

## Interactive Spectrum Analysis with Infia-software

Torstaina 18.11.1999 klo 16.35

Robert Brotherus

FM, tutkijakoulutettava

HY Fysikaalisen kemian laboratorio

Luonnontieteellinen tutkimus jaetaan yleensä kahteen luokkaan, teoreettiseen ja kokeelliseen. Teoreettinen tutkimus pyrkii kehittämään yhä parempia teorioita ja malleja luonnon eri osasten toiminnasta, kokeellinen tutkimus yhä tarkempia ja laaja-alaisempia kokeita ja mittauksia. Molekyylien *infrapunaspektroskopian* kokeelliset tutkijat mittaavat molekyylien absorboiman infrapunavalon aallonpituuksia, *spektriä*, yhä suuremmalla herkkyydellä ja tarkkuudella. Teoreetikot puolestaan kehittävät malleja kuvaamaan molekyylin sisäisiä liikkeitä ja pyörimistä – ominaisuuksia jotka viime kädessä määräävät molekyylin spektrin.

Kuilu mittaustiedon ja teoreettisten mallien välillä on kuitenkin spektroskopiassa poikkeuksellisen suuri: kokeelliset tulokset eli kymmenientuhansien spektriviivojen aallonpituudet riippuvat pohjalla olevista molekyylin ominaisuuksista äärimmäiden monimutkaisella tavalla. Tämän vuoksi teoreettisen ja kokeellisen työn lisäksi on spektroskopiassa tärkeänä osa-alueena *spektrien analysointi*. Analysointityö voi vaikeimmillaan olla hyvin aikaavievää, vaativaa ja herkkää virheille.

Infrapunaspektrien analyysia tehostamaan on Helsingin Yliopiston fysikaalisen kemian laboratorion tutkija **Robert Brotherus** on tehnyt *Infia*-spektrianalyysiohjelman (INfrared Fitting Application). Infia auttaa spektrin analysoijaa tarjoamalla useita interaktiivisia näkymiä spektriin, automatisoimalla spektriviivojen tunnistamista ja laskemalla tunnistettujen viivojen perusteella molekyylin ominaisuuksia kuvaavia lukuja. Ohjelman monipuoliset ominaisuudet ovat käytännön analysointityössä osoittaneet voivansa vapauttaa analysoijan monista rutiinitehtävistä joita alkeellisemmat analysointimenetelmät ovat vaatineet. Tämä johtaa inhimillisten virheiden vähenemiseen ja analysointiin käytetyn työajan lyhenemiseen. Ei voida myöskään väheksyä sitä seikkaa, että korkeasti koulutetun luonnontieteilijän luovuus tulee paremmin hyödynnetyksi, kun hän käyttää vähemmän aikaa puuduttavaan rutiinityöhön.