



Software de compensación atmosférica en espectroscopía infrarroja



VNIVERSITAT
DE VALÈNCIA

RESULTADO DE I+D

Patente

Ámbito Temático

- Química Analítica
- Instrumentación Científica
- Dispositivos de espectroscopía
- Espectroscopía infrarroja

Colaboración

- Tecnología disponible para Licenciar
- Otras formas de colaboración

Ref. OTRI

201117R-delaGuardia, M.

Método de compensación de gases y/o vapores ambientales en espectros de infrarrojos

Inventores:

Miguel de la Guardia Cirugeda, Guillermo Rafael Quintás Soriano, Julia Kuligowski y Salvador Garrigues Mateo (Dpto. Química Analítica, Universitat de València).

Antecedentes: Es frecuente observar en los espectros infrarrojos de muestras la presencia de interferencias causadas por gases y vapores presentes en el compartimento en el que se introduce la muestra a medir. Dichas interferencias resultan perjudiciales para la calidad de la medida, especialmente cuando dichos gases y/o vapores ambientales presentan bandas de absorción en la zona espectral de interés. Para evitar esta contribución la cámara en la que se introduce la muestra está típicamente sellada y sufre un proceso de purgado mediante aire seco o nitrógeno. No obstante, todavía existe interés en corregir los espectros mediante métodos de corrección cuando i) no es posible el purgado de la cámara o no funciona apropiadamente, ii) la cámara de la muestra se abre y el operario subestima el tiempo necesario para equilibrar las condiciones dentro de la cámara o iii) el dispositivo de muestreo no permite que se cierre la cámara. Actualmente, hay algún software comercial que compensa sólo la contribución de vapor del agua y CO₂ en espectros infrarrojos. Por ello, es necesario un método de compensación general de gases y/o vapores ambientales en el campo de la espectroscopía infrarroja que permita eliminar de forma secuencial todas las interferencias de este tipo.

La invención: Investigadores de la Universitat de València han desarrollado un procedimiento de compensación de gases y/o vapores ambientales en medidas de espectroscopía infrarroja, así como el programa de ordenador asociado a dicho procedimiento. El procedimiento de la invención permite obtener un espectro infrarrojo corregido de la muestra bajo análisis en el que se elimina de forma precisa, robusta, y eficiente la contribución de los gases y/o vapores presentes en la cámara en la que se realiza la medida. El algoritmo se basa en la medida de un espectro que contiene las bandas del gas o vapor ambiental que se quiere eliminar seguido de la estimación automática de la contribución espectral de las interferencias en la muestra a corregir. Después, esta contribución se compensa mediante una simple substracción espectral. Asimismo, el método es de una gran rapidez computacional, y puede aplicarse de manera universal para diferentes tipos de muestras sólidas, líquidas o gaseosas y condiciones de medida.

Aplicaciones: La principal aplicación de la tecnología es en el **sector químico**, como método de corrección de la contribución de gases y/o vapores ambientales en los espectros infrarrojos, lo que permite mejorar la selectividad y los límites de detección de las medidas.

Ventajas: Las principales ventajas aportadas por la invención son:

- Facilidad de uso, sólo hay que obtener un espectro del vapor o gas a corregir en las mismas condiciones de medida que los espectros de las muestras para seleccionar unos valores de absorbancia relativas.
- Rapidez, la computación es rápida ya que el algoritmo es sencillo.
- Es un método universal, puede aplicarse en múltiples situaciones (diferentes muestras y equipos, diferentes condiciones de medida). Corrige otros gases además de H₂O y CO₂.
- El método no aplica un suavizado a los espectros, evitando la distorsión de las bandas de infrarrojo de los analitos de interés.
- Mejora de los resultados obtenidos utilizando las herramientas de software comercialmente disponibles.

OTRI oficina de transferència
de resultats d'investigació

Avda. Blasco Ibáñez, 13
46010 Valencia (España)
Tel. +34 96 3864044
otri@uv.es
www.uv.es/otri