

## 新しい大気補正機能とその効果

### New Technique of Atmosphere Correction and its Effect

赤外スペクトルの測定においては、大気中の水蒸気や二酸化炭素の吸収が試料の赤外スペクトルに重なって、スペクトルを解析する上で妨害成分となる場合がたびたび起こります。

これはバックグラウンド測定時の雰囲気状態がサンプル測定時に変化した場合に起こるもので (Fig.1(1),(2))、これを改善するためには、装置内部を乾燥空気や窒素ガスでパージしたり、測定後に水蒸気や炭酸ガスのスペク

トルを用いて差スペクトル法によって除去したりする方法が一般的に用いられます。

新しいソフトウェア「IRsolution」には、このような特別な前準備や煩雑なデータ処理を必要とせず、自動的なデータ処理によって大気成分のスペクトルを除去する機能が標準で内蔵されていますので、その機能と効果をご紹介します。

S.Takeuchi

### 大気補正機能の概略

#### Outline of Atmosphere Correction

大気補正処理の流れは概略以下ようになります。まず、バックグラウンドのスペクトルから、特殊な計算によって水蒸気や炭酸ガスなどの大気成分を反映したスペクトル波形を算出します。次にこのスペクトル波形を用いて、バックグラウンド測定時との差によって生じる大気成分の影響を除去します。これらすべての処理は自動化されていますので一瞬で結果が表示されます (Fig.1(3))。

この手法は、固定の基準スペクトルを用いる差スペクトル法とは異なり、バックグラウンド測定時のスペクトルを使用して、その時点での雰囲気状態を反映した処理を行うため、使用する付属装置の種類に関係なく、より精度の高い補正が可能です。

### データのトレーサビリティ

#### Traceability of Data File

大気補正機能は測定時に実行する場合と測定終了後にデータ処理として行う場合のいずれかを選択することができます。「IRsolution」では測定されたデータには、バックグラウンドとサンプルのインターフェログラムと一緒に保存され、データ処理を行った場合は元データに関連付けて処理後のファイルが保存されますので、いずれの場合も補正なしの生データを再現することができます。

以下に異なる測定法における水蒸気ピークの補正例をご紹介します。

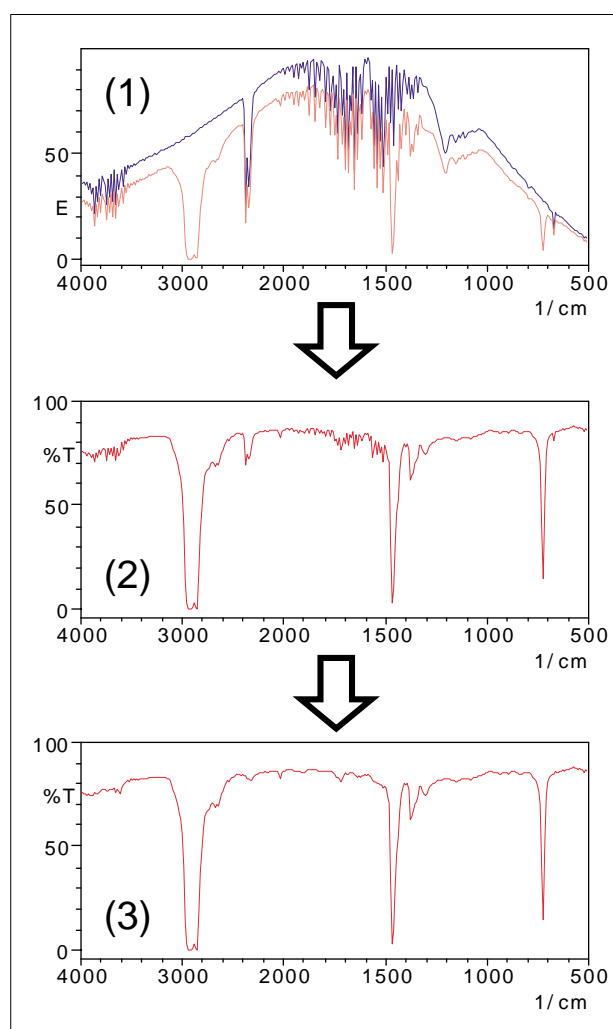


Fig.1 スペクトル処理の過程  
Process of calculating spectra

## 赤外顕微鏡測定における補正例

Example in Microscopic Measurement

赤外顕微鏡の透過測定において得られたポリプロピレンフィルムのスペクトルに対して、大気補正を行った例を示します。Fig.2はバックグラウンドのスペクトル、Fig.3は補正前と補正後のスペクトルを重ねたものです。Fig.4には高波数側と低波数側を拡大した図を示しました。ピークの分解を落とすことなく水蒸気成分のみ除去できていることがわかります。

Table 1 分析条件  
Analytical Conditions

Resolution	: 4cm <sup>-1</sup>
Accumulation	: 40
Detector	: MCT
Aperture	: 50 × 50 μm

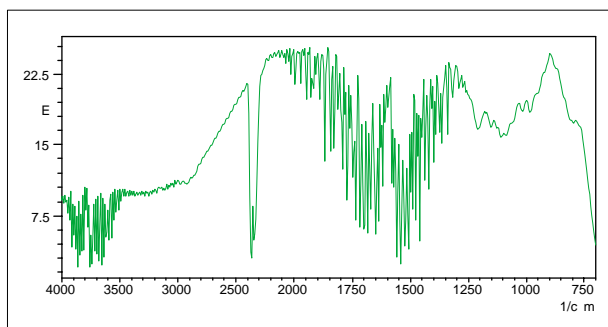


Fig.2 赤外顕微鏡透過法のバックグラウンドスペクトル  
BKG Spectrum of Microscopic Transmission Measurement

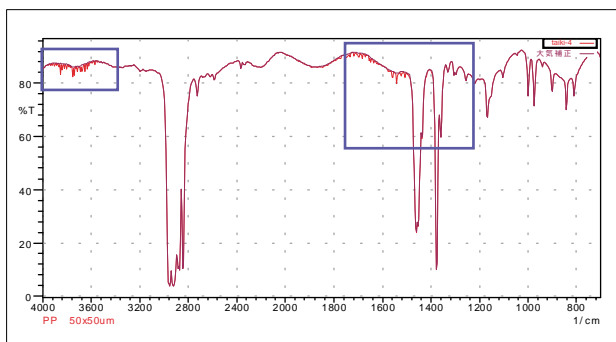


Fig.3 赤外顕微鏡透過測定での補正例  
Spectra of Microscopic Transmission Measurement before Correction and after Correction

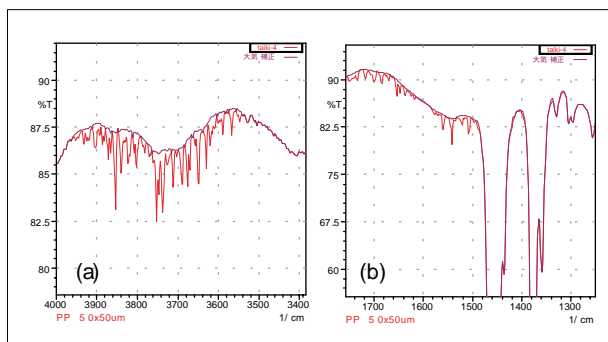


Fig.4 Fig.3の拡大図  
Enlarged Fig.3 in High Wavenumber Range(a) and Low Wavenumber Range(b)

## 1回反射ATR測定における測定例

Example in Single Reflection ATR Measurement

ダイヤモンドプリズムを使用した1回反射ATR装置 (DuraSAMPLIR II) を用いて測定したポリエチレンフィルムのスペクトルに対して大気補正を行った例を示します。Fig.5はバックグラウンドのスペクトル、Fig.6は補正前と補正後のスペクトルを示したものです。

バックグラウンドスペクトルの形状が変わっても、水蒸気の影響がきれいに補正できていることがわかります。

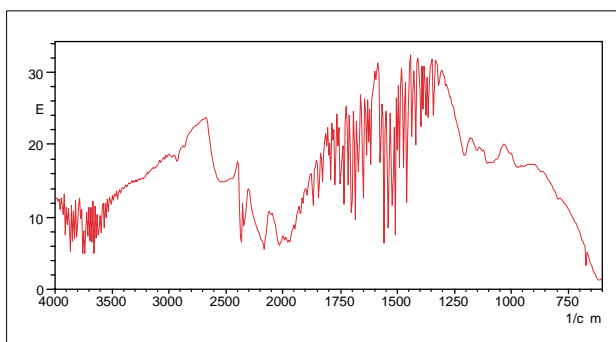


Fig.5 1回反射ATRのバックグラウンドスペクトル  
BKG Spectrum of Single Reflection ATR

Table 2 分析条件  
Analytical Conditions

Resolution	: 4cm <sup>-1</sup>
Accumulation	: 40
Detector	: DLATGS

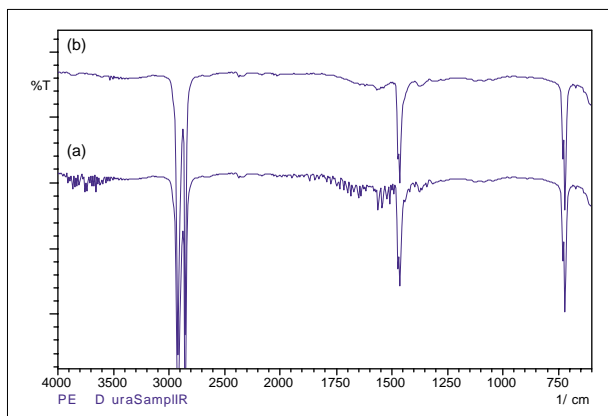


Fig.6 1回反射ATR測定での補正例 (a)補正前 (b)補正後  
Spectra of Single Reflection ATR before Correction(a) and after Correction(b)

**島津製作所** 分析計測事業部  
応用技術部

島津分析コールセンター

●東京 ☎(03)3219-1691  
●京都 ☎(075)813-1691

いろいろな分析アプリケーションニュース類は  
<http://www.an.shimadzu.co.jp/support/support.htm>  
でご覧いただけます。

会員情報提供サービス「Shim-Solutions Club」にご登録下さい。  
<http://solutions.shimadzu.co.jp/>  
いろいろな情報提供サービスが受けられます。

3100-02316-17A-IK  
2003.3