

# 简化光谱仪

**Scot Ellis, New Products Marketing Director, Molecular Spectroscopy and Microanalysis, Thermo Fisher Scientific, 5225 Verona Rd., Bldg. 4, Madison, WI 53711, U.S.A.; tel.: 608-276-6345; fax: 608-273-5046; e-mail: [scot.ellis@thermofisher.com](mailto:scot.ellis@thermofisher.com).**

2008 年将是分子光谱关键并且活跃的一年。一个全新范畴的分析学难题将被新一代的分析学家解决。现有的但对于那些真正需要它们的人们和组织仍遥不可及的强大技术将变得触手可得并被广泛运用于解决一系列的问题。原因是简化光谱仪能在不牺牲性能的情况下最大程度的适合 21 世纪分析学实验室的需要。

傅立叶变换红外光谱 (FT-IR) 和 Raman 光谱是在一系列运用领域和行业已被证明了的技术，如聚合物，药学，法医学以及科学研究等等领域。近来，它们在生物燃料、地质学、艺术品修补以及考古学等领域的应用已被证明非常成功，可鉴别、确认、考证及定量材料。然而，那些使用或者从分子光谱获益的绝大多数人面临着越来越多解决更大难题的压力，而不是使用这些技术和工具解决问题的压力。目标不是材料的表征，而是如何来实施的过程。

## 新型用户的出现

在过去的 10 年当中，绝大多数 FTIR 和 Raman 光谱学用户已经从一个光谱学方面的专家转变成了一个他们的产品和过程方面的专家。总的来说对于分析仪器所意味着的是朝着作为一个能得到结果的工具的转变。越来越多的使用者没有那么多时间和闲情在使用单一的一种分析技术上成为一个专家。由于 Raman 光谱和 FTIR 显微镜这样强大的技术仍然是非常复杂的技术，所以人们对它们能够解决的许多问题还不能理解。对于那些专家人士而言，可以得到许多适合研发的 Raman 和 FT-IR 光谱仪；而对于那些非专家人士来说，为了继续他们接下来的工作及更有效的解决问题这就意味着要简化光谱仪。

---

**对于新一代的分析学实验室来说，当分析学家关注于解决最终难题时仪器平台应该使得光谱仪简单易懂。**

---

Raman 和 FTIR 光谱在它们能分析的样品以及所能提供的结果方面已经得到了很好的理解。这两种技术提供了或大或小材料的化学指纹信息，在所提供的光谱信息和在不同情形下所能处理不同样品类型的能力方面二者是互补的。当样品变的越来越小，越来越相似或难以理解时，高性能的系统或者更专业的技术（或两者）显得很有必要。直到现在，给那些需要分子光谱学的人提供了技术家族这样一个选择，包括能解决具有挑战性分析问题但需要事先执行一些操作性问题（人员、服务、或者两者）的高效能系统和适用于单项任务但在光谱学性能和灵活性上都有很大局限性的简单系统。

人们过多的关注于研究部门和非本领域的光谱学方面，而对于以排解疑难、表征、鉴定和确认具有挑战性的和各式各样的样品为主要任务的操作型分析实验室部门没有给与足够的重视。帮助今天的分析服务型实验室意味着要在将二者结合起来方面加大投资，比如通过：

- 创造一套可以大大减少或彻底消除操作仪器的学习曲线的光谱仪系统
- 消除获得高质量数据的一切困难
- 简化系统所有的常规服务和可设置性
- 简化或自动化从样品到结果的转化过程

实际上，Thermo Fisher Scientific (Madison, WI) 就是以创造这样一套光谱学工具为目标的，它无需降低性能，技术或智能，而是专为简单的完成一项任务而设计的。对于今天的分析学实验室而言，主要任务已不仅限于获得一张光谱图，肯定也不是来运行一台光谱仪，而是快速而且确信无疑的得到答案以支持一些更大的工艺流程。

FTIR 和 Raman 光谱仪和显微镜系统这一完整的技术家族专为解决新一代的分析学问题而设计的。这些系统注重快速的从样品获得实时的结果，操作者只需简单的或根本无需进行繁重的操作。这些产品补充了 Thermo Scientific 研究级产品家族：Almega™ XR Raman, Nicolet™ 6700FTIR 和 Nicolet Continuum™ FTIR 显微镜。

本文叙述了 Raman 光谱，Raman 显微镜，FTIR 光谱和 FTIR 显微镜系列中刚刚引进的新产品的巨大进展，以及对光谱学界的意义。

## 使 Raman 光谱从专家分析工具成为现实生活中问题的解决者

2008 年是 Raman 技术的 80 周年。自从发现以来，Raman 已经成为一种极其强大的技术而且日益流行起来。然而，在分析服务领域它的应用受到一些需要专家人士的专业知识才能避免或解决的技术问题的限制。许多人都了解 Raman 光谱仪系统的校准灵敏性和聚焦。像荧光以及仪器对工艺的响应等光谱难题，对于所有人（除专家外）在数据质量上都会产生疑虑。那些可用来避免高难度样品带来的问题的光学可调节性，因为那些一直以来需要调节 Raman 系统以适合不同光谱范围性能的服务，对那些工作量极大的实验室从来都不可行。Raman 光谱可以解决其他光谱学技术难以对付的难题，使得这些障碍在更广的可及性上已不再是问题。好的消息是他们已经准备从方法上促进 Raman 的普及和实用性。

Thermo Scientific DXR SmartRaman™ 光谱仪和 DXR Raman 显微镜保持了高端 Raman 光谱仪的性能，但在方法学上通过设计取代了传统 Raman 面临的挑战。最终的结果是这套系统无需专业的知识就能操作甚至维护。更重要的是，他们为实验室问题解决者或那些事先没有专业知识或维护知识而从 Raman 光谱获益的非专家人士敞开了大门。这些系统以可互换的自校准部分和新的高度技术稳定性为特色。更重要的是，他们保持了 Raman 光谱学技术的敏锐性和独特性，使得使用者不用再担心背景、聚焦、光谱适合度或者系统性能就可以充满信心的只关注结果。

## FTIR 光谱和准确性与性能的微妙平衡

FTIR 光谱在绝大多数情况下可以容易的获得难以致信的广泛范围样品的数据，因此成为一种普遍的实验室技术。然而，因为仪器运行是否正常的不确定性和光谱解析的困难，FTIR 光谱的结果常常使人产生疑问。过去，保证数据的质量和解析的准确性必需重要的专业知识。迄今，FTIR 的价值仍然被使用者的专业知识所限制。

*对于那些非专业人士而言，为了继续他们接下来的工作  
及更有效的解决问题这就意味着要简化光谱仪。*

Thermo Scientific Nicolet iS™ 10 光谱仪、软件和附件将性能校验作为核心的衡量标准而设计和搭建的。所有的 Nicolet iS10 光谱仪都被赋予依靠内在有效性来追踪的标准。因此，那些需要系统性能校验的实验室都能将适合性测试整合到实验过程中去而无需额外的购买其他设备。

处理、组织、搜索和解析 IR 光谱的挑战促进了 Thermo Scientific OMNIC™ Spectra™ 的发展，此软件是出于两个核心问题的考虑而设计的，即改善分析中工作流程和得到一致、可靠的结果。传统的处理工具可以在一种新的对结果提供直接、交互式控制的界面上利用。这些工具提供了自动从光谱中提取信息的一些方式，保证了结果的一致性和可信度。

## 针对以解决问题为目的的用户的 FTIR 显微镜以及成像

人们对鉴别非均相系统微小颗粒和结构特征与日俱增的兴趣使得 FTIR 显微镜得到了长足的发展。过去 15 年的努力主要集中在提高空间分辨率（光谱纯度），大面积化学成像，快速化学成像以及统计学可视化工具来辅助数据的解析和阐释。所有的这些努力导致了能解决苛刻难题的新一代 FTIR 显微镜产品的诞生。对于普通用户来说某些障碍仍然存在，因为在这个行业中产品的开发主要针对显微镜和 FTIR 光谱仪的用户，而不是针对使用显微光谱仪解决问题从而获益的那些用户。由于对能驱动系统的模块式 FTIR 光谱仪的需求使得光通量已经成为一个难题。处理极其微小的样品、寻找以及优化一套显微镜/光谱仪组合系统来采集数据从来都不是一件容易的事情。

Thermo Scientific Nicolet iN™ 10 FTIR 显微镜解决了以上所有的和更多的问题。一个整合的设计消除了对光谱仪的需要，节省了空间，改善了光通量和灵敏度，使用户无需额外的兼容性 FTIR 光谱仪。使用机器视觉“智能”，此系统可以为用户鉴别样品以及轻松地处理所有的显微镜和光谱仪设置，包括调节光阑，聚焦以及背景处理。显微镜还包含了软件智能，它能解决大多数最常见的显微尺度样品难题，从分析层缺陷到逆工程设计。这些问题每一个都有一些特殊的任务和步骤，其中包括样品处理、数据采集和分析；到现在为止所有这些都需要花费时间和专业知识，而且有出错和误解析的可能性。iN10 系统将所有任务都打包进一个自运行系统当中，操作者就能毫不费力的快速获得答案。

## 针对实验室的分子光谱仪器

所描述产品的重要性不是产品本身。当分析实验室里聚集了很多有很大压力的问题解决者时，为那些依赖于光谱学工作的人分析仪器行业有责任严肃的对待如何能够改善这些步骤。为光谱仪考虑的一种新方式是将简化的光谱仪器用于实验室的工作中，根本无需再为光谱仪而发愁。