

Prosta korekta widma w podczerwieni

(Wykonanie ćwiczenia za pomocą programu OPUS)

1. W celu dokonania korekty linii podstawy należy:

- Przenieść swoje widmo z komputera obsługującego spektrometr na swój komputer. Założyć kartotekę na swoje pliki. Nazwać ją według następującego schematu: C:\USR\MK\NAZWA_SWOJA (nazwa swojej kartoteki jest dowolna). Uwaga, pliki leżące w innych miejscach będą nieodwracalnie kasowane (w szczególności dotyczy to „pulpitu”).
- Otworzyć widmo i ocenić, czy i jakiej wymaga korekty (wyobrazić sobie przebieg linii zerowej (zera absorbancji)).
- Uruchomić opcję w menu: Manipulate/Baseline Correction.
- W widocznym oknie zaznaczyć analizowany plik, a następnie kliknąć opcję: Start Interactive Mode.
- Wybrać funkcję opisującą linię bazową klikając odpowiednią ilość punktów (zwykle dobry okazuje się wielomian piątego lub szóstego stopnia). W lewym górnym rogu zaznaczamy sposób łączenia punktów klikając opcję: Polynomes. W górnym oknie, prawym klawiszem myszy tworzymy odpowiednią ilość punktów leżących na wyobrażonej linii bazowej. Należy pamiętać, że funkcja ta będzie odejmowana od naszego widma, w związku z czym nie powinna się z nim przecinać.
- Położenia punktów korygujemy (przesuwając lewym przyciskiem myszy) aż dolny rysunek będzie zadowalający.
- Naciśnięcie Store spowoduje dokonanie korekty widma.
- Tak poprawione widmo zapisać na dysku pod **nową** nazwą.

2. W celu wygładzenia szumów należy:

- Otworzyć widmo i ocenić, czy i jakiej wymaga korekty (powiększyć fragment widma w obszarze, w którym nie ma intensywnych pasm i ocenić poziom szumów).
- Uruchomić opcję w menu: Manipulate/Smooth.
- W widocznym oknie zaznaczyć analizowany plik, a następnie kliknąć opcję: Start Interactive Mode.
- Poprzez przesuwanie kursora po lewej stronie okna podać Number of smoothing points (ilości sąsiednich punktów, które jednocześnie procedura

bierze pod uwagę). Należy poeksperymentować z tym parametrem, porównując wynik wygładzenia (dolne okno) z widmem oryginalnym (górne okno) – pasma nie powinny zmienić kształtu a jedynie powinna zmniejszyć się tzw. „trawka”.

- Naciśnięcie `Store` spowoduje dokonanie korekty widma.
- Tak poprawione widmo zapisać na dysku pod **nową** nazwą.

3. W celu usunięcia pasm uznanych za zakłócenie należy:

- Otworzyć widmo i ocenić, czy i jakie pasma są artefaktami (porównać je z widmem typowych zanieczyszczeń zamieszczonym w instrukcji).
- Uruchomić opcję w menu: `Manipulate/Straight Line Generation`.
- W zakładce `Select Files` zaznaczyć analizowany plik.
- W zakładce `Frequency Range` wybrać opcję `Interactive`.
- Zaznaczyć obszar widma, który chcemy wykasować, przesuwając brzegi białego obszaru. Po kliknięciu `OK`, a następnie `Generate`, zaznaczony fragment zostanie zamieniony w widmie na linię prostą.
- Tak poprawione widmo zapisać na dysku pod **nową** nazwą.

Wszystkie użyte zabiegi na widmie należy zanotować i zamieścić opis przeprowadzonej korekty w sprawozdaniu wraz ze skorygowanym widmem.