

Peak Spectroscopy (Essential FTIR)



FT-IR、Raman、NIR、UV-vis データ処理、ライブラリー検索、回帰分析

データ処理

- ATR/Advanced ATR ●KK変換 ●Ramanシフト ●Xシフト ●X Unit変換 ●Y Unit変換
- Zap ●インターフェログラムからFTIRスペクトルへの変換 ●スムージング ●積算 ●デコンボリューション
- トランケート ●ノーマライズ ●ピークピック ●微分 ●ベースライン補正 ●補間

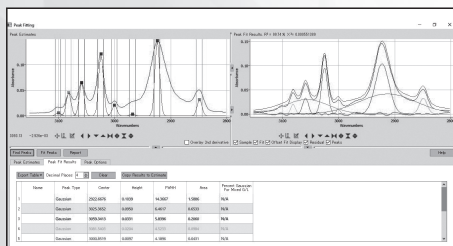
データの解析

- ・ピークフィッティング(ピーク分離)
- ・PLS(Partial Least Squares)、PCA(Principle Component Analysis)、CLS(Classical Least Squares)
- ・スペクトラルライブラリー検索

ピークフィッティング(ピーク分離)の例

ピーク形状

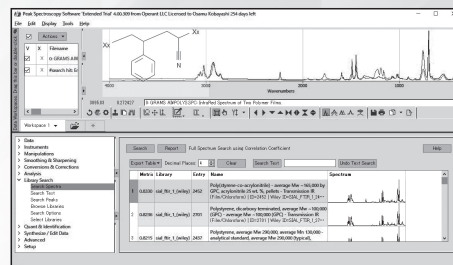
- ・ガウス
- ・ローレンツ
- ・フォークト
- ・ガウス/ローレンツ混合(任意の比率)



ライブラリー検索例

使用できるライブラリーフォーマット

- ・Spectral ID (Thermo)
- ・Win First (Mattson) 他



ライブラリー：(eFTIRライブラリーの他にSpectral ID、Win First(Mattson)ライブラリーも検索可能)

- ・Sigma-Aldrich Library of FT-IR Spectra, 11,000 spectra
 - ・Sigma-Aldrich Library of ATR-IR Spectra, 18,500 spectra
 - ・Sigma-Aldrich Library of Raman Spectra, 6,300 spectra
- 検索アルゴリズム：相関係数、ユークリッド距離、絶対差、一次微分、テキスト検索

サポートするファイル

Read(Import)

- A2/Agilent (*.a2r)
- Andor Raman (*.sif)
- ASCII Text (*.txt, *.csv)
- Bruker Opus (*.O, *.1,, *.9)
- BWTech Raman (*.txt)
- Foss (*.nir)
- J-camp DX (*.dx)
- Perkin Elmer Spectrum One/Two (*.sp)
- Sadtler Wiley KnowItAll (*.irf)
- Shimadzu IRsolution (*.smf)
- Thermo Fisher OMNIC (*.spa)
- Thermo Galactic GRAMS (*.spc)

Write(Export)

- ASCII Text (*.csv)
- Bruker OPUS (*.O)
- Excel (*.xls)
- J-camp DX (*.dx)
- MATLAB (*.mat)
- Perkin-Elmer (*.sp)
- Thermo Galactic GRAMS (*.spc)

制作：Operant (U.S.A)

株式会社 デジタルデータマネジメント

〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町1-11-8 紅萌ビル
TEL.03-5641-1771 FAX.03-5641-1772
E-mail:tech@ddmcorp.com URL:http://www.ddmcorp.com