

ขั้นตอนการใช้งาน FT-IR

ยี่ห้อ Bruker รุ่น Tensor 27



User Manual

REFERENCE

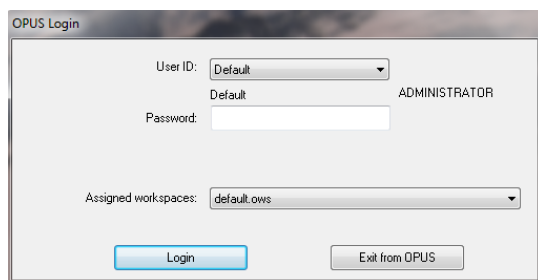
### ขั้นตอนการเปิดเครื่อง

- ตัวเครื่องจะเปิดไว้ตลอดเวลาเพื่อป้องกันความชื้นที่เกิดขึ้นภายในเครื่องซึ่งมีผลต่อการวิเคราะห์
- เปิดคอมพิวเตอร์เพื่อเข้า Software OPUS ดังนี้

## OPUS SOFTWARE

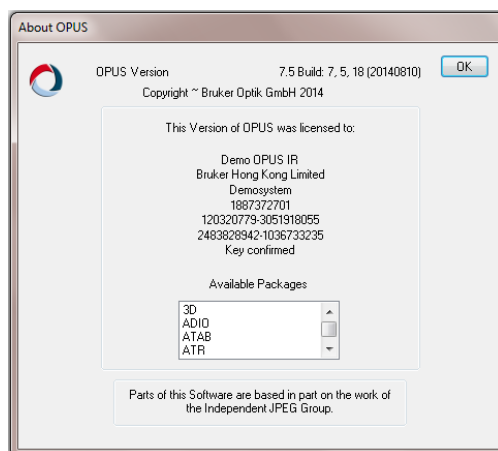
### 1. การเข้าโปรแกรม OPUS

- คลิกไอคอน  OPUS 7.5 เพื่อเข้าโปรแกรม
- คลิก **“Login”**



รูปที่1 แสดง OPUS Login

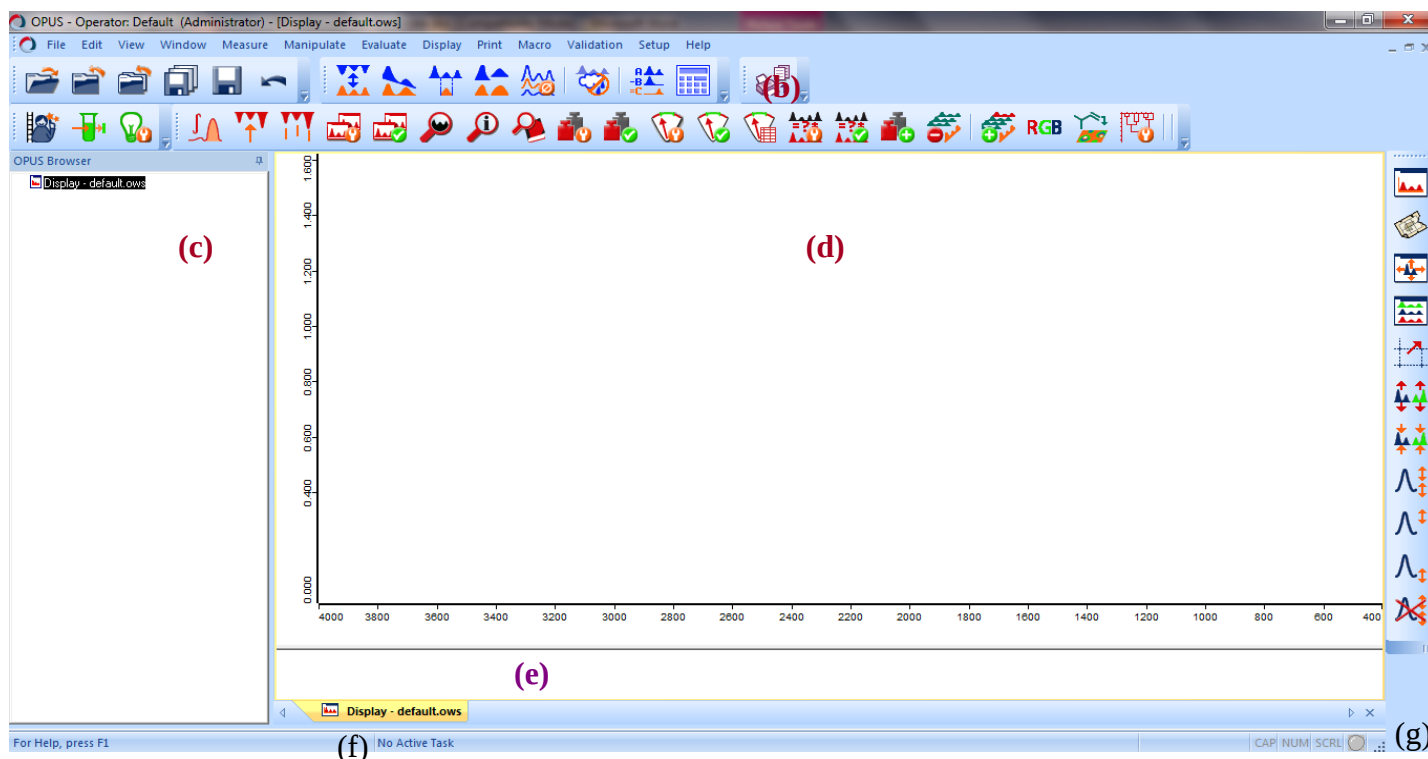
- จะปรากฏหน้าต่างที่แสดงเวอร์ชันของโปรแกรม, บริษัทที่มีลิขสิทธิ์, แพคเกจที่ใช้งาน ดังรูปที่ 2
- คลิกปุ่ม **“OK”** เพื่อเข้าสู่หน้าต่างการทำงานของโปรแกรม (workspace)



รูปที่2 แสดง About OPUS

ส่วนประกอบต่าง ๆ ในหน้าต่างการทำงานของ OPUS (OPUS workspace)

(a)



รูปที่3 แสดงหน้าต่างการทำงานของโปรแกรม OPUS (OPUS workspace)

- (a) แถบเมนูหลัก
- (b) ไอคอนของเมนูที่ใช้งาน
- (c) หน้าต่างBrowser เป็นหน้าต่างที่แสดงชื่อ IR spectrum
- (d) หน้าต่าง spectrum เป็นหน้าต่างที่ใช้แสดง IR spectrum
- (e) หน้าต่าง overview spectrum เป็นหน้าต่างที่ใช้แสดงช่วงทั้งหมดของ spectrum ที่ได้ทำการวิเคราะห์ไว้
- (f) แถบแสดงสถานะการวิเคราะห์
- (g) ไฟแสดงผลการเชื่อมต่อระหว่างเครื่องมือวิเคราะห์กับโปรแกรม OPUS
  - ไฟสีเทา : ไม่มีการเชื่อมต่อระหว่างเครื่องมือวิเคราะห์กับโปรแกรม OPUS
  - ไฟสีเขียว : มีการเชื่อมต่อระหว่างเครื่องมือวิเคราะห์กับโปรแกรม OPUS
  - ไฟสีเหลือง : การเตือนเพื่อให้ทำการทดสอบเครื่องมือ
  - ไฟสีแดง : มีความผิดพลาดของการเชื่อมต่อระหว่างเครื่องมือวิเคราะห์กับโปรแกรม OPUS

**หมายเหตุ** หน้าต่างโปรแกรม OPUS สามารถออกแบบใหม่เพื่อให้เหมาะสมกับการทำงานได้ และสามารถเก็บบันทึกไว้เป็นไฟล์นามสกุล “.ows”

## 2. หลักการใช้งานเบื้องต้นของโปรแกรม OPUS

### - การนำ spectrum ไปประยุกต์ใช้กับฟังก์ชันต่าง ๆ

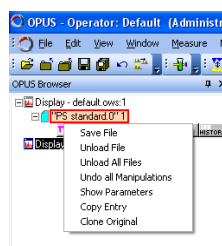
1. ต้องเลือกฟังก์ชันที่ต้องการโดยคลิกจากไอคอนของฟังก์ชันนั้น หรือเลือกจากแถบเมนูย่อย
2. ลาก data block ของ spectrum ที่อยู่ในหน้าต่าง browser ไปวางใน window สีขาว
3. คลิกปุ่ม OK หรือปุ่มที่ต้องการให้ active
4. ถ้าต้องการเปลี่ยน spectrum ใหม่ ให้นำเมาส์ไปคลิกที่ spectrum ที่ต้องการยกเลิก แล้วกดปุ่ม delete

### - OPUS Browser Window

รูปแบบและลักษณะการทำงานของ OPUS Browser Window จะคล้ายกับ window explorer OPUS Browser เป็นหน้าต่างที่แสดงจำนวนของ spectrum window, ชื่อ (filename) ของ IR spectrum, data block ต่าง ๆ เช่น result spectrum, single-channel sample spectrum, single-channel background spectrum, history และอื่นๆ

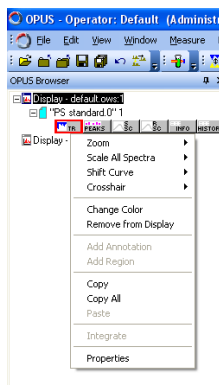
### - Right Clicking

1. ชื่อ spectrum (filename) จะแสดงแถบเมนูย่อยที่ใช้สำหรับเปลี่ยนแปลงหรือแก้ไข ไฟล์ spectrum ดังรูปที่ 4



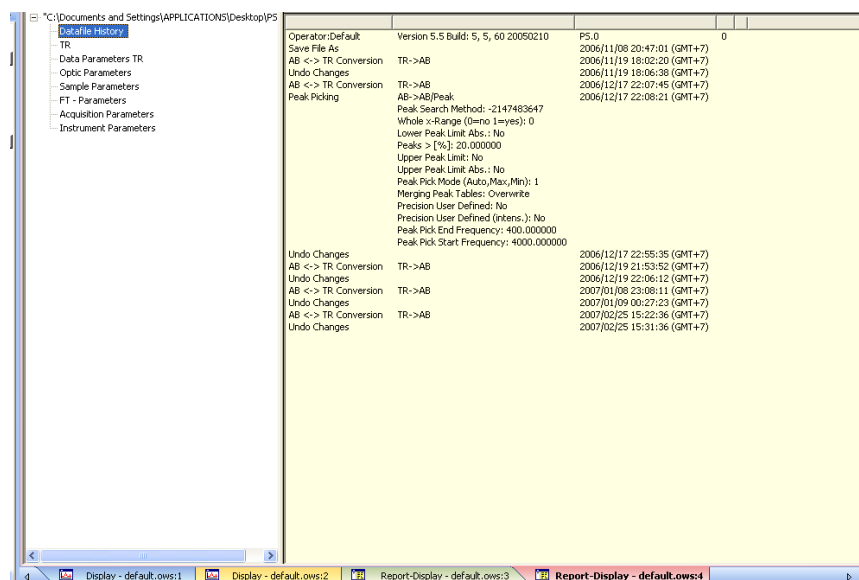
รูปที่ 4 แสดงเมนูย่อยเมื่อคลิกขวาที่ filename

2. data block “result spectrum” จะแสดงแถบเมนูย่อยที่ใช้ในการตกแต่งหรือแก้ไข spectrum ดังรูปที่ 5



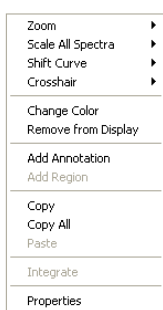
รูปที่ 5 แสดงเมนูย่อยเมื่อคลิกขวาที่ data block “result spectrum”

3. data block “history” ให้เลือก show report เพื่อต้องการให้แสดงข้อมูลทางด้านตัวเลขและข้อความ รวมทั้งประวัติของ spectrum นั้น ดังรูปที่ 6



รูปที่ 6 แสดง history report window

4. spectrum window จะแสดงแถบเมนูย่อยที่ใช้ในการตกแต่งหรือแก้ไข spectrum ดังรูปที่ 7 แสดง



รูปที่ 7 แสดง เมนูย่อยเมื่อคลิกขวาที่ spectrum window

**Zoom** คือ การย่อเข้าและขยายออกของ spectrum

**Scale all spectrum** คือ การขยาย spectrum ให้เต็ม spectrum window

**Shift curve** คือ การเลื่อนหรือขยับ spectrum

**Cross hair** คือ การแสดงเส้น cross hair

**Change color** คือการเปลี่ยนสีของเส้น spectrum

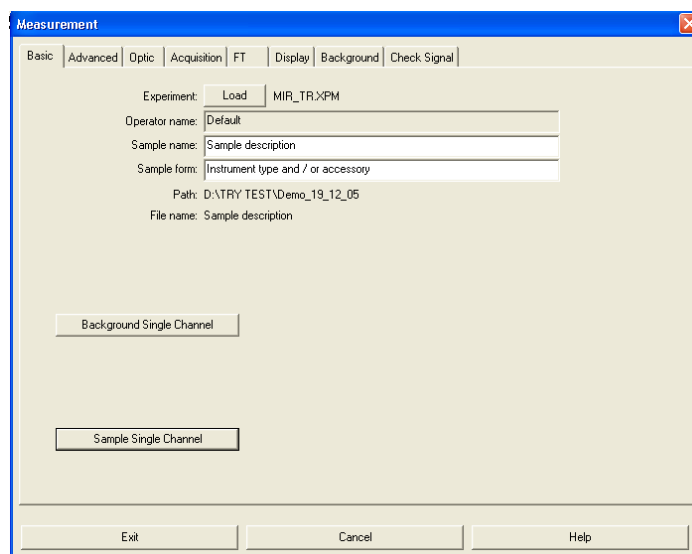
**Remove from display** คือ การย้าย spectrum ออก โดยไม่ให้แสดงที่ spectrum window

### 3. การวัด spectrum (Measurement)

#### 3.1 การวัด spectrum

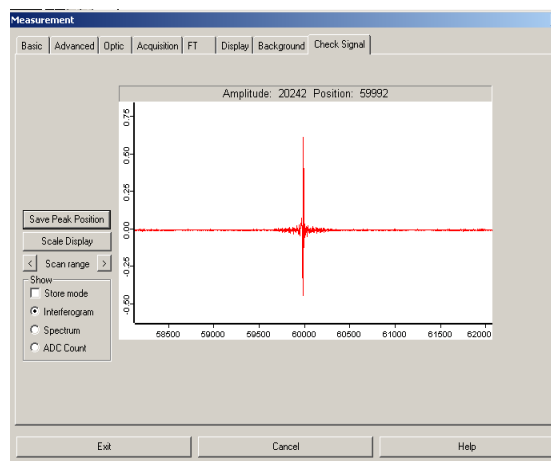
- เปิดหน้าต่างสำหรับวัด (measurement dialog box) ดังรูปที่ 8 โดยเลือกเมนู measurement แล้วคลิก

advance measurement ฟังก์ชัน หรือคลิกไอคอน advance measurement



รูปที่ 8 แสดง Measurement dialog box

- จากหน้าต่างแรกของ measurement dialog box (Basic) ให้เปิดไฟล์ experiment (นามสกุล .xpm) ที่ต้องการจะใช้วัด ข้อมูลต่าง ๆ เช่น path ที่เก็บไฟล์ spectrum, พารามิเตอร์, ระบบแสง (optics) จะถูกจัดเก็บอยู่ในไฟล์ experiment โดยที่ไม่ต้องการการแก้ไขใหม่ ซึ่งหลังจากวัด spectrum ข้อมูลต่าง ๆ เหล่านี้จะถูกบันทึกไว้ในไฟล์ spectrum นั้นๆ ด้วย



รูปที่ 9 แสดง check signal dialog box

- เลือกหน้าต่าง check signal ดังรูปที่ 9 เพื่อต้องการเช็คความเข้มของแสงอินฟราเรดโดยบันทึกจากค่าแอมพลิจูด (amplitude) และตำแหน่ง (position) ของ Interferogram แล้วกดปุ่ม Save Peak Position

การ check signal ไม่จำเป็นต้องทำทุกครั้ง แต่จำเป็นต้อง check signal ใหม่ในครั้งแรกหรือ เมื่อมีการเปลี่ยน hardware (accessory) หรือ optic

- กลับมาที่หน้าต่าง Basic ทำการวัด spectrum ของ background โดยคลิกปุ่ม Background single channel

- วางสารตัวอย่างในช่อง sample compartment แล้วใส่ชื่อสารตัวอย่าง (Sample name) และลักษณะตัวอย่าง (Sample form) ข้อมูลเหล่านี้จะถูกเก็บรวมกับ spectrum ไว้ในไฟล์เดียวกัน

- ทำการวัด spectrum ของสารตัวอย่าง โดยคลิกปุ่ม Sample single channel หลังจากที่ทำเสร็จ spectrum จะถูกบันทึกไว้โดยอัตโนมัติและจะแสดงไว้ที่ spectrum window ทันที

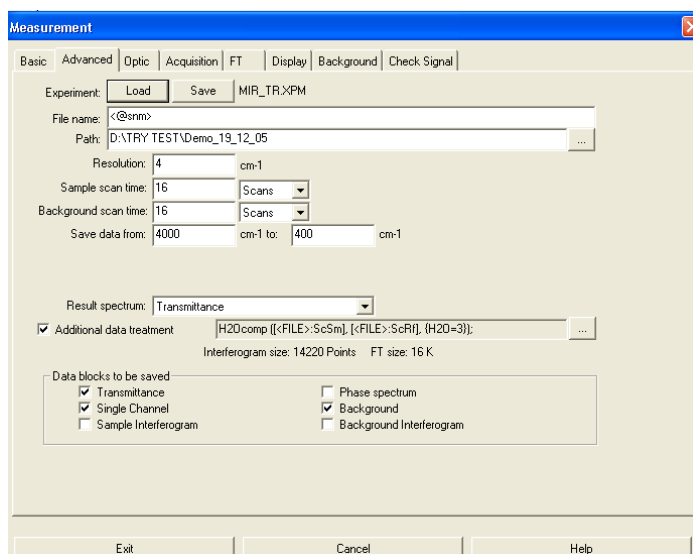
### 3.2 การแก้ไขพารามิเตอร์สำหรับการวัด

- ใช้สำหรับการต้องการแก้ไขพารามิเตอร์จากไฟล์ experiment เดิม โดยเลือกหน้าต่างที่สอง “Advance” ดังรูปที่ 10 หน้าต่างนี้สามารถเปลี่ยนแปลง path ที่เก็บไฟล์ spectrum, ความละเอียดในการเก็บ spectrum (resolution), เวลาในการเก็บ spectrum (scan time), ช่วงเวลาในการเก็บ spectrum (scan range) และรูปแบบของ spectrum ที่ต้องการ (result spectrum)

พารามิเตอร์มาตรฐานที่ใช้โดยทั่วไป

Resolution =  $4\text{ cm}^{-1}$       scan time = 16 หรือ 32 scans      scan range = 4,000 ถึง  $400\text{ cm}^{-1}$

Result spectrum = Absorbance หรือ Transmittance



รูปที่ 10 แสดง Advance dialog box

- หลังจากที่เราเปลี่ยนแปลงพารามิเตอร์ใหม่แล้วคลิก save เพื่อบันทึกแทนที่ไฟล์ experiment เดิมหรือตั้งชื่อใหม่  
หมายเหตุ สำหรับหน้าต่างอื่นได้ถูกตั้งค่าไว้เป็นค่ามาตรฐาน ไม่จำเป็นต้องมีการเปลี่ยนแปลง

#### 4. การเปิด (Load) และปิด(Unload) spectrum

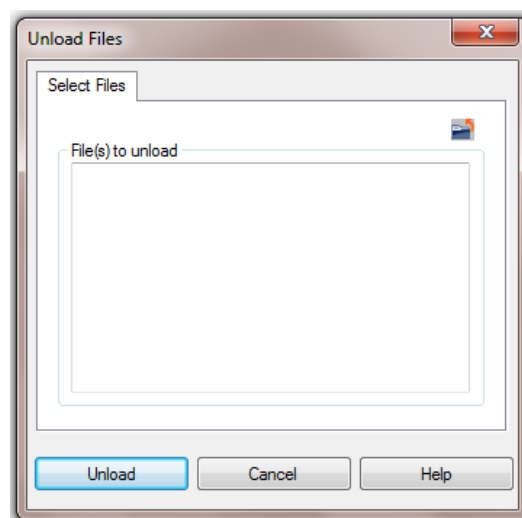
##### 4.1 การเปิด spectrum

- เลือกเมนู file แล้วคลิก Load file หรือคลิกไอคอน



##### 4.2 การปิด spectrum

- เลือกเมนู file แล้วคลิก Unload file หรือคลิกไอคอน จะปรากฏ Unload file dialog box ดังรูปที่ 11
- ลาก spectrum ที่ไม่ต้องการมาวางใน window สีขาว แล้วคลิก Unload file



รูปที่ 11 แสดง Unload file dialog box

หมายเหตุ การ unload file ไม่ได้เป็นการลบไฟล์ออกจาก hardware

#### 5. การบันทึก spectrum (Save และ Save file as)

- โดยปกติแล้ว spectrum ของสารตัวอย่างจะถูกบันทึกอย่างอัตโนมัติหลังจากที่ทำการวัด ถ้าต้องการบันทึก spectrum ที่ได้ทำการเปลี่ยนแปลงหรือแก้ไขแทนที่ spectrum เดิม ให้เลือกเมนู file แล้วคลิก Save หรือ คลิกไอคอน



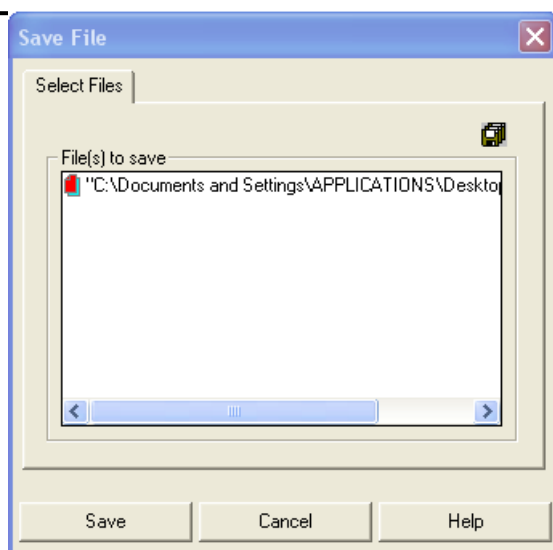
จะปรากฏ Save dialog box ดังรูปที่ 12

- ถ้าการเปลี่ยนแปลงหรือแก้ไข spectrum โดยไม่ต้องการให้บันทึกแทนที่ spectrum เดิม ให้คลิก Save file as

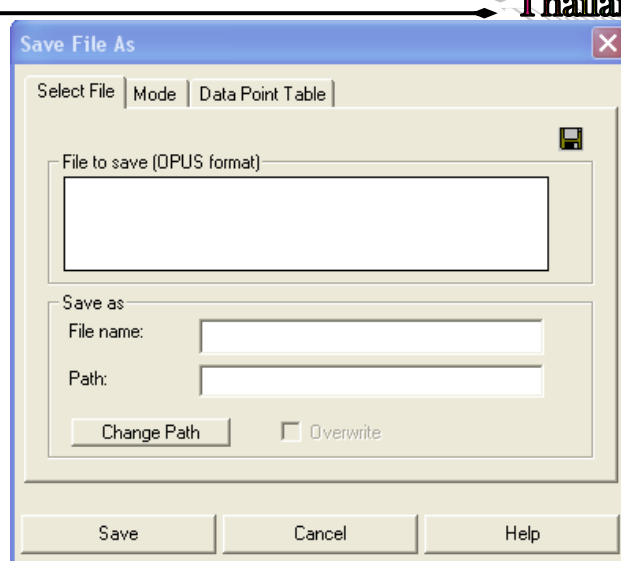
หรือคลิกไอคอน



จะปรากฏ Save file as dialog box ดังรูปที่ 13



รูปที่ 12 แสดง Save dialog box



รูปที่ 13 แสดง Save file as dialog box

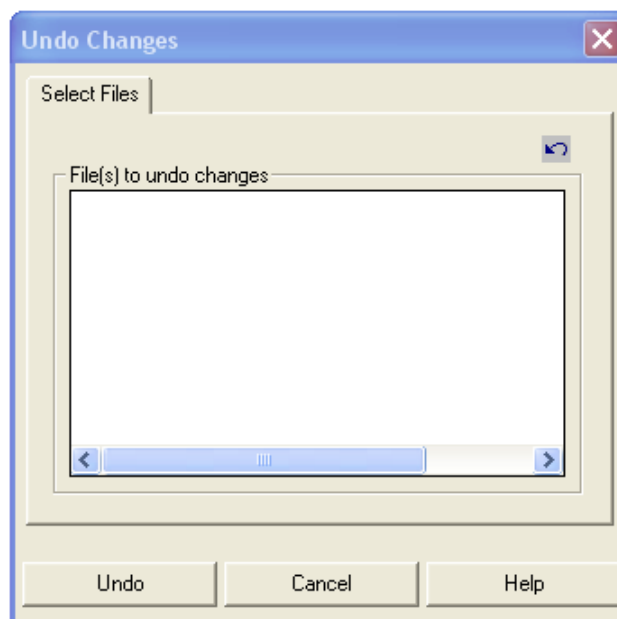
## 6. การยกเลิก การแก้ไขหรือเปลี่ยนแปลง spectrum (Undo changes to file)

ถ้าต้องการยกเลิก การแก้ไขหรือเปลี่ยนแปลง spectrum ให้เลือกเมนู file แล้วคลิก undo changes to file

หรือคลิก



จะปรากฏ Undo changes to file dialog box ดังรูปที่ 14



รูปที่ 14 แสดง Undo changes to file dialog box

**หมายเหตุ** การใช้ฟังก์ชัน Undo changes to file เป็นการยกเลิก การแก้ไขหรือเปลี่ยนแปลงทั้งหมด ก็จะย้อนกลับไปที่ไฟล์ spectrum แรก

## 7. การเปิดหน้าต่างของ spectrum เพิ่ม (New spectrum window)

เพื่อต้องการเปิดหน้าต่างของ spectrum เพิ่ม

- ให้เลือกเมนู window แล้วคลิก New spectrum window หรือ คลิกไอคอน



## 8. การตกแต่ง แก้ไขหรือเปลี่ยนแปลง spectrum (Manipulate)

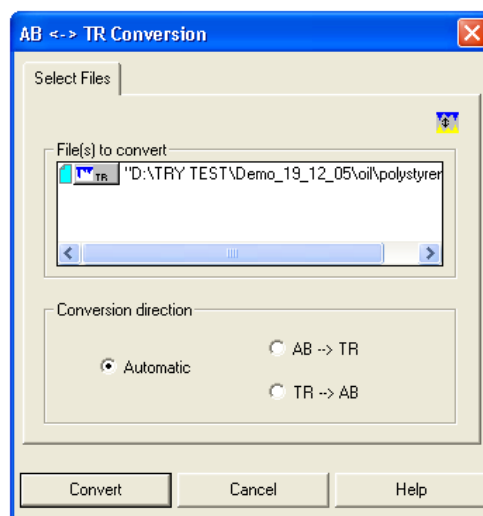
เป็นฟังก์ชันที่ต้องการตกแต่ง แก้ไขหรือเปลี่ยนแปลง spectrum การใช้เมนูนี้จะไม่ได้นบันทึก (Save) ลงใน hard disk อย่างอัตโนมัติ ถ้าต้องการบันทึก spectrum ที่ได้ทำเมนู Manipulate แล้วจะต้องทำการ Save หรือ Save file as ก่อนที่จะปิด spectrum หรือออกจากโปรแกรม OPUS

### 8.1 การเปลี่ยนรูปแบบ spectrum (conversion)

ฟังก์ชันนี้ใช้สำหรับเปลี่ยนรูปแบบ spectrum จาก AB ไปเป็น TR หรือจาก TR ไปเป็น AB

- ให้คลิก AB ↔ TR conversion หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ converting spectra dialog box ดังรูปที่ 15

- ลาก spectrum ที่ต้องการเปลี่ยนแปลงมาวางใน window สีขาว แล้วเลือก “Automatic” direction
- ทำการเปลี่ยนแปลงโดยคลิก convert



รูปที่ 15 แสดง converting spectra dialog box

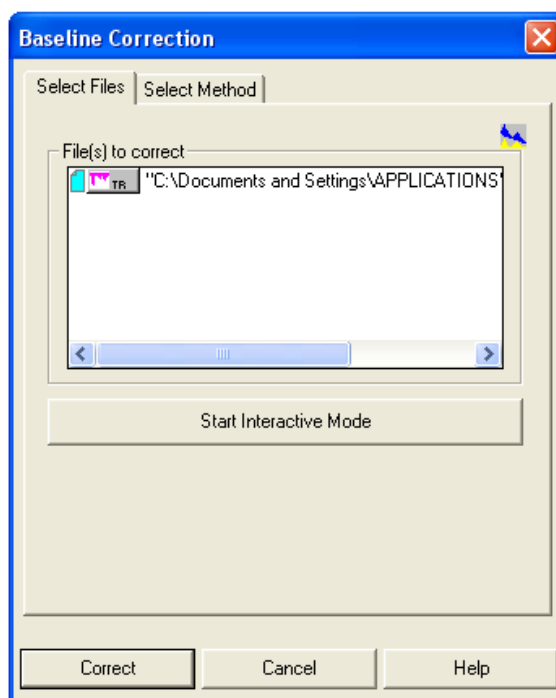
### 8.2 การปรับแต่งเส้นฐานของ spectrum (Baseline correction)

- ให้คลิก Baseline correction หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Baseline correction dialog box ดังรูปที่ 16

- ลาก spectrum ที่ต้องการปรับแต่งมาวางใน window สีขาว
- ถ้าต้องการการปรับแต่งอย่างอัตโนมัติจากโปรแกรม ให้คลิก Correct

- ถ้าต้องการปรับแต่งเส้นฐานเองให้เลือกปุ่ม Start Interactive Mode และหลังจากที่ปรับแต่งเสร็จแล้ว คลิก

Store



รูปที่ 16 แสดง Baseline correction dialog box

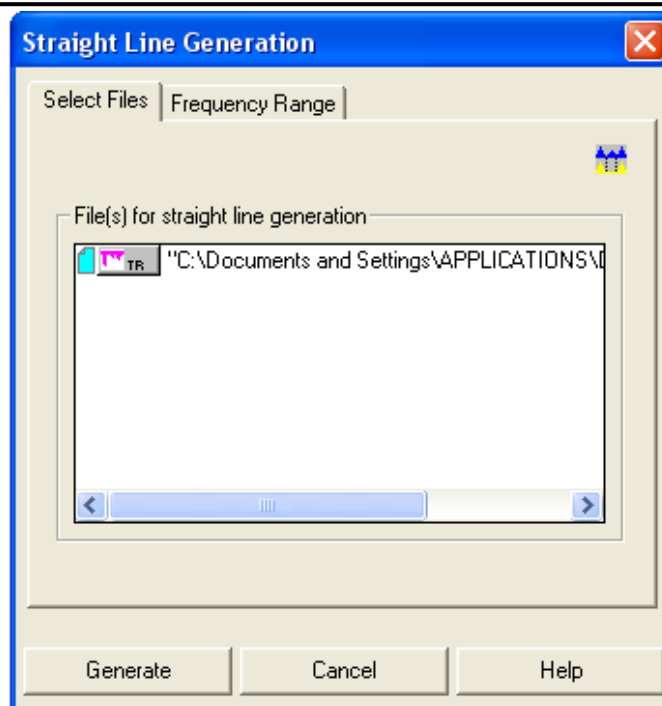
### 8.3 การแก้ไข spectrum ให้เป็นเส้นตรง (Straight Line Generation)

การทำเส้น spectrum ให้เป็นเส้นตรง เพื่อแก้ไขการรบกวนของพีคอื่น หรือลด fringe effect

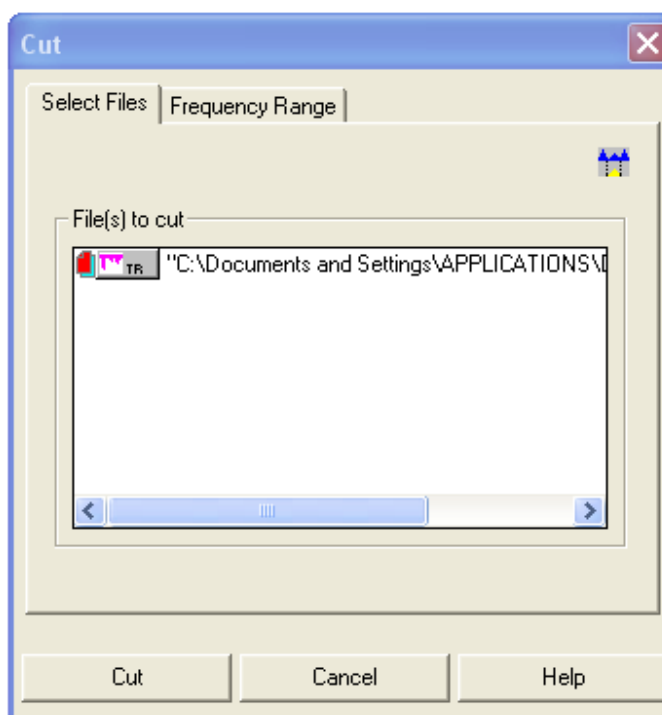
- ให้คลิก Straight Line Generation หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Straight Line Generation dialog box ดังรูปที่ 17
- ลาก spectrum ที่ต้องการแก้ไขมาวางใน window สีขาว แล้วคลิก Frequency Range เพื่อเลือกช่วงที่ต้องการจะแก้ไขให้เป็นเส้นตรง
- คลิก Generate เพื่อตกลงการแก้ไข

### 8.4 การตัดเส้น spectrum (Cut)

- เป็นการตัดช่วงของเส้น spectrum ที่ไม่ต้องการ โดยคลิก Cut หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Cut dialog box ดังรูปที่ 18
- ลาก spectrum ที่ต้องการตัดมาวางใน window สีขาว แล้วคลิก Frequency Range เพื่อเลือกช่วงที่ไม่ต้องการตัด
- คลิก Cut จะได้ช่วง spectrum ที่ต้องการแสดง



รูปที่ 17 แสดง Straight Line Generation dialog box



รูปที่ 18 แสดง Cut dialog box

## 8.5 การเฉลี่ย (Averaging)

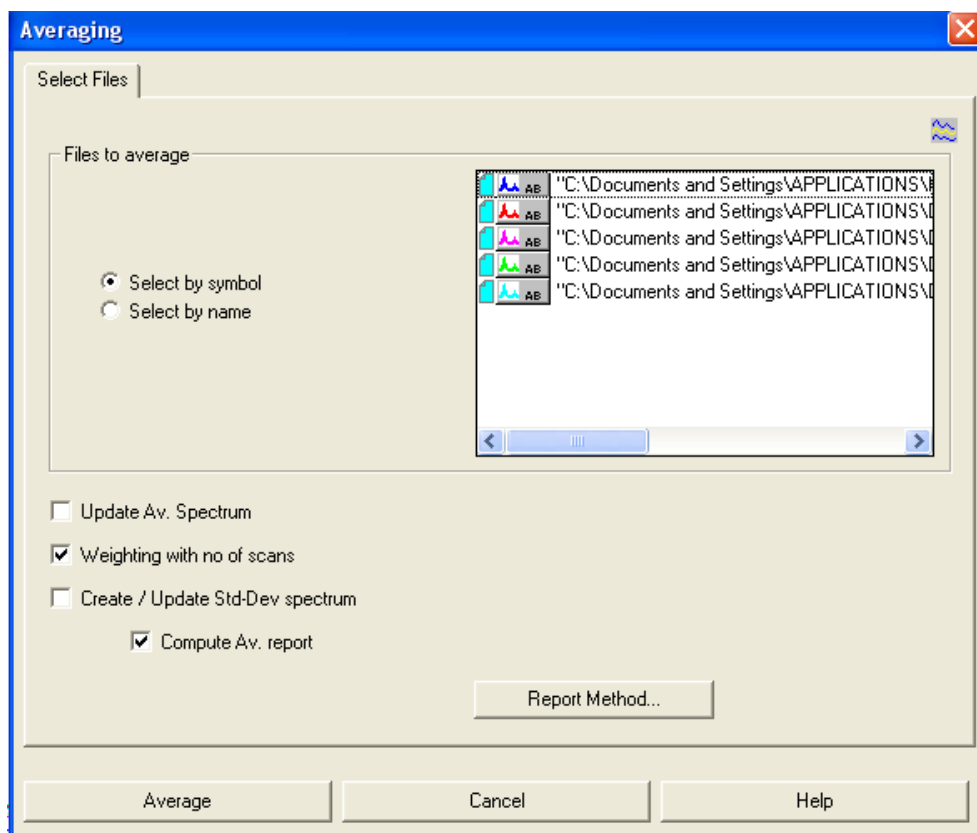
เป็นฟังก์ชันที่ใช้สร้าง spectrum เฉลี่ย ซึ่งได้จากการเฉลี่ย spectrum หลายๆ spectrum ที่มีรูปแบบเดียวกัน

- คลิก Averaging หรือคลิกไอคอน



จะปรากฏ Averaging dialog box ดังรูปที่ 19

- ลาก spectrum ที่ต้องการเฉลี่ยมาวางใน window สีขาว แล้วคลิก Average จะได้ spectrum เฉลี่ยซึ่งเป็น spectrum ใหม่



รูปที่ 19 แสดง Averaging dialog box

## 9. การคำนวณ spectrum (Evaluate)

เป็นการนำ spectrum ไปคำนวณเพื่อประมวลผลการวิเคราะห์

### 9.1 การแสดงตำแหน่งพีก (Peak picking)

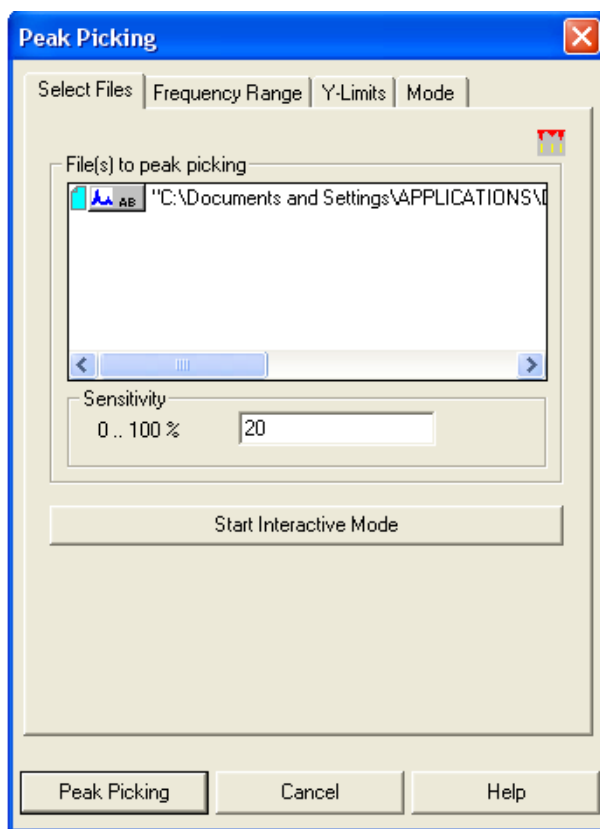
- เพื่อต้องการแสดงเลขคลื่น (wavenumber,  $\text{cm}^{-1}$ ) ที่ตำแหน่งต่างๆ โดยคลิก Peak Picking หรือคลิก

ไอคอน



จะปรากฏ Peak picking dialog box ดังรูปที่ 20

- ลาก spectrum ที่ต้องการให้แสดงค่าเลขคลื่นมาวางใน window สีขาว แล้วคลิก Start Interactive Mode เพื่อต้องการกำหนดเลขคลื่นที่ต้องการให้แสดง
- สามารถกำหนดเลขคลื่นที่ต้องการให้แสดง โดยเลื่อนระดับของ Threshold หลังจากนั้นคลิก Store



รูปที่ 20 แสดง Peak Picking dialog box

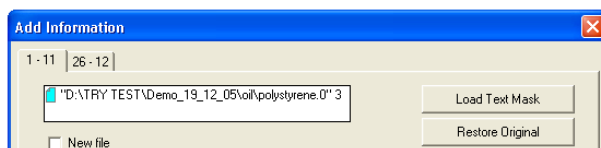
## 9.2 การสร้างห้องสมุด spectrum (Generating Library File)

การสร้างห้องสมุด spectrum มีขั้นตอนหลักอยู่ 2 ขั้นตอนดังนี้

### 9.2.1 การใส่ข้อมูลให้กับ spectrum (Add Information)

- spectrum ทุก spectrum ก่อนที่จะเก็บบันทึกในห้องสมุด จะต้องใส่ข้อมูลให้กับ spectrum นั้นก่อน โดยคลิก Add Information หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Add Information dialog box ดังรูปที่ 21

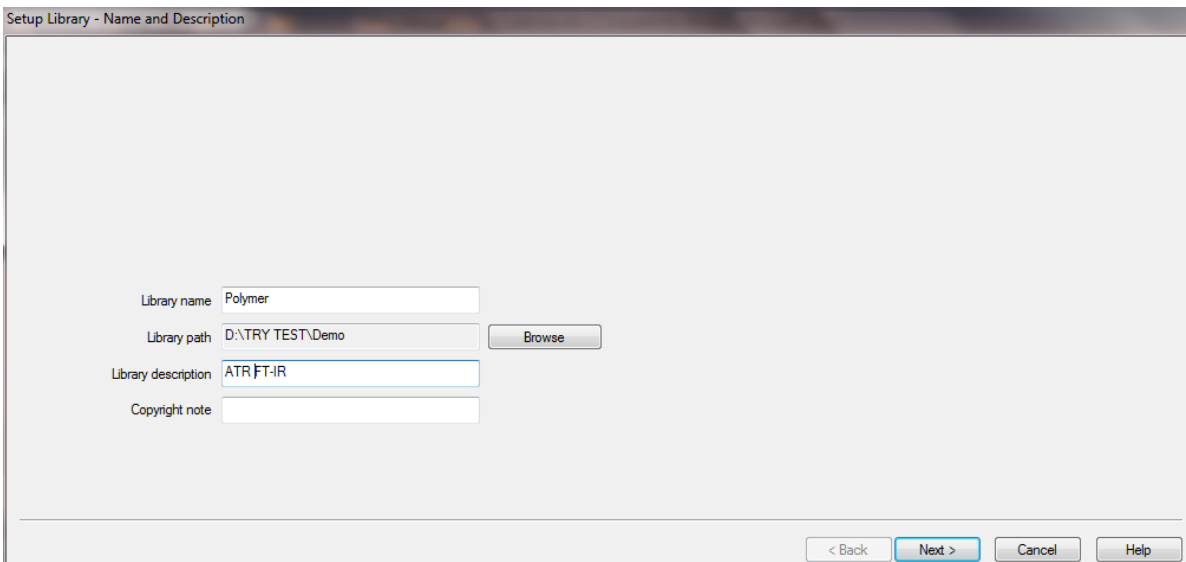
- ลาก spectrum ที่ต้องการมาวางใน window สีขาว ใส่ข้อมูลของ spectrum แล้วคลิก Add จะปรากฏ datablock “Info” 
- บันทึก spectrum นั้นอีกครั้ง โดยทำการ Save



รูปที่ 21 แสดง Add Information dialog box

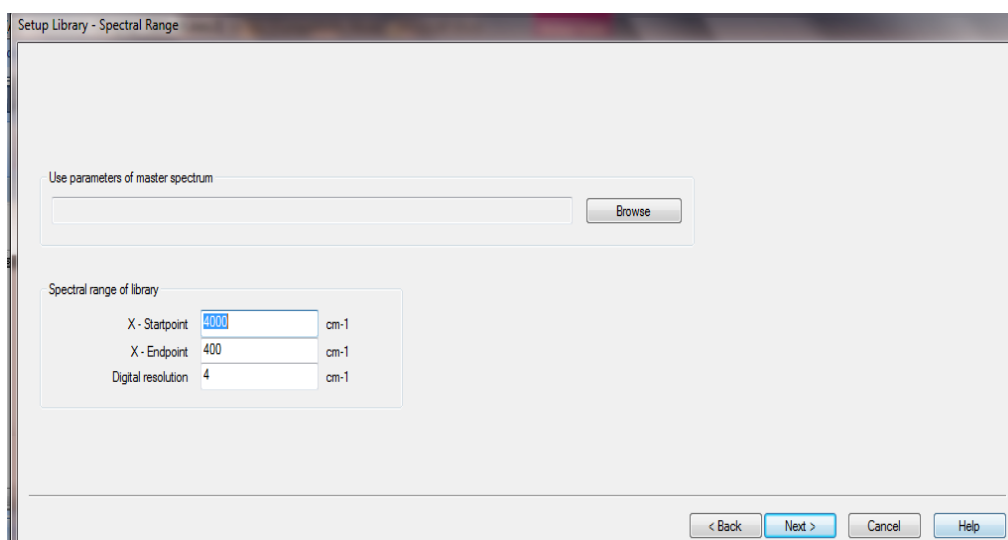
### 9.2.2 การตั้งชื่อห้องสมุด spectrum และเก็บ spectrum ในห้องสมุด (Setup Library)

- คลิก Setup Library หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Setup Library name and Description dialog box ดังรูปที่ 22A
- ใส่ชื่อห้องสมุด spectrum และกด “Browse” เพื่อเลือก path ที่จะเก็บห้องสมุด spectrum
- คลิก Next

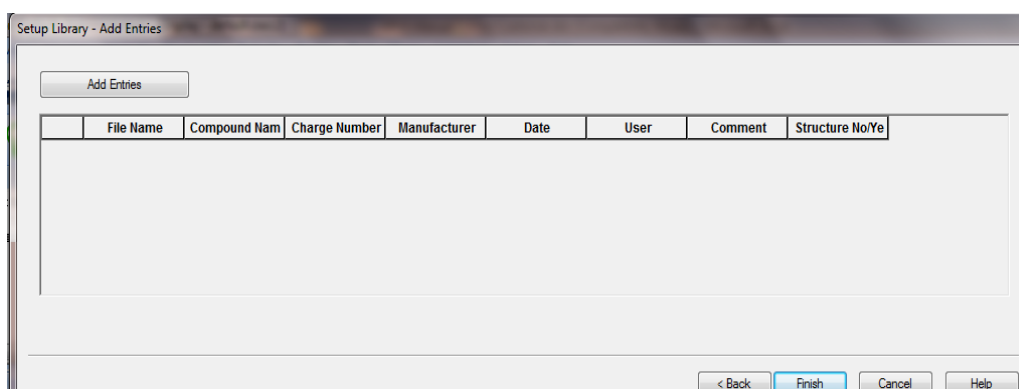


รูปที่ 22A แสดง Setup Library - Name and Description dialog box

- คลิก Next 2 ครั้ง



รูปที่ 22B แสดง Setup Library - Spectral Range dialog box



รูปที่ 22C แสดง Setup Library - Add Entries dialog box

- คลิก Add Entries เพื่อเลือก spectrum (ที่ Add Info แล้ว) เข้ามาเก็บในห้องสมุด spectrum
- คลิก Finish แล้ว ห้องสมุด spectrum จะถูกสร้างพร้อมทั้งมี spectrum เข้าไปเก็บในห้องสมุดอย่างอัตโนมัติ

### 9.3 การเก็บ spectrum ในห้องสมุด spectrum (Edit library)

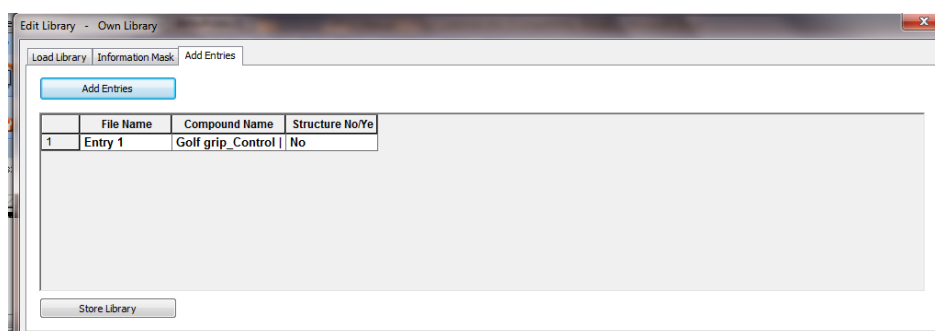
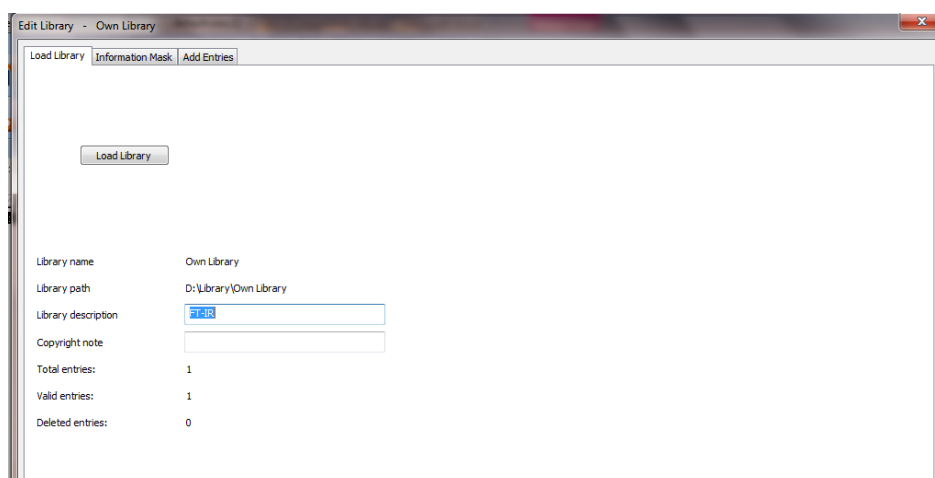
กรณีที่ได้มีการสร้างห้องสมุด spectrum ไว้ก่อนแล้ว และต้องการเพิ่ม spectrum อื่นเข้าไปอีก ให้คลิก Edit

library หรือคลิกไอคอน



จะปรากฏ Edit library dialog box ดังรูปที่ 23

- ให้คลิก Add Entries



รูปที่ 23 แสดง Edit library dialog box

- คลิก Add Entries เพื่อเลือก spectrum (ที่ Add Info แล้ว) เข้ามาเก็บในห้องสมุด spectrum นี้
- คลิก Store Library เพื่อบันทึก spectrum นั้นเพิ่มในห้องสมุด

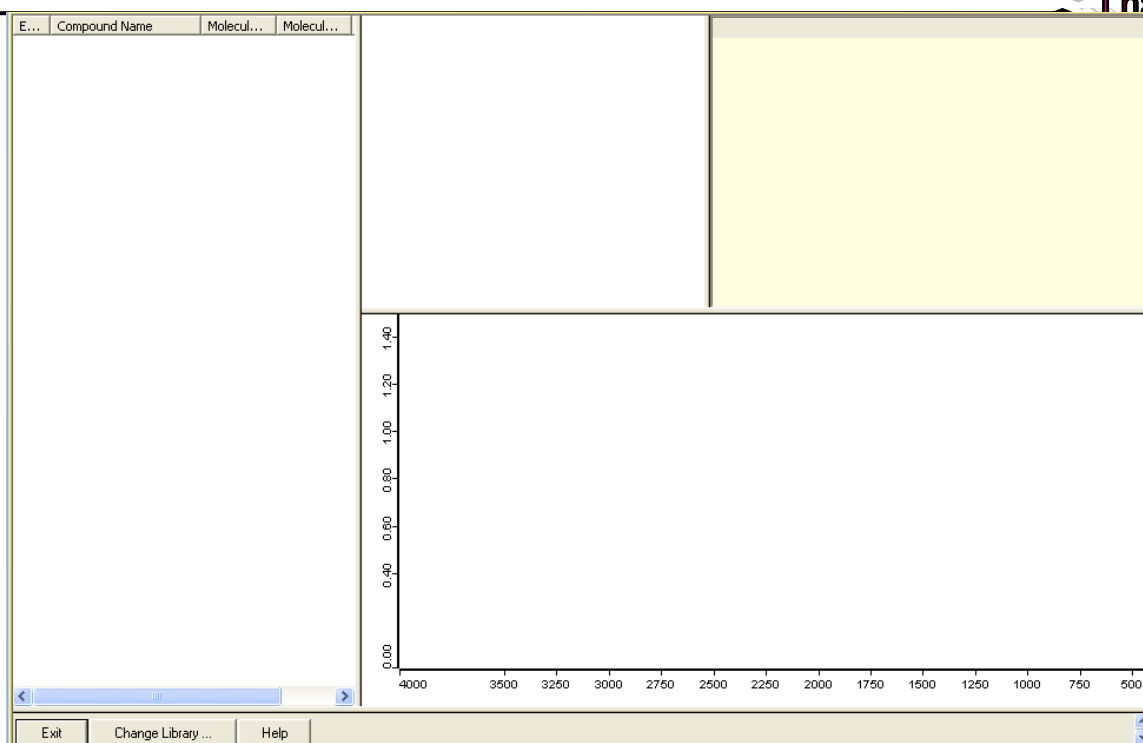
#### ข้อเสนอแนะ

1 ทุกๆ spectrum ก่อนที่จะทำการจัดเก็บ หรือเพิ่มเข้าในห้องสมุด spectrum ควรจะใส่ข้อมูลให้กับ spectrum ก่อน แล้วทำการบันทึก (Save)

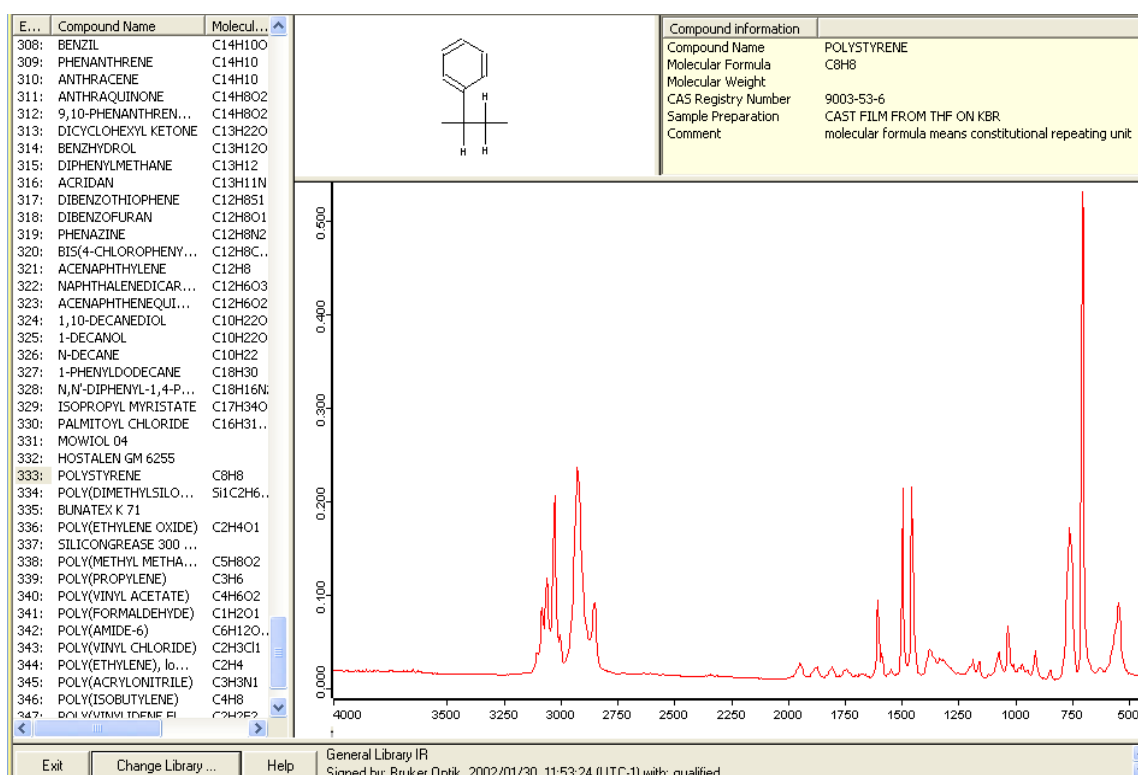
2 spectrum ที่จะเก็บเข้าในห้องสมุด ควรเป็น Absorbance spectrum

### 9.4 การตรวจสอบ spectrum ที่เก็บบันทึกในห้องสมุด spectrum

คลิก Browse Library หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Library display dialog box ดังรูปที่ 24 แล้วคลิก Change Library เพื่อเลือกห้องสมุดที่ต้องการจะตรวจสอบ spectrum ดังรูปที่ 25



รูปที่ 24 แสดง Library display dialog box

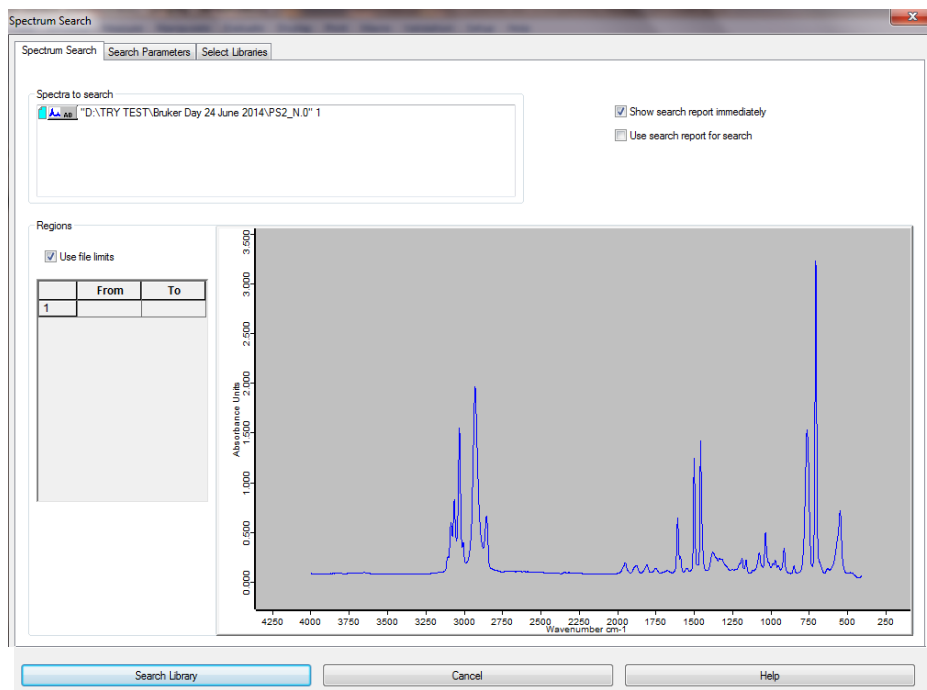


รูปที่ 25 แสดง List ของ spectrum ที่อยู่ในห้องสมุด spectrum

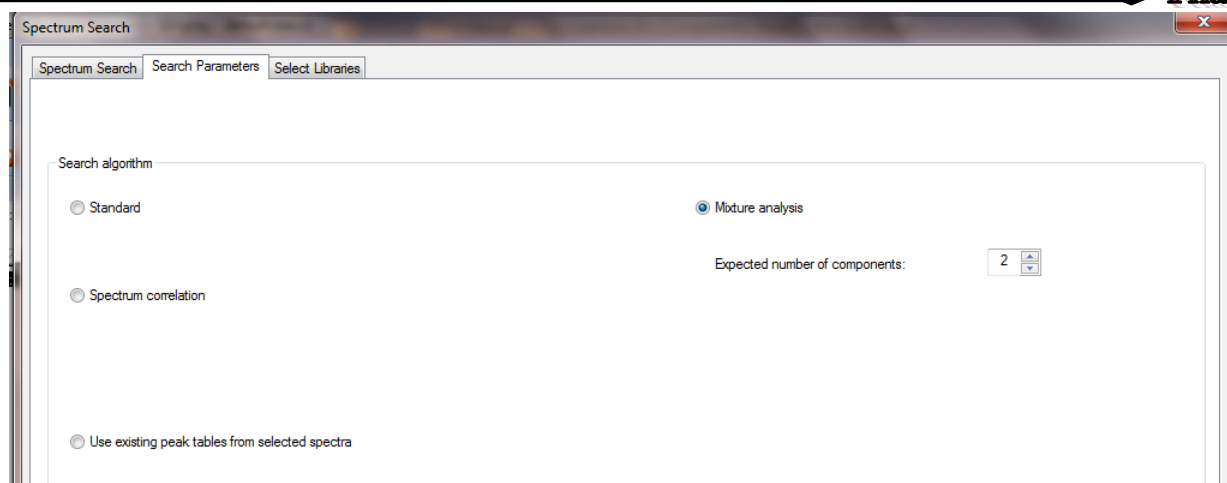
## 9.5 การ เปรียบเทียบ spectrum กับ ห้องสมุด spectrum (Search)

26A

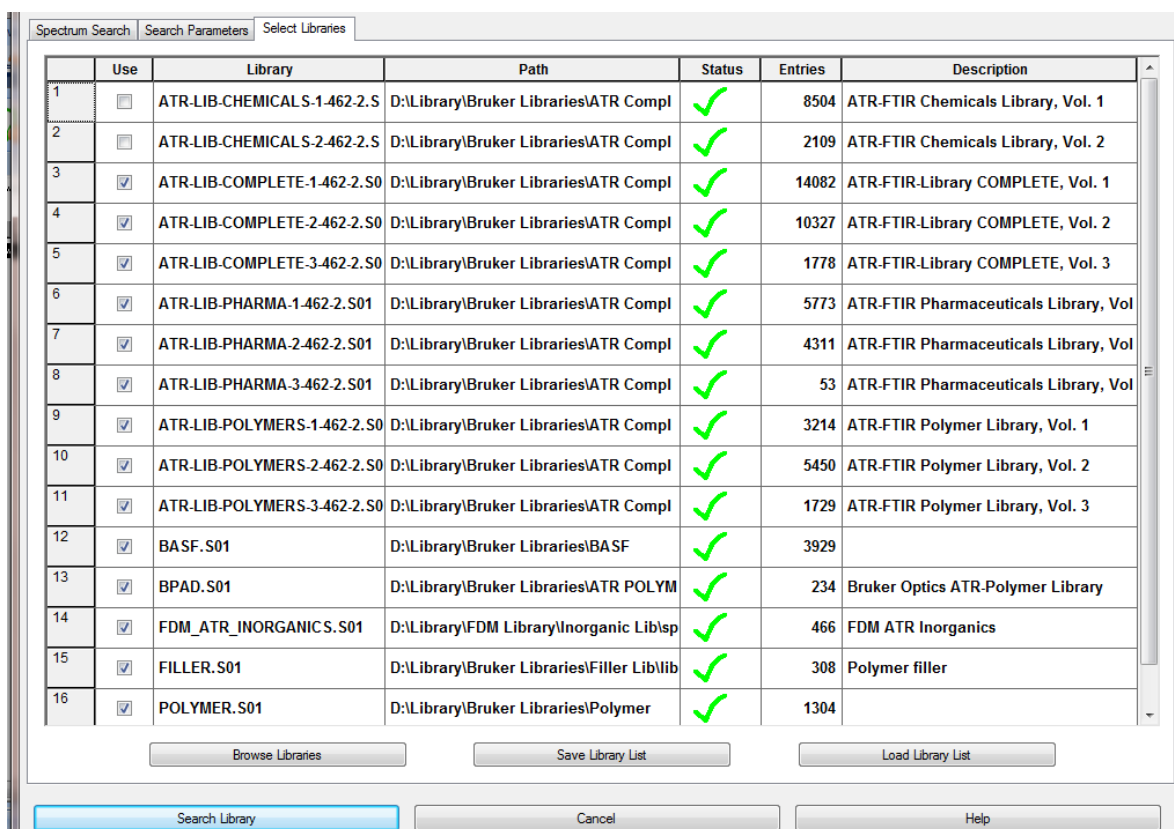
- คลิก *Spectrum Search* หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ *Spectrum Search* dialog box ดังรูปที่ 26A
- ที่หน้าต่างแรก “*Spectrum Search*” ลาก spectrum ที่ต้องการจะเปรียบเทียบมาวางใน window สีขาว
- ที่หน้าต่าง “*Search Parameter*” เลือกการเปรียบเทียบแบบ “*Standard*” สำหรับการสารทั่วไป หรือเลือก “*Mixture Analysis*” สำหรับสารผสม ดังรูปที่ 26B
- ที่หน้าต่างสุดท้าย “*Select Libraries*” ให้เลือกห้องสมุด spectrum ที่ต้องการเปรียบเทียบ โดยคลิกปุ่ม *Add Library* ดังรูปที่ 26C
- คลิก *Search Library* จะแสดงหน้าต่าง “*Library Display*” ที่รายงานผลการเปรียบเทียบ spectrum กับห้องสมุด spectrum ดังรูปที่ 27 พร้อมปรากฏ datablock “*search*” 
- เลือกไอคอน  เพื่อทำการบันทึกผลการเปรียบเทียบนี้ไว้กับ *Spectrum file*



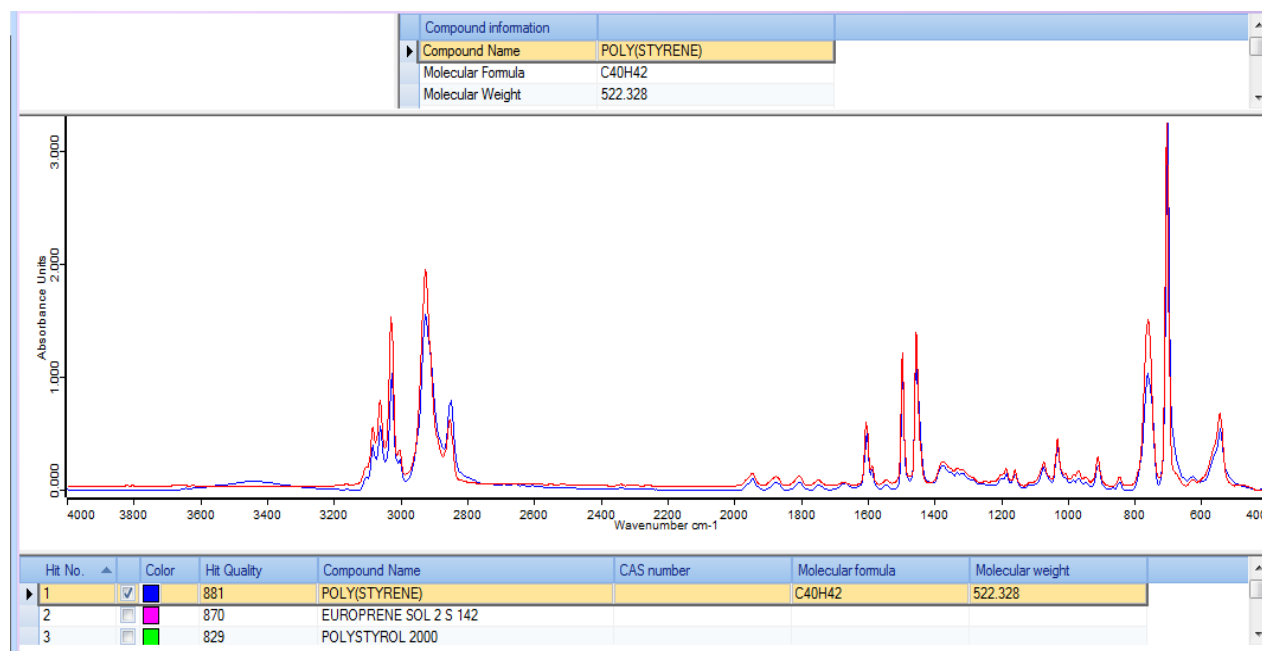
รูปที่ 26A แสดง *Spectrum Search* dialog box



รูปที่ 26B แสดง Spectrum Search dialog box



รูปที่ 26C แสดง Spectrum Search dialog box



รูปที่ 27 แสดง Library Display

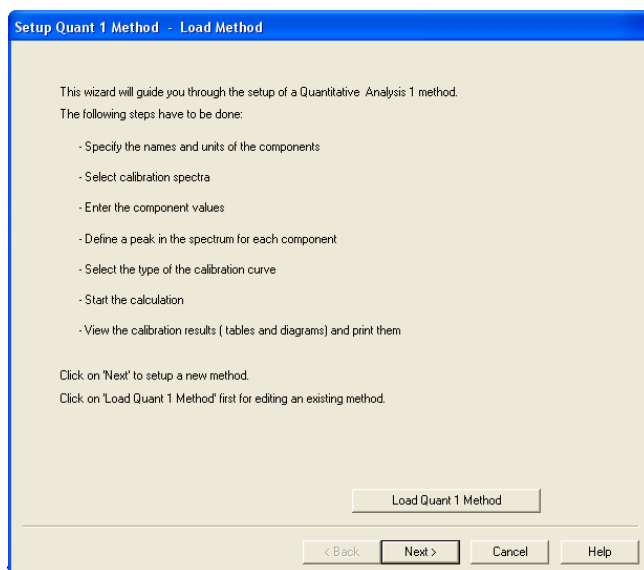
## 9.6 การวิเคราะห์ทางปริมาณ (Quantitative Analysis)

โปรแกรม Quantitative ใช้สำหรับคำนวณหาความเข้มข้นขององค์ประกอบที่อยู่ในสารตัวอย่าง มีขั้นตอนหลักอยู่ 2 ขั้นตอน

### 9.6.1 การสร้าง Calibration curve (Setup Quant 1)

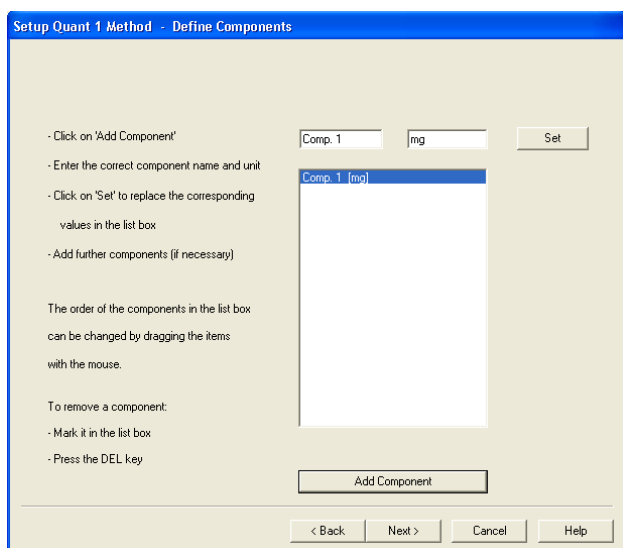
- คลิก Setup Quant 1 Method หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Setup Quant 1 dialog box

ดังรูปที่ 28 ภายในแต่ละ dialog box จะมีข้อแนะนำต่าง ๆ ซึ่งอ่านเข้าใจง่ายและสามารถปฏิบัติตามได้เอง



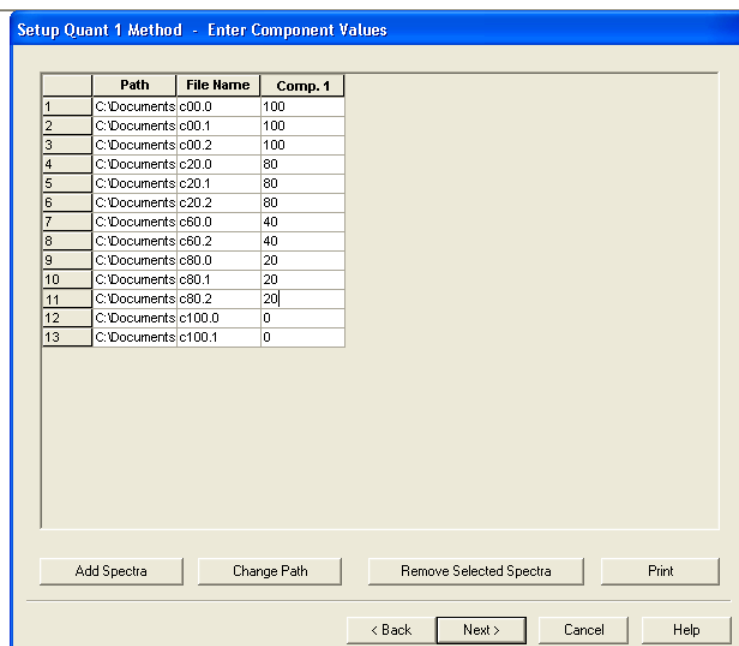
- คลิก Next จะปรากฏ Define component dialog box ดังรูปที่ 29

รูปที่ 28 แสดง Setup Quant 1 Method dialog box



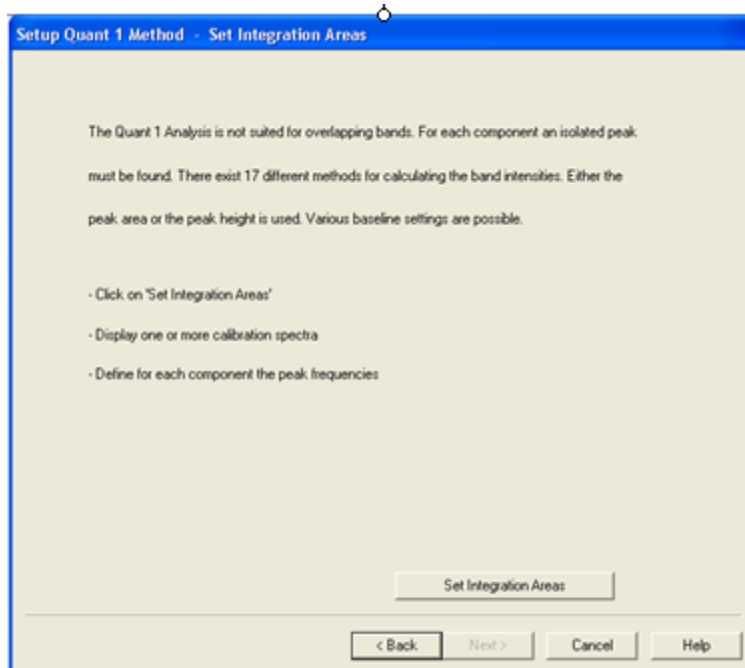
รูปที่ 29 แสดง Define component dialog box

- ให้ใส่ชื่อองค์ประกอบ และหน่วยของความเข้มข้น
- คลิก Next จะปรากฏ Component List dialog box ดังรูปที่ 30



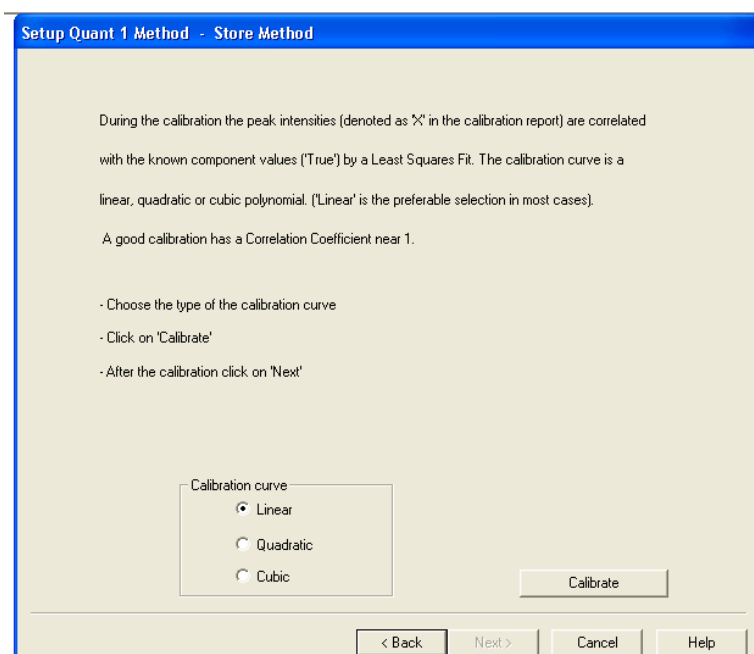
รูปที่ 30 แสดง Component List dialog box

- ให้ใส่ Absorbance spectra และค่าความเข้มข้นขององค์ประกอบที่ศึกษา (เพราะตามกฎของเบียร์ การดูดกลืนแสงจะแปรผันตามความเข้มข้น,  $A \propto c$ )
- คลิก Next จะปรากฏ Setup Integration Method dialog box ดังรูปที่ 31



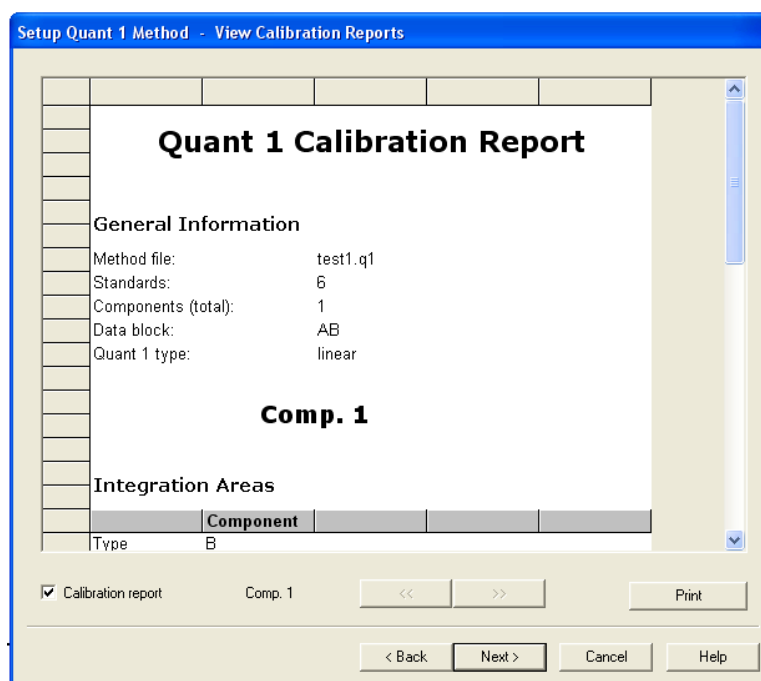
รูปที่ 31 แสดง Setup Integration Method dialog box

- คลิก Setup Integration Area เพื่อเลือกประเภทของการ Integrate และ ช่วง wavenumber ที่ต้องการ
- คลิก Next จะปรากฏ Choose calibration curve dialog box ดังรูปที่ 32



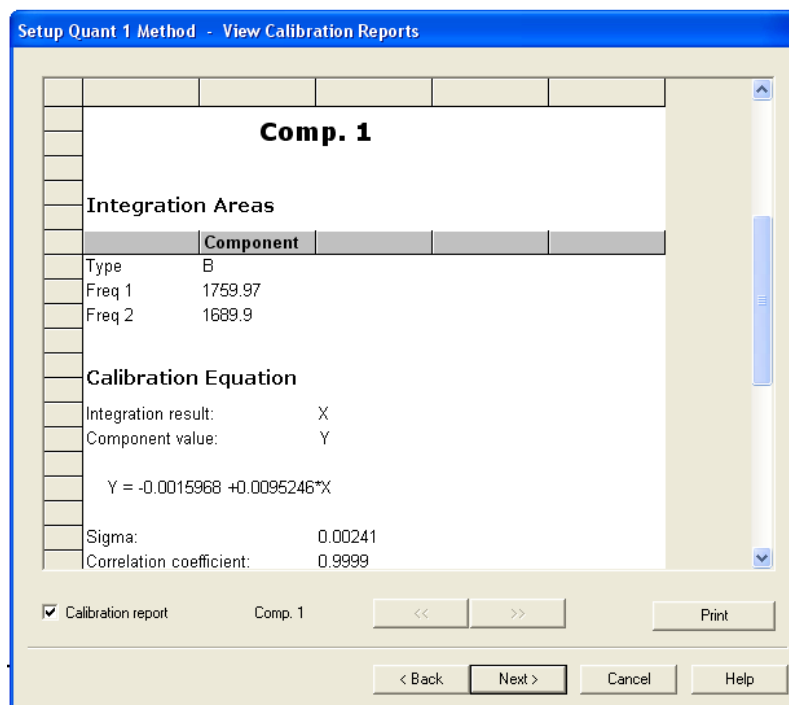
รูปที่ 32 แสดง Choose calibration curve dialog box

- เลือกประเภทของสมการ ซึ่งควรเลือกเป็นสมการเส้นตรง “Linear” แล้วคลิก Calibration เพื่อบันทึก Calibration curve นี้ (Calibration curve จะเป็นไฟล์นามสกุล .q1)
- คลิก Next จะปรากฏ Calibration result dialog box ดังรูปที่ 33

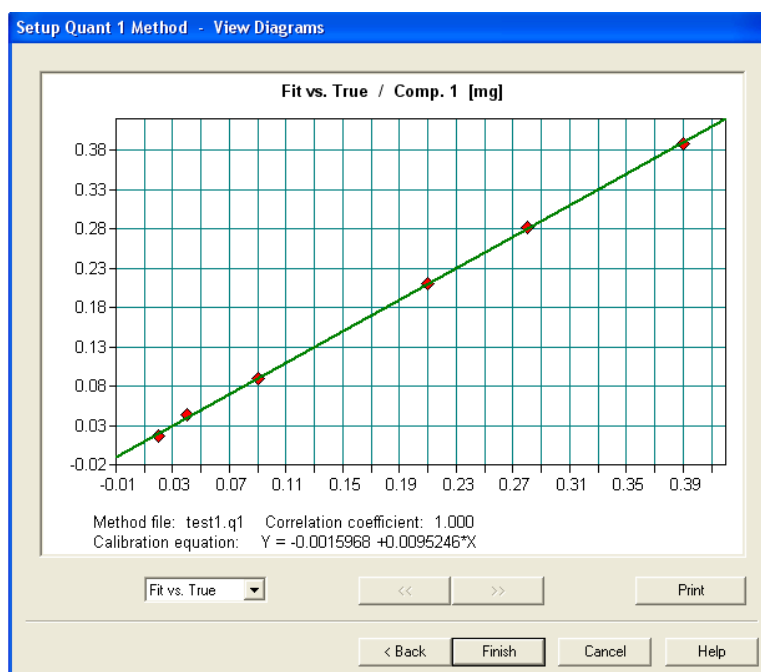


รูปที่ 33A แสดง Calibration result dialog box

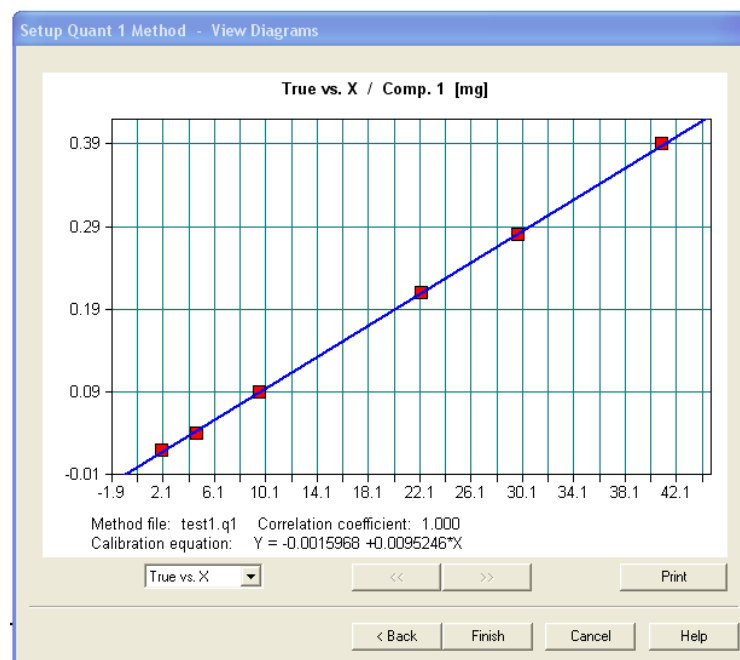
Calibration report จะแสดงข้อมูลต่างๆ, ผลการ integrate และความน่าเชื่อถือของสมการ (Calibration curve)



รูปที่ 33B แสดง Calibration result dialog box



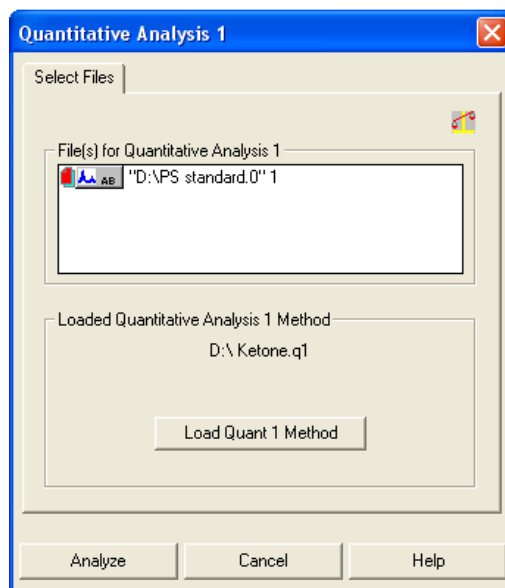
รูปที่ 33C แสดง Calibration result dialog box



รูปที่ 33D แสดง Calibration result dialog box

## 9.6.2 การวิเคราะห์ความเข้มข้นของสารตัวอย่าง (Quantitative Analysis)

หลังจากที่สร้างสมการ (Calibration curve) แล้วสามารถวิเคราะห์ความเข้มข้นของสารตัวอย่าง โดยคลิก Quant 1 หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Quantitative Analysis dialog box ดังรูปที่ 34



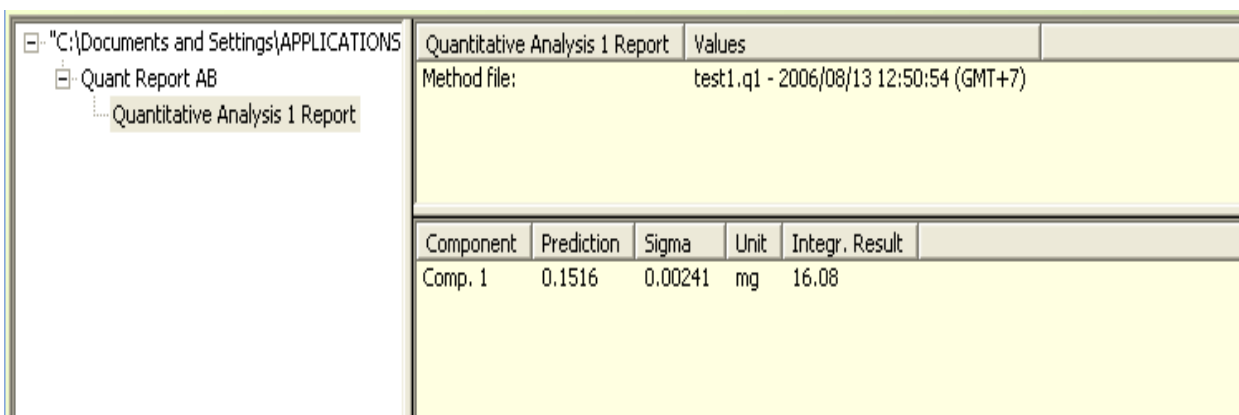
รูปที่ 34 แสดง Quantitative Analysis dialog box

- ลาก spectrum ที่ต้องการวิเคราะห์มาวางใน window สีขาว
- เลือก Calibration curve ที่ต้องการจะใช้งาน โดยคลิก Load Quant1 Method
- หลังจากคลิก “Analyze” เพื่อทำการวิเคราะห์ จะแสดง datablock “Quant” ที่ Browser window



- คลิกขวาที่ datablock “Quant” เลือก Show report จะปรากฏ Quantitative Analysis dialog box ดังรูปที่ 35

- เลือกไอคอน  เพื่อทำการบันทึกผลการวิเคราะห์นี้ไว้กับ Sample spectrum file



รูปที่ 35 แสดง Quantitative Analysis report window

## 9.7 การเปรียบเทียบ *Sample Spectrum* กับ *Reference* หรือ *Standard Spectrum* (Quick Compare)

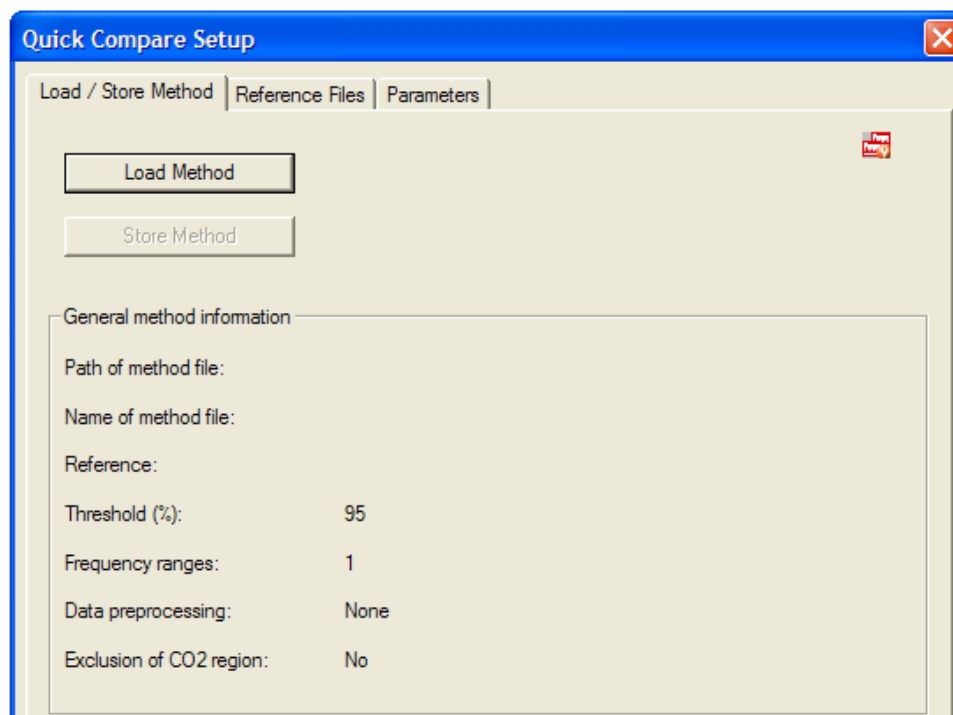
โปรแกรม Quick Compare นี้ใช้สำหรับเปรียบเทียบคุณภาพของ *Sample Spectrum* กับ *Reference* หรือ *Standard Spectrum* ซึ่งมีขั้นตอนหลักอยู่ 2 ขั้นตอน

### 9.7.1 การสร้าง *Reference* หรือ *Standard Spectrum file* (Quick Compare Setup)

- คลิก Quick Compare Setup หรือคลิกไอคอน  จะปรากฏ Quick Compare Setup dialog box ดังรูปที่ 36 A

จาก dialog box จะมีแถบใช้งานทั้งหมด 3 แถบ ดังนี้

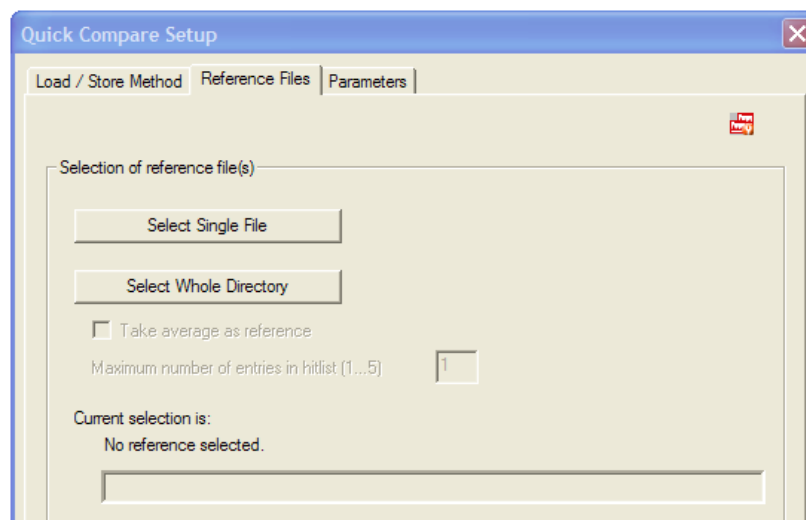
- Load / Store Method เพื่อเรียกไฟล์ *Reference* หรือ *Standard Spectrum* ขึ้นมาแก้ไข หรือเพื่อบันทึก
- Reference Files เพื่อเลือก spectrum สำหรับเป็น *Reference* หรือ *Standard Spectrum*
- Parameter เพื่อเลือกพารามิเตอร์ในการเปรียบเทียบคุณภาพ spectrum



รูปที่ 36A แสดง Quick Compare Setup dialog box

สำหรับการสร้างไฟล์ **Reference** หรือ **Standard Spectrum ใหม่** ให้ทำตามลำดับดังนี้

1. เลือกแถบ “Reference Files” จะปรากฏ dialog box ดังรูปที่ 36 B

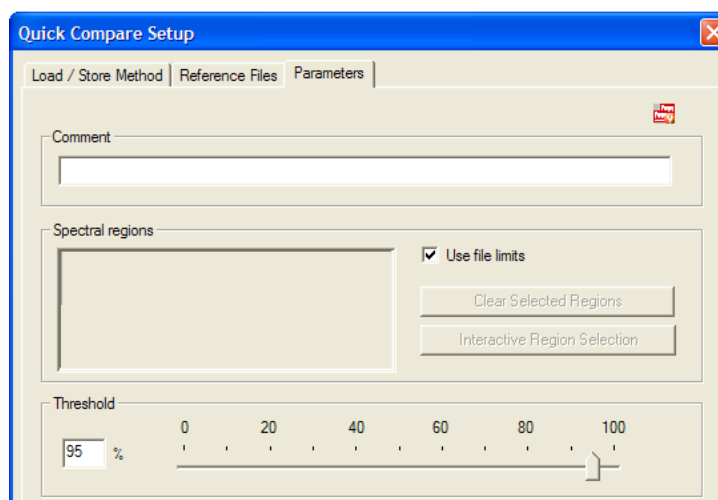


รูปที่ 36B แสดง Quick Compare Setup - References Files Tab

- ถ้าต้องการเลือก spectrum เดี่ยว สำหรับเป็น Reference file ให้คลิก “Select Single File”
- ถ้าต้องการเลือก spectra ทั้งหมดที่รวมอยู่ในหนึ่งโฟลเดอร์ ให้คลิก “Select Whole Directory”

ซึ่งการเลือกแบบนี้สามารถให้แสดงผลการเปรียบเทียบเป็นแบบเฉลี่ย “Take average as reference” หรือแสดงผลการเปรียบเทียบเป็นลำดับความเหมือนจาก 1 ถึง 5 อันดับ

2. เลือกแถบ “Parameter” จะปรากฏ dialog box ดังรูปที่ 36 C เพื่อเลือก spectral region ในการเปรียบเทียบและตั้งค่า % Threshold สำหรับเป็นค่าความสัมพันธ์อ้างอิงในการเปรียบเทียบคุณภาพ spectrum



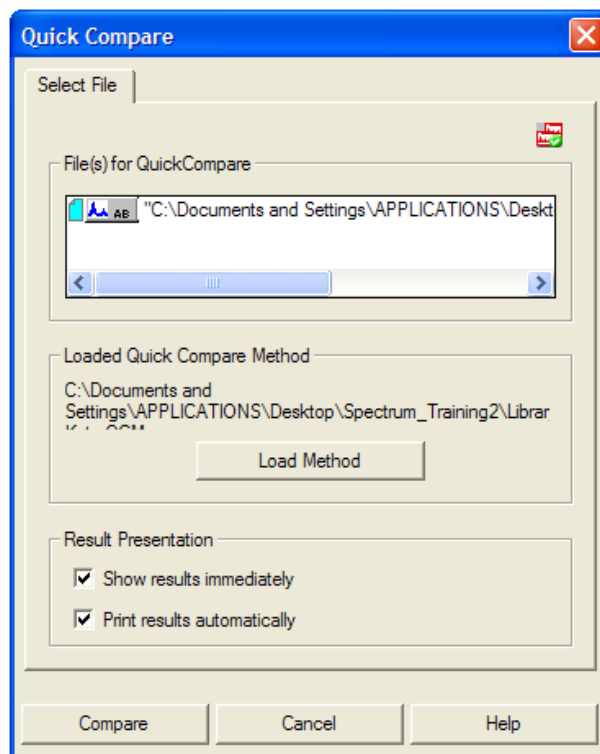
รูปที่ 36C แสดง Quick Compare Setup - Parameter Tab

3. เลือกแถบ “Load / Store Method” แล้วคลิก “Store Method” เพื่อบันทึก **Reference** หรือ **Standard file** โดยไฟล์ที่ถูกสร้างขึ้นจะมีนามสกุล QCM (Quick Compare Methods)

หมายเหตุ ชื่อไฟล์ของ **Reference** หรือ **Standard** ที่บันทึกควรจะเหมือนกัน หรือใกล้เคียงกับชื่อของ **Reference** หรือ **Standard**

### 9.7.2 การเปรียบเทียบกับ Reference หรือ Standard Spectrum (Quick Compare)

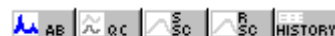
- คลิก Quick Compare หรือไอคอน  จะปรากฏ Quick Compare dialog box ดังรูปที่ 37



รูปที่ 37 แสดง Quick Compare dialog box

- ลาก Sample spectrum ที่ต้องการจะเปรียบเทียบ มาวางใน window สีขาว
- เลือก **Reference** หรือ **Standard file** (QCM file) ที่ต้องการจะเปรียบเทียบ โดยคลิก Load Method
  - เลือก ☒ ที่ “Show results immediately” เพื่อต้องการให้แสดงผลการเปรียบเทียบทันที
  - เลือก ☒ ที่ “Print results automatically” เพื่อต้องการพิมพ์ผลการเปรียบเทียบอย่างอัตโนมัติ

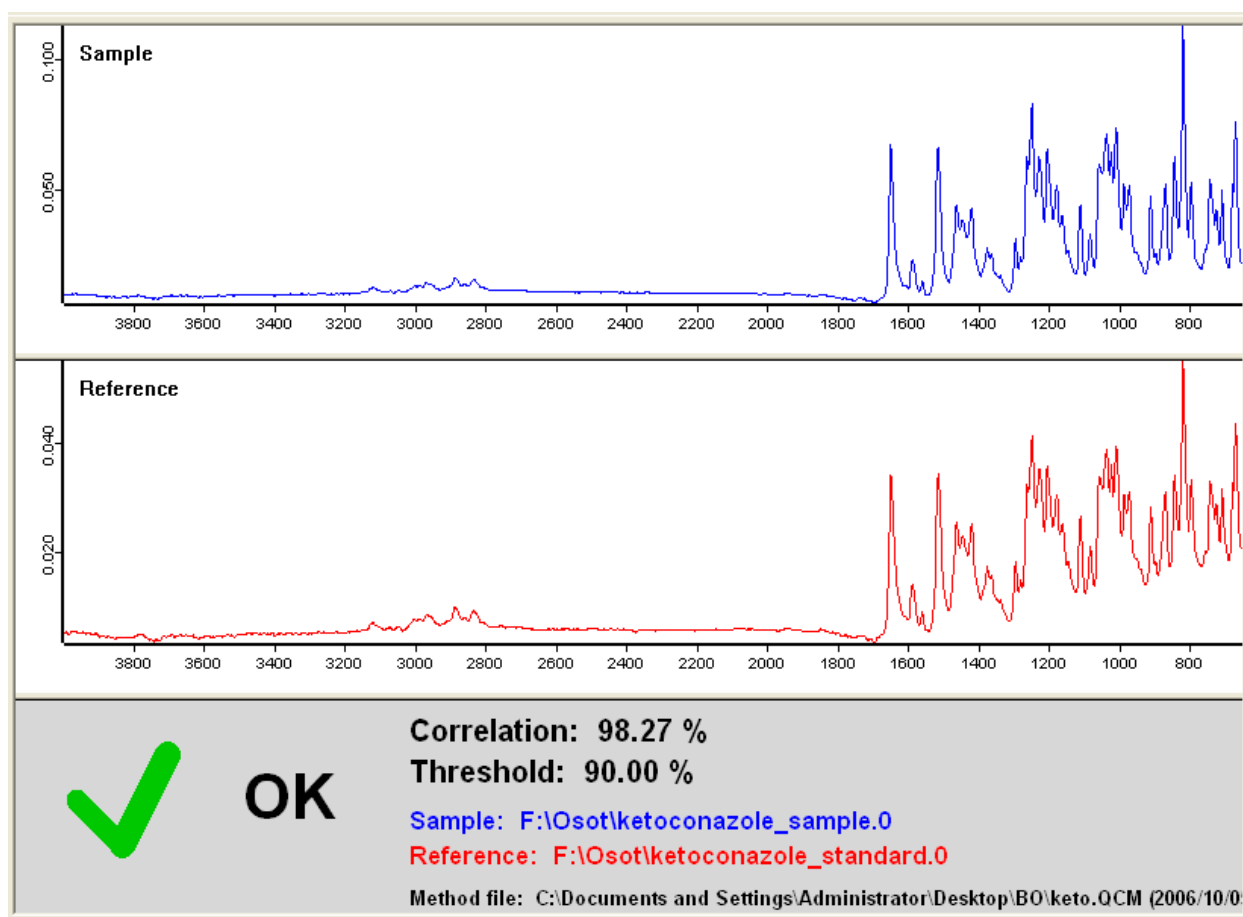
- หลังจากคลิก “Compare” เพื่อเปรียบเทียบแล้ว จะรายงานผลการเปรียบเทียบดังรูปที่ 38 A (OK คือค่า % Correlation > % Threshold) และรูปที่ 38 B (Not OK คือค่า % Correlation < % Threshold) และที่ Sample spectrum file จะแสดง datablock “QC” ที่ Browser window



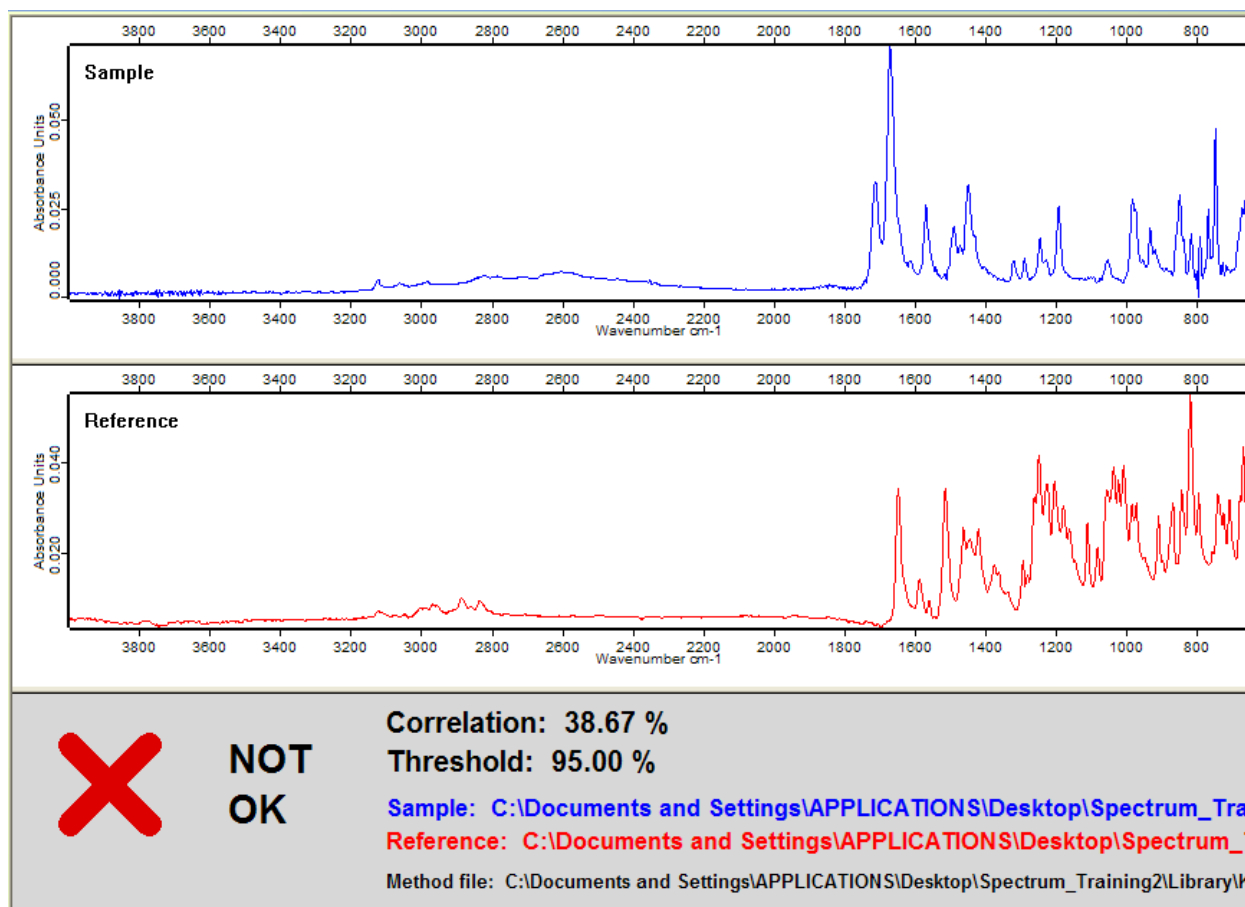
- เลือกไอคอน



เพื่อทำการบันทึกผลการเปรียบเทียบนี้ไว้กับ Sample spectrum file



รูปที่ 38A แสดง QC Results – Display – Result OK



รูปที่ 38B แสดง **QC Results – Display – Result Not OK**

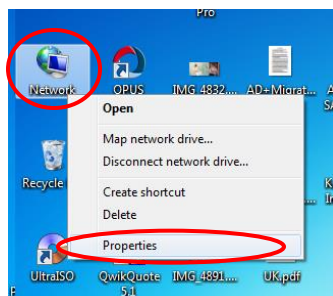
## 10. การพิมพ์ Spectrum

สามารถพิมพ์ spectrum ได้โดยเลือกเมนู Print แล้วคลิก Quick Print หรือคลิกไอคอน

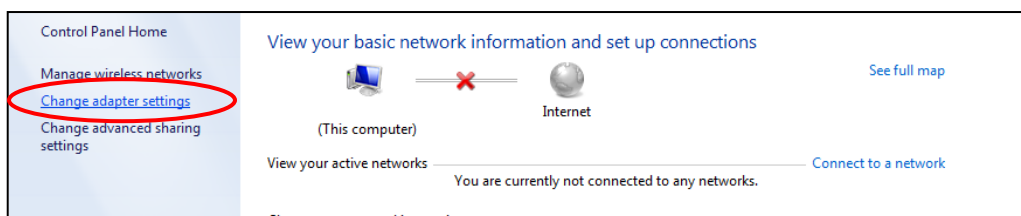


## การเชื่อมต่อของคอมพิวเตอร์กับอุปกรณ์ FTIR (Network Connection) บน Window 7

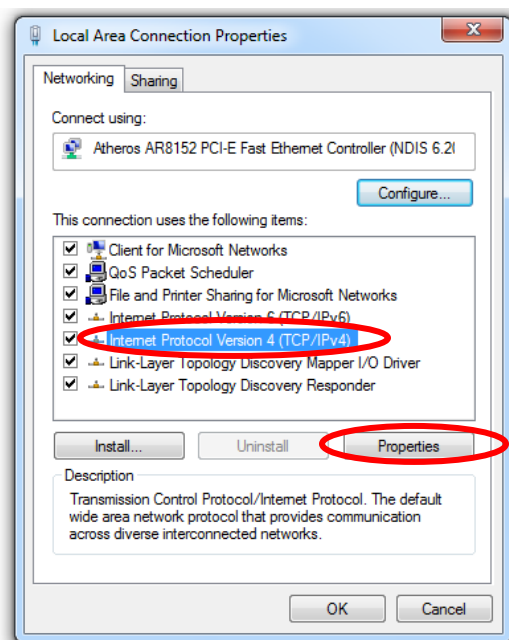
1. คลิกขวาไอคอน Network แล้วคลิกที่ properties



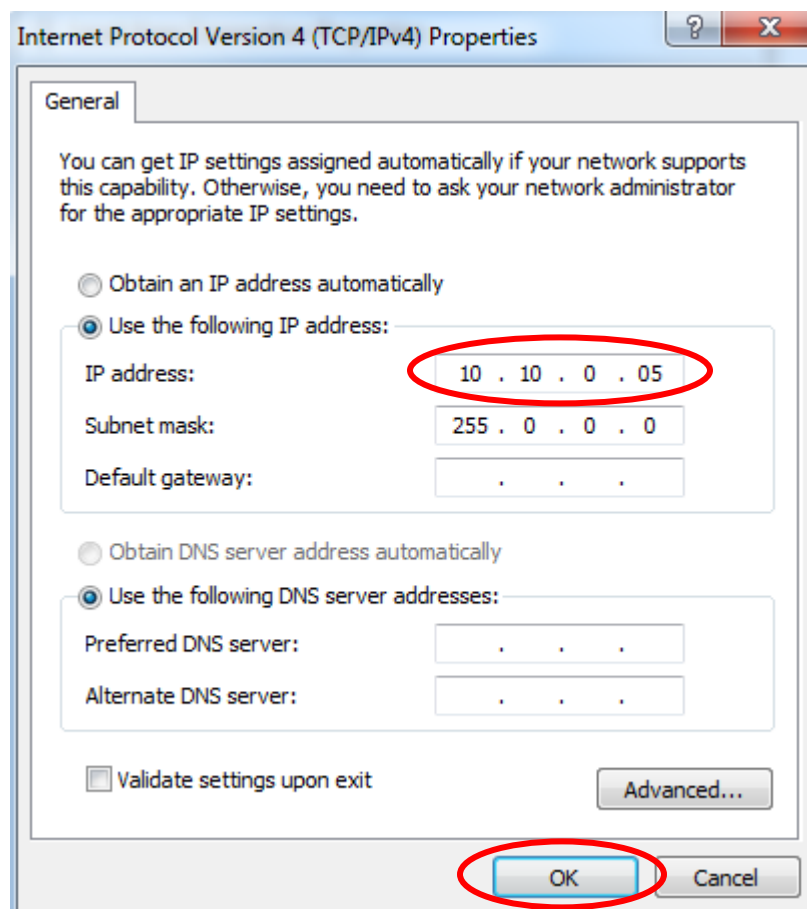
2. คลิกที่ Change adapter setting



3. ดับเบิลคลิกที่  Local Area Connection Network cable unplugged Atheros AR8152 PCI-E Fast Ethernet... แล้วคลิก Internet Protocol Version 4 (TCP/IPv4) แล้วเลือก Properties



4. เลือกที่ Use the following IP address และเปลี่ยน IP address เป็น 10.10.0.05 แล้วคลิก OK



## คำแนะนำในการใช้ FT-IR Spectrometer

### ความปลอดภัยในการใช้ FT-IR Spectrometer

- แสงเลเซอร์ที่ใช้ในการควบคุม Interferometer นั้นสามารถทำอันตรายต่อดวงตาได้ ดังนั้นควรหลีกเลี่ยงการมองแสงเลเซอร์นานๆ
- ห้ามทำการใช้เครื่อง เมื่อไม่มีฝาครอบ หรือเมื่อฝาครอบเกิดการชำรุด เพราะอาจทำให้แสงเลเซอร์หลุดรอดออกมาภายนอกได้
- เมื่อจะทำการ maintenance เครื่องหรือเปิดฝาครอบเครื่อง ควรปิดสวิทช์เครื่องก่อนทุกครั้ง
- ควรเก็บน้ำหรือตัวกลางนำไฟฟ้าให้ห่างจากเครื่อง
- ห้ามวางสิ่งของบังช่องระบายอากาศของส่วนแหล่งกำเนิดแสง เนื่องจากจะทำให้การระบายความร้อนเกิดได้ไม่ดี ซึ่งอาจทำลายแหล่งกำเนิดแสงหรือส่วนอิเล็กทรอนิกส์ของเครื่องได้
- ห้ามวางสิ่งของใดๆ บนเครื่อง เนื่องจากอาจตกลงมาและทำอันตรายต่อส่วนประกอบของเครื่อง

### สิ่งจำเป็นสำหรับเครื่อง FT-IR Spectrometer

- อุณหภูมิที่เหมาะสมควรอยู่ในช่วง 18 - 30 °C และความชื้นไม่ควรเกิน 70 % ในระหว่างทำการทดลอง อุณหภูมิควรเปลี่ยนแปลงไม่เกิน 1 °C ต่อชั่วโมงและ 2 °C ต่อวัน
- ไม่ควรตั้งเครื่องไว้ในบริเวณที่แออัดหรือใกล้แหล่งที่เกิดการสั่น เช่น ปล่อยระบายอากาศ แอร์คอนดิชันเนอร์ มอเตอร์ ฯลฯ
- หลีกเลี่ยงการตั้งเครื่องไว้ในบริเวณใกล้แหล่งรบกวนการนำไฟฟ้า แหล่งกำเนิดคลื่นแม่เหล็กหรือแหล่งรบกวนความถี่วิทยุ
- เพื่อให้ได้การปฏิบัติการของเครื่องที่ได้ผลดีที่สุด สารดูดความชื้นควรมีการเปลี่ยนหรืออบไล่ความชื้นเป็นประจำ การอบสารดูดความชื้นที่ใช้แล้วควรอบที่อุณหภูมิไม่เกิน 100 - 140 °C อย่างน้อย 24 ชั่วโมง
- แก๊ส N<sub>2</sub> หรือ Dry air ที่ต้องการใช้ไล่ความชื้นและ แก๊สคาร์บอนไดออกไซด์ออกจาก เครื่อง ควรจะมี flow rate ไม่เกิน 0.055 ลิตรต่อนาที และ ความดัน 2 บาร์ (หรือประมาณ 29 psi)