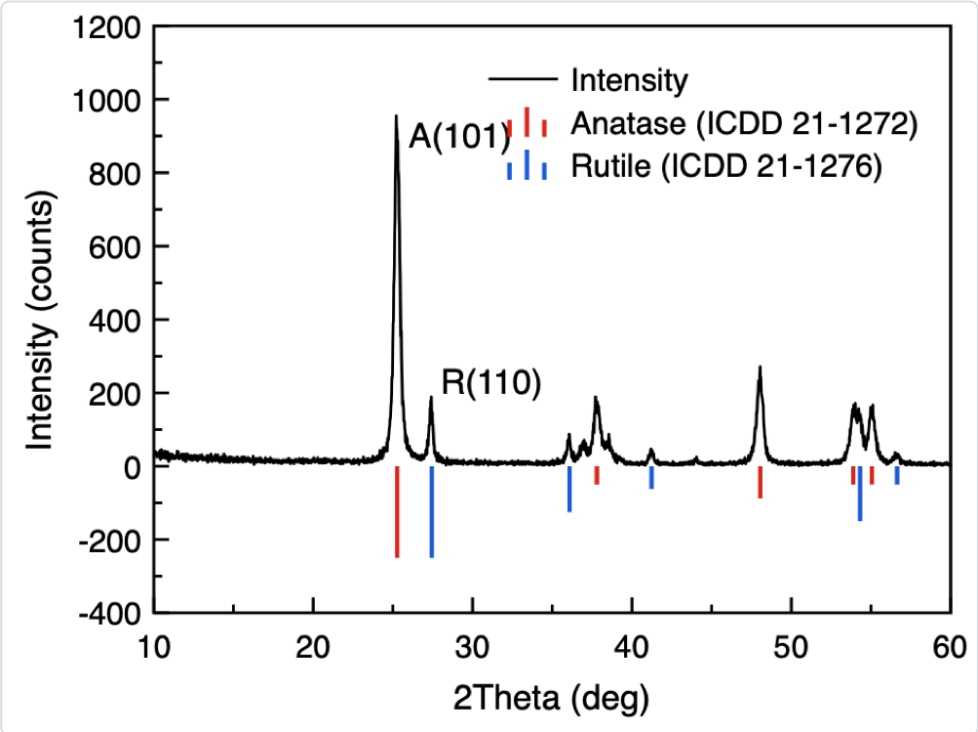


图 7–8　TiO_2 XRD 与锐钛矿、金红石标准卡片（棒状图）

堆积柱状图、自由能台阶图

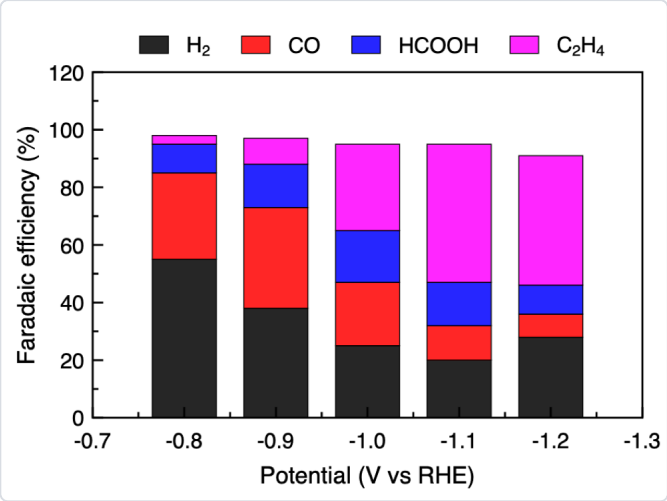


图 7–9　CO_2 电还原法拉第效率（堆积柱状图）

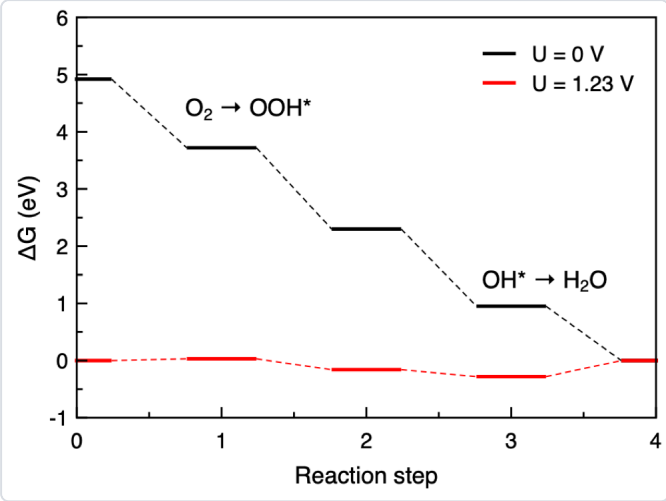


图 7–10　ORR 自由能台阶图

阻抗 Nyquist 图

以 Z′ 为 X、−Z″ 为 Y 画散点图，然后在图的检查器“页面 → 坐标轴”里勾选 **X、Y 等比例（1:1）**，半圆才是圆的（审稿人常会要求）。Bode 图用对数 X 轴加双 Y 轴即可。

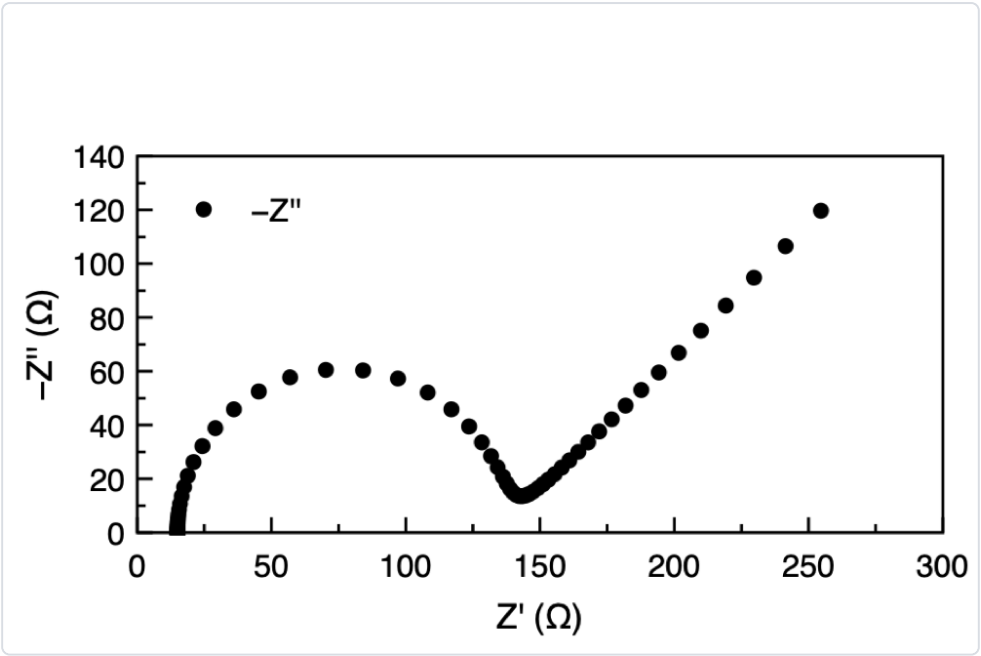


图 7–11　1:1 坐标的 Nyquist 图

热图 / 等高线图（原位、变温、时间分辨数据）

工作表格式：第一列是 X（例如 2θ、波数、波长），后面每一列是一条扫描。每条扫描在 Y 轴上的位置取该列长名称或注释里的第一个数字（例如 “300 K”“5 min”“1.2 V”），没有数字时依次为 1、2、3……。选“热图 / 等高线图”并勾选所有扫描列即可。在曲线检查器里可以选择配色（Viridis、Inferno、Plasma、蓝−白−红、彩虹、灰度）、设定颜色范围、叠加等高线、修改色标标题。

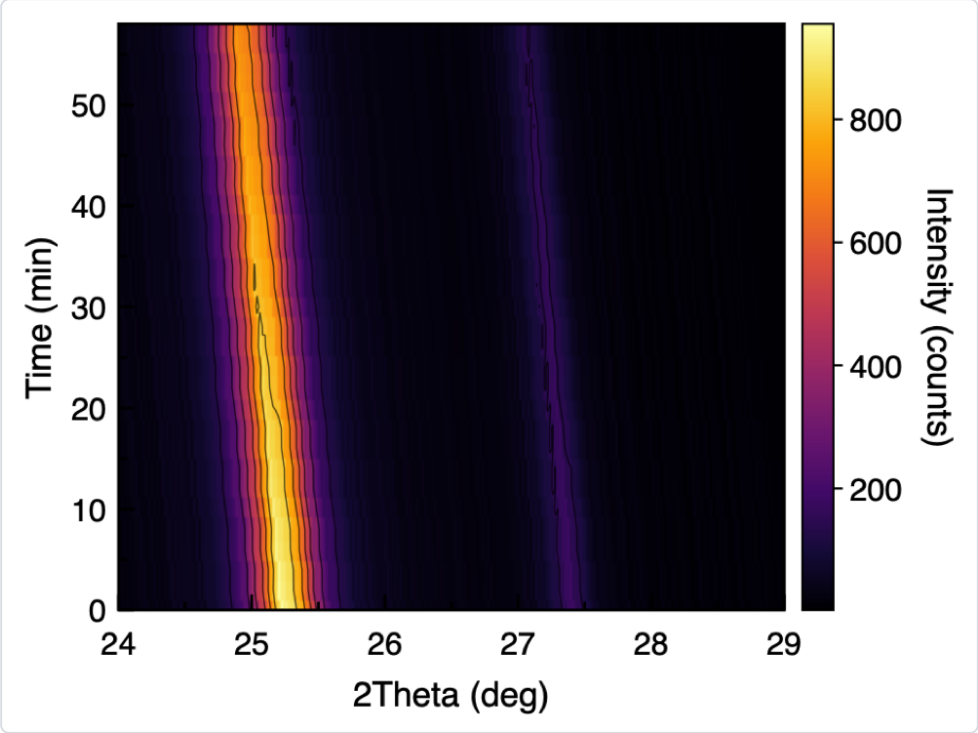


图 7–12　原位 XRD 热图（带等高线）

直方图（粒径分布）

绘图 → 直方图…：选择数据列，分组数可自动（Freedman–Diaconis 规则）或手动指定，可叠加正态或对数正态分布曲线（纳米颗粒粒径通常用对数正态）。平均值、标准差、几何平均值和几何标准差写在新工作表的备注里。

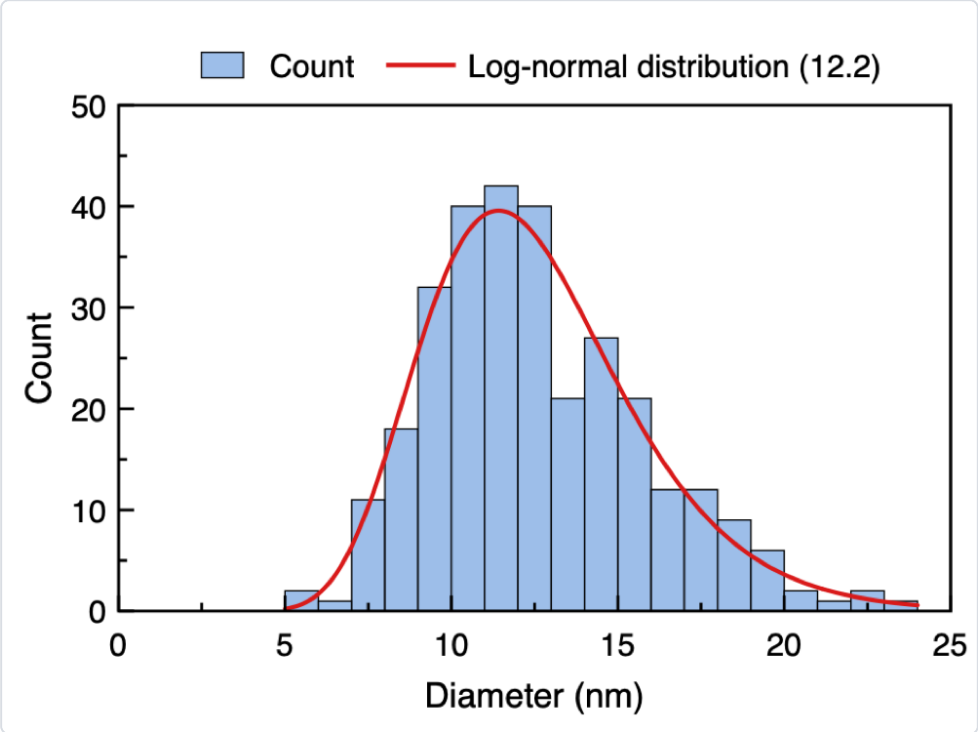


图 7–13　粒径直方图与对数正态分布曲线

瀑布图

多条光谱画在一张图里后，在每条曲线的检查器里同时设置 **Y 偏移** 和 **X 偏移**，就是常见的“伪三维”瀑布图。

气泡图、小提琴图、雷达图

- **气泡图**：成对勾选列（Y、气泡大小），气泡面积和数值成正比。
- **小提琴图**：每列一个，轮廓是核密度估计，中间粗线是四分位范围、白点是中位数；可以叠加原始数据点。检查器里可以和箱线图互相切换。
- **雷达图**：每个 Y 列一个多边形，每一行一个坐标轴，轴名取文字 X 列（如活性、选择性、稳定性、成本）。

三维图

绘图 → 三维曲面 / 三维瀑布图 / 三维散点：

图型	数据排列	常见用途
三维曲面	X 列 + 多个 Y 列，每个 Y 列是一条扫描（和热图相同）	原位 XRD / 拉曼 / 红外、变温、时间序列
三维瀑布图	同上，每条扫描画成一条曲线，按扫描值排在深度方向	变温、充放电过程中的光谱演化
三维散点	X 列 + 两个勾选的列（Y、Z）	组成—性能关系、响应面实验
三维柱状图	和三维曲面相同（矩阵）	不同条件下的产率、法拉第效率矩阵

扫描的位置取列的长名称或注释里的第一个数字（如“300 K”、“5 min”、“1.2 V”）。在图里**拖动鼠标即可旋转**；检查器“页面”里可以精确设置旋转、俯仰、坐标框比例、背面墙、色标和 Z 轴范围，“正视 / 俯视 / 默认”按钮一键切换视角。曲面可选网格线和按 Z 值上色，散点可画到底面的垂线。三维图和二维图一样导出为矢量 PDF / SVG。

8　修改图的格式

选中与编辑

和 Origin 一样：**单击** 图中的元素（坐标轴、曲线、图例、标题）选中它，虚线框表示选中；**双击** 打开右侧检查器并切到该元素。检查器顶部的“编辑”下拉框也可以直接选择要改的对象。

坐标轴

- **标题**：可以使用富文本（见下表）。新图会自动使用“长名称 (单位)”作为标题。
- **范围**：关闭“自动范围”后填写起止值。自动范围会在数据上下各留 5 % 的空白。
- **步长与次刻度**：关闭“自动主刻度”后填写主刻度间隔；次刻度数量 0–9。
- **反向**：红外波数、NMR 化学位移常用；**对数**：数量级跨度大的数据。
- **刻度朝内 / 朝外**、**网格线**。
- 数值很大或很小时，刻度标签会统一提出公共指数，在轴端显示 $\times 10^{n}$。

断轴

在 X 轴、左 Y 轴或右 Y 轴的检查器里打开 **断开坐标轴**，填写要跳过的范围（从……到……）。这段范围会被省略，坐标轴上画出 “//” 标记，穿过断口的曲线会画到断口边缘再从另一侧接上。线性轴和对数轴都可以断轴（对数轴的两个值必须是正数）。常见用途：

- 红外谱跳过 2700–1900 cm^{-1} 等没有吸收的区域；
- XRD 中一个特别强的峰把弱峰压得看不见时，断开 Y 轴；
- TG + DTG 中只断开右侧 DTG 轴，同时显示尖锐的 DTG 峰和平缓的小峰。

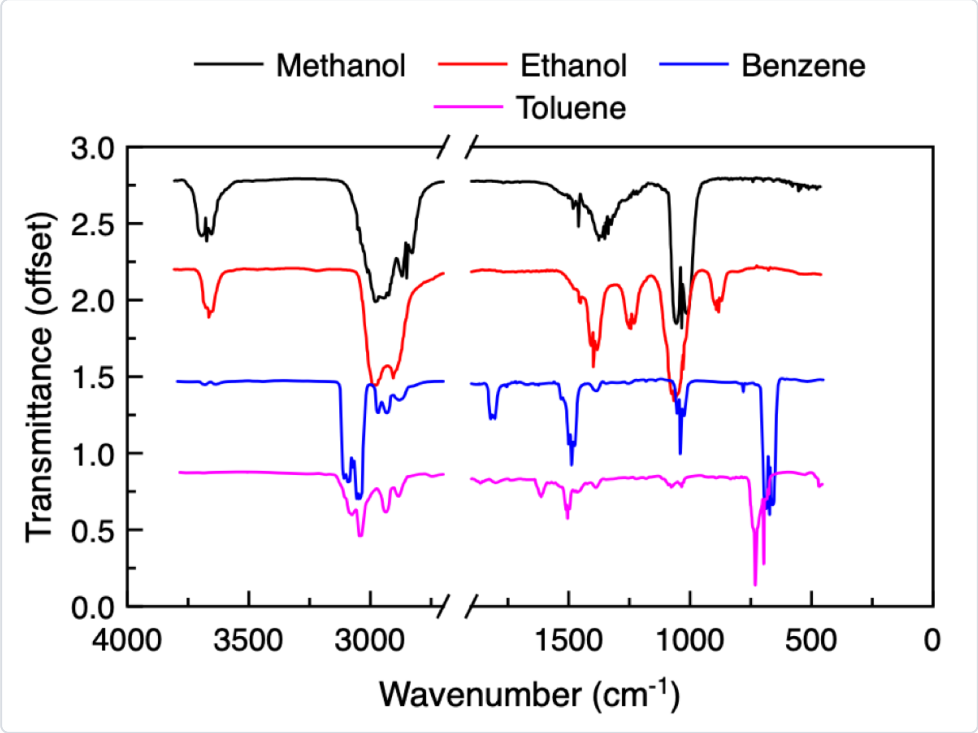


图 8–1　四种化合物的红外堆叠谱，X 轴在 2700—1900 cm^{-1} 断开

曲线

双击曲线后可修改：图例名称、图型、颜色、线型（实线 / 虚线 / 点线 / 点划线）、线宽、符号形状与大小、空心 / 实心、是否使用右 Y 轴、Y 偏移，也可以把曲线从图中移除（数据仍保留在工作表里）。

图例

- **自动位置**（默认）：放在压住数据最少的角落；四个角都会压住曲线或柱子时，自动放到图的上方，并按行排列。
- **用鼠标直接拖动** 图例到任意位置；位置会保存在项目里。
- 也可以在检查器里固定为某个角，或打开边框。
- 图例文字取曲线的“图例名称”；没有设置时取列的注释，再没有则取长名称。

注释：文字、箭头、参考线

在图的检查器“页面 → 注释”里点 **文字**、**箭头**、**竖直参考线** 或 **水平参考线**，注释会出现在图的中间并被选中。文字可以直接用鼠标拖动；箭头和参考线可以拖动，也可以在检查器里输入精确的数据坐标。注释使用数据坐标，修改坐标轴范围后仍然指向同一个位置。常用于标注峰的归属、CV 扫描方向、带隙数值、玻璃化转变温度等。

富文本写法

坐标轴标题、图标题、图例名称里都可以使用 Origin 的富文本写法：

写法	效果	例子
`\+(…)`	上标	`cm\+(-1)` → cm^{-1}
`\-(…)`	下标	`CO\-(2)` → CO_2
`\g(…)`	希腊字母	`\g(e)` → ε，`\g(l)` → λ，`\g(q)` → θ
`\b(…)` / `\i(…)`	粗体 / 斜体	`\i(T)` → T
`^{…}` / `_{…}`	上标 / 下标（LaTeX 风格）	`m^{2}/g` → m^2/g

页面、字体与期刊预设

在检查器的“页面”里设置图的实际尺寸（厘米）、字体和字号。**绘图 → 期刊预设** 内置 ACS、RSC、Elsevier 的单栏 / 双栏宽度，一键设置为 Arial 8 pt、1 pt 线宽和合适的高宽比。导出时图片的物理尺寸就是这里设置的尺寸。

图上工具：缩放、读数、选范围、屏蔽点、锚点

图上方有一排工具按钮（和 Origin 左侧工具栏一样），也可以在 **图 → 图工具** 里切换：

工具	用法
选择	单击选中元素，双击编辑（默认）。
缩放	拖出矩形放大到这个范围；单击放大 2 倍，⌥ 单击缩小。任何工具下都可以在触控板上**双指捏合**缩放。⌘R 或工具条上的按钮重新缩放到显示全部数据。
平移	拖动移动视图。
读数	鼠标移到图上，十字线显示最近数据点的名称、行号和 X、Y 值；单击把数值复制到剪贴板。
选范围	横向拖动框选一段 X 范围（蓝色带）。之后打开拟合、多峰拟合、找峰、FFT、插值等窗口时自动勾选“只用一段 X 范围”并填好范围；工具条上的“分析所选范围”菜单可以直接打开这些窗口。
屏蔽点	单击某个点或拖出矩形，把坏点屏蔽：显示为红色空心圈，平滑、基线、拟合、统计等所有分析都跳过它们；再操作一次取消屏蔽。也可以用 **数据 → 排序与筛选** 按条件屏蔽。
基线锚点	在图上点选基线经过的位置（橙色竖线），⌥ 单击删除；点“用锚点做基线…”打开基线校正，锚点之间用三次样条连接（Origin 的“用户定义基线”）。

图模板、复制格式

- **图 → 另存为模板...**：把当前图的页面尺寸、字体、坐标轴设置、图例和每条曲线的样式（颜色、线型、符号）存成模板，不包含数据。模板保存在 `~/Library/Application Support/ChemPlot`，所有项目都能用。
- **图 → 应用模板**：把模板套到当前图；坐标轴标题保留原图的。绘图设置窗口里也可以直接选模板。
- **图 → 管理模板...**：重命名、删除；点星号设为**默认模板**，以后每张新图自动套用（适合固定的期刊格式）。
- **复制格式 / 粘贴格式**（`⌥⇧⌘C` / `⌥⇧⌘V`）：把一张图的格式直接用到另一张图上，和 Origin 一样。

9　数据处理

所有处理都在 **分析** 菜单里。弹出窗口顶部的“数据”下拉框选择要处理的曲线：可以是当前图里的曲线，也可以是任意工作表中的 Y 列。结果作为新列插在原数据右边；如果数据来自图，结果曲线也会自动加到图上。

功能	说明
平滑	**Savitzky—Golay**（推荐，保留峰形和峰高）或 **相邻平均**。窗口点数越大越平滑；SG 的多项式阶数常用 2—3。
归一化	除以最大值（最高峰 = 1），或线性缩放到 [0, 1]。比较不同浓度 / 不同样品的谱形时常用。
微分	中心差分法，X 间隔不均匀也可以；结果单位自动写成“Y 单位/X 单位”，例如 TGA 的 DTG 为 %/°C。X 方向倒退或几乎不动的点（如 TGA 开头炉温先降后升、等温段）会留空，不会产生假尖峰。
积分	梯形法，添加累计积分列，并显示总面积（例如 CV 峰面积、DSC 峰面积）。

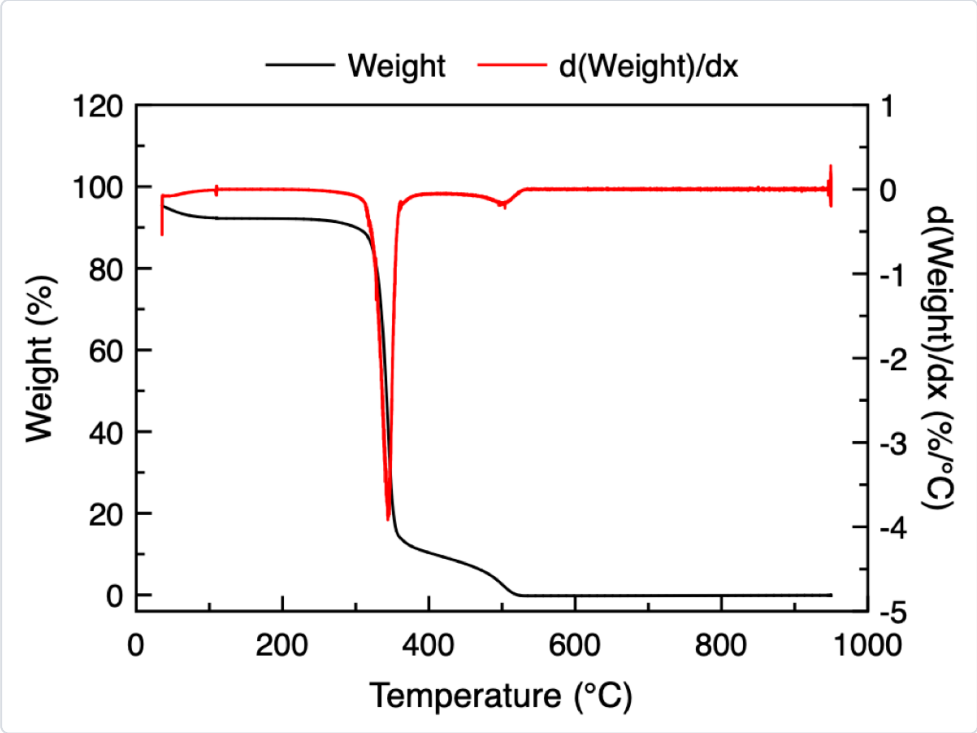


图 9–1　纤维素热重：TG（左轴）与微分得到的 DTG（右轴，单位自动为 %/°C）

FFT、滤波、插值

- **数据 → FFT（频谱）**：振幅、功率谱密度或相位，可选窗函数（Hanning、Hamming、Blackman、矩形）。频率单位是 1 /（X 的单位）；X 间隔不均匀时先插值到等间隔。
- **数据 → FFT 滤波**：低通、高通、带通、带阻（4 阶 Butterworth 形状），结果列和原数据同一

行对齐。窗口里会显示这组数据的奈奎斯特频率，建议先做 FFT 看噪声在哪个频率。

- **数据 → 插值 / 重采样**：线性、三次样条或 PCHIP（保形、不过冲），按点数或固定步长生成等间隔的新曲线，方便把 X 点不同的光谱相减、平均。

统计

统计 菜单里的检验都把结果写进一张新的“Stats”工作表，并弹出报告窗口（可一键复制到 Excel）。屏蔽的点不参与计算。

功能	内容
描述统计	N、缺失数、均值、标准差、标准误、95% 置信区间、最小 / 最大值、四分位数、中位数、方差、变异系数、偏度、峰度
t 检验	单样本（与给定均值比较）、双样本（默认 Welch，不假设方差相等；可选等方差，并给出方差齐性 F 检验）、配对；双侧 p 值、均值差的 95% 置信区间
单因素方差分析	每列一组；方差分析表、各组均值、Levene 方差齐性检验（Brown–Forsythe），以及 Tukey HSD 两两比较（组样本数不等时为 Tukey–Kramer）和 95% 同时置信区间，另附 Bonferroni、Holm 校正的 p 值
双因素方差分析	长格式数据：因素 A 一列、因素 B 一列（文字或数字，如催化剂、温度），响应值一列，每行一次测量。可选是否包含 A × B 交互作用；用 Type III 平方和，各组样本数不相等也可以（和 Origin 默认一致）。结果有方差分析表、各组合的均值，以及每个因素的 Tukey HSD 两两比较。交互作用显著时会提示谨慎解读主效应。
相关性	Pearson 或 Spearman 相关系数矩阵和 p 值
正态性检验	Shapiro–Wilk（Royston 算法，3–5000 个数据）

排序、筛选、XYZ 转矩阵

- **数据 → 排序与筛选**：按某列升序 / 降序排序整张表；按条件（如 `col(B) > 0.5 && col(A) < 400`）把行提取到新工作表，或在某列屏蔽 / 取消屏蔽这些行。公式里可以用 < > <= >= == != 和 &&、||。
- **数据 → XYZ 转矩阵**：把散点 (x, y, z)（成分分布、响应面实验等）网格化成矩阵工作表，方法有 **Delaunay 三角剖分**（在相邻数据点组成的三角形内线性插值，Origin 的默认方法，凸包以外的格子留空）、规则网格（数据本来就在网格上时自动选用）、格内平均、反距离加权（会填满所有格子，但数据点周围会出现小“靶心”），可以直接画热图 / 等高线、三维曲面或三维柱状图。
- 导入有多张工作表的 Excel 文件时，这些工作表放进以文件名命名的文件夹，相当于 Origin 的一个工作簿。

自动重新计算

和 Origin 的“重新计算：自动”一样：**设置列值**的公式，以及平滑、归一化、微分、积分、基线校正、找峰、拟合、多峰拟合的结果都会记下来。源数据一改（修改格子、粘贴、重新设置公式），公式列、结果列、拟合曲线和拟合结果表自动更新；公式列之间可以链式引用。每个分析窗口里都有“数据改变后自动重新计算”开关；工作表检查器的“重新计算”一栏列出相关的操作，可以逐个关掉自动、立即重算或停止跟踪。带公式的列在检查器里显示 f = 公式。

脚本窗口

分析 → 脚本窗口（⌥⌘K）用 JavaScript 操作整个项目（相当于 Origin 的 LabTalk / Python 脚本窗口）。⌘↩ 运行，⌘. 停止；脚本在后台运行，界面不会卡住。“示例”菜单里有批量拟合、列运算、出图排版、峰位表、三维图等现成脚本，“API 参考”列出所有函数。

```
const ws = importFile("~/Desktop/sample.csv");      // 导入
const y = ws.yColumns[0];
ws.setValues(null, "1240/col(A)", {longName: "E", units: "eV", role: "x"});
const r = ws.fit(y, "Boltzmann", {from: 300, to: 700}); // 任意函数库里的函数
print(r.params.x0, "±", r.errors.x0, "R² =", r.r2);
const g = ws.plot(y, "scatter", {template: "我的期刊格式"});
g.set({xtitle: "T (K)", width: 8.5});
g.export("~/Desktop/fig1.pdf");
```

脚本里的修改都可以 ⌘Z 撤销。导出图、保存项目在试用结束后需要激活。

用“保存…”存到默认的脚本文件夹（ `~/Library/Application Support/ChemPlot/Scripts` ）的脚本会出现在 **脚本** 菜单里，以后一键运行，相当于自己做的小工具（Origin 的 App）。

批处理

分析 → 批处理…：把同一套处理用在一批数据文件上（Origin 的批处理）。

1. 添加或拖入数据文件，选择处理哪一列（第一个 Y 列、所有 Y 列，或按列名）。
2. 勾选步骤，按顺序执行：基线校正 → 平滑 → 归一化 → 积分 / 找峰 / 拟合（内置模型或函数库里的任意函数），可以只用一段 X 范围。
3. 选择出图方式：每个文件一张图（可套模板），或所有文件叠加成一张图；可以把图批量导出到一个文件夹。
4. 运行后，每个文件的工作表和图放在以文件名命名的项目文件夹里，最后生成“批处理汇总”工作表：每个文件一行，包括拟合参数及误差、R^2、峰数、最强峰位置、面积。

10　基线校正

分析 → 基线校正…（⌥⌘B）。结果为两列：“基线”和“基线校正后”；数据来自图时，图上会加一条灰色虚线基线和一条校正后的曲线。

方法	适用与参数
非对称最小二乘（自动，推荐）	不需要选点，拉曼、红外、XRD 最常用。**平滑度 λ** 越大基线越平直（默认 10^7，常用 10^5–10^8）；**非对称系数 p** 越小基线越贴近峰的底部（默认 0.001，常用 0.001–0.01）。
迭代多项式	背景是平缓曲线时使用；设置多项式阶数（常用 2–4）。
两端连直线	取数据两端各若干点的平均值连成直线，适合紫外–可见光谱或单个峰的扣背景。
Shirley（XPS）	XPS 窄谱最常用的背景：背景在峰下按峰面积比例阶梯式升高。数据两端应落在平坦的背景上；结合能从大到小排列也可以。

透过率谱（峰朝下）请勾选 **峰朝下（透过率谱）**。列名中含有 Transmittance、%T、透过率的数据会自动勾选。

> 基线切进了宽峰里？把 λ 调大（例如 10^8）。基线高于峰底？把 p 调小。

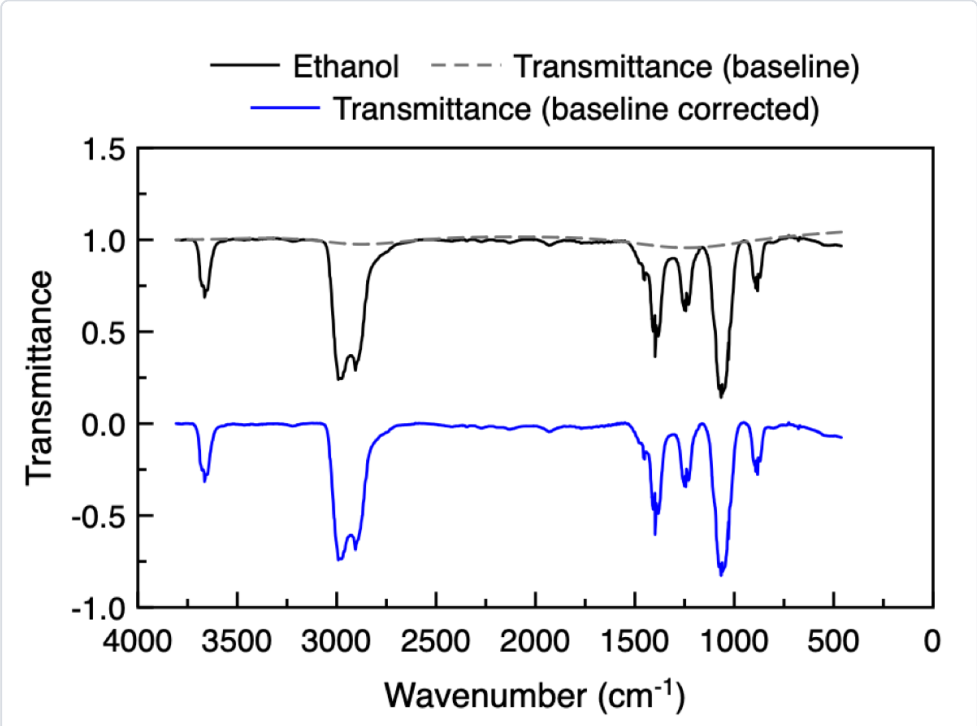


图 10–1　NIST 乙醇红外透过率谱的基线校正（默认参数）：灰色虚线为基线，蓝色为校正后

11　找峰

分析 → 找峰…（⌥⌘P）。

- **最小突出度**：峰顶比它两侧较高的那个谷底高出多少，以数据总跨度的百分比表示。调高可以忽略噪声和肩峰；调低可以找到更多弱峰。
- 软件会自动估计数据的噪声水平，突出度低于 4 倍噪声、或宽度小于两个采样间隔的毛刺不会被当成峰。
- 可以只在某一段 X 范围里找峰；透过率谱、CV 还原峰等请勾选“峰朝下”。
- 勾选“同时标出肩峰”时，用二阶导数法找出藏在大峰侧面、没有单独峰顶的肩峰。为避免把噪声当成肩峰，只有曲率明显超出噪声水平时才算；噪声较大的数据请先平滑。
- 结果：新工作表“Peaks”列出每个峰的位置、高度、突出度和半高宽；图上用三角标出峰位并写出数值，相邻标注会自动错开。

12　曲线拟合

分析 → 曲线拟合…（⌥⌘F），或直接从 **分析** 菜单选择某种拟合（会预先选好模型）。

模型	公式	常见用途
线性	$y = Intercept + Slope \cdot x$	标准曲线、Arrhenius、KAS 作图
多项式（1–9 阶）	$y = B0 + B1 \cdot x + B2 \cdot x^2 + \dots$	校准曲线、经验关系
指数衰减	$y = y0 + A \cdot \exp(-x/t)$	一级动力学、荧光寿命（结果附 t½）
指数增长至平台（Box–Lucas）	$y = a \cdot (1 - \exp(-b \cdot x))$	吸附动力学、BOD
高斯峰	$y = y0 + H \cdot \exp(-4\ln 2 \cdot (x-xc)^2/w^2)$	XRD、色谱峰
洛伦兹峰	$y = y0 + H / (1 + 4(x-xc)^2/w^2)$	拉曼、NMR 峰

勾选 **95% 置信带** 或 **95% 预测带**，图上会画出拟合曲线两侧的填充带：置信带表示“真实曲线”可能的范围，预测带表示新测量点可能落入的范围（标准曲线定量时常用）。计算方法为 t 分布分位数 × 参数协方差，与 Origin、统计教材一致。

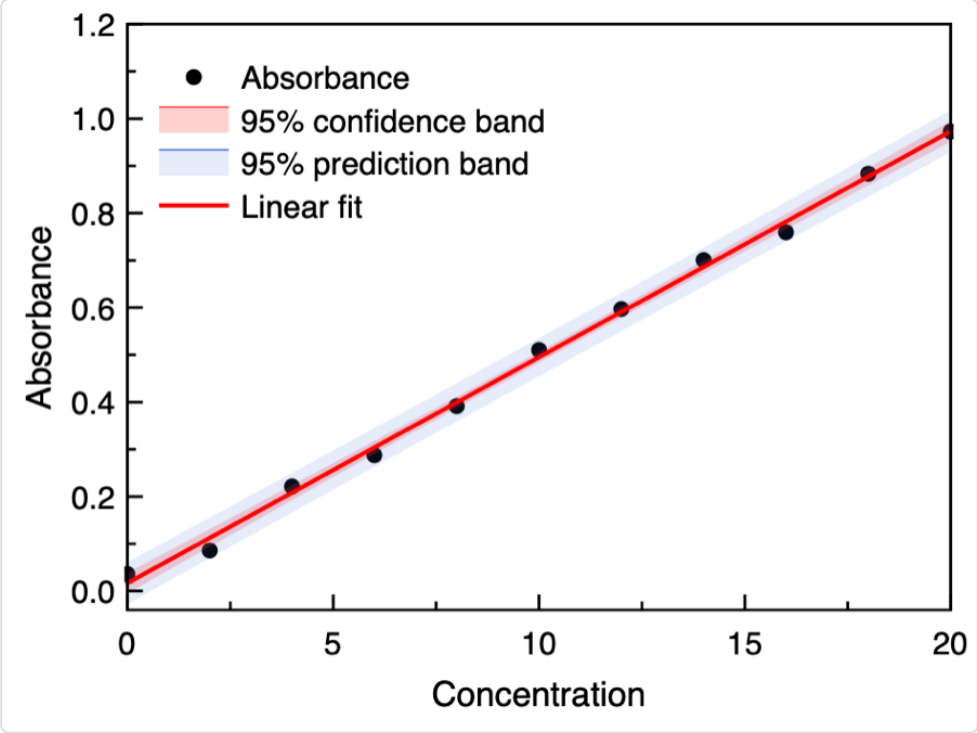


图 12–1　标准曲线的 95% 置信带和预测带

峰拟合的参数直接就是峰位 xc、半高宽 w、峰高 H，并给出峰面积。分峰时请勾选 **只拟合一段 X 范围**，范围内只包含一个峰。

如何阅读拟合结果

- **标准误差**：参数的不确定度。论文中通常写成“数值 ± 标准误差”。
- **R^2** 越接近 1 拟合越好；**调整后 R^2** 考虑了参数个数，比较不同模型时更公平。
- **残差平方和**、**数据点数**。
- **复制结果** 按钮把整张结果表复制到剪贴板，可以直接粘贴进 Excel。拟合曲线会加到图上，曲线数据放在新的“Fit”工作表里（工作表备注里有完整结果）。

> ChemPlot 的拟合算法已用 NIST StRD 回归认证数据集（Norris、Pontius、Misra1a）验证，参数和标准误差与认证值一致。

非线性曲线拟合与自定义函数

分析 → 非线性曲线拟合…（⌥⌘Y），对应 Origin 的 NLFit。左侧是函数库，按类别排列，名称和写法与 Origin 一致：

类别	函数
指数	ExpDec1、ExpDec2（附强度加权平均寿命）、ExpDec3、ExpGrow1、ExpAssoc
增长 / S 形	Boltzmann、Logistic、DoseResp（附 EC50）、Hill
峰函数	Gauss、GaussAmp、Lorentz、PsdVoigt1、LogNormal（附半高宽、峰高、面积）
幂函数 / 有理函数	Allometric1、Power、过原点直线、Michaelis–Menten
吸附等温线	Langmuir、Freundlich、Sips、Temkin
动力学	准一级、准二级、Elovich、颗粒内扩散、一级、二级、Avrami、Arrhenius
电化学	Cottrell、Butler–Volmer、Randles–Sevcik、$ip = a \cdot v^b$

右侧参数表里每个参数可以设置：

- **初值**：数字，或用数据统计量写的表达式，如 `ymax-ymin`、`xpeak`（最大值处的 x）、`fwhm`、`xhalf`（中点处的 x）、`slope`。旁边灰色数字是按当前数据算出的初值。
- **固定**：参数不参与拟合（例如固定 y0 = 0、固定温度）。
- **上限 / 下限**：例如宽度 ⩾ 0、比例在 0–1 之间。

选项里可以只拟合一段 X 范围、**用误差棒加权**（$w = 1/\sigma^2$，结果给出约化 χ^2）、画置信带 / 预测带、数据改变后自动重算。

拟合函数生成器（函数列表下方的 + 按钮）：输入函数名和公式（如 `y0 + A*exp(-x/t)`），点“从公

式识别参数”，设置初值、固定、上下限，还可以定义**派生量**（如半衰期 `t*ln(2)`），拟合后一并给出。自己写的函数保存在“我的函数”里，所有项目都能用；内置函数可以另存一份再修改。公式里可以用 exp、ln、log、sqrt、erf、gamma、if(c,a,b) 等函数和 R、F、kB、h 等常数。

残差、全局拟合、模型比较、曲面拟合

- **残差图**：曲线拟合和非线性拟合窗口里勾选“残差图”，结果表里多两列（数据点的 X 和残差），并另外画一张残差图（带 0 参考线），用来检查模型是否合适。
- **全局拟合**（**分析 → 全局拟合…**）：勾选几组数据（如不同浓度下的荧光衰减），选一个函数，把需要相同的参数（如寿命 t1、速率常数）设为“共享”，其余参数每组分别拟合。结果表列出每组的参数和标准误差，图上画出每组数据和对应的拟合线。
- **模型比较**（**分析 → 模型比较…**）：同一组数据用两个模型拟合，给出 RSS、R^2、AIC、AICc、BIC、Akaike 权重；一个模型是另一个的特例时（如 ExpDec1 与 ExpDec2）还给出 F 检验，判断多出来的参数是否有意义。
- **曲面拟合**（**分析 → 曲面拟合…**）：z = f(x, y)，内置 Plane、Poly2D（响应面）、Gauss2D、Lorentz2D，也可以自己写公式。拟合值和残差加到工作表里，三维图同时显示数据点和拟合曲面。

13　多峰拟合

分析 → 多峰拟合…（⌥⌘M）。用于重叠峰的分峰，例如 XRD 中相邻的衍射峰、XPS / 拉曼的分峰。

1. 选择 **峰形**：高斯、洛伦兹，或 **赝 Voigt**（每个峰有自己的洛伦兹比例 η，实际峰形最常用）。
2. 选择 **基线**：无、常数或线性。基线和所有峰一起拟合。
3. 设置 **最多峰数** 和 **最小突出度**：软件先自动找峰作为初值。
4. 强烈建议勾选 **只用一段 X 范围**，只框住要分开的那几个峰。
5. 已知各组分大致位置时（例如 XPS C 1s 的 C–C 284.8、C–O 约 286.3、O–C=O 约 288.7 eV），在 **峰位（可选）** 里输入，最可靠；留空则自动找峰和肩峰。

结果面板列出每个峰的峰位、半高宽、峰高（赝 Voigt 还有 η）及其标准误差，以及每个峰的面积和面积百分比。图上画出总拟合线（红色）、各个分峰（虚线，画在基线上）和基线；所有曲线数据放在“MultiPeak”工作表里。

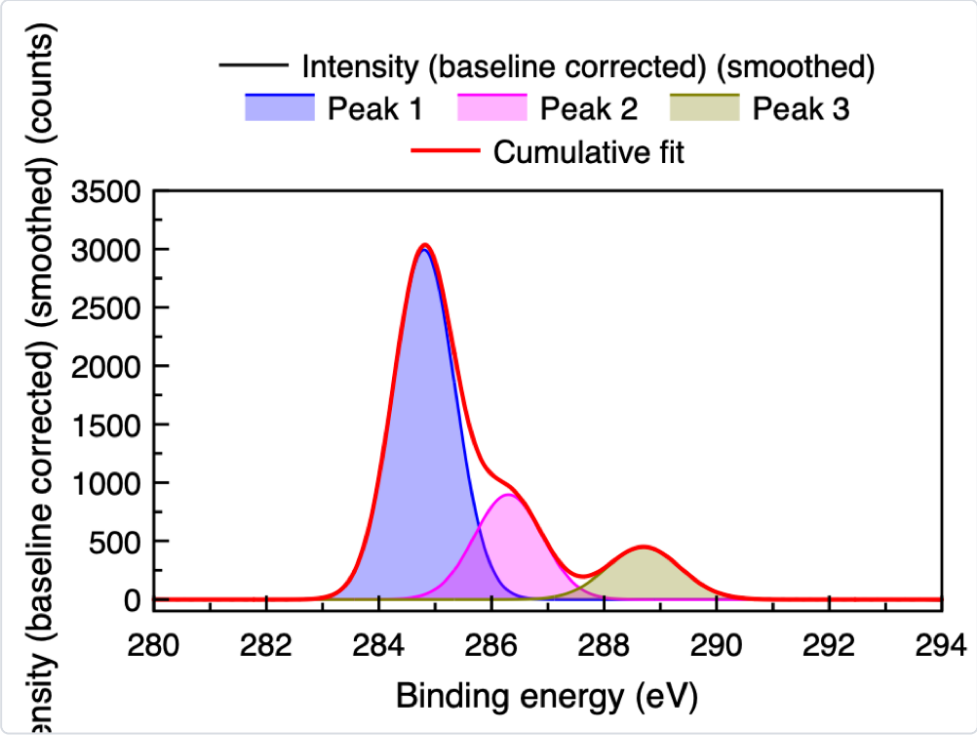


图 13–1　XPS C 1s：Shirley 背景 → 平滑 → 输入三个峰位的多峰拟合，分峰用面积图显示

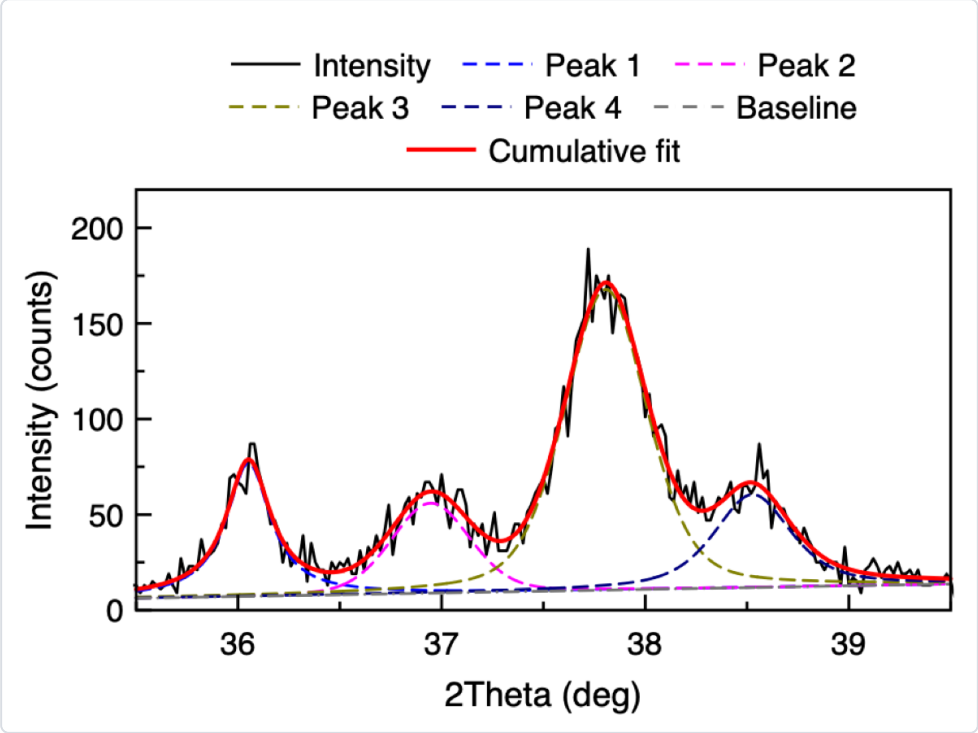


图 13–2　TiO_2 XRD 35.5–39.5° 的四个重叠峰：赝 Voigt + 线性基线

> 找到的峰太多（把噪声当成峰）时调高最小突出度；漏掉了肩峰时调低突出度或缩小 X 范围。

14　多图拼版

论文中的组合图（a）（b）（c）（d）可以直接在 ChemPlot 里完成：

1. 先分别画好每一张图。
2. 选择 **绘图 → 新建多图拼版**（⌥⌘L）。软件按图的数量自动排成网格（2 张 1×2、4 张 2×2、6 张 2×3……），左侧栏出现“多图拼版”。
3. 在右侧检查器里调整：行数、列数、整页宽高（可直接选期刊栏宽）、所有子图的统一字号、子图间距、标号样式（(a) / a / A / 无），以及每个格子放哪张图。
4. 双击某个子图，可以回到那张图修改；修改会立即反映在拼版里。
5. 选中拼版时按 ⌘E 导出，整页拼版导出成一个文件。

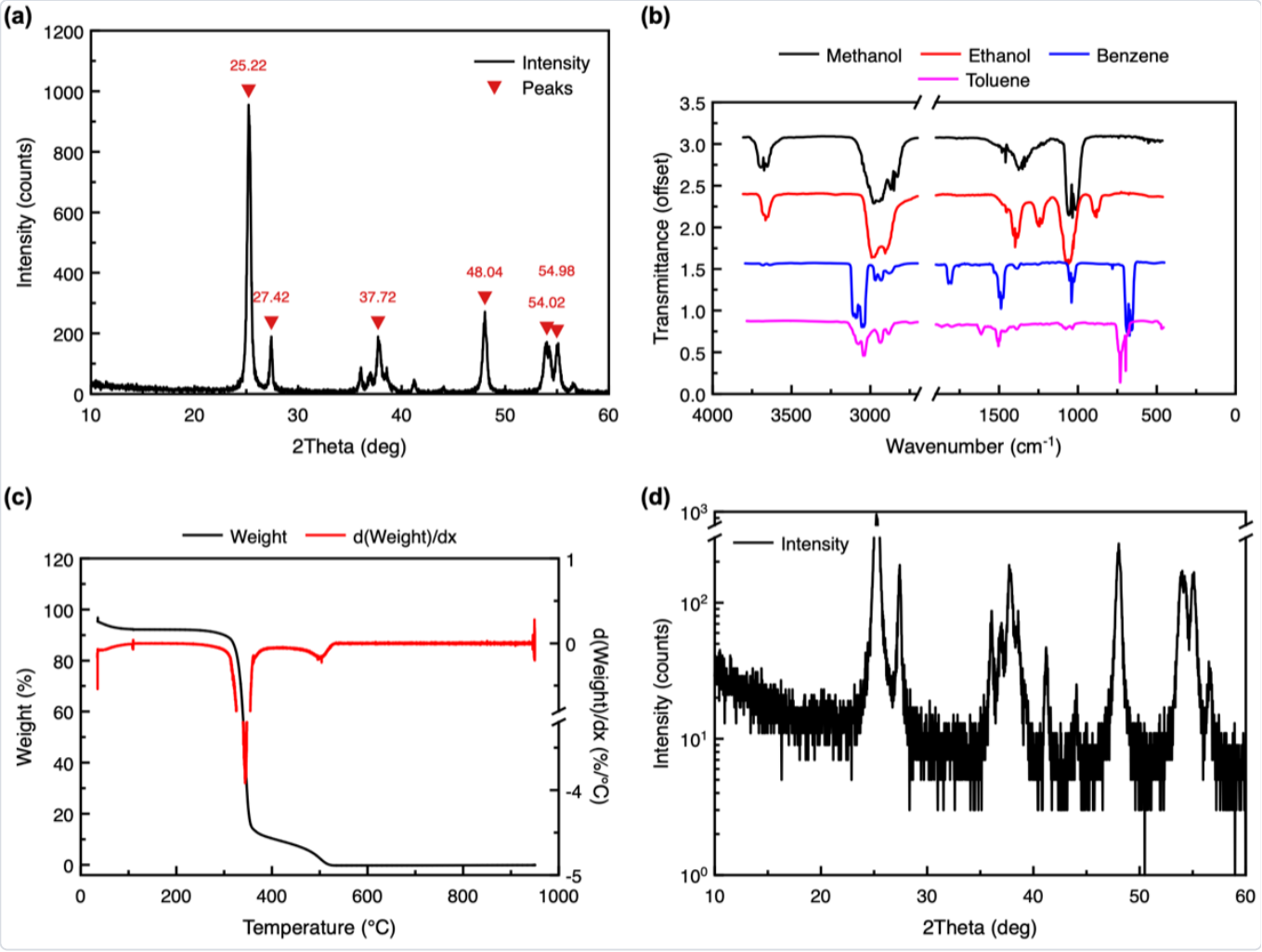


图 14–1　2×2 拼版：(a) XRD 找峰，(b) 红外 X 断轴，(c) TG + DTG 右轴断轴，(d) 对数轴断轴

堆叠图与联动坐标轴

绘图 → 堆叠图（共用 X 轴）…：每个 Y 列画成一张图，从上到下排在一起，共用一个 X 范围，只有最下面一张显示 X 刻度和标题，子图之间没有间隙（Origin 的 Stack 图，常用于 XRD、TG/DSC、原

位光谱的对比）。任何拼版都可以在检查器里打开“联动 X 轴”。坐标轴检查器里还可以填**自定义刻度标签**（如 `1:Pt/C; 2:Pd/C; 3:Ni`）或隐藏刻度标签。

自由排版

检查器顶部的“排版方式”切换为 **自由** 后，每张图都可以放在任意位置、设成任意大小，像 Origin 的 Layout 页面一样：一张大图横跨整行、下面放两张小图，或者大小不一的组合。

- 在页面上**拖动**图移动，拖动选中图右下角的蓝色方块缩放；位置按 0.1 cm 吸附，按住 `⌥` 可以自由移动。
- 检查器里可以输入精确的 X、Y、宽、高（厘米），移到最前 / 最后，把其他图的左边、上边或大小对齐到选中的图。
- “添加图”把任意一张图放到页面上；(a)(b)(c) 标号按阅读顺序（先上后下、先左后右）自动编排。
- 切换回“网格”时，图按阅读顺序重新放进格子。

15　导出与投稿

文件 → 导出图…（`⌘E`）。当前选中的是图就导出这张图，选中的是拼版就导出整页拼版。

格式	特点与建议
PDF（矢量）	无限放大不失真，文字可选中。适合 LaTeX、多数期刊投稿和打印。
SVG（矢量，可编辑）	文字保留为文字，可以在 Adobe Illustrator、Inkscape 中继续修改，也可以插入网页。
TIFF	期刊最常要求的位图格式，建议 600 dpi（线条图可用 1200 dpi），LZW 无损压缩。
PNG	适合 PPT、Word、网页；300 dpi 一般足够。

- 导出窗口中可以直接修改图的宽度和高度（厘米）。图片里记录的 dpi 与选择的一致，插入 Word 后就是设定的物理尺寸。
- **文件 → 复制图**（`⌥⌘C`）把图以矢量 PDF + 300 dpi PNG 同时放到剪贴板，在 Word、PowerPoint、Keynote 中直接粘贴即可。

> 期刊对图片的一般要求：线宽不小于 0.5 pt，文字 6–8 pt 以上，单栏约 8–9 cm、双栏约 17–19 cm。使用“期刊预设”可以一次满足。

16　项目、撤销与语言

项目文件

- `⌘S` 保存、`⇧⌘S` 另存为、`⌘O` 打开、`⌘N` 新建项目。项目文件扩展名为 `.chemplot`，包含所有工作表、图、拼版和分析结果。
- 窗口标题显示“已编辑”表示有未保存的修改；关闭或退出前会提示保存。
- 新版本可以打开旧版本保存的项目文件。

撤销与重做

- `⌘Z` 撤销、`⇧⌘Z` 重做，最多 100 步。导入、绘图、分析、修改格子、修改格式、拼版等操作都可以撤销。
- 一次操作产生的多处修改（例如基线校正同时添加两列和两条曲线）一步撤销；在检查器里连续输入同一项（如逐字输入标题）也合并为一步。
- 正在文本框里输入时，`⌘Z` 先撤销文本框里的文字。

界面语言

在 **语言** 菜单中选择“跟随系统 / 中文 / 日本語 / English”，界面和全部菜单（包括“文件”“编辑”“窗口”等系统菜单）立即切换；只有“打开 / 保存”对话框等由 macOS 提供的窗口在重新启动软件后切换。

项目文件夹

左侧栏是 Origin 式的项目管理器，可以用文件夹整理工作表、图和拼版：

- 右键（或侧栏底部的 + 菜单）**新建文件夹**，文件夹可以嵌套；右键可以重命名、移到其他文件夹、删除（删除文件夹时里面的东西移到上一级，不会删除数据）。
- 把工作表、图**拖到文件夹上**即可移动；拖到空白处移回顶层。
- 打开（选中）一个文件夹时，新建的工作表、图以及分析结果都放进这个文件夹；侧栏底部显示当前文件夹。
- 侧栏顶部的搜索框按名字查找。

17　快捷键一览

快捷键	功能	快捷键	功能
⌘N	新建项目	⇧⌘N	新建工作表
⌘O	打开项目	⌘I	导入数据
⌘S	保存项目	⇧⌘S	项目另存为
⌘E	导出图 / 拼版	⌥⌘C	复制图到剪贴板
⌘Z	撤销	⇧⌘Z	重做
⇧⌘V	从剪贴板粘贴数据	⌘?	打开用户手册
⌥⌘1	折线图	⌥⌘2	散点图
⌥⌘3	点线图	⌥⌘4	柱状图
⌥⌘5	双 Y 轴图	⌥⌘L	新建多图拼版
⌥⌘B	基线校正	⌥⌘P	找峰
⌥⌘F	曲线拟合	⌥⌘M	多峰拟合
⌥⌘6	堆积柱状图	⌥⌘7	面积图
⌥⌘8	棒状图（垂线）	⌥⌘9	热图 / 等高线图
⌥⌘H	直方图	⌥⌘=	设置列值（公式）
⌥⌘0	箱线图	⌥⌘Y	非线性曲线拟合
⌥⌘K	脚本窗口	⌥⇧⌘N	新建文件夹
⌥⇧⌘C	复制格式	⌥⇧⌘V	粘贴格式
⌘↩	运行脚本（脚本窗口）	⌘.	停止脚本
⌘R	重新缩放（显示全部数据）		

⌘ = Command，⌥ = Option，⇧ = Shift。

鼠标操作

操作	作用
单击图中元素	选中坐标轴、曲线、图例或标题
双击图中元素	打开检查器并编辑该元素
拖动图例	把图例移到任意位置
拖动注释	移动文字、箭头、参考线
双击拼版中的子图	打开那张图编辑
拖动自由拼版中的图 / 蓝色角	移动 / 缩放
在三维图里拖动	旋转视角
触控板双指捏合	缩放图（以手指位置为中心）
在侧栏里拖动项目到文件夹	移到该文件夹
双击工作表格子	编辑数值或表头
拖入文件	导入数据或打开项目

18　常见问题

打开时提示“无法验证开发者”或“已损坏”

见 第 1 章：**系统设置 → 隐私与安全性 → 仍要打开**。

导入后提示“无法读取数值数据”

- 确认文件里的数据是按列排列的数字；如果是 `.xls` ，请在 Excel 中另存为 `.xlsx` 或 CSV。
- 仪器专有的二进制格式（如 `.spa` 、 `.raw` ）不能直接读取，请在仪器软件中导出为 TXT / CSV。
- 也可以在 Excel 或仪器软件里复制数据，用 `⇧⌘V` 粘贴。

长名称和单位识别错了 / 列类型不对

在工作表检查器中直接修改；或把文件整理成“长名称 / 单位 / 注释”三行表头后重新导入。

画出来的曲线 X 轴不对

Y 列总是画在它左边最近的 X 列上。检查列类型，必要时用 **列 → 设为 X** 修改，然后重新绘图。

拟合失败

- 峰拟合时勾选“只拟合一段 X 范围”，范围内只保留一个峰；
- 换一个模型试试，或先做基线校正 / 平滑；
- 多峰拟合时调高最小突出度，减少被当成峰的噪声。

图里的中文显示为方框或字体不对

在“页面 → 字体”中选择 PingFang SC、Hiragino Sans 或 Songti SC 等含中文的字体。导出 SVG 到其他电脑时，如果对方没有相同字体会自动替换为相近字体。

激活时提示“这个激活码是给另一台电脑的”

激活码和机器码一一对应。请确认发给作者的是 **这台电脑** 的机器码（**帮助 → 购买与激活…** 里显示的那一串）。

激活时提示“激活码不完整”

激活码比较长，请从 `CPL1.` 开始完整复制到最后一个字符。邮件里自动换行没有关系，空格和换行会被自动去掉。

“打开 / 保存”对话框没有切换语言

这些对话框由 macOS 提供，只在软件启动时决定语言。切换语言后重新启动 ChemPlot 即可；菜单不需要重启。

能打开 Origin 的 .opju 项目吗?

不能，.opju 是不公开的格式。请在 Origin 中把工作表导出为 CSV 或 Excel，再导入 ChemPlot。

撤销不了某个操作

打开或新建项目后，撤销历史会重新开始；只保留最近 100 步。

19 附录

示例数据

文件 → 打开示例数据 中的文件都是公开数据库或开源项目中的真实测量数据，可用来熟悉各项功能：

文件	内容
XRD_TiO2_rutile_anatase.csv	金红石 + 锐钛矿 TiO_2 粉末 XRD（Cu Kα）
IR_*_NIST.jdx、IR_4_compounds_NIST_XYXY.csv	甲醇、乙醇、苯、甲苯的气相红外透过率谱（NIST）
UVVis_toluene_NIST.jdx	甲苯紫外吸收谱（log ε，NIST）
CV_CHI1040C_curcumin_raw.txt	辰华 CHI1040C 电化学工作站原始导出的循环伏安数据
TGA_cellulose_10Kmin_raw.txt	纤维素热重原始导出（含仪器信息行）
TGA_cellulose_T50_vs_heating_rate.csv、TGA_cellulose_KAS_plot.csv	不同升温速率下的 T_{50}（平均值 ± 标准差）与 KAS 动力学作图数据
NIST_StRD_*.csv	NIST 回归认证数据集（线性、二次、Box–Lucas），文件头含认证值

项目文件格式

`.chemplot` 是 UTF-8 编码的 JSON 文本，包含工作表数值、表头、图和拼版的全部设置。必要时可以用任何文本编辑器查看。

已知限制

- 不支持旧版 Excel `.xls`（二进制格式）和 Origin `.opju`。
- 脚本语言是 JavaScript，不兼容 Origin 的 LabTalk / originpro Python 脚本。
- 三维图为正交投影，暂不支持透视。
- 方差分析支持单因素和双因素，暂不支持重复测量方差分析和三因素以上。
- 分类 X 轴的标签较长时不会自动倾斜，请缩短名称或加宽图。
- 当前安装包未经 Apple 公证，首次打开需在“隐私与安全性”中允许。
- 试用期结束后，保存项目、导出图和复制图需要激活。
- 导出的 PDF、SVG、PNG、TIFF 文件的文件信息里会写入软件版本和授权信息（授权人名称和机器码，或“试用版”），图片本身的外观不受影响。

20　软件许可协议

ChemPlot（以下简称“本软件”）的著作权及其他一切知识产权归本软件作者（以下简称“作者”）所有，受著作权法及相关国际条约保护。安装、复制或使用本软件，即表示您同意本协议的全部条款；如不同意，请勿安装或使用本软件。

第 1 条　试用

您可以免费试用本软件 7 天。试用期结束后，保存项目、导出图片、复制图片等功能需要购买授权后才能使用。

第 2 条　授权范围

购买授权后，作者授予您非独占、不可转让的使用许可：

（1）授权与激活时登记的一台电脑（以机器码识别）绑定，只能在该电脑上使用；

（2）授权限于激活码中登记的个人或单位使用；

（3）授权期限以激活码记载为准（永久或至指定日期）。

更换电脑、增加电脑或续期，请联系作者。

第 3 条　禁止事项

未经作者书面许可，您不得：

（1）复制、出租、出借、转售、转让、再许可本软件或激活码，或将激活码提供给他人；

（2）对本软件进行反向工程、反编译、反汇编，或修改本软件的程序文件；

（3）规避、破坏、删除本软件的授权验证、试用期限制等技术保护措施，或制作、传播用于上述目的的程序或方法；

（4）删除或修改本软件中的著作权声明，或本软件写入导出文件的软件与授权信息；

（5）以本软件为基础开发、销售相同或类似的产品。

第 4 条　您的数据和成果

您使用本软件处理的数据，以及用本软件制作的图片等成果，其权利归您所有。本软件不会收集或上传您的数据；激活过程不需要联网。

为便于识别授权，本软件会在导出的 PDF、SVG、PNG、TIFF 文件的文件信息中写入软件版本和授权信息（授权人名称及机器码，或“试用版”字样）。

第 5 条　免责声明

本软件按“现状”提供。作者已尽合理努力保证计算结果的正确性，但不保证本软件没有错误，也不保证其适用于特定目的。对于使用或无法使用本软件造成的任何直接或间接损失（包括数据丢失、研究结果错误等），在法律允许的范围内，作者不承担责任。请对重要结果自行验证，并做好数据备份。

第 6 条　协议终止

您违反本协议任何条款时，授权自动终止，您应停止使用并删除本软件。作者保留依法追究责任的权利。

第 7 条　其他

本协议的解释和适用以作者所在地的法律为准。本协议的条款如有部分无效，不影响其余条款的效力。