

Application News

No. A514

光吸收分析
Spectrophotometric Analysis

使用 AIMsolution 软件进行区域成像的介绍

Introducing Area Imaging with AIM-9000 and AIMsolution

红外显微镜 AIM-9000 的操作软件 AIMsolution 配置 Mapping 程序(选购件)。通过该程序可进行点扫描和面扫描。并且在同一窗口可简单地样品的图像拍摄、扫描范围、光阑大小以及扫描间隔等设置。通过 Mapping 程序能够进行待测样品成分的面内分布的范围扫描, 以及有助于纵轴方向分析的线扫描, 以对样品中的微小区域进行详细分析。

本文向您介绍使用 AIMsolution 的 Mapping 程序进行范围扫描的示例。

■ 测定样品

Measurement Sample

本次采用透射法对由多种成分构成的药物粉末进行了范围扫描。首先将样品放入金刚石样品池, 然后压制成为适合透射测定的厚度。将样品池安装在样品台上进行范围扫描。

图 1 为样品整体的可视图像。由图可知, 样品上存在颜色不同的部分, 可以推测样品中可能混合有多种成分。

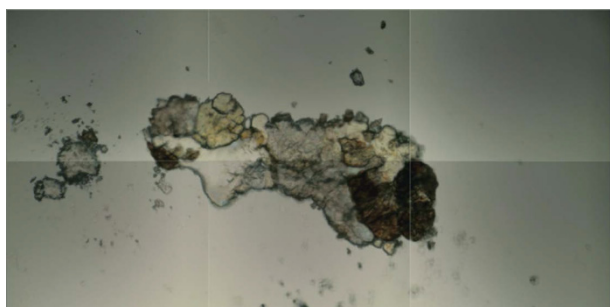


图 1 样品的可视观察图像
Visible Image of Sample

对样品在纵向 375 μm $\times$ 横向 600 μm 的范围进行扫描。图 2 为扫描范围。在各扫描位置上设置了 25 μm $\times$ 25 μm 的光阑。蓝框表示各位置的的光阑, 由此对目标范围进行面扫描。黄框表示背景位置。背景扫描的光阑尺寸会自动设为样品扫描的光阑尺寸。

表 1 为分析条件。

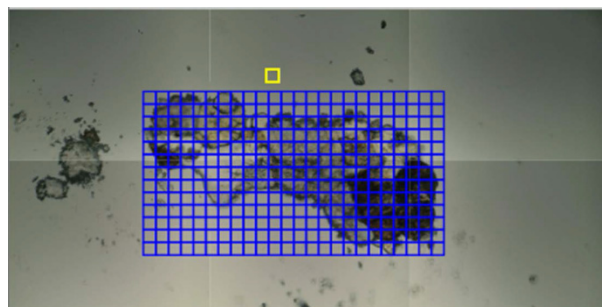


图 2 设置扫描范围后的视图
Image Displayed after Measurement Area Selection

表 1 FTIR 的分析条件
FTIR Measurement Conditions

仪器	: IRTracer-100 / AIM-9000
分辨率	: 8 cm^{-1}
扫描次数	: 2
变迹函数	: Sqr-Triangle
光阑	: 25 μm $\times$ 25 μm
扫描间隔	: 25 μm
检测器	: MCT

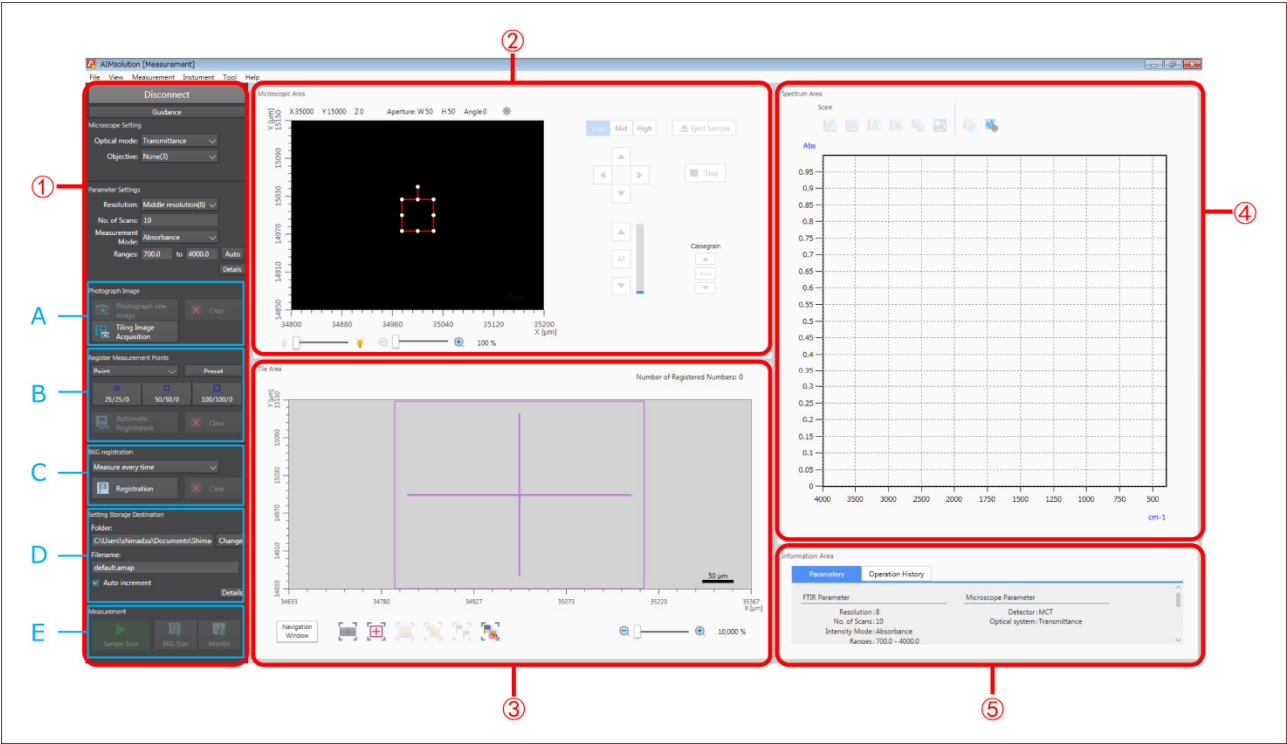


图 3 测定程序的设置窗口
Measurement Program Configuration Window

■ 测定步骤
Measurement Procedure

图 3 为 AIMsolution 的测定程序窗口。窗口大体分为以下五个部分：

- ① Measurement Parameter Configuration Area
进行参数设置。
- ② Microscope Area
显示显微图像。样品台移动和焦点调整均通过该区域的按钮进行操作。
- ③ Tile Area
排列显示通过显微镜拍摄得到的图像。
(排列显示称为“平铺”)
范围扫描的位置设置也主要在该区域进行。
- ④ Spectrum Area
显示得到的光谱。
- ⑤ Information Area
该区域显示所设参数或记录等信息。

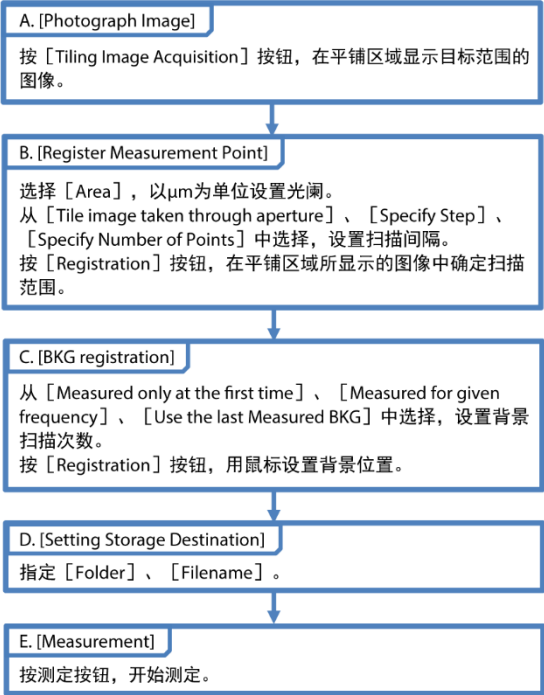


图 4 测定步骤流程图
Flowchart of Sample Measurement

由此在一个窗口即可显示所需信息，并可操作显微镜。

图 4 为扫描步骤的流程图。

由图可知，AIMsolution 的范围扫描设置非常简单。在扫描参数设置区域按照 A~E 的顺序进行即可。

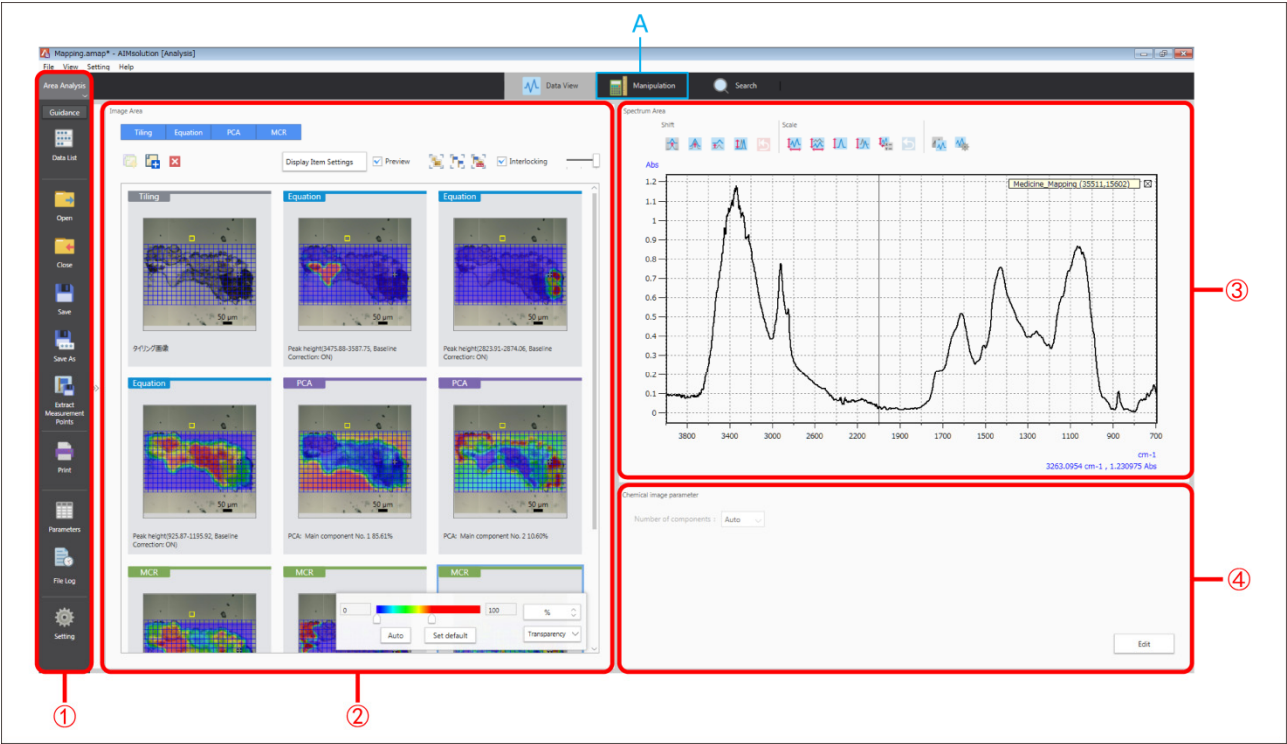


图 5 范围扫描窗口
Area Data Analysis Program Window

■ 范围分析（范围扫描结果的分析）
Area Data Analysis (Data Analysis of Area Measurement Results)

使用分析程序的范围分析进行范围扫描结果的分析。范围分析窗口如图 5 所示。

分析窗口大体分为以下四个部分：

- ① Toolbar
配置有工具图标。
- ② Image Area
显示平铺图像和分析结果（计算结果）。
分析结果称为化学成像。
- ③ Spectrum Area
显示扫描点的光谱、多变量分析的载荷光谱和成分光谱。
- ④ Chemical Image Parameter
显示和编辑分析（计算）时使用的参数。
可向峰高或峰面积输入波数范围，在多变量分析中输入系数。

对数据进行预处理时，按图 5 (A) 的数据处理按钮切换窗口。程序中有“基线校正”、“大气校正”、“高级 ATR 校正”，“克拉默斯·克罗尼格分析”、“差分（差谱计算）”等 5 种预处理方法。

在标准设置下，范围扫描的分析结果将按照数值的大小显示。红色为数值较大的位置，蓝色为数值较小的位置。

作为化学成像的计算公式，包括“指定位置的强度”、“指定位置的强度比”、“峰高”、“峰高比”、“峰面积”、“峰面积比”、“匹配度”。

化学成像还可进行多变量分析。多变量分析方法有 PCA（Principal Components Analysis/主成分分析）、MCR（Multivariate Curve Resolution/多变量光谱分离法）。PCA、MCR 无需设置繁琐的参数，只需点击即可进行分析。

图 6 为化学成像示例。该图像根据 3500 cm⁻¹ 附近 OH 基的峰高绘制而成。由图可知，在样品的左侧区域中大量存在带 OH 基的成分。由此可以通过化学成像一目了然地显示成分分布状况。

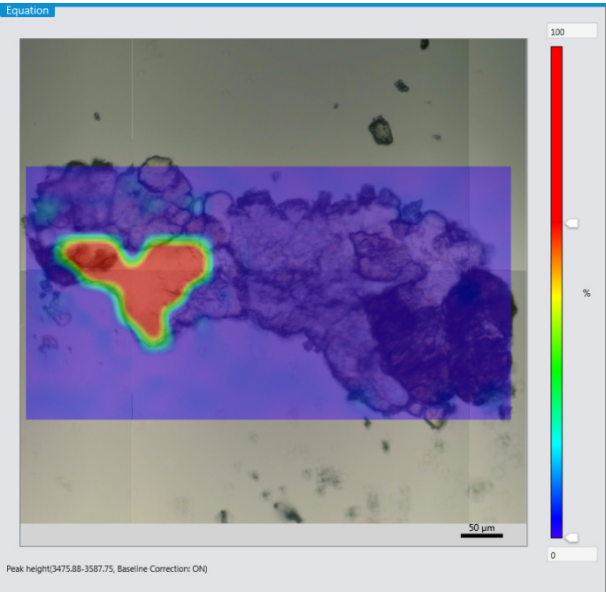


图 6 化学成像示例
An Example of Chemical Imaging

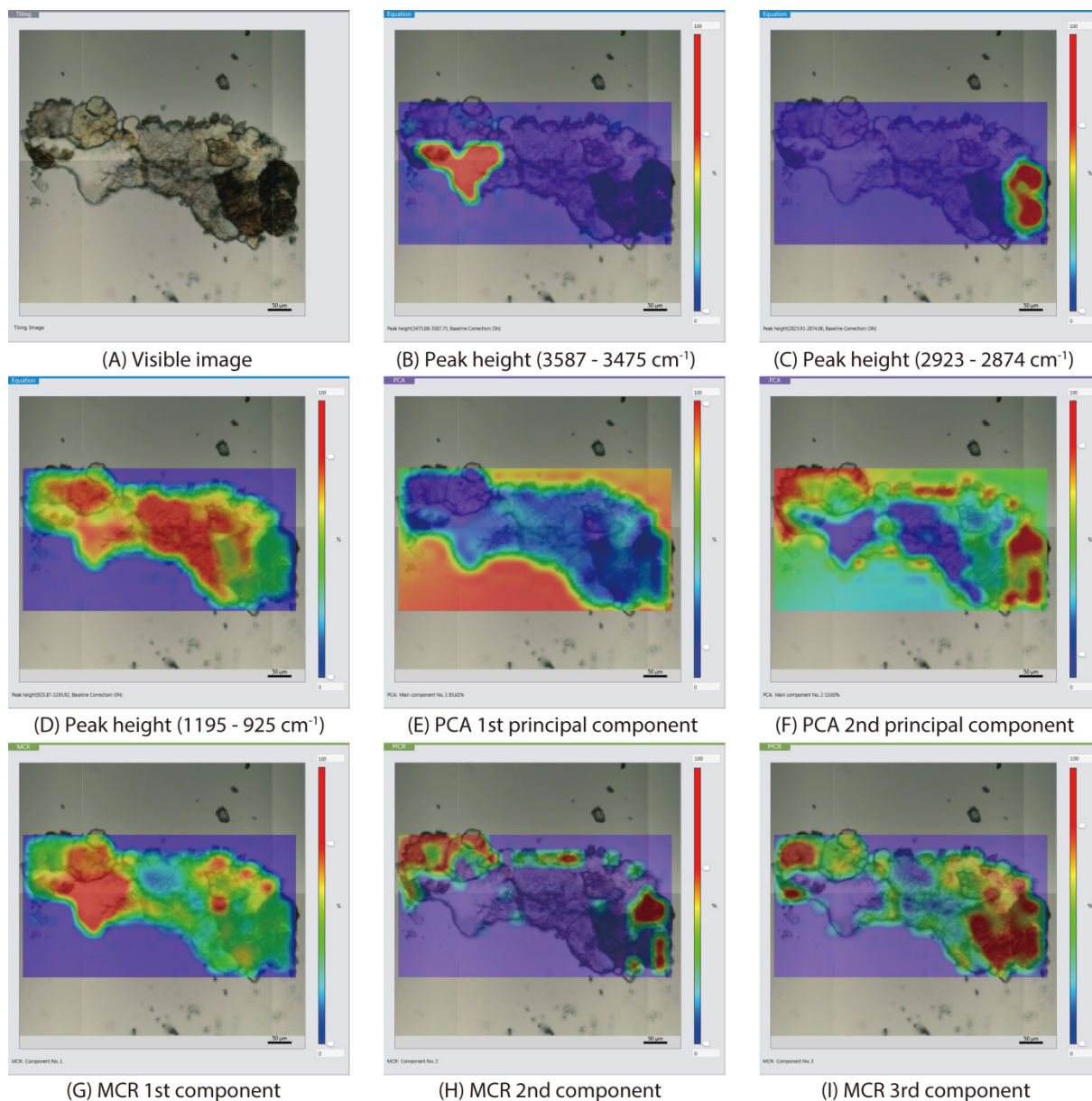


图 7 样品的化学成像
Chemical Imaging of Sample

分析结果

Results of Data Analysis

图 7 为使用多种方法得到的样品化学成像。

自左上角起依次为 (A) 可视观察图像、(B) 3587~3475 cm^{-1} 的峰高、(C) 2923-2874 cm^{-1} 的峰高、(D) 1195-925 cm^{-1} 的峰高、(E) PCA 第 1 主成分、(F) PCA 第 2 主成分、(G) MCR 第 1 成分、(H) MCR 第 2 成分、(I) MCR 第 3 成分。

图 7 中的 (B) 为 OH 基的吸收、(C) 为 CH 基的吸收、(D) 为 CO 基的吸收、(E) 为与样品所有数据平均值之间的差。此外，通过 (D)、(G) 可知，尽管该样品存在浓度差，但有整体存在的成分。而且通过 (C)、(F)、(H)、(I) 可以判断，右端部分可能存在与其他成分不同的成分。

总结

Conclusion

综上所述，通过 AIMSOLUTION 的范围扫描不仅可以显示峰高和面积，而且还可显示基于 PCA、MCR 等多变量分析结果的多种绘制图像。



岛津企业管理（中国）有限公司
岛津（香港）有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话： 800-810-0439
400-650-0439

免责声明：

※ 本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售；
※ 本资料中的所有信息仅供参考，不予任何保证。
如有变动，恕不另行通知。

第一版发行日：2016 年 11 月