

环境水样品的三维数据校正功能介绍

荧光分光光度计F-7100的软件FL Solutions4.2(rev.10~)新增三维数据校正功能。包括三维荧光光谱的空白扣除功能，以及内滤效应校正功能（由于激发光和荧光的吸收，导致荧光减弱的内滤效应现象），可应对环境水的检测要求。此次实验采用移动式吸收样品池支架（定制），通过切换样品的测定位置，获得荧光和吸收光谱，从而进行三维荧光光谱的空白扣除以及内滤效应校正。



F-7100荧光分光光度计

使用移动式吸收样品池支架测定荧光和吸收光谱

- ✓ 移动式吸收样品池支架（定制）可通过移动支架的位置，测定荧光和吸收光谱。
- ✓ 测定三维荧光光谱时，将激发光直接照射到样品上，由此检测到样品的荧光光谱。
- ✓ 测定吸收光谱时，入射光经平面镜反射，照射到样品上，由此检测到透过光。
- ✓ 无需替换附件，简单滑动即可轻松实现荧光光谱和吸收光谱的测定。

■ 使用移动式吸收样品池支架（定制）的测定方法

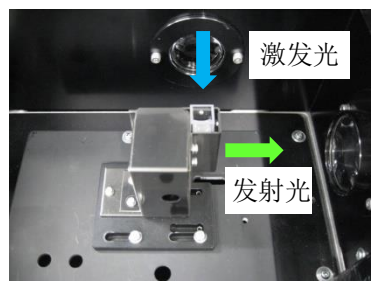


图1 测定荧光光谱时的样品仓

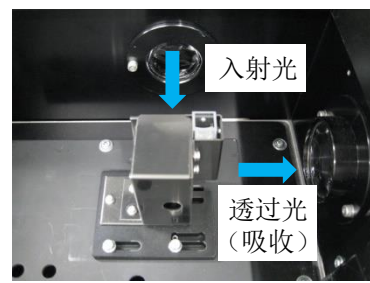
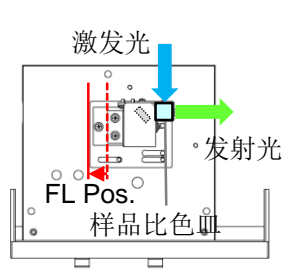
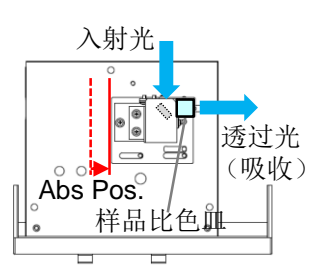


图2 测定吸收光谱时的样品仓

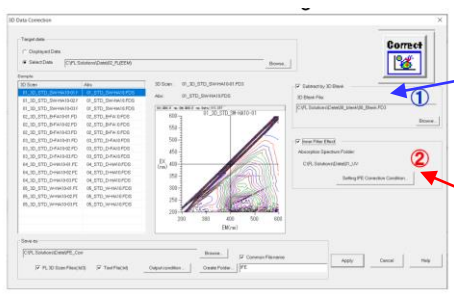
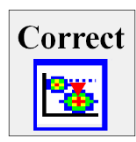


将激发光直接照射到样品上，测定荧光光谱。通过将移动式吸收样品池支架向左滑动，即可测定荧光光谱。

测定吸收光谱时，入射光经平面镜反射，检测透过光。通过测定空白样品和样品的同步光谱，可计算出样品的吸收光谱。

三维空白扣除功能（河川水样品）

■ 三维数据校正功能



三维空白扣除功能

内滤效应校正功能

- ✓ FL Solutions 4.2 (Rev.10~) 新增三维数据校正功能。
- ✓ 使用三维空白扣除功能，将河川水的三维荧光光谱扣除掉空白值。通过空白扣除，可以去除掉数据评价时不需要的信息如拉曼散射峰，得到三维荧光光谱。

图3 三维数据校正画面

■ 河川水的三维空白扣除

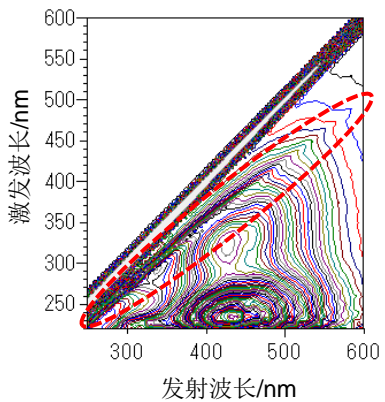


图4 河川水的三维荧光光谱

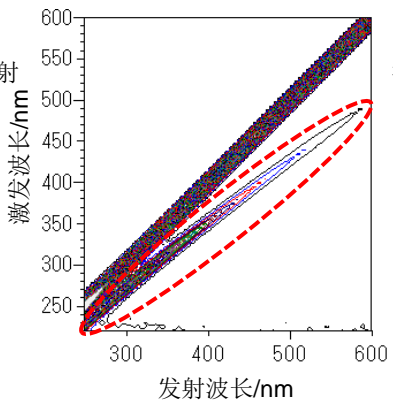


图5 空白样品的三维荧光光谱

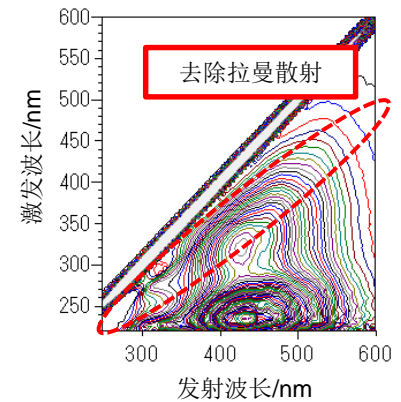


图6 扣除空白后的三维荧光光谱

内滤效应校正功能（河水水样品）

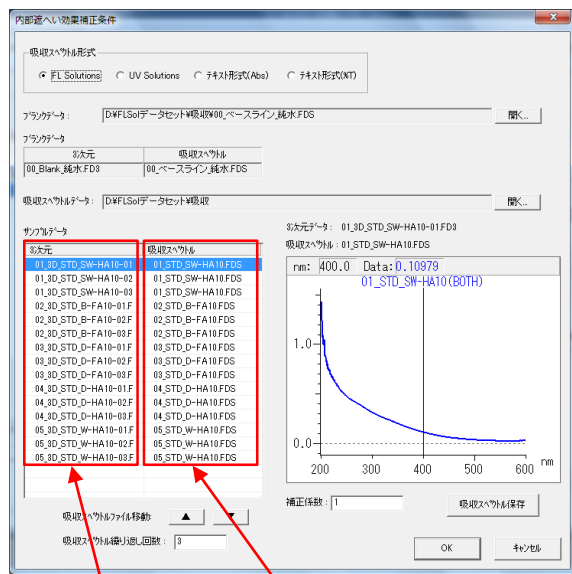
- ✓ 内滤效应是指样品浓度较大时，激发光和荧光被吸收，荧光减弱的现象。
- ✓ 通过测定河川水的吸收光谱，进行三维荧光光谱的内滤效应校正。吸收光谱除了FL Solutions测定的吸收数据之外，也可使用紫外分光光度计软件UV Solutions的测定数据或文本数据。
- ✓ 一次可对多个样品进行内滤效应校正，因此，十分适合多变量分析前的预处理。

■ 内滤效应校正功能

【计算公式】

$$F_{\text{corr}} = \alpha \times F_{\text{meas}} \times 10^{[(Abs_{\text{ex}} + Abs_{\text{em}})/2]}$$

- F_{corr} : 校正激发波长 / 发射波长后的荧光强度
- F_{meas} : 在激发波长 / 发射波长下测得的荧光强度
- Abs_{ex} : 激发波长(ex)的吸光度
- Abs_{em} : 发射波长(em)的吸光度
- α : 校正系数 (初始值1)



三维荧光光谱 吸收光谱

图7 内滤效应校正画面

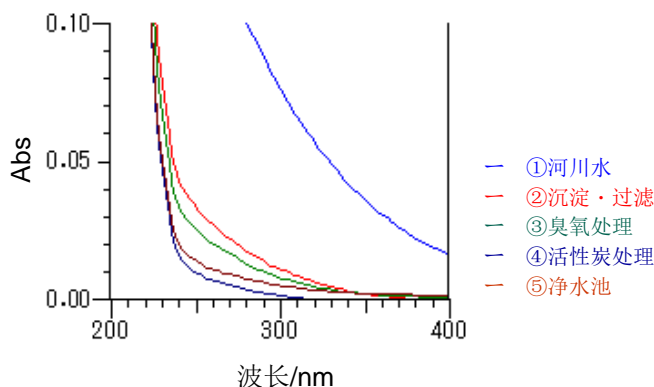


图8 河川水净化工序的吸收光谱

(②~⑤为参考)

■ 河川水的内滤效应校正

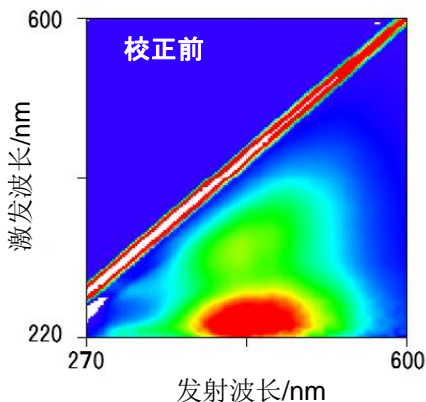


图9 河川水的三维荧光光谱
(三维空白扣除后)

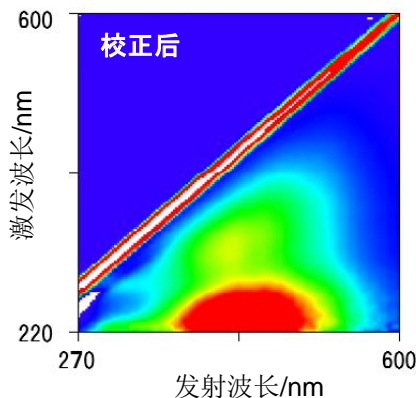


图10 校正后的河川水三维荧光光谱
(三维空白扣除以及内滤效应校正后)

- ✓ 使用扣除三维空白值的河川水三维荧光光谱，进行内滤效应校正（图9、10）。
- ✓ 得到消除激发光和荧光吸收影响的三维荧光光谱。
实验证明，对吸收较大的短激发波长，校正效果更为显著。
- ✓ 使用校正后的三维荧光光谱，利用多变量分析软件“3D SpectAlyze”可以实现谱峰分离（PARAFAC）、主成分分析等。关于多变量分析的详细内容，请参考技术报告“FL160002 使用三维荧光光谱的多变量分析法评价水中有机物”。

* “3D SpectAlyze”是株式会社Dynacom在日本的注册商标。

注意：产品升级后，上述仪器的外观或技术参数可能会有变化。
本资料中的数据为测试示例，不代表真实数据，仅供参考。

【KEY WORDS】

荧光分光光度计、F-7100、荧光光谱、吸收光谱、河川水、内滤效应、三维空白扣除、3DSpectAlyze