

Capitolo 3.

In questo capitolo si darà una descrizione approfondita dello spettrofotometro e degli accessori utilizzati per effettuare le misure. Si passerà poi a descrivere il software utilizzato per l'acquisizione dei dati ed il modo in cui si controllano i parametri ottici ed elettronici dello strumento.

3.1. Apparato strumentale.

Per effettuare le misure e per preparare i campioni a si sono utilizzati:

1. Spettrofotometro Perkin Elmer Lambda 900;
2. Sfera integratrice da 150 mm Labsphere in Spectralon[®] montata su di un banco PELA-1001 che permette di analizzare il campione in orizzontale;
3. Setacciatore Retsch;
4. Pressa Perkin Elmer da 15 ton/cm²;

Per la descrizione dello spettrofotometro e della sfera integratrice si scenderà più in dettaglio, per il setaccio e la pressa si daranno solo delle informazioni

descrittive e la metodologia di utilizzo nel momento in cui si descriveranno le procedure di preparazione dei campioni a partire dal *bulk*.

3.1.1. Spettrofotometro.

Lo spettrofotometro a nostra disposizione è un Perkin Elmer, modello Lambda 900. Il suo range spettrale copre tutto il NIR, il visibile (utilizzando un rivelatore a *PbS* raffreddato a cella di Peltier) e parte del vicino UV tramite un fotomoltiplicatore (da 185 a 3300 nm, purificando lo strumento con N_2 si può partire anche da 175 nm). Poiché lo spettrofotometro richiede delle particolari condizioni climatiche (temperatura compresa tra 15 e 35 °C ed un'umidità compresa tra il 20 e 80%) e vista la locazione geografica, è stato posto in un ambiente controllato. Lo strumento è caratterizzato da un'accuratezza di $\pm 0,08$ nm nell'UV/Vis ed di $\pm 0,32$ nm nel NIR, mentre la risoluzione spettrale è di 0,05 – 5,00 nm, Step 0,01 nm, e 0,20 – 20,00 nm, Step 0,04 nm, rispettivamente nell'UV/Vis e nel NIR.

Un'altra caratteristica importante dello spettrofotometro è il rapporto segnale-rumore, o livello di rumore. Per tale strumento si ha che lo scarto quadratico medio (RMS, root mean square) per una misura di assorbanza pari a 0 con un tempo d'integrazione di 2 s a 500 nm è di 0,00005, mentre se l'assorbanza è 2, nelle stesse condizioni, si ha un RMS di 0,0003.

La struttura dello spettrofotometro Lambda 900 è caratterizzata da un sistema ottico a doppio monocromatore. In ogni monocromatore sono utilizzati dei reticoli (grating) olografici, sia per il range UV/Visibile che per quello NIR. Il sistema ottico dello strumento è riprodotto schematicamente in Figura 3.1..

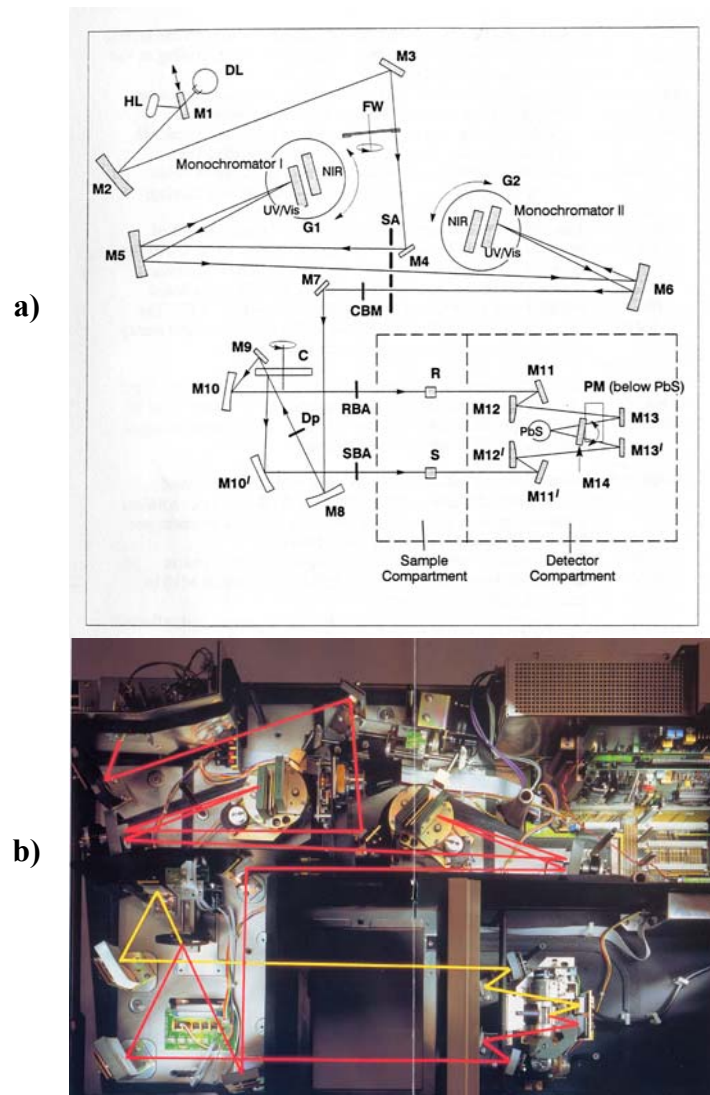


Figura 3.1. Ottica dello spettrofotometro: a) diagramma schematico e b) fotografia dello strumento.

Le due sorgenti di radiazione, la lampada al deuterio (*DL*) e la lampada alogena (*HL*), coprono tutto l'intervallo di lavoro delle spettrofotometro (vedi Figura 3.2.).

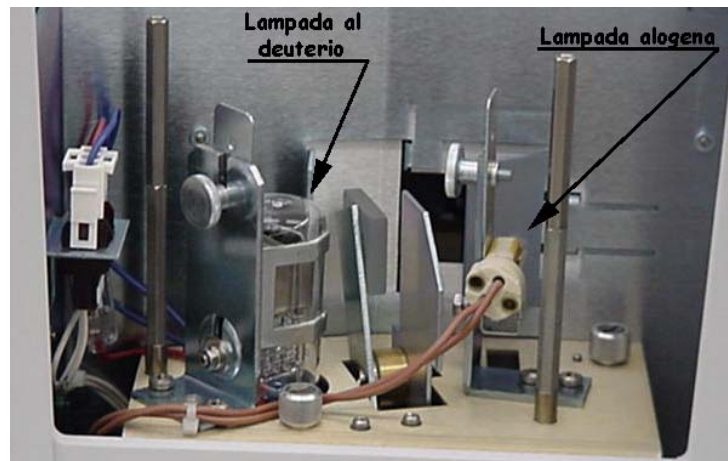


Figura 3.2. Sorgenti dello spettrofotometro.

Per le misure nel NIR o nel visibile lo specchio *M1* riflette la radiazione proveniente dalla lampada alogena sullo specchio *M2*. Allo stesso tempo *M1* blocca la radiazione proveniente dalla lampada al deuterio. Per le misure nel range UV, lo specchio sorgente *M1* viene sollevato permettendo alla radiazione proveniente dalla lampada a deuterio di colpire lo specchio *M2*. Il cambio della sorgente è automatico durante la rotazione del monocromatore.

La radiazione proveniente da una delle due lampade viene riflessa dallo specchio *M2* allo specchio *M4* dopo essere stato riflesso dallo specchio *M3* e dopo aver attraversato un filtro ottico montato su di una ruota portafiltro (*FW*). La ruota portafiltro è guidata da un motore *passo passo* che è sincronizzato con i monocromatori. Dipendendo dalla lunghezza d'onda che vuole essere prodotta, il filtro appropriato viene a trovarsi sul percorso del fascio per prefiltrare la radiazione prima che entri nel primo monocromatore e, cosa fondamentale,

permette di tagliare gli ordini superiori. Il filtro cambia automaticamente durante la rotazione del monocromatore.

Dallo specchio *M4* la radiazione viene riflessa attraverso la fenditura d'ingresso del *Monocromatore I*. Tutte le fenditure sono localizzate su di un porta fenditure (*SA*). La radiazione viene così collimata sullo specchio *M5* e riflessa sul reticolo *G1*. A seconda del range di lunghezze d'onda al momento in uso, la radiazione colpisce il reticolo per l'UV/Visibile o il reticolo per il NIR. La radiazione incidendo sul reticolo produce uno spettro. La rotazione del reticolo seleziona un segmento dello spettro riflettendolo sullo specchio *M5* e da questo sulla fenditura d'uscita. La fenditura d'uscita ha il compito di restringere ancora di più il segmento di spettro, rendendo il fascio più monocromatico possibile. Il reticolo cambia automaticamente durante la rotazione del monocromatore.

La fenditura d'uscita del *Monocromatore I* è anche quella d'ingresso del *Monocromatore II*. La radiazione viene riflessa, tramite lo specchio *M6* sull'opportuno reticolo *G2*, e dopo, tramite lo specchio *M6* e la fenditura d'uscita del *Monocromatore II*, arriva allo specchio *M7*. La rotazione del *G2* è sincronizzata con quella di *G1*. La radiazione emergente dalla fenditura d'uscita è caratterizzata da un'alta purezza spettrale e da un basso disturbo.

Nei range UV/Visibile e NIR si può scegliere tra una fenditura a larghezza fissa, una servofenditura e una fenditura programmata. Quando la servofenditura è selezionata, la larghezza della fenditura cambia automaticamente durante l'acquisizione allo scopo di mantenere costante l'energia al rivelatore (*detector*).

Dallo specchio $M7$ il fascio viene riflesso, tramite uno specchio $M8$, verso un separatore di fascio (C , *chopper*). Il *chopper*, costituito da un segmento specchio, un segmento a finestra e due segmenti scuri, ruotando fa sì che la radiazione incida sui diversi segmenti. Quando la radiazione incontra il segmento a finestra passa e incontra lo specchio $M9$ e quindi, dopo aver incontrato lo specchio $M10$, crea il fascio di riferimento (R , *reference beam*). Quando invece il fascio incontra il segmento con lo specchio viene riflesso e crea il fascio principale (S , *sample beam*) tramite lo specchio $M10'$ (vedi Figura 3.3.). Quando



Figura 3.3. Porta campioni dello spettrofotometro, uno per il fascio principale, l'altro per il fascio di riferimento.

il segmento scuro è sul percorso del fascio, nessun segnale arriva al rivelatore, permettendo al detector di creare un segnale scuro (*dark signal*), cioè un segnale di zero. La radiazione, passando alternativamente attraverso il campione ed il riferimento, raggiunge, tramite gli specchi $M11$, $M12$ e $M13$ o $M11'$, $M12'$ e $M13'$

alternativamente, l'appropriato rivelatore, montato su di un porta detector (vedi Figura 3.4.).

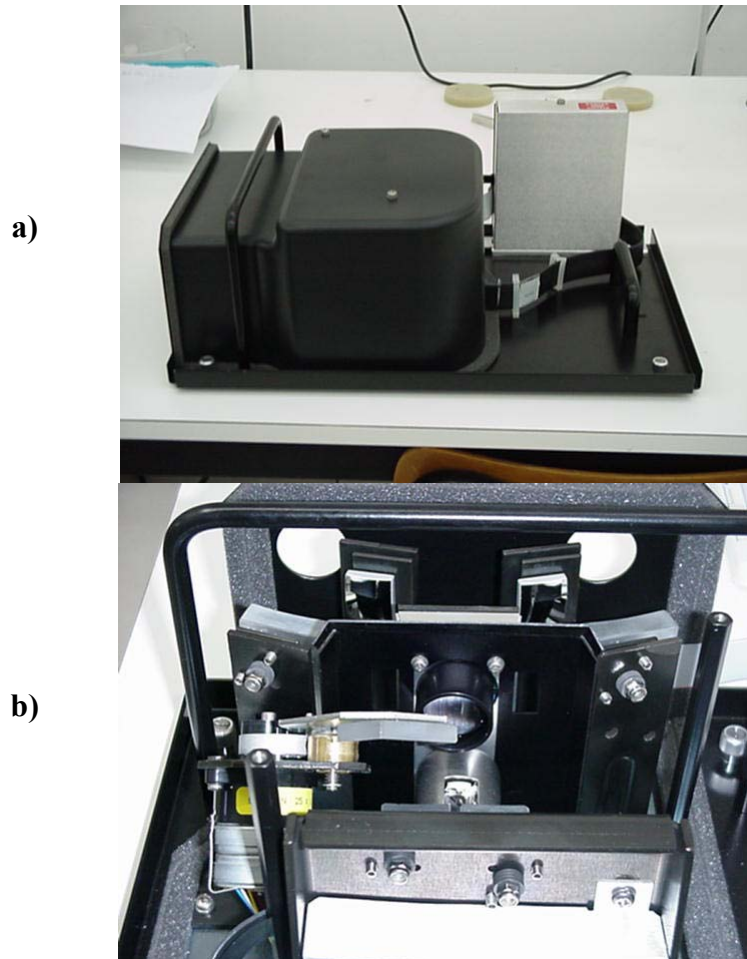


Figura 3.4. Sistema di rivelatori dello spettrofotometro: a) vista del contenitore e b) particolare dell'ottica.

Lo specchio *M14* può ruotare permettendo di selezionare il rivelatore richiesto. Un fotomoltiplicatore (*PM*) viene utilizzato nel range UV/Visibile mentre un rivelatore al solfuro di piombo (*PbS*) viene utilizzato nel NIR. Il detector cambia automaticamente durante la rotazione del monocromatore.

Al piano delle celle, ogni fascio di radiazioni è alto approssimativamente 12 mm. La larghezza del fascio dipende dalla larghezza della fenditura. Ad una larghezza della fenditura¹ di 5 nm corrisponde una larghezza dei due fasci di circa 4,5 mm (gli altri valori dei fasci in funzione della fenditura sono riportati in Tabella 3.1.).

Tabella 3.1. sezione d'urto del fascio.

| Fenditura | Larghezza fascio | Altezza fascio |
|------------------|-------------------------|-----------------------|
| 0,05 nm | 0,04 mm | 11,70 mm |
| 0,10 nm | 0,09 mm | 11,70 mm |
| 0,50 nm | 0,45 mm | 11,70 mm |
| 1,00 nm | 0,89 mm | 11,70 mm |
| 2,00 nm | 1,00 mm | 11,70 mm |
| 5,00 nm | 4,44 mm | 11,70 mm |

Per permettere di misurare campioni di volume molto piccolo in microcelle, l'ampiezza del fascio deve essere ridotta. Un *common beam mask (CBM)*, cioè una maschera che riduce la forma del fascio, è montato tra il porta fenditure (*SA*) e lo specchio *M7*. La maschera riduce la sezione sia del fascio principale che di quello di riferimento nelle rispettive celle. Il fascio può essere portato da un'altezza massima di 11,7 mm ad una minima di 0,0 mm attraverso 50 stadi successivi.

¹ Per larghezza della fenditura si intenderà d'ora in poi non la larghezza fisica della stessa ma la larghezza spettrale.

Ovviamente si può scegliere la lunghezza d'onda a cui cambiano le sorgenti ed il detector nell'ambito di un ben definito range di lunghezze d'onda. Vi è anche un filtro depolarizzante (Dp) opzionale che può essere posizionato sul percorso del fascio. Ci sono degli attenuatori che possono operare separatamente sul fascio principale (SBA) e sul fascio di riferimento (RBA). I valori che possono assumere gli attenuatori sono 0%, 1%, 10% e 100% (Perkin-Elmer, 1996).

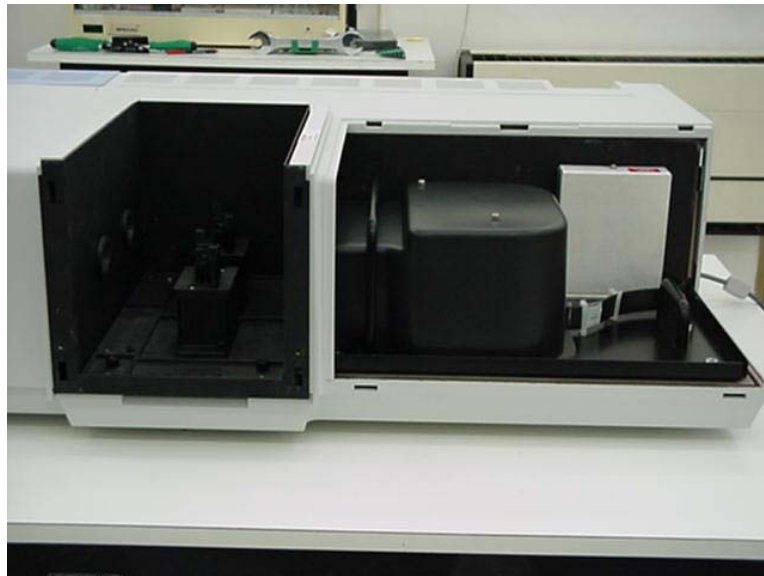


Figura 3.5. Visione globale dei componenti dello spettrofotometro.

3.1.1.1. Reticolo di diffrazione.

Il reticolo di diffrazione è un insieme di elementi riflettenti (o trasmittenti) separati da una distanza comparabile con la lunghezza d'onda della luce in esame. Un *reticolo a riflessione* non è altro che un reticolo sovrapposto ad una superficie riflettente. Un'onda elettromagnetica incidente sul reticolo subisce una modifica prevedibile dell'ampiezza del suo campo elettrico, o della sua fase o di entrambi.

La diffrazione da reticolo può essere vista dalla geometria in Figura 3.6., che mostra un raggio di luce di lunghezza d'onda λ incidente con un angolo α , diffratto con un angolo β_m da un reticolo di passo (*groove spacing*) d . Questi angoli sono misurati rispetto alla normale del reticolo. Solitamente si usa la convenzione di indicare come positivi gli angoli della luce diffratta dallo stesso lato della luce incidente mentre negativi quelli dal lato opposto. In figura gli angoli α e β_1 sono positivi e vengono misurati in senso antiorario a partire dalla normale al reticolo, mentre β_0 e β_{-1} sono negativi e vengono misurati in senso orario a partire dalla normale.

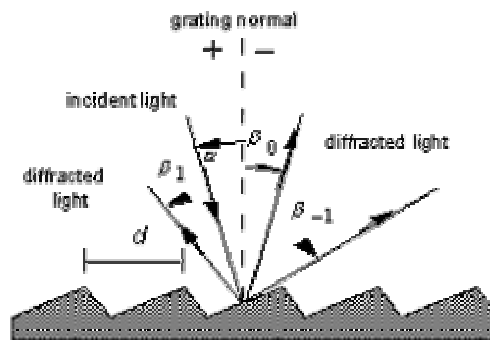


Figura 3.6. Diffrazione da un reticolo piano.

Consideriamo ora solo i raggi diffratti verso destra. La differenza di cammino tra i raggi provenienti da due scanalature adiacenti è uguale a $d \sin \alpha + d \sin \beta$ (essendo β negativo, il secondo termine è negativo). Il principio dell'interferenza afferma che solo quando questa differenza è uguale alla lunghezza d'onda λ della luce incidente, o ad un suo multiplo intero, i raggi provenienti da due fenditure adiacenti sono in fase. Di conseguenza raggi emergenti con angolo β diverso da

quello che soddisfa a questa condizione subiscono l'effetto di una interferenza distruttiva. Queste relazioni sono espresse dall'*equazione dei reticoli*:

$$m\lambda = d(\sin \alpha + \sin \beta)$$

che governa gli angoli di diffrazione per un reticolo con *groove spacing* d . In questo caso m rappresenta l'*ordine di diffrazione*, o *ordine spettrale*, che è un intero. Alcune volte è conveniente esprimere l'equazione del reticolo come:

$$Gm\lambda = \sin \alpha + \sin \beta$$

dove $G=1/d$ è la *frequenza di scanalatura*, o *densità di scanalature*, più comunemente detto "scanalature per millimetro".

Nel caso in cui il fascio incidente non sia monocromatico quello che accade è che le singole frange diffratte normalmente dal reticolo possono essere risolte come una sequenza di frange monocromatiche. Utilizzando piccoli angoli si ottiene una buona risoluzione di tali frange. In questo caso però si ottiene anche la sovrapposizione (*overlapping*), su alcune lunghezze d'onda ben precise, tra i raggi emergenti a diversi ordini spettrali (vedi Figura 3.7.). A questo inconveniente solitamente si ovvia filtrando otticamente la luce prima che incida sul reticolo.

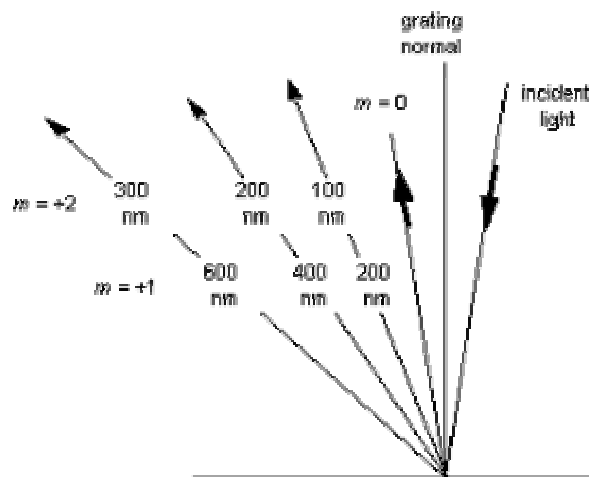


Figura 3.7. Sovrapposizione degli ordini spettrali.

Solitamente queste frange vengono proiettate su di una fenditura che seleziona un ristretto intervallo di lunghezze d'onda, che nel caso di un sistema a doppio monocromatore, come nella nostra situazione, finiscono su di un secondo reticolo di diffrazione per subire un processamento analogo e selezionare così una “singola”² lunghezza d'onda. (vedi Figura 3.8.) (Palmer, 2000).

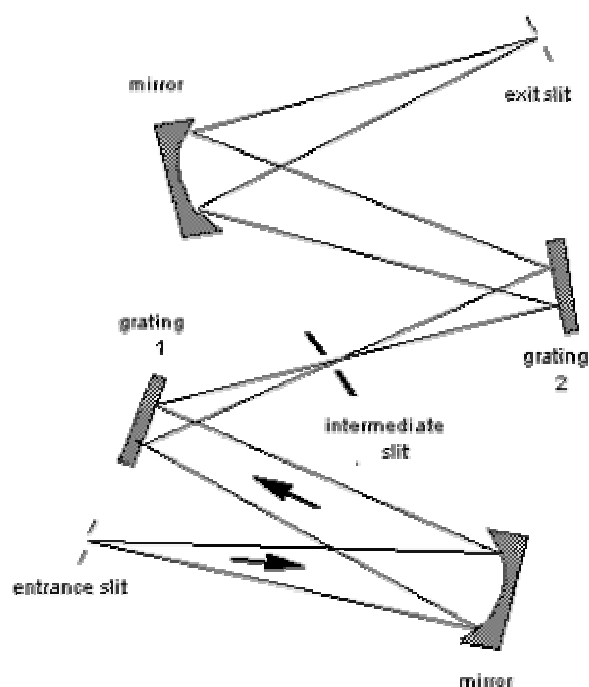


Figura 3.8. Montaggio dei reticoli a doppio monocromatore.

² Per singola lunghezza d'onda in questo contesto si intende un intervallo di lunghezze d'onda molto ristretto. Per il nostro strumento tale intervallo, come si è visto in precedenza, ha risoluzione di circa 0,05 nm per l'UV/Vis e di 0,20 nm per il NIR.

In molte applicazioni, ad esempio i monocromatori, l'analisi delle varie lunghezze d'onda λ avviene tramite la rotazione del reticolo intorno ad un'asse coincidente con il suo asse centrale, lasciando invariata la direzione del raggio incidente e di quello emergente. L'*angolo di deviazione* $2K$ tra la direzione incidente e quella emergente (anche detta *deviazione angolare*) è:

$$2K = \alpha - \beta = \text{cost} ,$$

mentre l'angolo di acquisizione ϕ , che è misurato dalla normale al reticolo alla bisettrice dei raggi, è:

$$2\phi = \alpha + \beta .$$

È da notare che ϕ cambia con λ . In questo caso l'equazione del reticolo può essere espressa in termini di ϕ e la *semideviazione angolare* K come:

$$m\lambda = 2d \cos K \sin \phi$$

3.1.2. Sfera integratrice.

Per effettuare le misure in riflettanza semisferica si è utilizzata una sfera integratrice Labsphere da 150 mm. Per poter montare la sfera integratrice sullo spettrofotometro si è dovuto provvedere a rimuovere il porta detector ed il vano porta campioni ed installare un vano porta banco ottico PELA-1001 che tramite un sistema di specchi provvede a trasferire nella sfera sia il fascio principale che quello di riferimento (vedi Figura 3.9.).

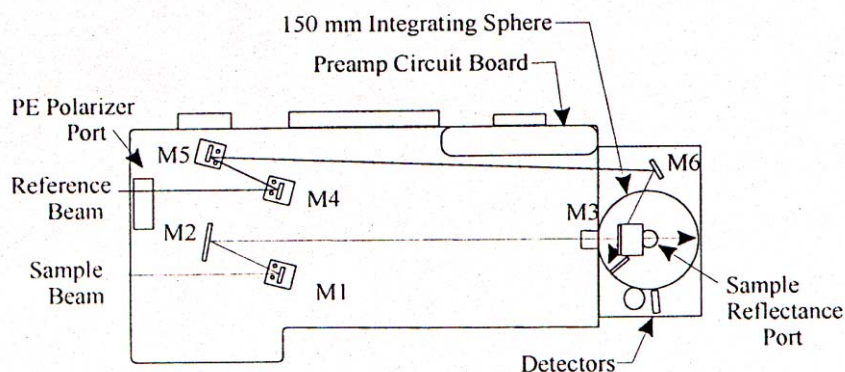


Figura 3.9. Schema ottico del vano porta sfera PELA-1001.

Il sistema è stato progettato per effettuare misure di riflettanza ad 8° , indicata in letteratura come 8° Reflectance, cioè il fascio incide sul campione con un'inclinazione di 8° rispetto alla direzione normale. Poiché non vi è alcuna possibilità di confusione, si parlerà semplicemente di misure come di riflettanza, omettendo l'angolo di incidenza che per il nostro strumento resta costante³. Inoltre la sfera è dotata di una porta superiore che permette l'esclusione della componente speculare del fascio riflesso (SEP, Specular Exclusion Port) (vedi Figura 3.10).

³ Quando in seguito si effettueranno dei confronti con delle misure effettuate con altri strumenti o in altri laboratori, saranno effettuati sugli spettri integrati proprio per svincolarsi dalla restrizione imposta dal nostro strumento di avere l'angolo d'incidenza fisso.

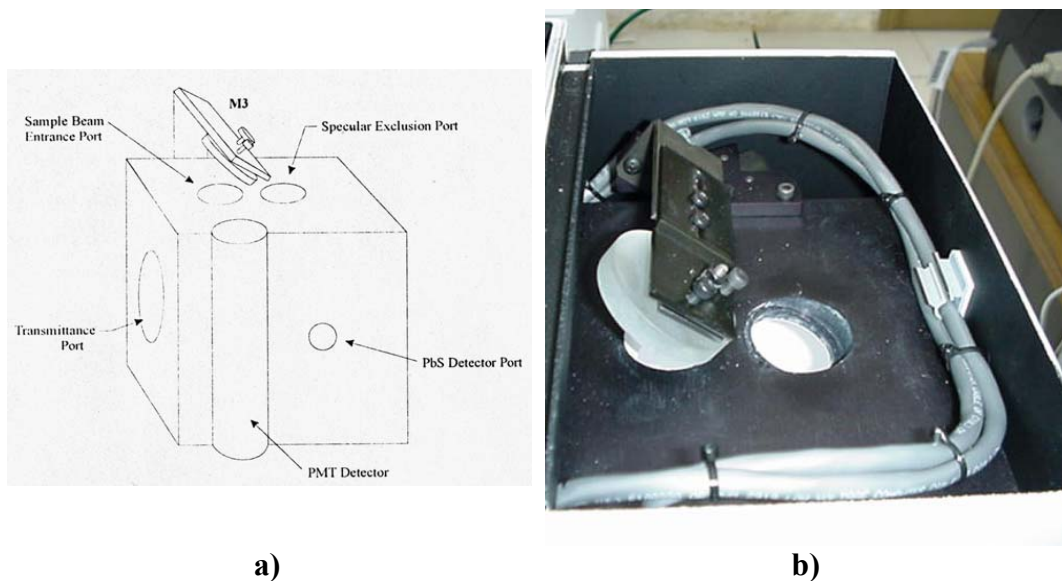


Figura 3.10. Sfera integratrice: a) schema strutturale, b) fotografia della parte superiore della sfera con in evidenza la SEP.

La sfera è dotata di due nuovi rivelatori analoghi a quelli presenti sul porta detector utilizzati in trasmissione. Inoltre presenta anche una porta per effettuare delle misure in trasmissione che, a causa della presenza della sfera oltre la porta, includono anche la componente della radiazione diffusa in avanti.



Figura 3.11. Fotografia del banco ottico nel vano PELA-1001.

La sfera è posta all'esterno del box ottico per permettere l'utilizzo di campioni orizzontali, condizione necessaria nell'effettuare misure di polvere che permette di escludere l'introduzione di matrici e quindi semplifica notevolmente le operazioni di misura (Labsphere, 1998). Un particolare dell'interno del box ottico PELA-1001 è riportato in Figura 3.11..

3.1.2.1. Spectralon®.

L'interno della sfera è in Spectralon®, una resina termoplastica, facilmente lavorabile. Il materiale ha la stessa stabilità termica del polietilene ad alta densità, è chimicamente inerte ed altamente idrofobo, eventuali contaminazioni della superficie ottica dovute al contatto con materiali di piccole dimensioni possono essere rimosse tramite acqua corrente. Il materiale presenta una forte degradazione ottica solo dopo una lunga immersione in acqua marina.

Il *range* di efficienza dello Spectralon® copre tutta la regione dell'UV, del visibile e del NIR. La riflettanza solitamente è maggiore del 99% tra 400 e 1500 nm e del 95% tra 250 e 2500.



Figura 3.12. Risposta in riflettanza dello Spectralon® tra 250 e 2500 nm.

In Figura 3.12. è riportata la curva di riflettività dello Spectralon® tra 250 e 2500 nm. Come si può vedere dalla figura il materiale ha un comportamento altamente lambertiano nella regione tra $0,257 \mu\text{m}$ e $10,6 \mu\text{m}$ (Labsphere, 2000).

3.2. Software di acquisizione ed elaborazione dati.

Per l'acquisizione e l'elaborazione dei dati si è utilizzato il software fornito dalla Perkin Elmer *UV WinLab for Lambda 900* numero di rilascio 2.90.02 del 1998, che, essendo mirato per lo strumento, consente un'agevole configurazione dei parametri ottici ed elettronici dello strumento.

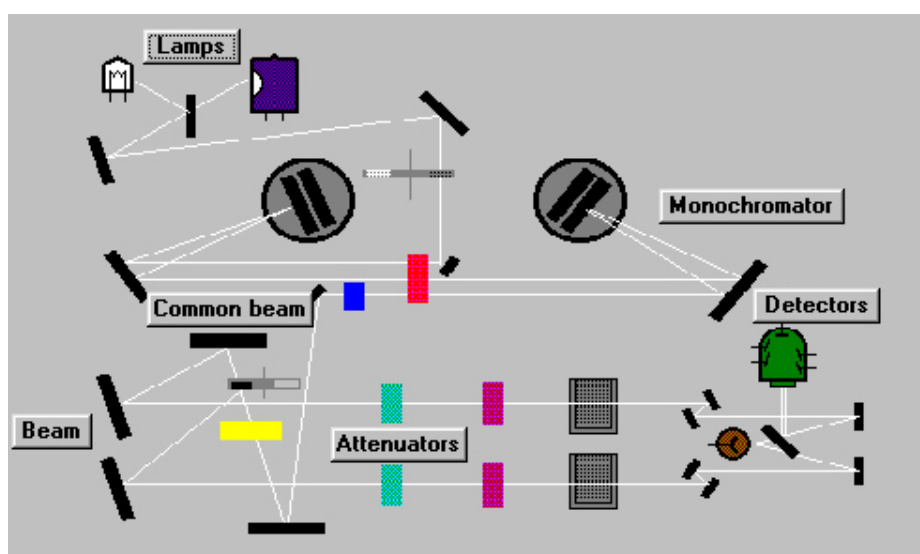


Figura 3.13. Pannello di dello strumento con diagramma schematico dello strumento.

In un primo pannello di controllo (vedi Figura 3.13.) si può controllare tutti i parametri che interagiscono direttamente con il fascio quali la lunghezza d'onda a cui si cambia sorgente luminosa (intervallo consigliato tra 300 e 350 nm, *Lamps*), la lunghezza d'onda a cui cambia il reticolo (700 – 900 nm, *Monochromator*). Il tasto *Common beam* permette di controllare la maschera che attenua il fascio (il *CBM* dello scema ottico in Figura 3.1.) fornendo la percentuale del fascio che si vuole far passare. La voce *Beam*, invece, permette di scegliere se il fascio di riferimento deve essere quello anteriore o quello posteriore, mentre *Attenuators* permette di attenuare il fascio di campionamento o quello di riferimento indipendentemente (valori consentiti 0%, 1%, 10%, 100% o automatico). Infine il tasto *Detectors* permette di scegliere a quale lunghezza d'onda si vuole cambiare il rivelatore attivo (intervallo consigliato 700 – 900 nm).

| | | | |
|-------------------------|--------------------------------------|--|--|
| Ordinate Mode : | <input type="button" value="E1"/> | Baseline Filename : | <input type="text"/> |
| | | Include 0%T : | <input type="checkbox"/> |
| Data Interval : | <input type="text" value="1.00"/> nm | <input checked="" type="radio"/> Standard Mode | <input type="radio"/> Expert Mode |
| UV/Vis | | | |
| Integration Time (sec): | <input type="text" value="0.04"/> | Slit Mode : | <input type="button" value="Fix"/> |
| Scan Speed (nm/min): | <input type="text" value="750.00"/> | Slit : | <input type="text" value="2.00"/> nm Gain : <input type="text" value="49"/> |
| NIR | | | |
| Integration Time (sec): | <input type="text" value="0.12"/> | Slit Mode : | <input type="button" value="Fix"/> |
| Scan Speed (nm/min): | <input type="text" value="500.00"/> | Slit : | <input type="text" value="7.20"/> nm Gain : <input type="text" value="3"/> |

Figura 3.14. Pannello di controllo dei parametri di acquisizione dello strumento.

Un secondo pannello (vedi Figura 3.14.) permette di scegliere la risoluzione spettrale ed i parametri dei rivelatori, oltre la quantità da misurare in ordinata. Quest'ultima scelta viene effettuata tramite il menu a tendina denominato *Ordinate Mode*. Le varie possibilità sono:

A Assorbanza;

D1 a D4 permette di vedere il valore della derivata di ordine n (da 1 a 4) dello spettro;

E1 permette di misurare l'energia del fascio del campione;

E2 permette di misurare l'energia del fascio di riferimento;

FR visualizza i valori per la funzione di Kubelka-Munk (vedi l'equazione (2.3));

%R visualizza la riflettanza⁴ in percentuale, non corretta;

⁴ Lo spettro in riflettanza non corretto è dato da :

%RA visualizza la riflettanza assoluta speculare in percentuale, con una configurazione V-W, questa modalità è utilizzabile solo se si dispone dell'accessorio PELA-1029 o PELA-1030⁵;

%RC visualizza la riflettanza corretta⁶ in %;

%T visualizza la trasmittanza in percentuale.

A seconda della scelta fatta per la modalità ordinata, è necessario definire in quali file sono presenti le *baseline* di riferimento dello strumento. La misura in %T richiede una *baseline* che consenta una correzione di *background* tramite un campione a $T = 0\%$. In questo caso il file è del tipo xxx.b0. questo è anche il file che contiene i dati relativi al parametro B_0 presente nella (3.1), mentre quelli relativi al parametro B_1 sono contenuti in un file del tipo xxx.b1.

Nel caso si sia scelto come ordinata **E1** o **E2** non è necessaria nessuna *baseline* in quanto queste forniscono semplicemente uno spettro del tipo $\%R_{(raw)}$ da

$$\%R = \frac{\%R_{(raw)} - B_0}{B_1 - B_0} \quad (3.1)$$

dove B_1 è la *baseline* al 100%T, B_0 è la *baseline* a 0%T e $\%R_{(raw)}$ è lo spettro *crudo*, cioè quello rilevato direttamente dallo strumento. Se non è disponibile la *baseline* a 0%T la riflettanza è data da:

$$\%R = \frac{\%R_{(raw)}}{B_1}$$

⁵ Tali accessori permettono di misurare la riflettanza speculare assoluta ad un angolo fisso di incidenza di 7,5° (PELA-1029) o ad un angolo variabile tra 0° e 72° (PELA-1030). Il termine assoluta è dovuta al fatto che si misura direttamente la riflettanza del campione; un altro modo di esprimere tale concetto è che il percorso ottico è identico a meno della presenza o dell'assenza del campione. Non è quindi necessaria nessuna correzione per “*background correction morror*” ed analogamente non è necessaria nessuna calibrazione su di uno specchio standard.

⁶ La riflettanza corretta è data da:

$$\%RC = R_l \left(\frac{\%R - R_0}{100 - R_0} \right)$$

normalizzare in un secondo momento con uno spettro in assenza di campione, un analogo della *baseline* tipo xxx.b1. Tale metodologia è stata preferita in quanto non presenta nessuna possibile interazione tra in fascio di riferimento ed il campione, cosa invece altamente probabile utilizzando le altre possibilità di rilevamento messe a disposizione a causa delle riflessioni multiple che avvengono nella sfera a causa dello Spectralon[®].

Una volta scelta la quantità da misurare in ordinata alcuni parametri dei rivelatori vengono automaticamente disabilitati in quanto la scelta diviene automatica in base a degli standard presenti nel software. In ogni caso i parametri su cui si può agire, in generale, sono lo *Slit Mode*, cioè il sistema di fenditura che si vuole utilizzare, che può essere impostato in *Fix*, la dimensione della fenditura è fissa, mentre cambia automaticamente il guadagno del rivelatore, o in *Servo*, la larghezza della fenditura cambia in base al guadagno del rivelatore che è fissato. La voce *Slit* controlla la larghezza della fenditura, in nm, mentre la voce *Gain* il guadagno del rivelatore. La voce *Integration Time* (espresso in secondi) permette di controllare una funzione che sopprime il rumore, aumentando, di conseguenza, la qualità del segnale⁷.

dove R_0 è lo spettro nero, mentre R_I è lo spettro bianco del materiale di riferimento standard (nel nostro caso lo Spectralon[®]).

⁷ Il rapporto segnale-rumore è proporzionale alla radice quadrata del tempo d'integrazione: incrementando il tempo di integrazione di un fattore 10, il rapporto segnale rumore viene incrementato di un fattore 3.

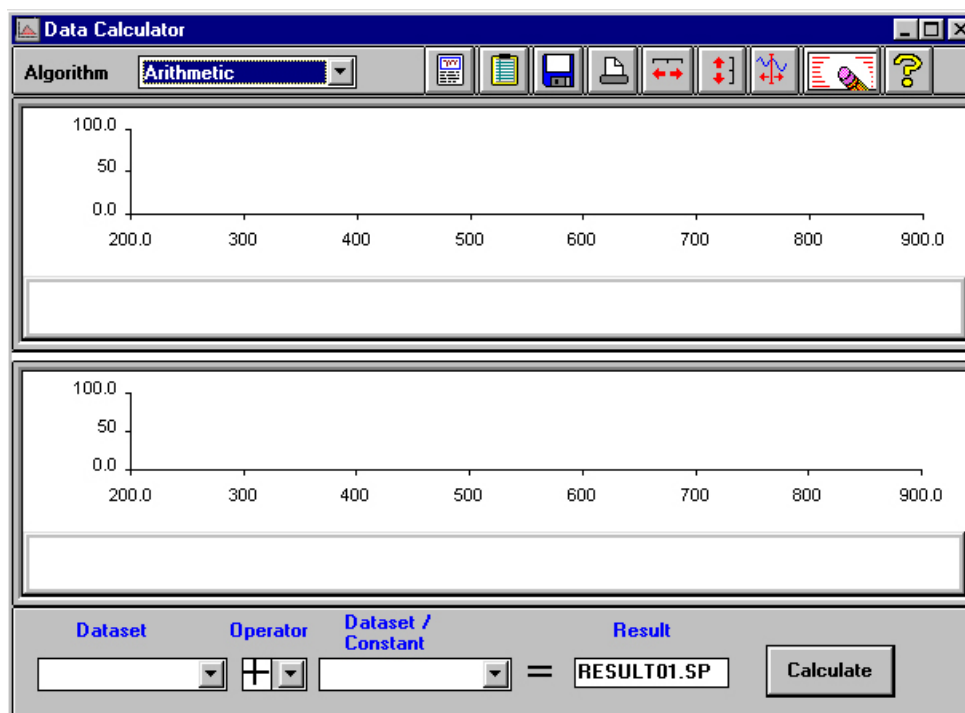


Figura 3.15. Modulo di elaborazione dati.

Il software è fornito anche di un semplice modulo di elaborazione degli spettri acquisiti (vedi Figura 3.15.). Le operazioni più utilizzate sono quelle algebriche, come si vedrà nella sezione dedicata alla spiegazione delle procedure di acquisizione. Sono comunque possibili altre operazioni come il cambio di ascissa o di ordinata, il calcolo di derivate di ordine qual si voglia dello spettro, il calcolo dell'area sottostante un picco, l'interpolazione, l'unione di due spettri, la normalizzazione, la correzione della riflettanza (impostando la curva di zero e di bianco, $R=0\%$ e $R=100\%$), la deviazione standard dello spettro e lo *smoothing* dei dati.