



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 109211406 B

(45) 授权公告日 2021.06.15

(21) 申请号 201810738365.2

(51) Int.CI.

(22) 申请日 2018.07.06

G01J 3/45 (2006.01)

(65) 同一申请的已公布的文献号

G01J 3/02 (2006.01)

申请公布号 CN 109211406 A

(56) 对比文件

(43) 申请公布日 2019.01.15

JP S6344131 A, 1988.02.25

(30) 优先权数据

CN 102865927 A, 2013.01.09

2017-133439 2017.07.07 JP

US 2003007155 A1, 2003.01.09

(73) 专利权人 株式会社岛津制作所

PRESES JM 等.Fourier-transform

地址 日本京都府

spectrophotometer for time-resolved

(72) 发明人 加藤大二郎 和久田真也

emission measurements using a 100-point

(74) 专利代理机构 北京林达刘知识产权代理事

transient digitizer.《Review of Scientific

务所(普通合伙) 11277

Instruments》.1993, 第64卷(第1期), 第95-102

代理人 刘新宇

页.

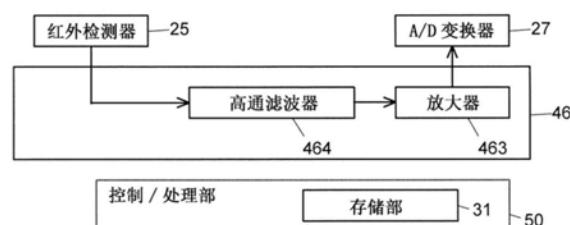
审查员 张婷

(54) 发明名称

傅立叶变换红外分光光度计

(57) 摘要

提供一种傅立叶变换红外分光光度计,无论在出现正电压的最大峰和负电压的最大峰中的哪一个最大峰的情况下都能够有效地使用A/D变换器的输入范围。傅立叶变换红外分光光度计具备:光源,其产生具有包含分析对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光;干涉仪,其包括固定镜和移动镜,从红外光生成干涉光;检测器,其生成与干涉光的强度相应的大小的电压,输出从该电压减去规定大小的电压所得到的电压;高通滤波器,其使来自检测器的输出电压中包含的规定频率以上的成分通过;放大部,其将来自高通滤波器的输出电压以规定倍率进行放大;以及A/D变换部,其将来自放大部的输出电压变换为数字信号。



1. 一种傅立叶变换红外分光光度计, 其特征在于, 具备:
 - a) 光源, 其产生具有包含分析对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光;
 - b) 干涉仪, 其包括固定镜和移动镜, 从所述红外光生成干涉光;
 - c) 检测器, 其生成与所述干涉光的强度相应的大小的电压, 输出从该电压减去规定大小的电压所得到的电压;
 - d) 高通滤波器, 其将来自所述检测器的输出电压的波形中包含的最大峰变换为朝向正电压侧和负电压侧对称扩展的波形;
 - e) 放大部, 其将来自所述高通滤波器的输出电压以规定倍率进行放大; 以及
 - f) A/D变换部, 其将来自所述放大部的输出电压变换为数字信号。
2. 一种傅立叶变换红外分光光度计, 其特征在于, 具备:
 - a) 光源, 其产生具有包含分析对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光;
 - b) 干涉仪, 其包括固定镜和移动镜, 从所述红外光生成干涉光;
 - c) 检测器, 其生成与所述干涉光的强度相应的大小的电压, 输出从该电压减去规定大小的电压所得到的电压;
 - d) 极性反转部, 其使被输入的电压的极性反转并将极性反转后的电压输出;
 - e) 偏置电压加法部, 其对被输入的电压加上规定大小的偏置电压;
 - f) 放大部, 其将被输入的电压以规定倍率进行放大;
 - g) A/D变换部, 其将被输入的电压变换为数字信号;
 - h) 第一信号处理部, 其执行利用所述偏置电压加法部和所述放大部依次对从所述检测器输出的电压进行处理的第一信号处理;
 - i) 第二信号处理部, 其执行利用所述极性反转部、所述偏置电压加法部以及所述放大部依次对从所述检测器输出的电压进行处理的第二信号处理;
 - j) 判定部, 其将所述第一信号处理后的电压和所述第二信号处理后的电压分别输入到所述A/D变换部, 判定该电压是否在所述A/D变换部的输入范围内; 以及
 - k) 信号处理决定部, 其基于由所述判定部得到的判定结果, 来决定在实际测定时通过所述第一信号处理和所述第二信号处理中的哪个处理对从所述检测器输出的电压进行处理。
3. 一种傅立叶变换红外分光光度计, 其特征在于, 具备:
 - a) 光源, 其产生具有包含分析对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光;
 - b) 干涉仪, 其包括固定镜和移动镜, 从所述红外光生成干涉光;
 - c) 检测器, 其生成与所述干涉光的强度相应的大小的电压, 输出从该电压减去规定大小的电压所得到的电压;
 - d) 偏置电压加法部, 其对被输入的电压加上规定的正的偏置电压或负的偏置电压, 该正的偏置电压的绝对值与该负的偏置电压的绝对值相同;
 - e) 放大部, 其将被输入的电压以规定倍率进行放大;
 - f) A/D变换部, 其将被输入的电压变换为数字信号;
 - g) 第一信号处理执行部, 其执行对从所述检测器输出的电压加上所述正的偏置电压并将相加得到的电压以所述规定倍率进行放大的第一信号处理;
 - h) 第二信号处理执行部, 其执行对从所述检测器输出的电压加上所述负的偏置电压并

将相加得到的电压以所述规定倍率进行放大的第二信号处理；

i) 判定部，其将所述第一信号处理后的电压和所述第二信号处理后的电压分别输入到所述A/D变换部，判定该电压是否在所述A/D变换部的输入范围内；以及

j) 信号处理决定部，其基于由所述判定部得到的判定结果，来决定在实际测定时通过所述第一信号处理和所述第二信号处理中的哪个处理对从所述检测器输出的电压进行处理。

傅立叶变换红外分光光度计

技术领域

[0001] 本发明涉及一种傅立叶变换红外分光光度计(FTIR:Fourier Transform Infrared Spectrometer)。

背景技术

[0002] 在傅立叶变换红外分光法中,使用一种包括分束器、固定镜以及移动镜的迈克尔逊(Michelson)型干涉仪等干涉仪。在干涉仪中,使移动镜的位置移动来对由固定镜反射的光和由移动镜反射的光赋予光路长度差,由此能够获得与该光路长度差相应地在不同的相位发生了干涉的光。通过使移动镜依次移动并进行以下动作来获得干涉图(图1):将具有包含试样中含有的测定对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光导入到干涉仪来生成干涉光,对试样照射该干涉光后测定透过光的强度,其中,该干涉图表示透过光强度相对于移动镜的移动距离的变化。通过对该干涉图进行傅立叶变换,来获得将纵轴设为强度、将横轴设为波数的功率谱(例如专利文献1~3)。

[0003] 图2表示以往使用的傅立叶变换红外分光光度计的主要部分结构。傅立叶变换红外分光光度计100大致由配置在气密室101内的干涉部和配置在气密室101外的测定部构成。干涉部具备光源102、聚光镜103、准直镜104、分束器105、固定镜106以及移动镜107。另外,测定部具备抛物面镜112、试样室113、椭圆面镜115以及检测器116,在试样室113内配置试样114。

[0004] 从光源102射出的红外光经由聚光镜103、准直镜104被照射到分束器105,被分束器105分割成朝向固定镜106和移动镜107的两个方向。被固定镜106和移动镜107分别反射的红外光返回到分束器105并合流,从气密室101的窗108射出后去向抛物面镜112。被抛物面镜112会聚后的光被照射到试样室113内的试样114。通过了试样114的光被椭圆面镜115会聚到检测器116的检测面上而被检测。当使移动镜107沿前后(图2的箭头M的方向)进行往复运动时,被固定镜106反射的红外光的光路长度与被移动镜107反射的红外光的光路长度之差发生变化,生成与该光路长度差相应地在不同的相位发生了干涉的红外干涉光。通过了试样114的红外干涉光被检测器116检测。

[0005] 作为检测器116,例如使用具有热电元件和结型场效应晶体管的热电检测器。热电元件生成与红外光的入射光量相应的电荷来产生电流。结型场效应晶体管的栅极连接有热电元件,另外,源极连接有电阻。当入射红外光时,连接有热电元件的栅极的电压变化,从源极流出的电流量变化,连接于源极的电阻的两端的电位差变化。通过检测该电位差来获得与红外光的入射光量相应的电压值。在没有被照射红外线时,对栅极施加与从漏极至栅极的漏电流及热电元件的电阻相当的电压,在所述电阻的两端产生偏移电压。在热电检测器的情况下,从该偏移电压起的变动以正负的电压值的形式输出(在图3中用实线表示的波形)。为了与图1所示的干涉图进行区分,以下将图3所示的波形称为“减法波形”。

[0006] 专利文献1:日本特开2012-7964号公报

[0007] 专利文献2:日本特开2002-22536号公报

- [0008] 专利文献3:日本特开2003-14543号公报
[0009] 专利文献4:日本特开2007-205793号公报

发明内容

- [0010] 发明要解决的问题

[0011] 在傅立叶变换红外分光光度计中,在移动镜107处于某个特定的位置时,被该移动镜107反射的红外光的光路长度与被固定镜106反射的光的光路长度一致。在该状态下,在所有的波长下,在分束器105处合流后的两道反射光的相位一致而彼此增强,检测到最高强度的红外光。与该红外光对应的干涉图上的峰被称为中心爆发(参照图1)。该中心爆发与在图3中用实线表示的减法波形的正电压侧出现的最大峰对应。当移动镜107偏离所述特定的位置时,两道反射光产生光路长度差,两道反射光按每个波长而在不同的相位差下发生干涉,因此被检测的红外光的强度以波动方式变化。

[0012] 但是,在实际的测定中,红外光通过被用作分束器105的在表面蒸镀有Ge等的薄膜的一对窗构件时的折射率根据波长的不同而不同,另外,该一对窗构件的厚度严格来说也并不均匀。因此存在以下情况:对于所有波长的红外光而言,两道反射光的相位不同时一致,相反地,所述两道反射光的相位差为 π ,光彼此减弱的波长变多,朝向下方地出现最大的峰(也就是说在负电压侧出现最大峰)。即使是相同装置,在放入了试样时,也由于强烈地吸收了哪处的波长而在正电压侧出现最大峰,或者在负电压侧出现最大峰。在无试样的状态下峰固定,因此能够事先某种程度地预测每个装置的最大峰的高度、正负,但无法事先预测正电压的峰和负电压的峰中的哪一个峰出现。

[0013] 这样,由于无法事先预测正电压的最大峰和负电压的最大峰中的哪一个最大峰出现,因此以使无论出现了哪一个峰的情况下都收敛于A/D变换器的输入范围内的方式设定放大器的放大率。但是,在实际的测定中,仅在正电压侧和负电压侧中的某一侧出现最大峰,因此在如图3中用实线表示的减法波形那样在正电压侧出现了最大峰的情况下,负电压侧的输入范围中的大部分未被使用,在如用虚线表示的减法波形那样在负电压侧出现了最大峰的情况下,正电压侧的输入范围中的大部分未被使用,因此存在A/D变换器的输入范围的一部分变得浪费这样的问题。

[0014] 本发明所要解决的课题在于,提供一种无论在出现正电压的最大峰和负电压的最大峰中的哪一个最大峰的情况下都能够有效地使用A/D变换器的输入范围的傅立叶变换红外分光光度计。

- [0015] 用于解决问题的方案

[0016] 为了解决上述课题而完成的本发明所涉及的傅立叶变换红外分光光度计的第一方式具备:

- [0017] a) 光源,其产生具有包含分析对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光;
- [0018] b) 干涉仪,其包括固定镜和移动镜,从所述红外光生成干涉光;
- [0019] c) 检测器,其生成与所述干涉光的强度相应的大小的电压,输出从该电压减去规定大小的电压所得到的电压;
- [0020] d) 极性反转部,其使被输入的电压的极性反转并将极性反转后的电压输出;
- [0021] e) 偏置电压加法部,其对被输入的电压加上规定大小的偏置电压;

- [0022] f) 放大部,其将被输入的电压以规定倍率进行放大;
- [0023] g) A/D变换部,其将被输入的电压变换为数字信号;
- [0024] h) 第一信号处理部,其执行利用所述偏置电压加法部和所述放大部依次对从所述检测器输出的电压进行处理的第一信号处理;
- [0025] i) 第二信号处理部,其执行利用所述极性反转部、所述偏置电压加法部以及所述放大部依次对从所述检测器输出的电压进行处理的第二信号处理;
- [0026] j) 判定部,其将所述第一信号处理后的电压和所述第二信号处理后的电压分别输入到所述A/D变换部,判定该电压是否在所述A/D变换部的输入范围内;以及
- [0027] k) 信号处理决定部,其基于由所述判定部得到的判定结果,来决定在实际测定时通过所述第一信号处理和所述第二信号处理中的哪个处理对从所述检测器输出的电压进行处理。
- [0028] 所述检测器例如是热电检测器,在该热电检测器的情况下,生成与干涉光的强度相应的大小的电压,输出从该电压减去规定大小的直流电压(偏移电压)所得到的电压。作为检测器,除了使用热电检测器以外,也能够使用输出从与干涉光的强度相应的大小的电压减去其直流成分所得到的电压的检测器。例如,能够使用作为量子型检测器的MCT检测器、InGaAs检测器等。该直流成分相当于不包含构成傅立叶变换后的吸收谱的频率成分的信息的成分,对于该直流成分,例如能够使用在不使从光源发出的红外光发生干涉地就对该红外光进行了检测时生成的电压值。或者,也可以使用基于从光源发出的红外光的强度以及干涉仪等中包括的各光学部件的光吸收的大小而得到的计算值。
- [0029] 能够通过确认来自A/D变换部的输出信号是否为饱和信号来进行所述判定部的判定。
- [0030] 在傅立叶变换红外分光光度计中,难以预测减法波形的最大峰出现在正电压侧和负电压侧中的哪一侧,但其峰高度(绝对值)大致固定。因而,能够根据预实验或过去的测定的结果来决定所述偏置电压的大小或所述预先决定的倍率。
- [0031] 在上述第一方式的傅立叶变换红外分光光度计中,进行对从检测器输出的电压加上偏置电压后进行放大的第一信号处理和使从检测器输出的电压的极性反转并加上偏置电压后进行放大的第二信号处理,判定两处理后的电压是否在A/D变换部的输入范围内。例如,在最大峰出现在正电压侧且所述偏置电压为负值的情况下,如图4的(a)所示,在第一信号处理中通过偏置电压的加法运算来使电压信号向负方向位移,在减法波形的最大峰的高度变低(绝对值变小)之后用放大器进行放大。这样,当通过偏置电压的加法运算使电压信号位移以使最大峰的高度的绝对值变小时,放大后的电压信号收敛于A/D变换器的输入范围内。另一方面,在使极性反转的第二信号处理中,如图4的(b)所示,通过偏置电压的加法运算使最大峰的高度进一步变高(绝对值变大),之后用放大器进行放大,因此该放大后的电压信号脱离A/D变换器的输入范围并输出饱和信号。因而,在该情况下,通过信号处理决定部将第一信号处理决定为实际测定时的处理方法。相反地,在减法波形的最大峰在负电压侧的情况下,在第一信号处理的情况下放大后的电压信号脱离A/D变换器的输入范围,在第二信号处理的情况下放大后的电压信号收敛于A/D变换器的输入范围内,将第二信号处理决定为实际测定时的处理方法。这样,在第一方式的傅立叶变换红外分光光度计中,在实际测定时进行以下处理:使减法波形整体向降低最大峰的高度的方向位移,在将偏向于正

电压侧或负电压侧的波形变换为向两侧均等地扩展的波形之后将电压信号放大。因此,能够有效地使用A/D变换器的正电压侧和负电压侧这两侧的输入范围。

[0032] 另外,本发明所涉及的傅立叶变换红外分光光度计的第二方式具备:

[0033] a) 光源,其产生具有包含分析对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光;

[0034] b) 干涉仪,其包括固定镜和移动镜,从所述红外光生成干涉光;

[0035] c) 检测器,其生成与所述干涉光的强度相应的大小的电压,输出从该电压减去规定大小的电压所得到的电压;

[0036] d) 偏置电压加法部,其对被输入的电压加上规定的正的偏置电压或负的偏置电压,该正的偏置电压的绝对值与该负的偏置电压的绝对值相同;

[0037] e) 放大部,其将被输入的电压以规定倍率进行放大;

[0038] f) A/D变换部,其将被输入的电压变换为数字信号;

[0039] g) 第三信号处理执行部,其执行对从所述检测器输出的电压加上所述正的偏置电压并将相加得到的电压以所述规定倍率进行放大的第三信号处理;

[0040] h) 第四信号处理执行部,其执行对从所述检测器输出的电压加上所述负的偏置电压并将相加得到的电压以所述规定倍率进行放大的第四信号处理;

[0041] i) 判定部,其将所述第三信号处理后的电压和所述第四信号处理后的电压分别输入到所述A/D变换部,判定该电压是否在所述A/D变换部的输入范围内;以及

[0042] j) 信号处理决定部,其基于由所述判定部得到的判定结果,来决定在实际测定时通过所述第三信号处理和所述第四信号处理中的哪个处理对从所述检测器输出的电压进行处理。

[0043] 在上述第二方式的傅立叶变换红外分光光度计中,在正电压侧出现了最大峰的情况下,通过所述第四信号处理,以降低其峰高度的方式使减法波形整体位移,来将偏向于正电压侧的波形变换为向两侧均等地扩展的波形,另外,在负电压侧出现了最大峰的情况下,通过所述第三信号处理,以降低其峰高度的方式使减法波形整体位移,来将偏向于负电压侧的波形变换为向两侧均等地扩展的波形。因而,与上述第一方式的傅立叶变换红外分光光度计同样地,能够有效地使用A/D变换器的正电压侧和负电压侧这两侧的输入范围。

[0044] 并且,本发明所涉及的傅立叶变换红外分光光度计的第三方式具备:

[0045] a) 光源,其产生具有包含分析对象化合物的吸收波长的波长宽度的红外光;

[0046] b) 干涉仪,其包括固定镜和移动镜,从所述红外光生成干涉光;

[0047] c) 检测器,其生成与所述干涉光的强度相应的大小的电压,输出从该电压减去规定大小的电压所得到的电压;

[0048] d) 高通滤波器,其使来自所述检测器的输出电压中包含的规定频率以上的成分通过;

[0049] e) 放大部,其将来自所述高通滤波器的输出电压以规定倍率进行放大;以及

[0050] f) A/D变换部,其将来自所述放大部的输出电压变换为数字信号。

[0051] 在第三方式的傅立叶变换红外分光光度计中,使用高通滤波器使从检测器输出的电压中的规定频率以上的成分通过。高通滤波器也作为微分电路而被知晓(例如专利文献4)。在第三方式的傅立叶变换红外分光光度计中,使用高通滤波器将所述规定频率设定为接近减法波形中包含的主要频率的值,由此对偏向于正电压侧或负电压侧的波形进行微分

处理来变换为向两个方向大致均等地扩展的波形。因而,能够有效地使用A/D变换器的正电压侧和负电压侧这两侧的输入范围。

[0052] 发明的效果

[0053] 通过使用本发明所涉及的第一方式至第三方式的傅立叶变换红外分光光度计,无论在出现正电压的最大峰和负电压的最大峰中的哪一个最大峰的情况下都能够有效地使用A/D变换器的输入范围。

附图说明

[0054] 图1是用傅立叶变换红外分光光度计获得的干涉图的一例。

[0055] 图2是以往的傅立叶变换红外分光光度计的主要部分结构图。

[0056] 图3是说明以往的傅立叶变换红外分光光度计的减法波形与A/D变换器的输入范围的关系的图。

[0057] 图4的(a)和(b)是示意性地表示本发明所涉及的傅立叶变换红外分光光度计的第一方式中的信号处理的图。

[0058] 图5是说明在实施例1~3的傅立叶变换红外分光光度计中共用的结构的图。

[0059] 图6是说明在实施例1的傅立叶变换红外分光光度计中使用的信号处理部以及控制/处理部的结构的图。

[0060] 图7的(a)和(b)是说明实施例1的傅立叶变换红外分光光度计的信号处理的流程的图。

[0061] 图8是说明在实施例2的傅立叶变换红外分光光度计中使用的信号处理部以及控制/处理部的结构的图。

[0062] 图9的(a)和(b)是说明实施例2的傅立叶变换红外分光光度计的信号处理的流程的图。

[0063] 图10是说明在实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中使用的信号处理部以及控制/处理部的结构的图。

[0064] 图11是说明实施例3的傅立叶变换红外分光光度计的信号处理的流程的图。

[0065] 图12是针对1kHz正弦波的正侧半波加入了1kHz的高通滤波器的情况下的模拟波形。

[0066] 附图标记说明

[0067] 10:气密室;11:光源;12:聚光镜;13:准直镜;14:分束器;15:固定镜;16:移动镜;16a:移动镜驱动部;17:激光光源;18、19:反射镜;20:检测器;21:抛物面镜;22:试样室;23:试样;24:椭圆面镜;25:检测器;26、36、46:信号处理部;261:极性反转部;262、362:偏置电压加法部;263、363、463:放大器;464:高通滤波器;27:A/D变换器;29:信号生成部;30、40、50:控制/处理部;31:存储部;32、42:判定部;33、43:信号处理决定部;60:输入部;70:显示部。

具体实施方式

[0068] 以下,参照附图对与本发明所涉及的傅立叶变换红外分光光度计有关的三个实施例进行说明。

[0069] 图5是在三个实施例的傅立叶变换红外分光光度计中共用的主要部分结构图。在傅立叶变换红外分光光度计中设置有：主干涉仪，其用于获得干涉图；以及控制干涉仪，其用于控制移动镜的滑动速度或者生成对由主干涉仪的检测器获得的信号进行采样的定时信号。主干涉仪包括光源11、聚光镜12、准直镜13、分束器14、固定镜15以及移动镜16，产生用于进行谱测定的干涉红外光。从光源11射出的红外光经由聚光镜12、准直镜13被照射到分束器14，在此被分割为朝向固定镜15和移动镜16这两个方向的光。被固定镜15和移动镜16分别反射的光被分束器14再次合流，被送到去向抛物面镜21的光路。此时，利用移动镜驱动部16a沿前后(图5中的箭头M的方向)对移动镜16进行往复驱动，因此被合二为一后的光成为强度随时间变动的干涉光。被抛物面镜21会聚的光被照射到试样室22内，通过了配置于试样室22的试样23的光被椭圆面镜24会聚至检测器25。

[0070] 另一方面，控制干涉仪包括激光光源17、反射镜18、(所述的)分束器14、(所述的)固定镜15以及(所述的)移动镜16，产生用于获得干涉条纹信号的激光干涉光。从激光光源17射出的光经由反射镜18被照射到分束器14，与上述红外光同样地成为干涉光并朝向抛物面镜21的方向。该激光干涉光成为直径非常小的光束并行进，由被插入到去向抛物面镜21的光路的中途的反射镜19反射后被导入到检测器20。

[0071] 构成主干涉仪和控制干涉仪的光学部件被配置在气密室10内，气密室10内的湿度受到控制。这主要是为了保护将具有潮解性的KBr设为基板的分束器14等光学元件。

[0072] 检测器20的受光信号、即干涉条纹信号被输入到信号生成部29，在此，生成用于对与红外干涉光对应的受光信号进行采样的脉冲信号。另外，该激光干涉条纹信号还用于进行移动镜16的滑动控制。

[0073] 通过了被配置在试样室22内的试样23的干涉光被椭圆面镜24会聚并被检测器25检测。本实施例的检测器25是具有热电元件和结型场效应晶体管的热电检测器，输出正负的电压，该正负的电压同由热电元件根据红外光的强度生成的量的电荷所对应的电压与结型场效应晶体管的偏移电压之差相当。

[0074] 在信号处理部26(36、46)中对由检测器25得到的受光信号实施后述的实施例各自特有的处理，在A/D变换器27中将处理后的受光信号变换为数字信号并发送到控制/处理部30(40、50)。在控制/处理部30(40、50)中执行规定的数据处理之后进行傅立叶变换运算来制作吸收谱。

[0075] 控制/处理部30(40、50)也能够设为具备存储部31的专用的控制/处理装置，一般来说，该控制/处理部30(40、50)的实体是安装有专用的控制/处理软件的个人计算机，连接有用于进行各种输入操作的键盘和指示设备(鼠标等)构成的输入部60、以及用于显示测定结果等的液晶显示器等显示部70。

[0076] 【实施例1】

[0077] 在图6中示出在实施例1的傅立叶变换红外分光光度计中使用的信号处理部26以及控制/处理部30的结构。实施例1的信号处理部26具备：极性反转部261，其使被输入的电压的极性反转并将极性反转后的电压输出；偏置电压加法部262，其对被输入的电压加上规定大小的偏置电压；以及放大器263，其将被输入的电压以规定倍率进行放大。此外，极性反转部261、偏置电压加法部262以及放大器263的实体分别是电路，利用以往已知的各种电路的组合来实现后述的各部的功能。控制/处理部30除了具备存储部31以外，还具备判定部

32、信号处理决定部33来作为功能块。例如通过执行在被用作控制/处理部30的计算机中安装的规定程序来具体实现这些功能块。

[0078] 在实施例1的傅立叶变换红外分光光度计中,在实际测定试样前,进行用于决定在该测定时使用的信号处理的方法的预测定。控制/处理部30基于由使用者例如通过输入部60输入的指示来使傅立叶变换红外分光光度计的各部进行动作,由此进行该预测定。或者,也可以在接通了傅立叶变换红外分光光度计的电源时或在上次实际测定试样后经过了规定时间以上的时间的情况下,控制/处理部30自动地进行预测定。

[0079] 在预测定中,一边使移动镜16的位置移动,一边依次测定向检测器25入射的红外干涉光的强度。进行两次该预测定,在最初的测定时实施第一信号处理,而在第二次测定时实施第二信号处理。

[0080] 在最初的预测定时进行的第一信号处理中,不使从检测器25输出且被输入到极性反转部261的电压的极性反转,而直接输入到偏置电压加法部262。或者,也可以使用被配设在极性反转部261的跟前的信号路径的切换开关,来使电压不输入到极性反转部261,而直接输入到偏置电压加法部262。在偏置电压加法部262中,对被依次输入的电压加上规定的偏置电压并输出。加上偏置电压所得到的电压被放大器263放大到规定倍率并被输出。从放大器263输出的电压在A/D变换器27中被变换为数字信号并被保存于控制/处理部30内的存储部31。

[0081] 在第二次预测定时进行的第二信号处理中,在使从检测器25输出且被输入到极性反转部261的电压的极性反转后输入到偏置电压加法部262。在偏置电压加法部262中,对被依次输入的极性反转后的电压加上规定的偏置电压并输出。加上偏置电压所得到的电压被放大器263放大到规定倍率并被输出。从放大器263输出的电压在A/D变换器27中被变换为数字信号并被保存于控制/处理部30内的存储部31。这样,第一信号处理与第二信号处理在是否使来自检测器25的输出电压的极性反转这一点上不同。

[0082] 在图7中示出使用了示意性的减法波形的具体的信号处理的一例。在图7中,为了容易地理解实施例1中的信号处理的特征,将波形进行了简化,但在实际的测定中获得的减法波形更加复杂。在后述的实施例2和实施例3中,在说明时使用的波形也同样。在此,设想从检测器25输出最大峰的电压的绝对值为4V、与该最大峰的极性相反的一侧的最大输出电压的绝对值为1V的减法波形的情况下,将偏置电压设为-1.5V,将放大率设为2倍。另外,A/D变换器27的输入范围是-5V~+5V。无法事先预测在用傅立叶变换红外分光光度计获取的干涉图(图1)中是朝向上方地出现最大峰还是朝向下方地出现最大峰(换句话说,在如图3那样的减法波形中是在正电压侧出现最大峰还是在负电压侧出现最大峰),但该最大峰的大小(电压的绝对值)大致固定,因此能够事先设想构成减法波形的电压范围。因而,能够预先基于该电压范围和A/D变换器27的输入范围来决定偏置电压的大小和放大率。

[0083] 在减法波形的最大峰出现在正电压侧(即,减法波形的输出电压范围是-1V~+4V)的情况下,在第一信号处理中如图7的(a)所示那样对减法波形进行处理。其结果,从放大器263输出的电压的范围为-5V~+5V,收敛在A/D变换器27的输入范围内。另一方面,在第二信号处理中,如图7的(b)所示那样对减法波形进行处理。其结果,从放大器263输出的电压范围为-11V~-1V,脱离A/D变换器27的输入范围。当输入这种电压时,从A/D变换器27输出饱和信号并保存于存储部31,因此判定部32能够通过确认存储部31中保存的信号是否饱和来

判定第一信号处理后的输出电压和第二信号处理后的输出电压各自是否收敛于A/D变换器27的输入范围内。在由判定部32进行判定后,信号处理决定部33将第一信号处理和第二信号处理中的、使处理后的电压收敛于A/D变换器27的输入范围内的一方决定为在实际测定时使用的信号处理方法。

[0084] 在此,说明了减法波形的最大峰出现在正电压侧的例子,但在减法波形的最大峰出现在负电压侧的情况下也同样地进行处理,信号处理决定部33将第二信号处理决定为实际测定时的信号处理方法。另外,在此将偏置电压设为负电压,但也能够将偏置电压设为正电压。

[0085] **【实施例2】**

[0086] 在图8中示出在实施例2的傅立叶变换红外分光光度计中使用的信号处理部36以及控制/处理部40的结构。实施例2的信号处理部36具备:偏置电压加法部362,其对被输入的电压加上正的偏置电压或负的偏置电压,该正的偏置电压的绝对值与该负的偏置电压的绝对值相同;以及放大器363,其将被输入的电压以规定倍率进行放大。偏置电压加法部362和放大器363的实体分别是电路,利用以往已知的各种电路的组合来实现后述的各部的功能。控制/处理部40也与实施例1的控制/处理部30同样地,除了具备存储部31以外,还具备判定部42和信号处理决定部43来作为功能块。通过执行例如在被用作控制/处理部40的计算机中安装的规定程序来具体实现这些功能块。

[0087] 在实施例2的傅立叶变换红外分光光度计中,也在实际测定时进行用于决定在该测定时使用的信号处理的方法的预测定。控制/处理部40例如基于由使用者通过输入部60输入的指示来使傅立叶变换红外分光光度计的各部进行动作,由此进行该预测定。或者,也可以在接通了傅立叶变换红外分光光度计的电源时、或在上次实际测定时经过规定时间以上的时间的情况下,控制/处理部40自动地进行预测定。

[0088] 在预测定中,一边使移动镜16的位置移动,一边依次测定向检测器25入射的红外干涉光的强度。进行两次该预测定,在最初的测定时实施第三信号处理,而在第二次测定时实施第四信号处理。

[0089] 在最初的预测定时进行的第三信号处理中,偏置电压加法部362对从检测器25依次输出的电压加上正的偏置电压并输出。加上正的偏置电压所得到的电压在放大器363中以规定倍率被放大并被输出。从放大器363输出的电压在A/D变换器27中被变换为数字信号并被保存于控制/处理部40内的存储部31。

[0090] 在第二次预测定时进行的第四信号处理中,偏置电压加法部362对从检测器25依次输出的电压加上绝对值与所述正的偏置电压相同的负的偏置电压并输出。加上负的偏置电压所得到的电压在放大器363中以规定倍率被放大并被输出。从放大器363输出的电压在A/D变换器27中被变换为数字信号并被保存于控制/处理部40内的存储部31。也就是说,在第三信号处理和第四信号处理中,在偏置电压加法部362中与来自检测器25的输出电压相加的偏置电压的极性不同。

[0091] 在图9中示出使用了示意性的减法波形的具体的信号处理的一例。在此,与图7同样地,也设想从检测器25输出最大峰的电压的绝对值为4V、与该最大峰的极性相反的一侧的最大输出电压的绝对值为1V的减法波形的情况下,将偏置电压设为±1.5V,将放大率设为2倍。另外,A/D变换器的输入范围是-5V~+5V。如在实施例1中说明过的那样,无法事先预测

在减法波形中是在正电压侧出现最大峰还是在负电压侧出现最大峰,但该最大峰的大小(电压的绝对值)大致固定,因此能够事先设想构成减法波形的电压范围,基于该电压范围和A/D变换器27的输入范围来预先决定偏置电压的大小(绝对值)。

[0092] 在减法波形的最大峰出现在正电压侧(即,减法波形的输出电压范围是-1V~+4V)的情况下,在上述的第三信号处理中,如图9的(a)所示那样对减法波形进行处理。其结果,从放大器363输出的电压范围为+1V~+11V,脱离A/D变换器27的输入范围。另一方面,在第四信号处理中,如图9的(b)所示那样对减法波形进行处理。其结果,从放大器363输出的电压范围成为-5V~+5V,收敛于A/D变换器27的输入范围内。判定部42能够通过确认存储部31中保存的信号是否饱和来判定第三信号处理后的输出电压和第四信号处理后的输出电压各自是否收敛于A/D变换器27的输入范围内。在由判定部42进行判定后,信号处理决定部43将第三信号处理和第四信号处理中的、使处理后的电压收敛于A/D变换器27的输入范围内的一方决定为在实际测定时使用的信号处理方法。

[0093] 在此,也说明了减法波形的最大峰出现在正电压侧的例子,但在减法波形的最大峰出现在负电压侧的情况下也同样地进行处理,信号处理决定部43将第三信号处理决定为实际测定时的信号处理方法。

[0094] 【实施例3】

[0095] 在图10中示出在实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中使用的信号处理部46以及控制/处理部50的结构。实施例3的信号处理部46具备:高通滤波器(HPF)464,其仅使被输入的电压信号中的规定频率以上的成分的信号通过;以及放大器463,其将被输入的电压以规定倍率进行放大。高通滤波器464和放大器463的实体分别是电路,利用以往已知的各种电路的组合来实现后述的各部的功能。控制/处理部50与实施例1的控制/处理部30和实施例2的控制/处理部40同样地具备存储部31,但不具备判定部和信号处理决定部。

[0096] 在实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中,与实施例1和实施例2不同,不进行预定。因而,例如能够在接通装置的电源并进行光路调整等之后直接进行实际测定。当然,如果需要决定使电压信号通过高通滤波器464的频率范围、放大率或者A/D变换器的输入范围,则也可以进行预定。

[0097] 在图11中示出使用了示意性的减法波形的具体的信号处理的一例。在此,与图7和图9同样地,也设想从检测器25输出最大峰的电压的绝对值为4V、与该最大峰的极性相反的一侧的最大输出电压的绝对值为1V的减法波形的情况下,将放大率设为2倍。另外,A/D变换器的输入范围是-5V~+5V。

[0098] 在实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中,使用高通滤波器464来使从检测器输出的电压中的规定频率以上的成分通过。在此所说的规定频率设为与减法波形(或者干涉图)中包含的主要频率接近的值即可。该值取决于在光源的发光谱中强度大的波长、或干涉仪等的光学系统的结构。减法波形中包含的主要频率由移动镜16的速度和红外光的波长决定。红外光的波长是被试样中含有的测定对象化合物吸收的光的波长,对于光源11,使用该波长下的发光强度大的光源。例如,在移动镜16的速度是2.8mm/s、与测定波长(对应的波数)是 2000cm^{-1} 的情况下,频率 $f=2 \times 2.8(\text{mm/s}) \times 2,000(\text{cm}^{-1}) = 1,120\text{Hz}$,1kHz附近的频率成为主导,因此将高通滤波器464的截止频率设定在1kHz附近即可。

[0099] 高通滤波器464也作为微分电路而被知晓,在实施例3的傅立叶变换红外分光光度

计中,通过使电压信号通过高通滤波器464来对减法波形进行微分处理,该微分处理后的波形在放大器463中被放大并在A/D变换器27中被变换为数字信号。

[0100] 在普通的分析装置中,信号频率大多比噪声频率小,因而,在测定信号的频带中很少使用滤波器。另一方面,在傅立叶变换红外分光光度计中对通过测定获取到的数据进行傅立叶变换,因此信号频率与噪声频率的频带大致相同,因此在测定信号的主要频带的附近使用高通滤波器。当例如针对1kHz的测定信号使用1kHz的高通滤波器时,测定信号和噪声双方减少至 $1/\sqrt{2}$,但与此同时,将偏向于正电压侧或负电压侧的最大峰的波形变换为朝向这两侧均等地(对称地)扩展的波形,不改变A/D变换器27的输入范围就能够将放大器463的放大率设为2倍。在图12中示出针对1kHz正弦波的正侧半波加入了1kHz的高通滤波器的情况下模拟波形。

[0101] 在上述实施例1~3中的任一个实施例中,偏向于正电压侧或负电压侧的减法波形通过各个实施例所特有的信号处理被变换为向正电压侧和负电压侧这两侧(大致)均等地扩展的波形。因此,不会如以往那样在A/D变换器的输入范围内,正电压侧和负电压侧中的没有出现减法波形的最大峰的一侧的输入范围的大部分未被使用而变得浪费。也就是说,能够有效地使用A/D变换器的整个输入范围,最大限度地充分利用其位数,以高分辨率获取测定数据。

[0102] 在此,将在以往的傅立叶变换红外分光光度计、实施例1和实施例2的傅立叶变换红外分光光度计以及实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中获得的测定信号的S/N比进行比较。作为计算的前提条件,将对各个信号处理部进行输入的时间点的S/N设为1。另外,与上述实施例1~3同样地,关于对信号处理部输入的减法波形的形状,将最大峰的峰电压的绝对值设为4V(即,+4V或者-4V),另外,将A/D变换器的输入范围设为-5V~+5V。

[0103] 在以往的傅立叶变换红外分光光度计中,无论在正电压侧和负电压侧中的哪一侧出现了最大峰(绝对值4V)的情况下,都将放大器的放大率设定为1.25倍,使得电压信号收敛于A/D变换器的输入范围(-5V~+5V)这一范围内。另一方面,在实施例1和实施例2中,放大器263(363)中的信号的放大率被设定为2倍。另外,在实施例3中,在通过高通滤波器464的时间点将信号和噪声双方设为 $1/\sqrt{2}$ (=0.71)倍,在放大器463中被放大为2倍。下表中示出对基于这些参数分别获得的A/D变换后的S/N比进行计算所得的结果。

[0104] 【表1】

	输入时	通过HPF后	放大后	A/D变换后
以往	$\frac{S}{N} = \frac{1}{1}$		$\frac{S}{N} = \frac{1.25}{1.25}$	$\frac{S}{N} = \frac{1.25}{1.25 + Vn(AD)}$
实施例1, 2	$\frac{S}{N} = \frac{1}{1}$		$\frac{S}{N} = \frac{2}{2}$	$\frac{S}{N} = \frac{2}{2 + Vn(AD)}$
实施例3	$\frac{S}{N} = \frac{1}{1}$	$\frac{S}{N} = \frac{0.71}{0.71}$	$\frac{S}{N} = \frac{1.42}{1.42}$	$\frac{S}{N} = \frac{1.42}{1.42 + Vn(AD)}$

[0106] 上表中的 V_n (AD)是A/D变换器所特有的噪声,这在以往、实施例1、实施例2以及实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中均相同。因而,根据上表获知,A/D变换后的S/N比按实施例1、实施例2、实施例3、以往的傅立叶变换红外分光光度计的顺序变低。这样,当使用实施例1和实施例2的傅立叶变换红外分光光度计时,能够获得比实施例3的傅立叶变换红外分光光度计高的S/N比的测定数据。另一方面,在实施例1和实施例2的傅立叶变换红外分光光度计中,需要设计并追加用于极性变换、计算偏置电压的电路,但在实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中仅直接使用以往使用的高通滤波器即可,因而,具有与实施例1和实施例2相比能够容易地构成这一优点。另外,在实施例3的傅立叶变换红外分光光度计中,不需要在实际测定试样前进行预测定来决定信号处理方法,因此还能够简化与测定有关的程序。

[0107] 上述实施例是一例,能够按照本发明的主旨适当地变更。作为在上述实施例1~3中共用的结构,图5示出的傅立叶变换红外分光光度计的结构是一例,在上述实施例1~3中说明的信号处理方法同样能够在能够执行傅立叶变换红外分光的各种装置中使用。

[0108] 在上述实施例1和实施例2中,一边使移动镜16移动一边进行第一(第三)信号处理来获取减法波形,之后,再次一边使移动镜16移动一边进行第二(第四)信号处理来获取减法波形,但也可以使移动镜16的位置依次移动来进行以下处理:在相同的移动镜16的位置处进行第一(第三)信号处理和第二(第四)信号处理。

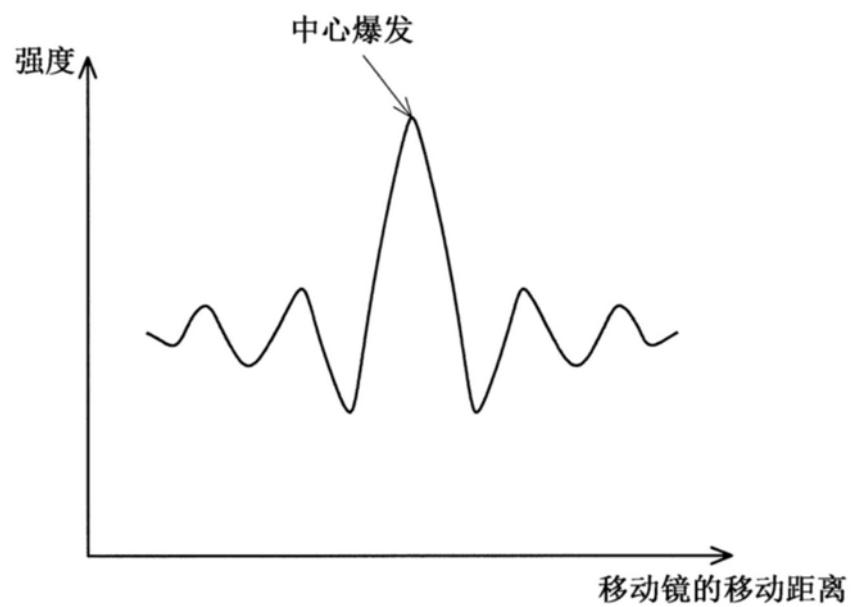


图1

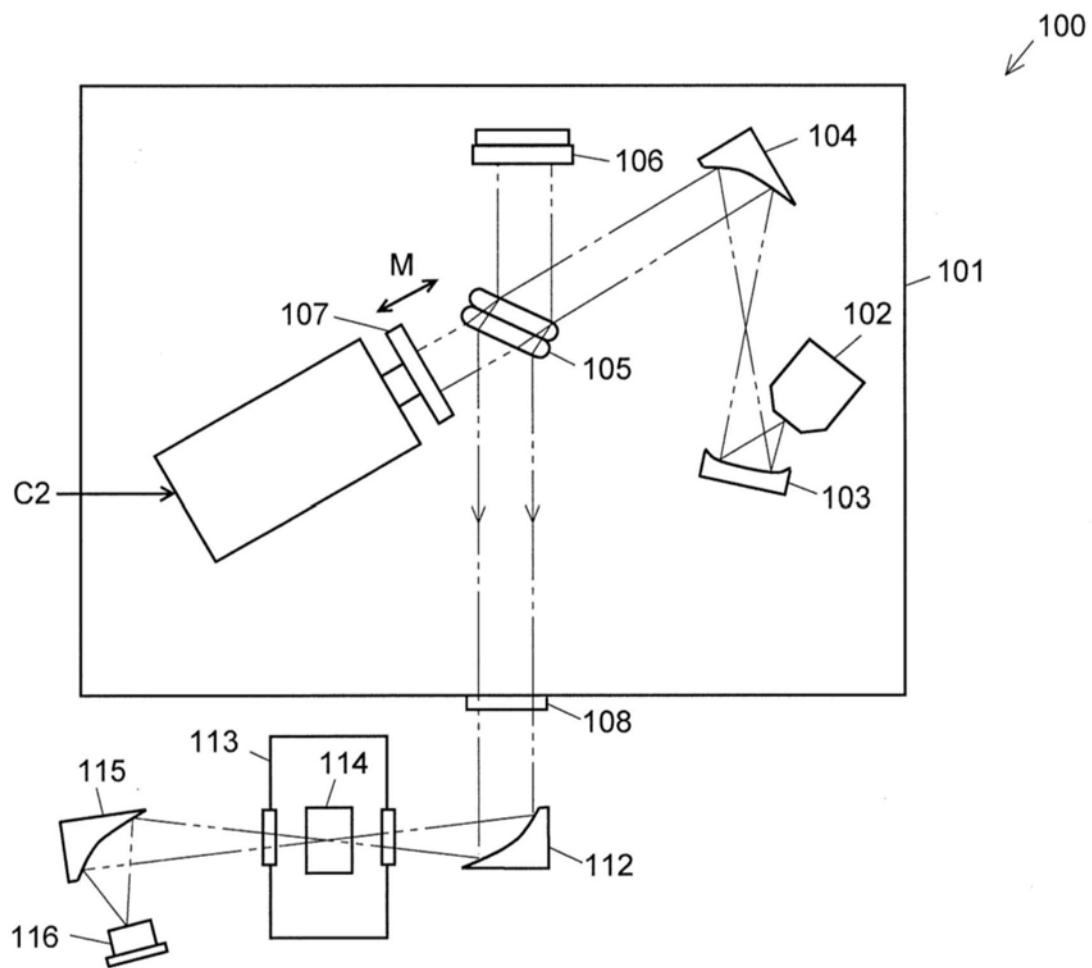


图2

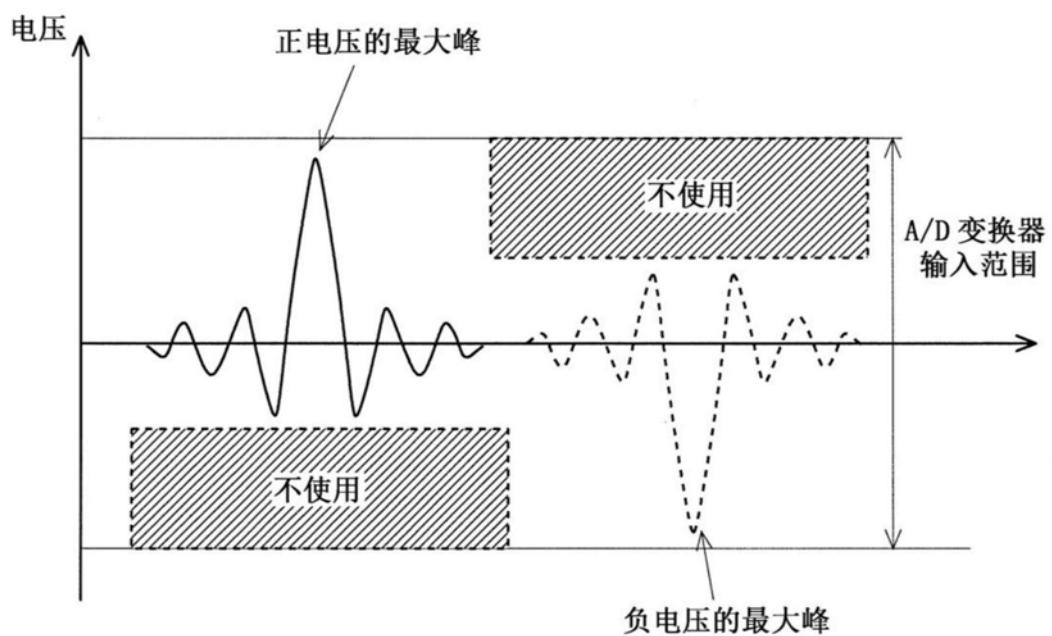


图3

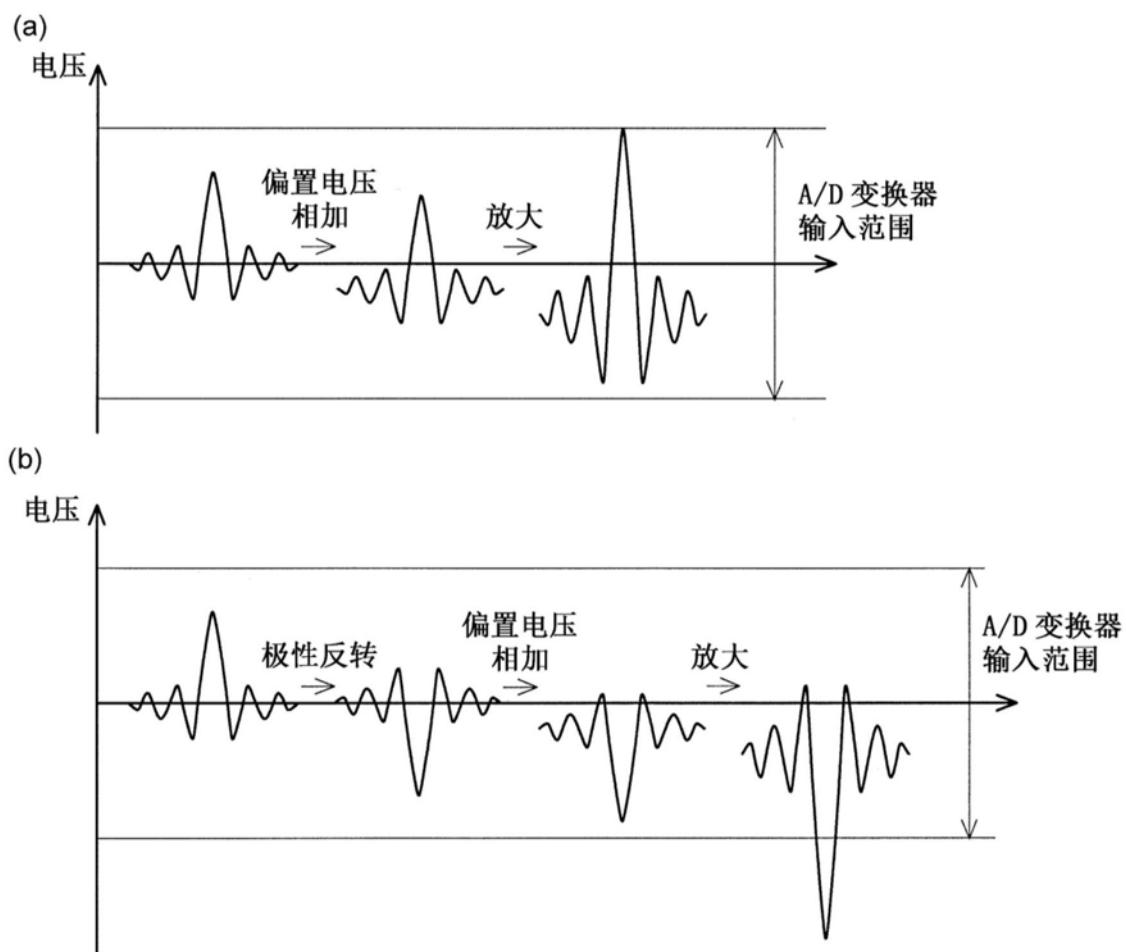


图4

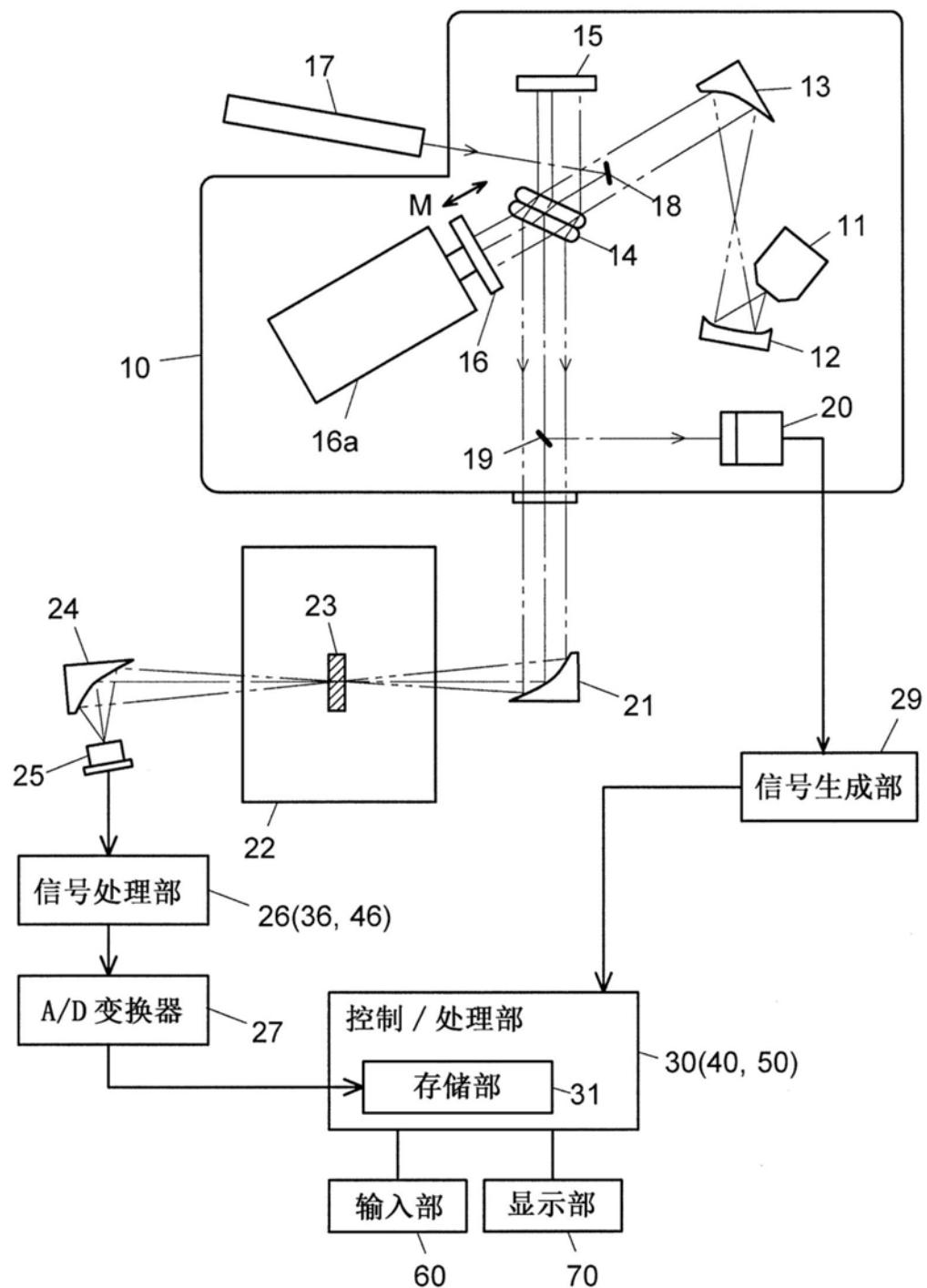


图5

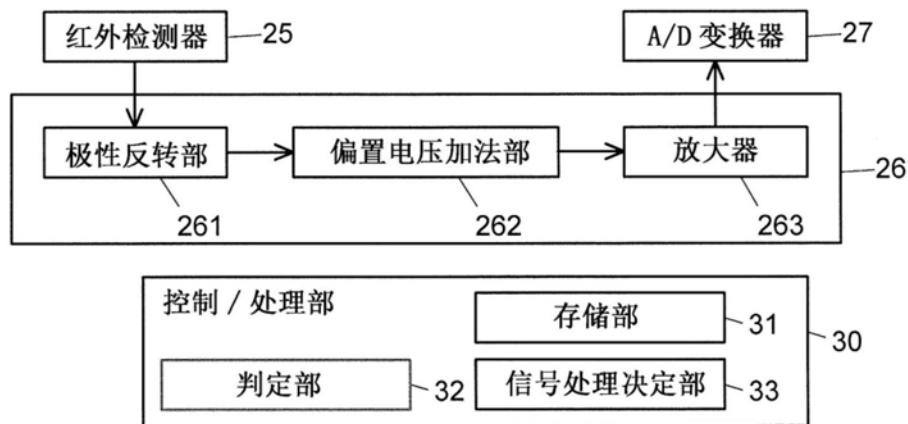


图6

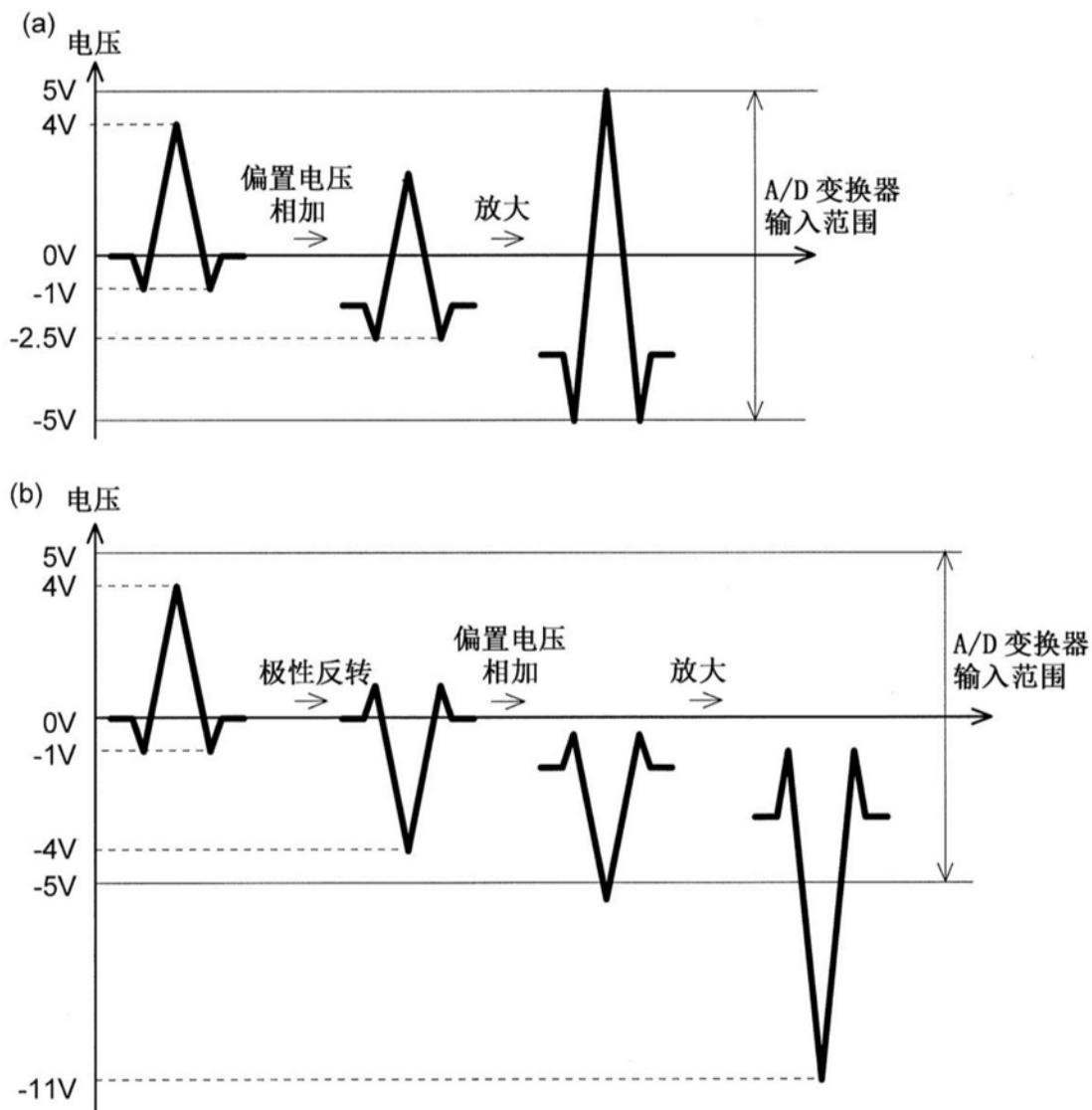


图7

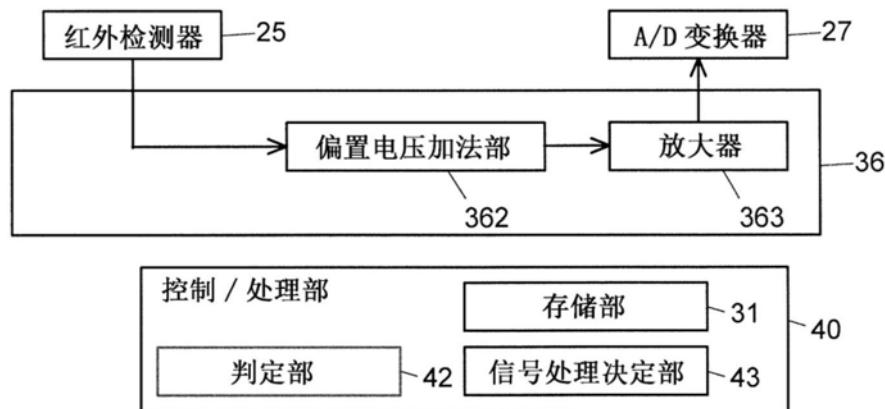


图8

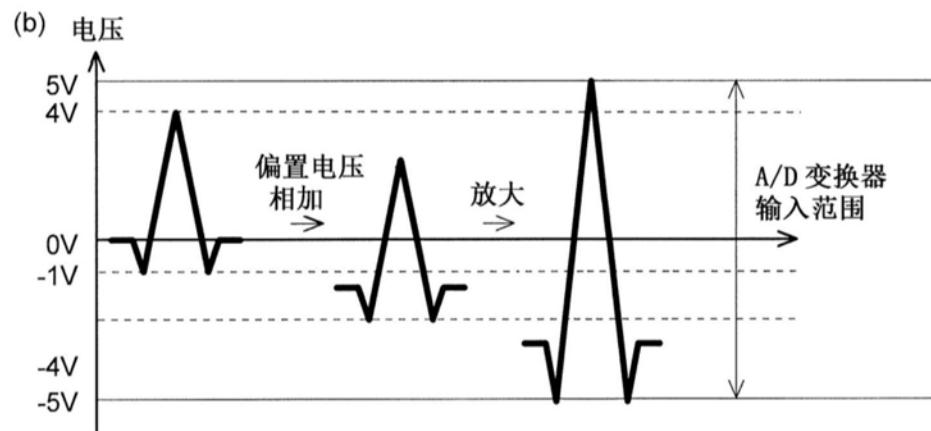
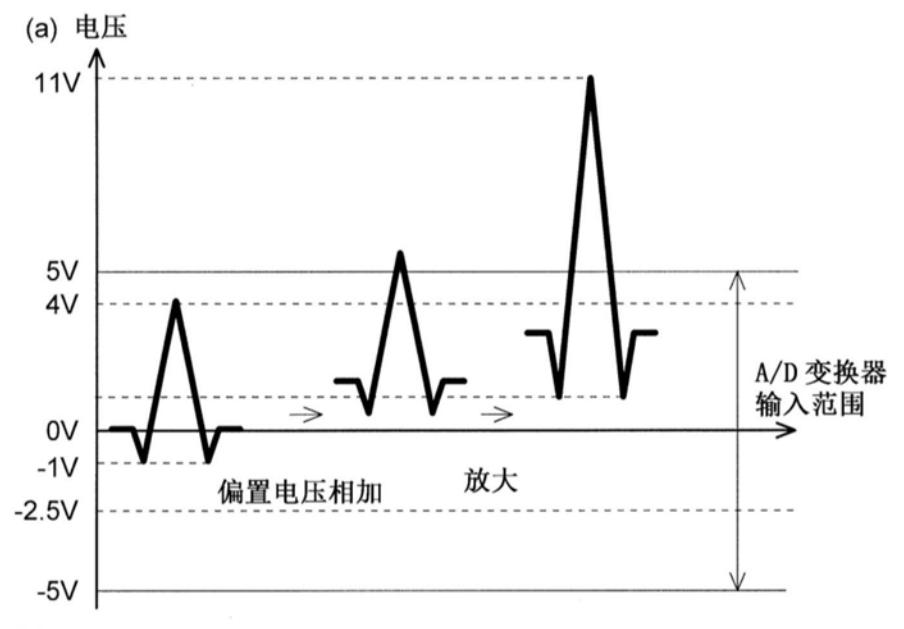


图9

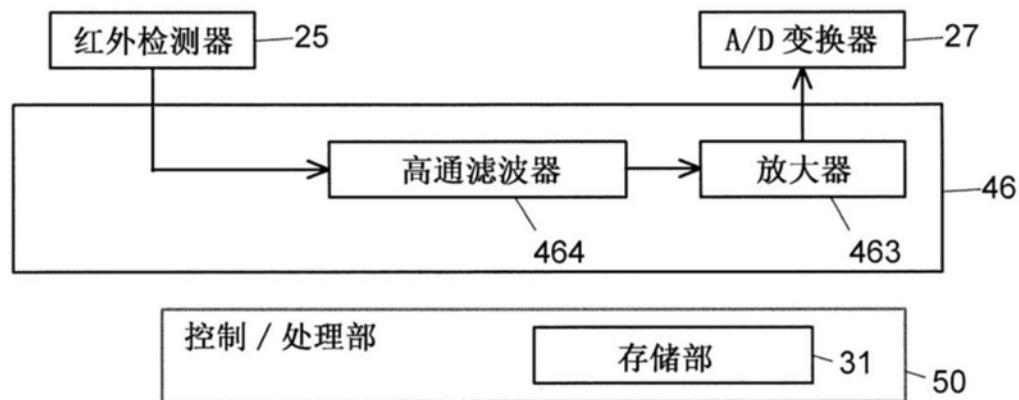


图10

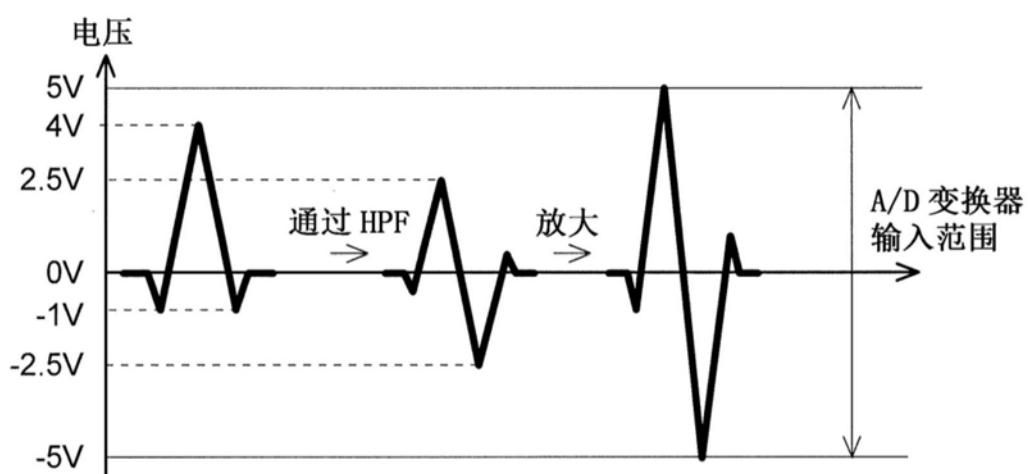


图11

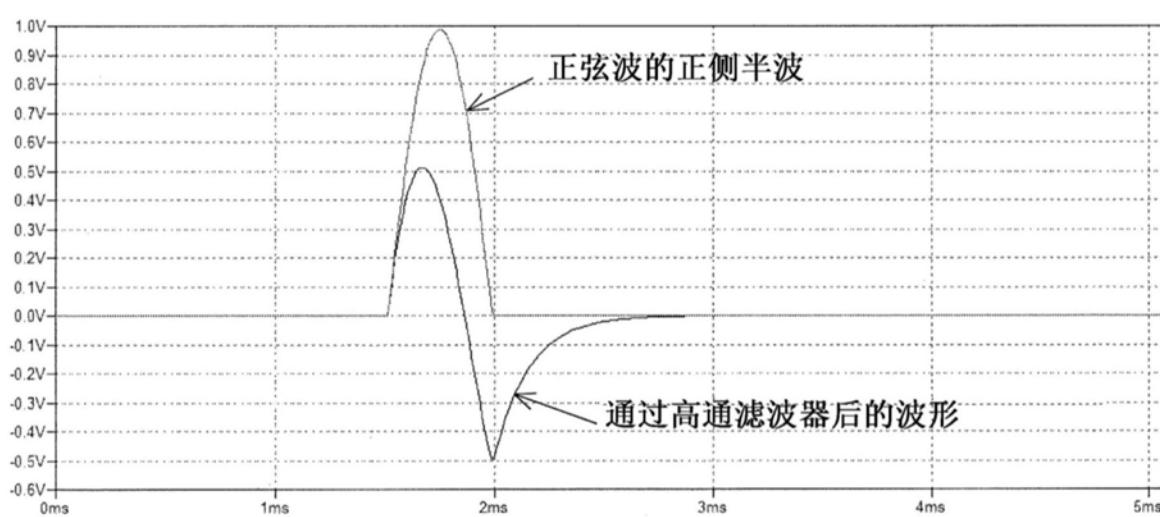


图12