คู่มือปฏิบัติงาน

เรื่อง
การใช้งานเครื่องวิเคราะห์หาองค์ประกอบโครงสร้างทางเคมีของสาร โดยใช้ความยาวคลื่นช่วงอินฟรา
Fourier Transform Infrared Spectrometer (FT-IR)
รุ่น Spectrum two ยี่ห้อ PerkinElmer

จัดทำโดย
นางวรรณฤดี หมื่นพล

คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี
มหาวิทยาลัยราชภัฏสงขลา

คู่มือปฏิบัติงาน

เรื่อง
การใช้งานเครื่องวิเคราะห์หาองค์ประกอบทางโครงสร้างเคมีของสาร โดยใช้ความยาวคลื่นช่วงอินฟาเรด Fourier Transform Infrared Spectrometer (FT-IR) รุ่น Spectrum two ยี่ห้อ PerkinElmer

จัดทำโดย
นางวรรณฤดี หมื่นพล
คณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี
มหาวิทยาลัยราชภัฏสงขลา

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ขวัญกมล ขุนพิทักษ์)
คณบดีคณะวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี

กันยายน พ.ศ. 2567

คำนำ

วัตถุประสงค์ของการจัดทำคู่มือปฏิบัติงานเล่มนี้ซึ่งเกี่ยวกับการใช้งานเครื่องวิเคราะห์หาองค์ประกอบโครงสร้างทางเคมีของสารโดยใช้ความยาวคลื่นช่วงอินฟ*ราเรด* Fourier TransformInfrared Spectrometer (FT-IR) รุ่น Spectrum two ยี่ห้อ PerkinElmer ที่ใช้ในการวิเคราะห์วัสดุที่เป็นสารอินทรีย์หรืออนินทรีย์ เพื่อตรวจวิเคราะห์หาโครงสร้างและองค์ประกอบของโมเลกุลรวมกับเทคนิคอื่น โดยอาศัยหลักการของการดูดกลืนคลื่นรังสีช่วงกลางอินฟราเรด (Middle infrared region) ประมาณ 400 - 4000 cm-1 เมื่อโมเลกุลได้รับพลังงานจากคลื่นรังสีอินฟราเรดที่มีความถี่ตรงกับความถี่ของการสั่น (Stretching) หรือการหมุน (Bending) ของพันธะโควาเลนซ์ในโมเลกุล จะทำให้โมเลกุลดังกล่าวเกิดการดูดกลืนแสง และมีการเปลี่ยนแปลงค่าโมเมนต์ขั้วคู่ (Dipole moment) ของโมเลกุลจากนั้นเครื่องมือจะวัดค่าความเข้มแสงต่อความถี่หรือความยาวคลื่น (Wave number) ได้ผลเป็นสเปคตรัม ซึ่งในแต่ละพันธะของหมู่ฟังก์ชันจะแสดงค่าความยาวคลื่นเฉพาะต่างกัน จึงใช้สันนิฐานหมู่ฟังก์ชันในสารได้ และเป็นเทคนิคที่ไม่ทำลายตัวอย่าง (nondestructive) คือไม่มีการเปลี่ยนแปลง คุณสมบัติทางเคมีและกายภาพของตัวอย่างหลังการวัด นอกจากนี้ยังเป็นวิธีที่สะดวก ไม่ยุ่ง ยาก ใช้เวลาในการวัดสั้นและมีความปลอดภัยสูงสามารถวัดตัวอย่างได้ทั้งในรูปของแข็งและของเหลวสามารถวัดได้ทั้งแบบการส่องผ่าน (Transmission) และการสะท้อน (Reflection)

สารบัญ

เรื่อง	หน้า
คำนำ	
สารบัญ	
ขั้นตอนที่ 1 ข้อมูลทั่วไปของเครื่อง	
1.1 ข้อมูลทั่วไป	1
1.2 ประเภทตัวอย่าง	1
1.3 ลักษณะผลที่ได้	1
ขั้นตอนที่ 2 การใช้งานโปรแกรม	2
2.1 การใช้งานโปรแกรม	2
2.2 การตรวจสอบพลังงาน	4
2.3 การตรวจสอบความชื้นภายในเครื่อง	5
2.4 ตั้งค่าการทดสอบ	6
2.5 การจัดการรูปแบบสเปกตรัม	7
2.6 กระบานการปรับปรุงสเปกตรัม	11
2.7 การระบุพีคบนสเปกตรัม	12
2.8 การเปลี่ยนกราฟ	12
2.9 การตำนวณพื้นที่ใต้กราฟ	13
2.10 การค้นหาตัวอย่างที่ไม่ทราบเทียบกับพีคตัวอย่างในโปรแกรม	16
2.11 การออกจากโปรแกรม	17
2.12 การส่งออกข้อมูล	17
ขั้นตอนที่ 3 การวิเคราะห์ตัวอย่างโหมดการสะท้อน (Reflection)	20

ขั้นตอนที่ 1 ข้อมูลการทำงานของเครื่องวิเคราะห์หาองค์ประกอบโครงสร้างทางเคมีของสาร โดยใช้ความยาวคลื่นช่วงอินฟราเรด Fourier Transform Infrared Spectrometer (FT-IR) รุ่น Spectrum two ยี่ห้อ PerkinElmer

1.1 ข้อมูลทั่วไป

เครื่องมือที่ใช้ในการวิเคราะห์วัสดุที่เป็นสารอินทรีย์หรืออนินทรีย์ เพื่อตรวจวิเคราะห์หาโครงสร้างและองค์ประกอบของโมเลกุลรวมกับเทคนิคอื่น โดยอาศัยหลักการของการดูดกลืนคลื่นรังสีช่วงกลางอินฟราเรด (Middle infrared region) ประมาณ 400 - 4000 cm-1 เมื่อโมเลกุลได้รับพลังงานจากคลื่นรังสีอินฟราเรดที่มีความถี่ตรงกับความถี่ของการสั่น (Stretching) หรือการหมุน (Bending) ของพันธะโควาเลนซ์ในโมเลกุล จะทำให้โมเลกุลดังกล่าวเกิดการดูดกลืนแสง และมีการเปลี่ยนแปลงค่าโมเมนต์ขั้วคู่ (Dipole moment) ของโมเลกุลจากนั้นเครื่องมือจะวัดค่าความเข้มแสงต่อความถี่หรือความยาวคลื่น (Wave number) ได้ผลเป็นสเปคตรัม ซึ่งในแต่ละพันธะของหมู่ฟังก์ชันจะแสดงค่าความยาวคลื่นเฉพาะต่างกัน จึงใช้สันนิฐานหมู่ฟังก์ชันในสารได้ และเป็นเทคนิคที่ไม่ทำลายตัวอย่าง (nondestructive) คือไม่มีการเปลี่ยนแปลง คุณสมบัติทางเคมีและกายภาพของตัวอย่างหลังการวัด นอกจากนี้ยังเป็นวิธีที่สะดวก ไม่ยุ่ง ยาก ใช้เวลาในการวัดสั้น และมีความปลอดภัยสูงสามารถวัดตัวอย่างได้ทั้งในรูปของแข็งและของเหลวสามารถวัดได้ทั้งแบบการส่องผ่าน (Transmission) และการสะท้อน (Reflection)

1.2 ประเภทตัวอย่าง

1. ตัวอย่างวัตถุ/ฟิล์ม : วัสดุหรือของแข็งหนาไม่เกิน 20 mm ขนาดไม่เกิน 50 x 50 mm และไม่น้อยกว่า 5 x 5 mm (ทดสอบได้เฉพาะพื้นผิวนอกสุด/ฟิล์มบางชั้นนอก)
2. ตัวอย่างของเหลว : สารตัวอย่างควรมีปริมาตร 1 ml (ควรเตรียมตัวทำลายของสารนั้นในการทำความสะอาด)
3. ตัวอย่างผง **:** เป็นผงละเอียดปริมาณเพียงพอต่อการวัด ไม่น้อยกว่า 0.5 g

1.3 ลักษณะของผลที่ได้

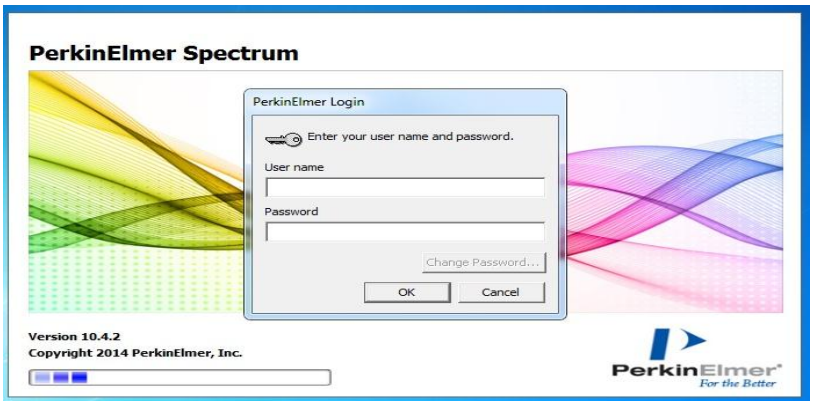
1. กราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่าการส่องผ่านของแสง (% Transmittance) กับเลขคลื่น (Wave numbers)
2. กราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสง (Absorbance) กับเลขคลื่น (Wave numbers)

ขั้นตอนที่ 2 การใช้งานโปรแกรม

2.1 การเข้าใช้งานโปรแกรม

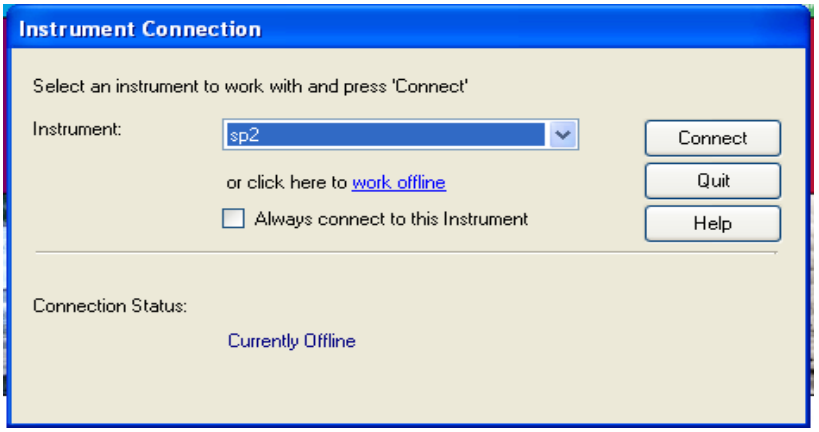
1. ดับเบิ้ลคลิ๊กที่ไอคอน Spectrum ที่หน้าจอ Desktop

2. พิมพ์ชื่อ User name และ Password ที่ต้องการ Lo



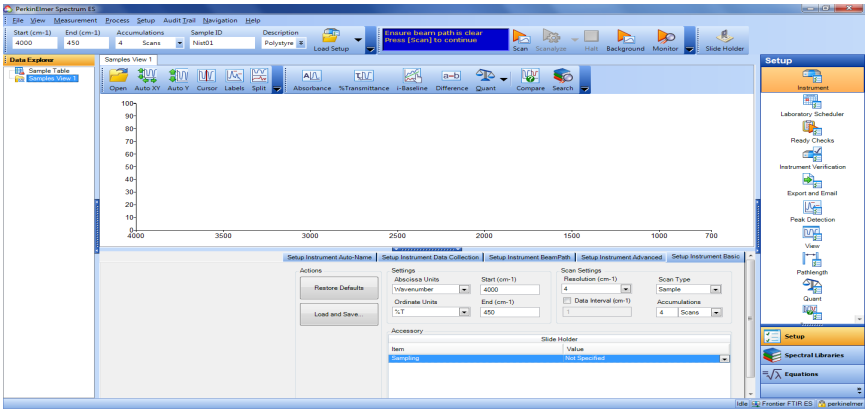
รูปที่ 1 การเข้าสู่โปรแกรม

3. เลือกเครื่อง FTIR ที่ต้องการจะเชื่อมต่อกับโปรแกรม (ต้องเปิดเครื่อง FTIR ก่อน) แล้วกด Connect หรือ หากเลือก work offline เมื่อต้องการเปิดดูกราฟและ Process ต่าง ๆ โดยที่ไม่ต้องเปิดเครื่อง



รูปที่ 2 เข้าสู่โปรแกรม

4. จะปรากฏหน้าต่างของโปรแกรมดังรูป



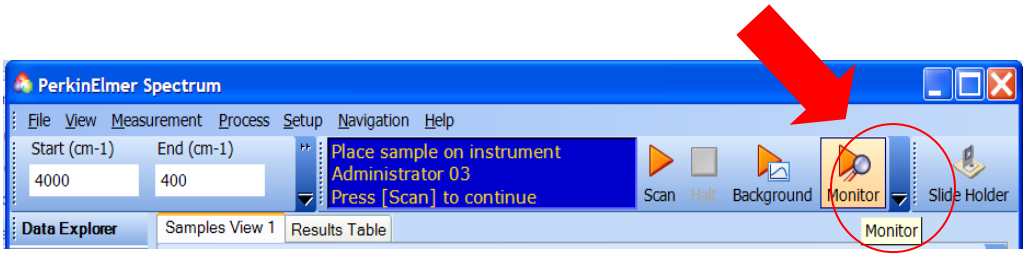
รูปที่ 3 หน้าต่างโปรแกรม

ประกอบด้วยหน้าต่าง

- **แถบเมนูบาร์ ด้านบน:** แสดงแถบคำสั่งหลักต่างๆ สำหรับการทำงานของโปรแกรม
- **Navigation Pane ด้านซ้ายมือ:** แสดง Data Explorer สำหรับเปิดหน้าต่างกราฟตัวอย่าง
- **Navigation Pane ด้านขวามือ:** แสดงแถบคำสั่งเมนูตั้งค่าต่างๆ (Setup Menu) เช่น Instrument, Compare, Search และ Quant เป็นต้น
- **Navigation Pane ด้านล่าง:** แสดงหน้าต่างการตั้งต่า ของคำสั่งเมนู Setup
- **Sample View หน้าต่างกลาง:** แสดงกราฟที่เลือกเปิดดูหรือผลที่ต้องการวิเคราะห์
- **Graph and Process Toolbar:** แสดงแถบคำสั่งเมนูลัดสำหรับจัดการกราฟและ Process สเปกตรัมกราฟ

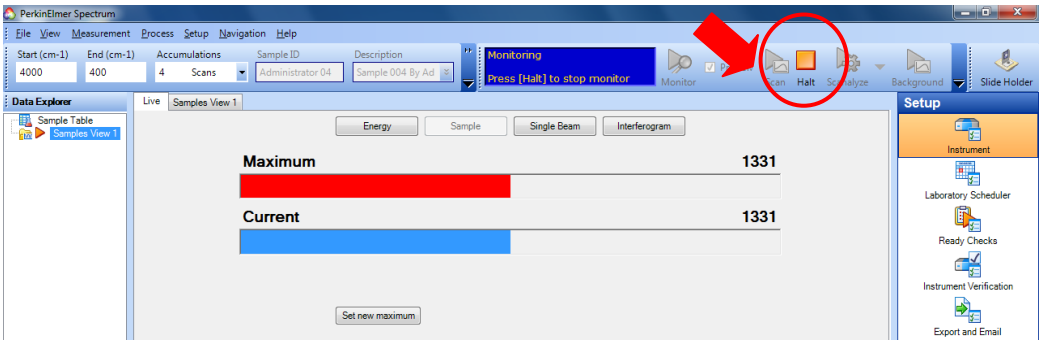
2.2 การพลังงานของเครื่อง (Monitor Energy)

1. เปิดดูช่องใส่ตัวอย่างจะต้องไม่มีตัวอย่างวางกั้นทางเดินแสงคลิ๊กที่ปุ่มไอคอน Monitor



รูปที่ 4 แสดงการมอนิเตอร์ดูพลังงานของเครื่อง

2. อ่านค่าพลังงานที่แถบสีน้ำเงิน บันทึกค่าเริ่มต้นไว้
3. กด Halt เพื่อหยุดการมอนิเตอร์



รูปที่ 5 แสดงการอ่านค่าพลังงาน

หมายเหตุ : - ค่าพลังงานของเครื่องจะขึ้นอยู่กับอุปกรณ์ที่ต่อกับเครื่องต่อกับอุปกรณ์แบบ Slide Holder จะมีค่าอยู่ที่ประมาณ 800 – 1,000 ต่อกับอุปกรณ์แบบ UATR จะมีค่าอยู่ที่ประมาณ 10% ของอุปกรณ์ Slide Holderค่าพลังงานจะลดลดตามอายุการใช้งานของเครื่องมือและ การดูแลรักษา

2.3 การตรวจสอบความชื้นภายในเครื่อง (Humidity)

1. กดเลือกไอคอน Humidity Shield ที่เมนู Measurement จะปรากฏ เป็นเปอร์เซ็นต์ตัวเลข และ คำแนะนำการดูแล

รูปที่ 6 แสดงค่าความชื้นภายในเครื่อง

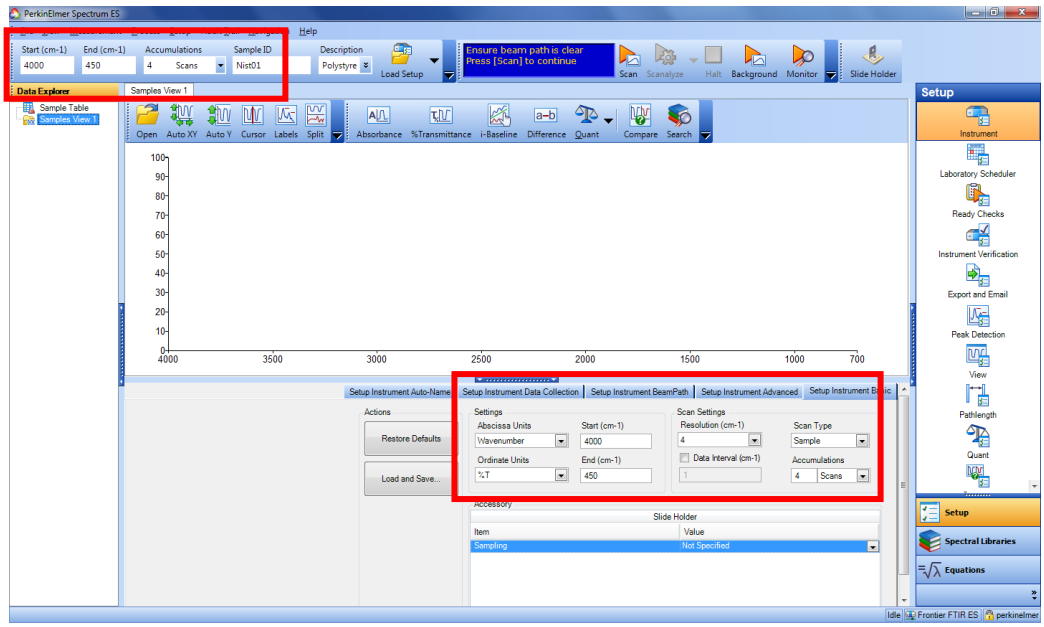
2. ค่าความชื้นภายในเครื่องและคำแนะนำจะแสดงดังนี้และเมื่อตรวจสอบเสร็จสิ้น กดปุ่ม Close เพื่อปิดหน้าต่าง

Status	Appearance	Humidity Range	Action Required
Normal	0%	<10%	No action is required.
High	20%	20–39%	Desiccant change is recommended.
Critical	40%	≥40%	Replace the desiccant immediately to avoid instrument damage.

รูปที่ 7 แสดงตารางค่าความชื้นและคำแนะนำ

2.4 ตั้งค่าการทดสอบ

1. เลือกที่เมนู Setup\Instrument หรือตั้งค่าการ Scan ได้ที่เมนูบาร์ด้านบน



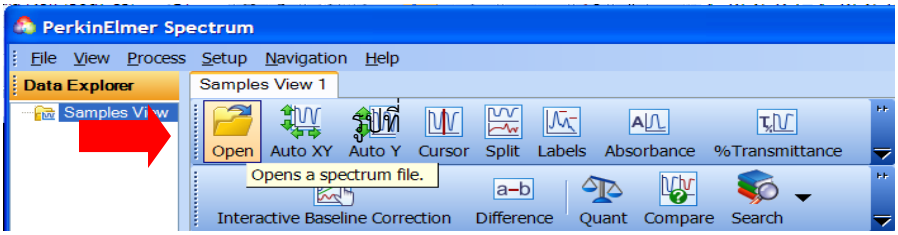
รูปที่ 8 แสดงการตั้งค่าเมนู

2. ใส่ Scan range Start, End ตามที่ต้องการโดยตั้งค่าดังต่อไปนี้

- Slide Holder : 4000 – 400 cm-1 หรือตามแต่ชนิดของ Window ที่ใช้
- Universal ATR : 4000 – 650 cm-1
- Ordinate Units: เลือกหน่วยที่จะใช้ทำการวิเคราะห์ %T, A หรือ %R
- ช่อง Accumulations: ใส่จำนวนรอบที่ใช้ในการ Scan (แนะนำ 4 หรือ 8 Scans)
- Resolution (cm^{-1}) ให้เลือกค่า 4 cm^{-1} (เมื่อตัวอย่างเป็นของแข็ง และ ของเหลว)
- Sample ID : ชื่อตัวอย่าง

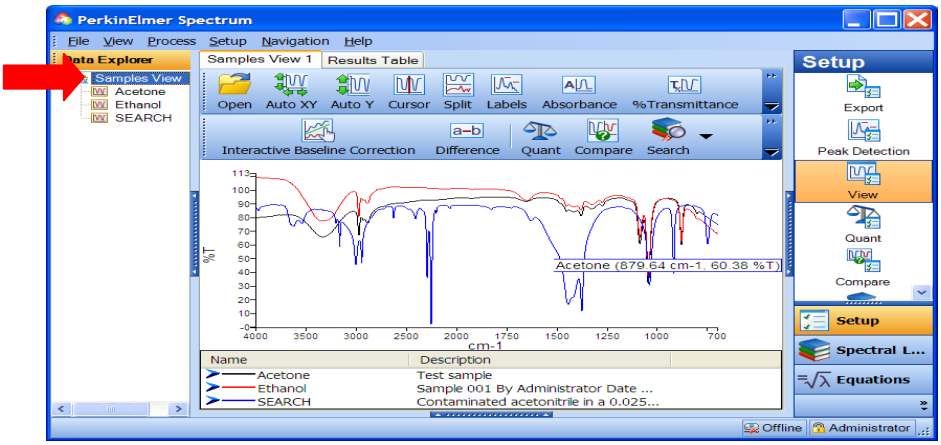
2.5 การจัดการรูปแบบของสเปกตรัม (Menu View)

1. การเปิดสเปกตรัมที่เก็บไว้โดยเข้าเมนู File open หรือเมนูลัดที่ Toolbar



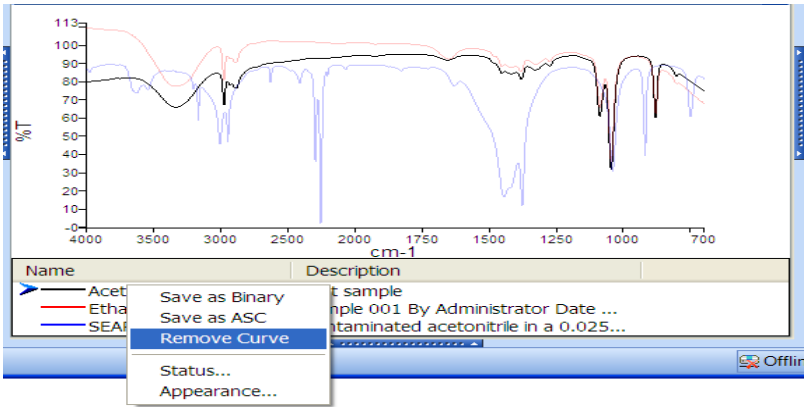
รูปที่ 9 แสดงเมนูการเปิดสเปกตรัม

2. เลือกชื่อสเปกตรัมที่ต้องการเปิดดูโดยสามารถเปิดได้ทีละหลายสเปกตรัมพร้อมกันได้จะปรากฏสเปกตรัมในหน้า Sample View



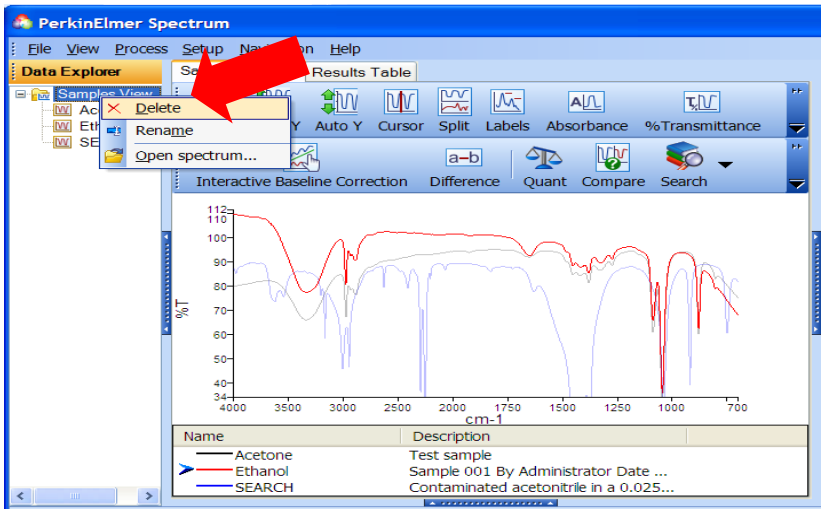
รูปที่ 10 แสดงเลือกสเปกตรัมที่ต้องการเปิด

3. การลบสเปกตรัมออกจากหน้าต่าง (แต่ Raw data file ในเครื่องจะไม่ถูกลบ)
เลือกชื่อสเปกตรัมที่ต้องการลบแล้วคลิกขวาเลือก Remove Curve หรือ กดปุ่ม Delete ที่ปุ่ม Keyboard



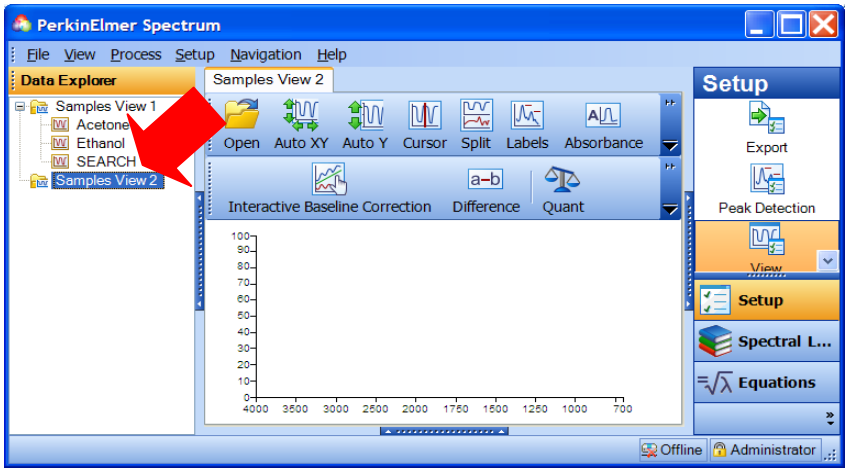
รูปที่ 11 แสดงการลบสเปกตรัมออกจากหน้าต่าง

4. หากต้องการลบทุกสเปกตรัมออกจาก Sample View คลิกขวาที่ Sample View ด้านซ้ายมือแล้วเลือก Delete



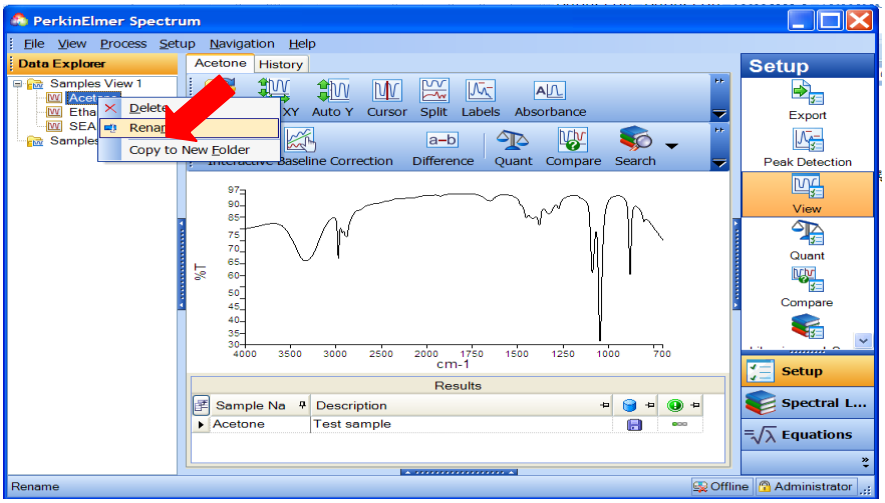
รูปที่ 12 แสดงการลบข้อมูลทุกสเปกตรัม

5. การเพิ่มหน้าต่าง Sample View เลือกเมนู File \ New จะปรากฏหน้าต่าง Sample View2 เพิ่มขึ้นมาเพื่อให้ทำการเปิดกราฟที่ต้องการให้อยู่คนละหน้าต่างกันได้



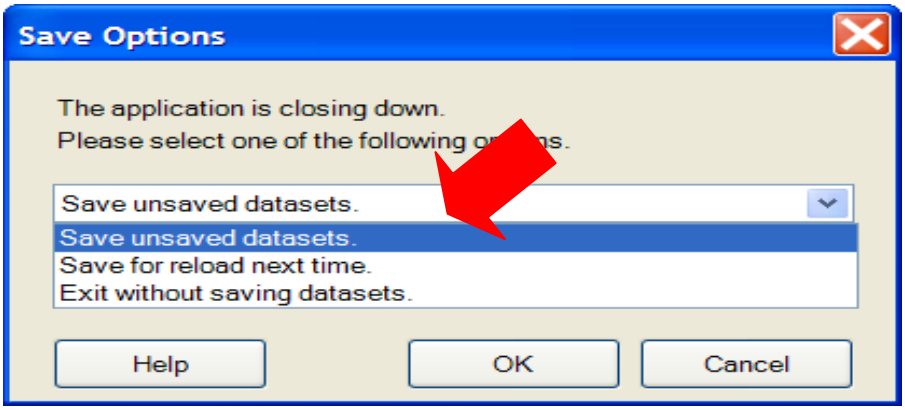
รูปที่ 13 แสดงการเพิ่มหน้าต่าง Sample View

6. การเปลี่ยนชื่อสเปกตรัมการ Rename ที่หน้าต่าง Sample view เลือกชื่อสเปกตรัมที่ต้องการคลิกขวาเลือก Rename พิมพ์ชื่อที่ต้องการ ชื่อก็จะถูกเปลี่ยนตามที่ตั้งใหม่จากนั้นกดเมนู File\Save เพื่อทำการเก็บชื่อใหม่ไว้ทับชื่อเดิมหากไม่ต้องการเก็บทับชื่อเดิมเลือก File\Save as



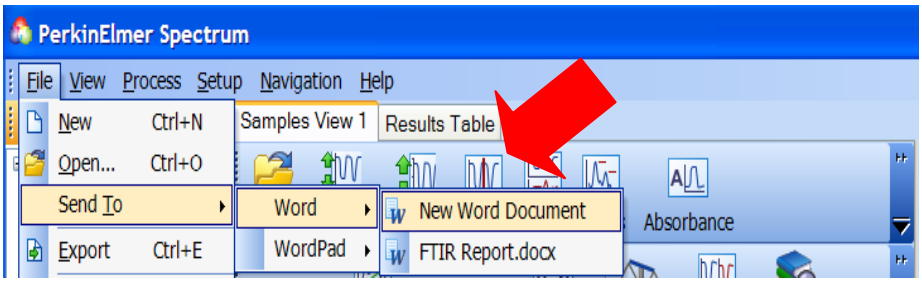
รูปที่ 14 แสดงการเปลี่ยนชื่อสเปกตรัม

7. หากไม่ทำการ Save ตอนปิดโปรแกรมจะถามว่าต้องการเก็บก่อนปิดโปรแกรมไหม ให้เลือก Save unsaved datasets



รูปที่ 15 แสดงการบันทึกข้อมูล

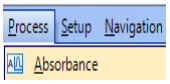
8. หากต้องการ Copy หน้าต่าง Sample View ไปอยู่ในรูป Microsoft Word คลิกเลือก Sample View ที่ต้องการ แล้วเลือกเมนู File\Send to\Word เลือก New word Document เพื่อสร้างใหม่ หรือเลือกให้ไปอยู่ในเอกสาร Word ที่เราเปิดใช้งานอยู่ขณะนั้นก็ได้

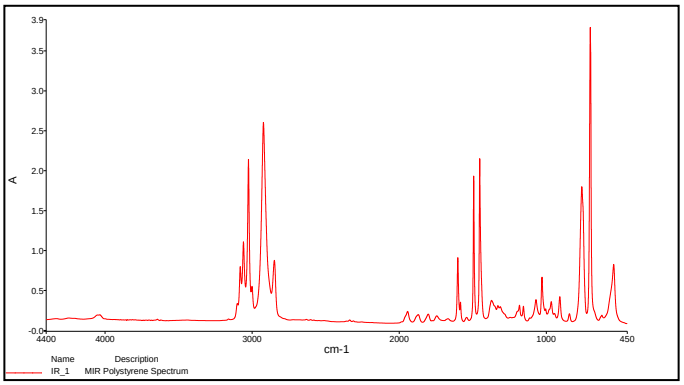


รูปที่ 16 แสดงการคัดลอกข้อมูลไปใน Microsoft Word

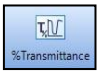
2.6 กระบวนการปรับปรุงสเปกตรัม (Process Menu)

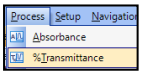
1. การเปลี่ยนค่าแกน Y จาก %T เป็น Abs เลือก Sample View หรือสเปกตรัมที่ต้องการ จากนั้นเลือกเมน

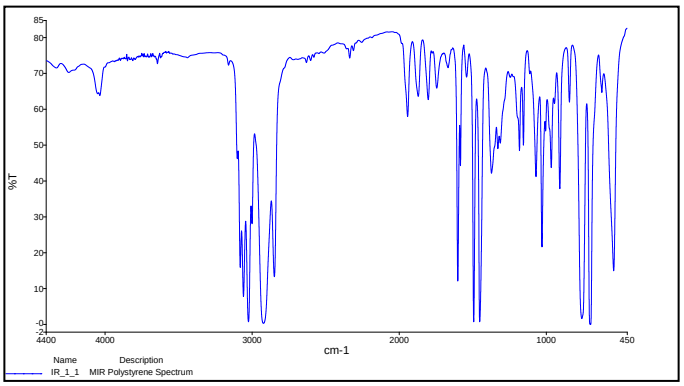
Process\Absorbance หรือกดที่ไอคอนบน Toolbar 



รูปที่ 17 แสดงการเปลี่ยนค่าแกน Y จาก %T เป็น Abs

2. การเปลี่ยนค่าแกน Y จาก Abs เป็น %T เลือก Sample View หรือสเปกตรัมที่ต้องการ จากนั้นเลือกเมนู 

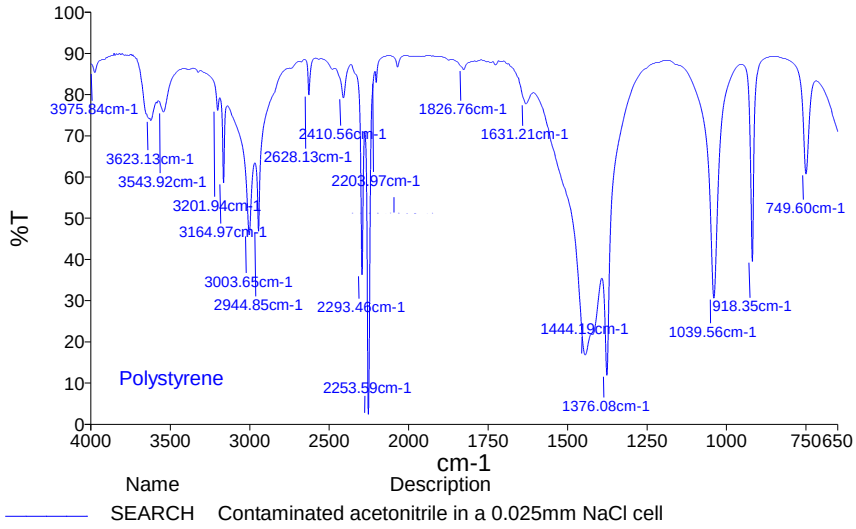
Process\%Transmittance หรือกดที่ไอคอนบน Toolbar 



รูปที่ 18 แสดงการเปลี่ยนค่าแกน Y จาก Abs เป็น %T

2.7 การระบุพีคลงบนสเปกตรัม

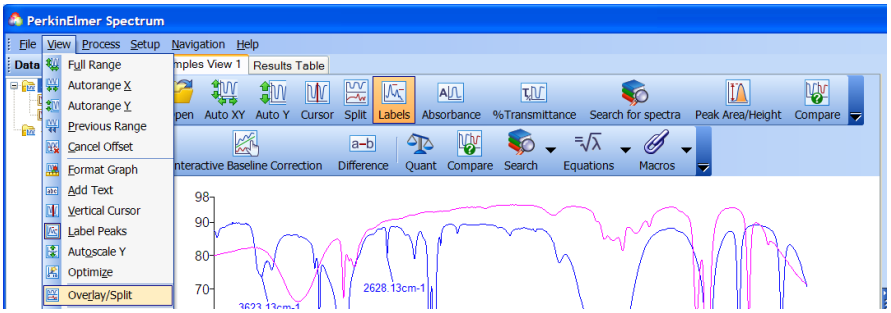
เลือกสเปกตรัมที่ต้องการระบุพีค เลือกเมนู View\Label Peaks



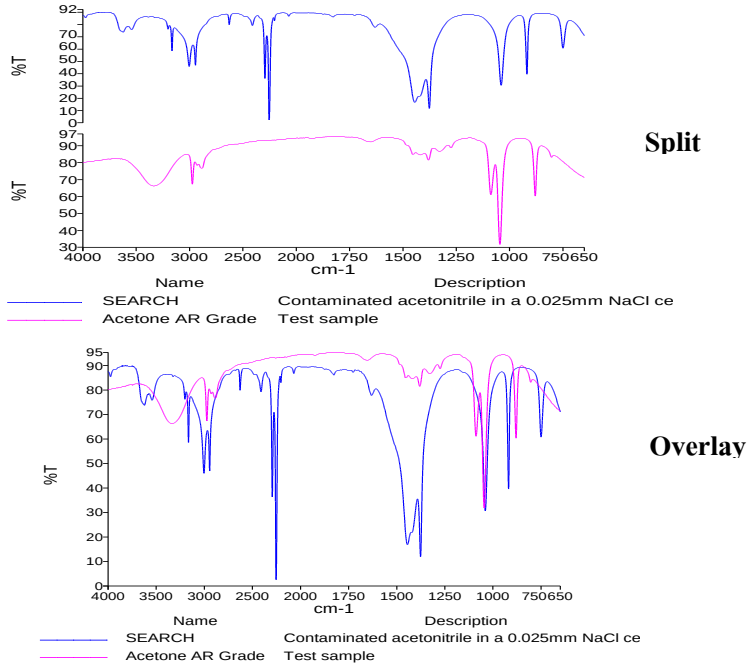
รูปที่ 19 แสดงการระบุพีคลงบนสเปกตรัม

2.8 การเปลี่ยนกราฟ (Overlay/Split Mode)

เลือก Sample View ที่ต้องการ จากนั้นเลือกเมนู View\Overlay\Split เลือกเมนูเดิมซ้ำอีกครั้งหากต้องการให้กลับมาเป็น Mode เดิม



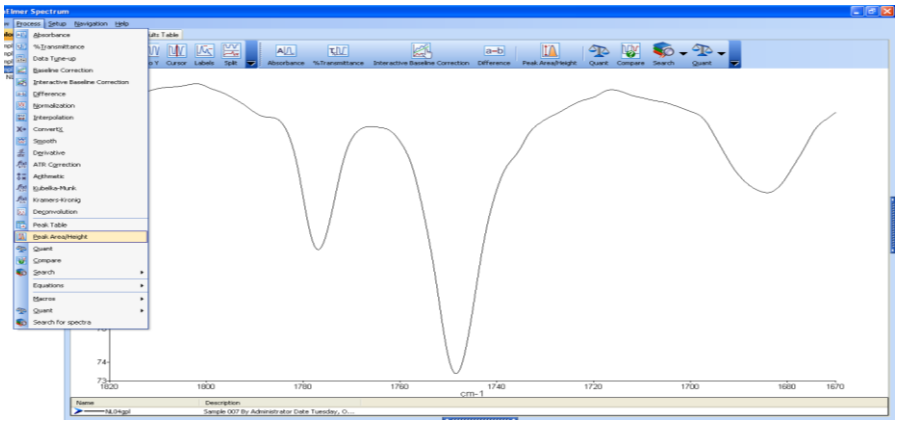
รูปที่ 20 แสดงการ View Graph ระหว่าง Overlay/Split Mode



รูปที่ 21 แสดง View Graph ระหว่าง Overlay/Split Mode

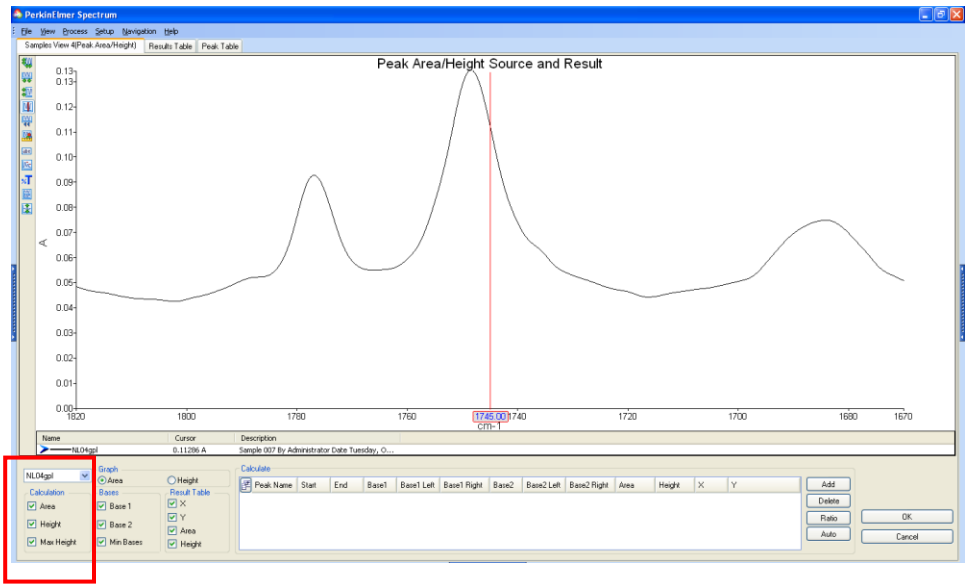
2.9 การคำนวณหาพื้นที่ใต้กราฟ และ ความสูงพีค (Peak Area/Height)

1. กดเลือก Process แล้วเลือก Peak Area/Height



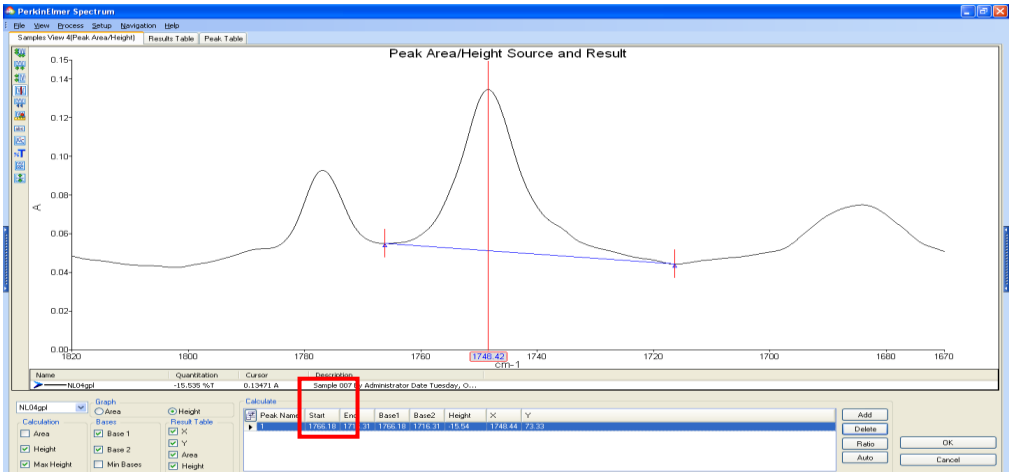
รูปที่ 22 แสดงโปรแกรมกดเลือก Process แล้วเลือก Peak Area/Height

2. เลือกว่าจะทำการคำนวณด้วย Area, Height หรือ Max Height



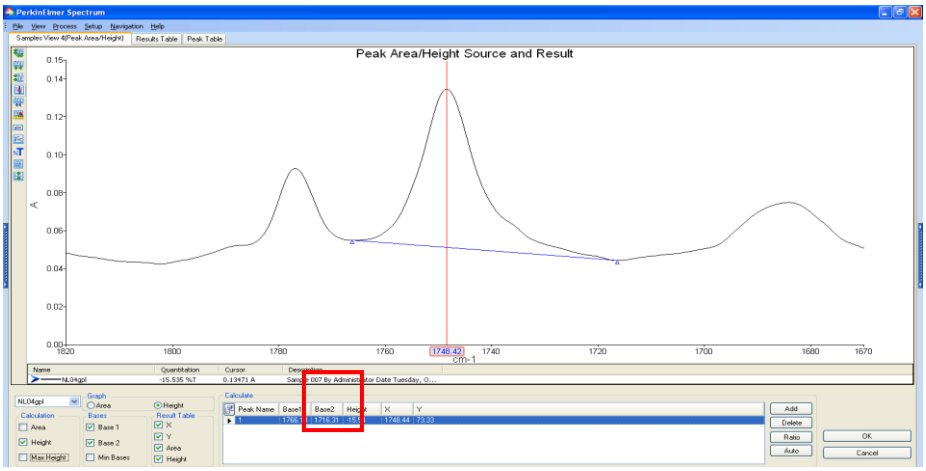
รูปที่ 23 แสดงการปรับแกน %T เป็น Absorbance

2.1 Max Height : คือให้โปรแกรมคำนวณความสูงจากตำแหน่งพีคที่สูงที่สุดในช่วงที่กำหนด โดยต้องระบุฐานพีคด้านซ้ายและขวาที่ Base1 และ Base2 และระบุช่วงของยอดพีคที่ต้องการใช้คำนวณยอดพีคสูงสุดที่ Start และ End โปรแกรมจะทำการคำนวณค่าความสูงพีคมาให้โดยดูที่ Height



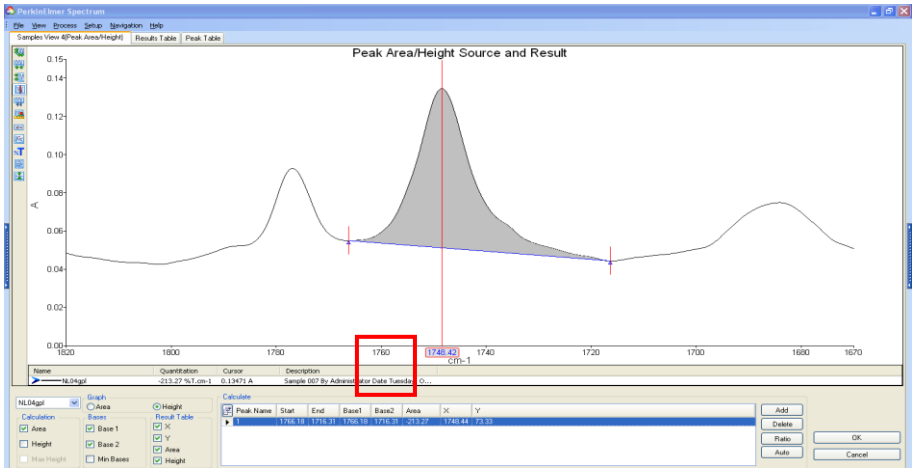
รูปที่ 24 แสดงโปรแกรมคำนวณความสูงจากตำแหน่งพีคที่สูงที่สุดในช่วงที่กำหนด

2.2 Height: คือให้โปรแกรมคำนวณความสูงที่ตำแหน่งพีคที่กำหนด โดยต้องระบุฐานพีคด้านซ้ายและขวาที่ Base1 และ Base2 และระบุยอดพีคที่ต้องการใช้คำนวณที่ Location จากนั้นโปรแกรมจะทำการคำนวณค่าความสูงพีคมาให้โดยดูที่ค่า Height



รูปที่ 25 แสดงโปรแกรมคำนวณความสูงที่ตำแหน่งพีคที่กำหนด

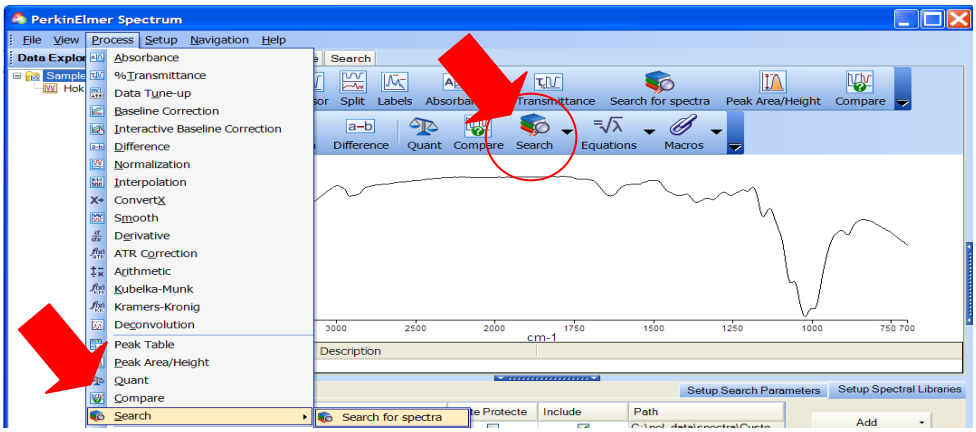
2.3 Area : คือให้โปรแกรมคำนวณพื้นที่ใต้พีคในช่วงที่กำหนด โดยต้องระบุฐานพีคหรือ baseline ด้านซ้ายและขวาที่ Base1 และ Base2 และระบุช่วงของพีคที่ต้องการให้คำนวณพื้นที่ Start และ End โปรแกรมจะทำการคำนวณค่าความสูงพีคมาให้โดยดูที่ค่า Area



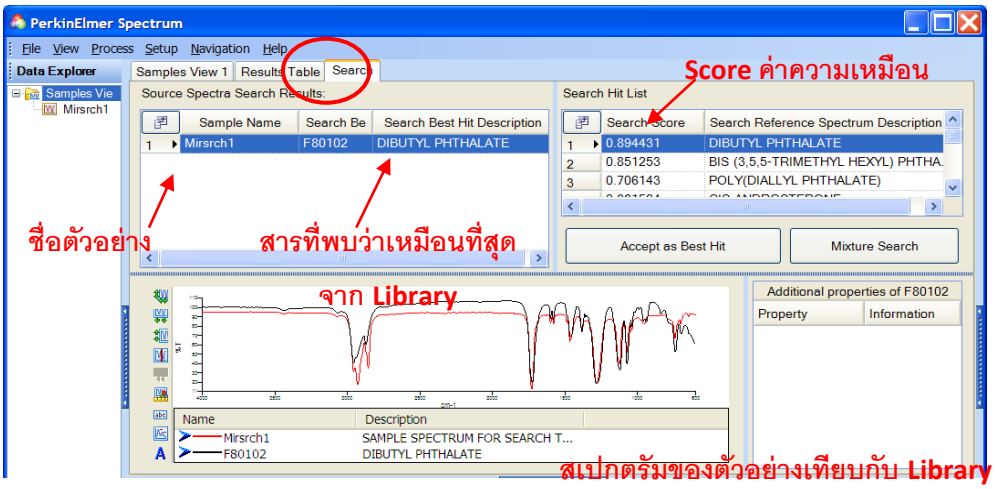
รูปที่ 26 แสดงโปรแกรมคำนวณพื้นที่ใต้พีคในช่วงที่กำหนด

2.10 การค้นหาตัวอย่างที่ไม่ทราบเทียบกับพีคตัวอย่างในโปรแกรม (Unknown กับ Library)

1. ทำการเลือกไฟล์สเปกตรัมที่ต้องการ Search แล้วเลือกเมนู Process\Search\Search for Spectra หรือคลิกที่ไอคอน Search for spectra ที่แถบด้านบน



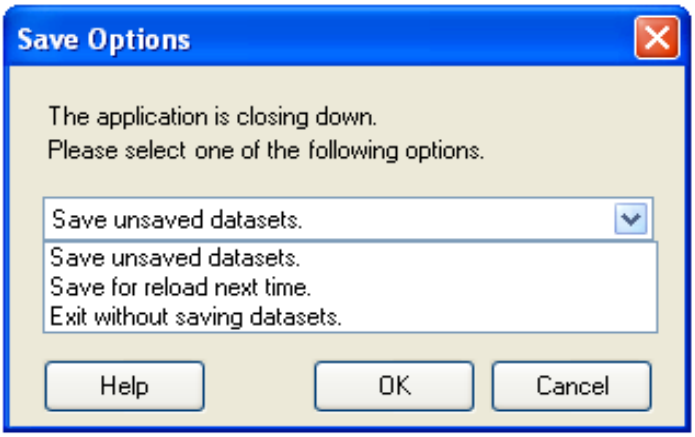
รูปที่ 27 แสดงสเปกตรัมที่ต้องการ Search



รูปที่ 28 จะแสดงหน้าต่าง Search เพิ่มขึ้นมาซึ่งจะแสดงผลของการ Search

2.11 การออกจากโปรแกรม (Exit)

กดปิดโปรแกรมจะปรากฏหน้าต่าง เพื่อเลือกการออกจากโปรแกรมกดเลือก แล้วกดปุ่ม OK

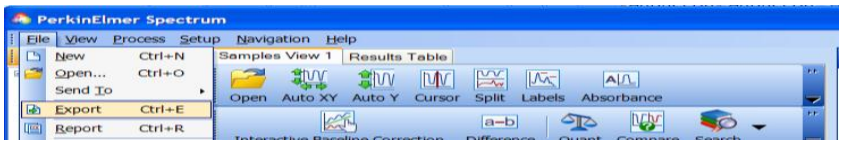


รูปที่ 29 แสดงการออกจากโปรแกรม

- Save unsaved datasets คือ โปรแกรมจะทำการจัดเก็บสเปกตรัมที่ทำการเปลี่ยนแปลง แล้วยังไม่ได้ถูกจัดเก็บ ทุกสเปกตรัม
- Save for reload next time.คือ ในการเข้าโปรแกรมครั้งถัดไป จะเป็นหน้าต่างสุดท้ายที่เปิดใช้โปรแกรมก่อนหน้านี้
- Exit without saving datasets คือ ในการเข้าโปรแกรมครั้งถัดไป จะเป็นหน้าต่างว่างเปล่าพร้อมที่จะทดสอบงานครั้งนั้น

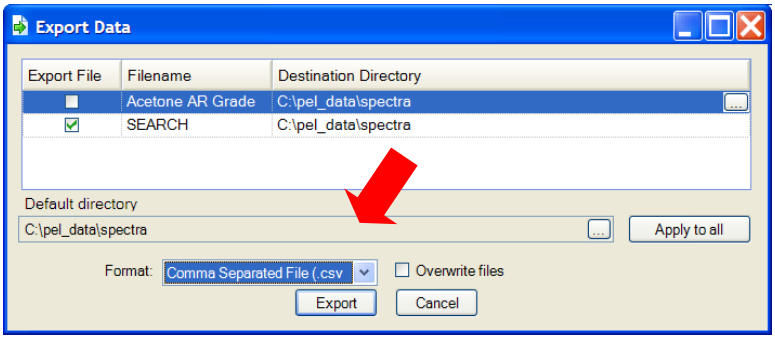
2.12 การส่งออกข้อมูล (Export data)

1. ออกไปอยู่ในรูป X,Y เพื่อเปิดใน Excel เลือกสเปกตรัมที่ต้องการ Export จากนั้นเลือกเมนู File\Export



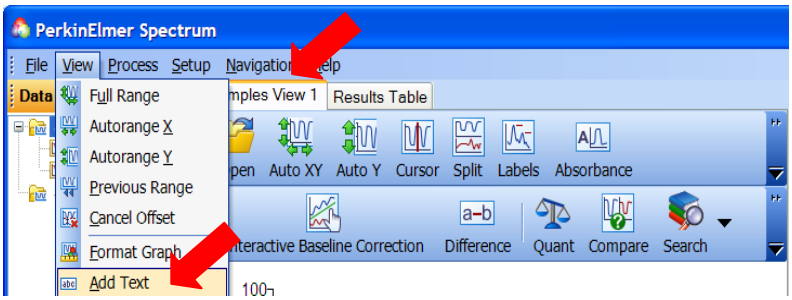
รูปที่ 30 แสดงการ Export data

2. คลิกเลือก Destination Directory ว่าจะให้ Export ไปเก็บไว้ที่ไหน เลือก Format เป็น .CSV จากนั้นทำการ Browse file ที่เก็บไว้ใน Drive C หรืออื่นๆ ขึ้นมาในรูป Excel File ได้เลย

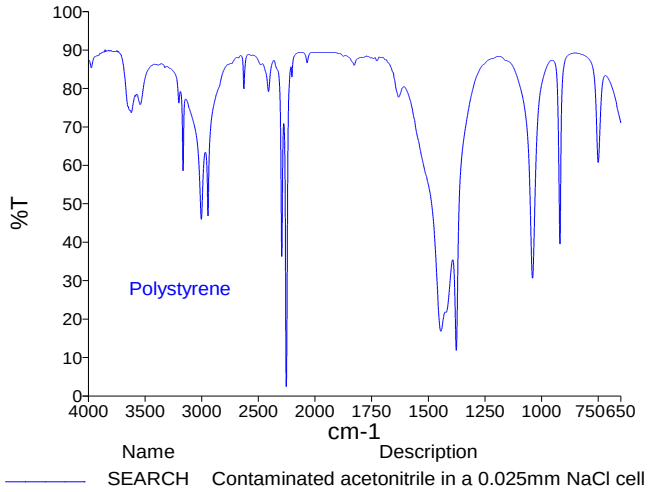


รูปที่ 31 แสดงเลือก Format เป็น .CSV

3. การเพิ่มข้อความลงบนหน้าสเปกตรัม Sample View พิมพ์ข้อความที่ต้องการลงในช่อง Text เลือกขนาดและสีของตัวอีกษรได้ที่ Font Size และ Color ถ้าไม่ต้องการกรอบตัวหนังสือไม่ต้องเลือก Draw Border



รูปที่ 32 แสดงเพิ่มข้อความลงบนหน้าสเปกตรัม



รูปที่ 33 แสดงตัวหนังสือจะปรากฏบนกราฟหลังการเพิ่มข้อความ

ขั้นตอนที่ 3 การวิเคราะห์ตัวอย่างโหมดการสะท้อน (Reflection)

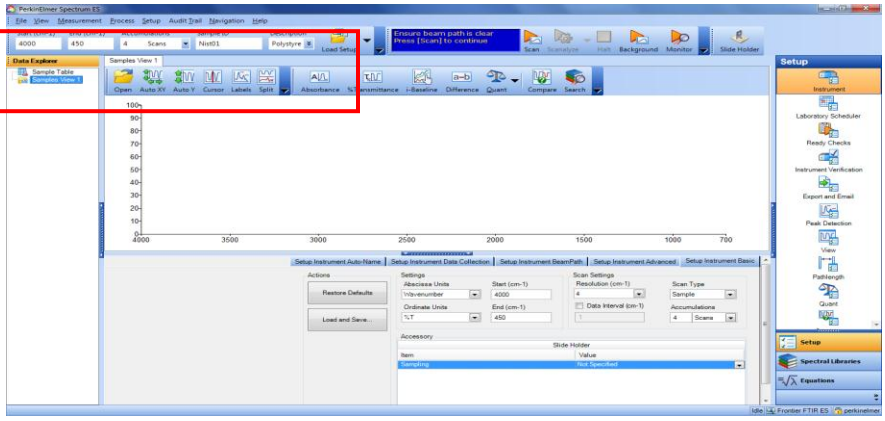
การตั้งค่าการทดสอบโดยใช้โหมดการสะท้อน (Reflection) โดยใช้ Universal ATR (UATR) มีการตั้งค่าโปรแกรมการทดสอบดังนี้ Scan range Start,: 4000 – 650 cm-1 เลือกหน่วยที่จะใช้ทำการวิเคราะห์ %T, A หรือ %R ช่อง Accumulations: ใส่จำนวนรอบที่ใช้ในการ 4 Scan Resolution (cm^{-1}) ให้เลือกค่า 4 cm^{-1} เนื่องจากตัวอย่างเป็นของแข็ง

1. เสียบปลั๊กเปิดเครื่องสำรองไฟโดยกด Ok ค้างไว้

รูปที่ 34 แสดงเครื่องสำรองไฟ

2. เข้าโปรแกรม

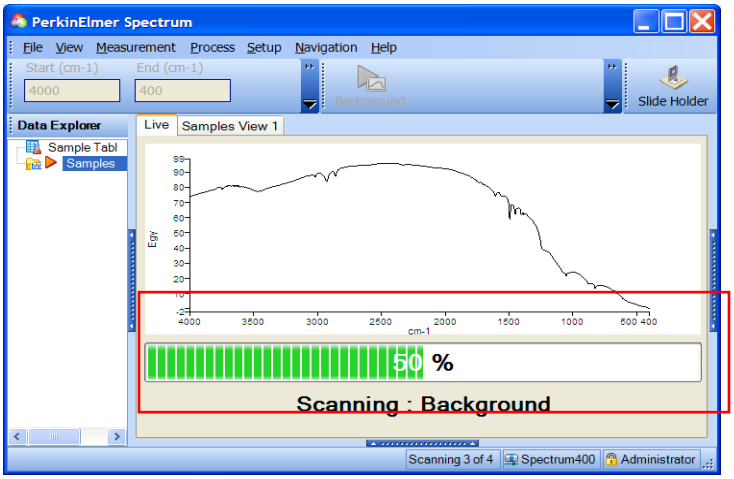
เลือกที่เมนู Setup\Instrument หรือตั้งค่าการ Scan ได้ที่เมนูบาร์ด้านบน



รูปที่ 35 แสดงโปรแกรมตั้งค่าการทดสอบ

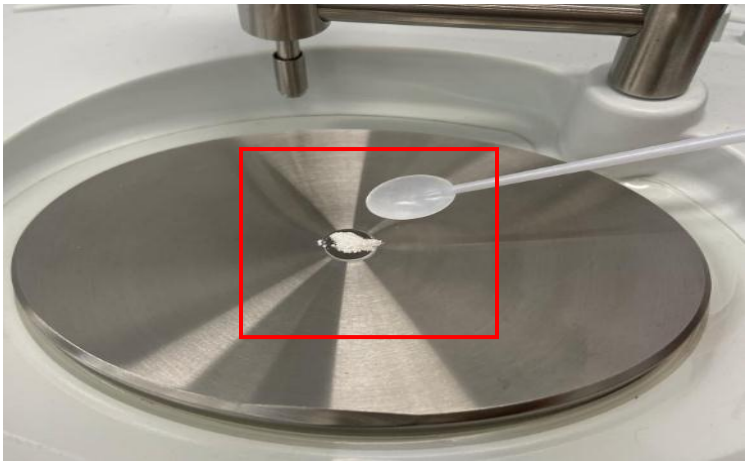
3. ทำการ Scan Background ก่อนทุกครั้ง โดยที่ไม่ต้องใส่ตัวอย่างใดๆ การ Scan Background โดยการกดไอคอนหรือปุ่ม Background รอจนเครื่องทำการ Scan เสร็จครบ 100 %

รูปที่ 36 แสดงการ Scan Background



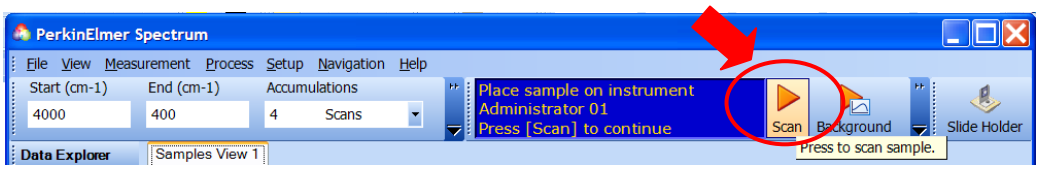
รูปที่ 36 แสดงการ Scan เสร็จครบ 100 %

1. ตัวอย่างเป็นประเภทของแข็งเป็นผงใช้ปริมาณตัวอย่างไม่น้อยกว่า 0.5 กรัม

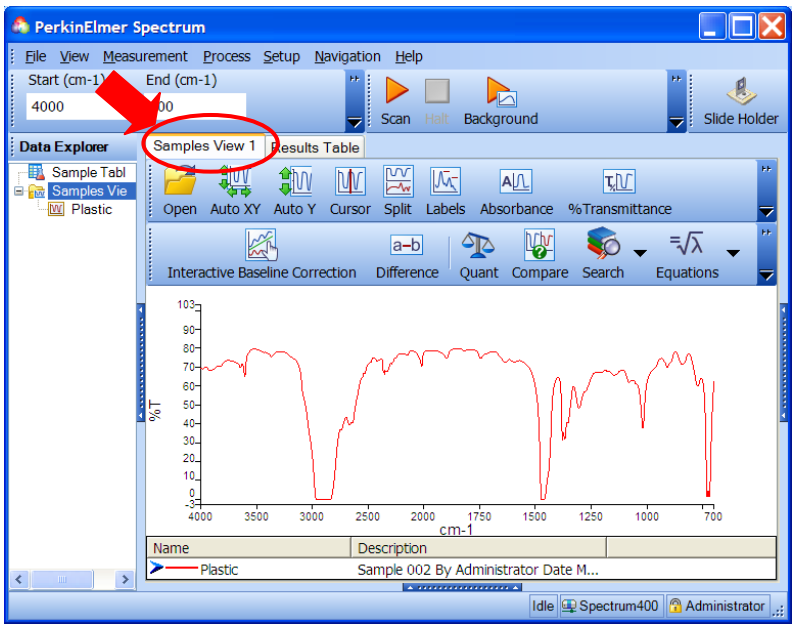


รูปที่ 37 แสดงการใส่ตัวอย่าง

2. จากนั้นคลิก Scan เพื่อเริ่มวัดตัวอย่างรอจน Scanning ครบ 100%

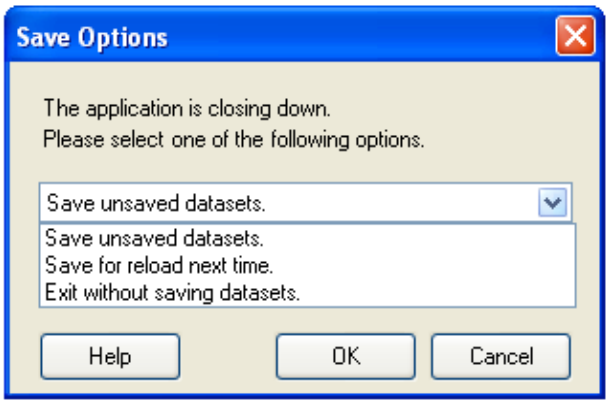


รูปที่ 38 แสดงโปรแกรม Scanning ครบ 100%



รูปที่ 39 แสดงสเปกตรัมของตัวอย่างในหน้าต่าง Sample View

3. หากต้องการเพิ่มเลขสเปกตรัมในเส้นกราฟให้ไปที่หัวข้อ 2.7
4. ทำความสะอาดที่แผ่นว่างตัวอย่างกดปิดโปรแกรมจะปรากฏหน้าต่างเพื่อเลือกการออกจากโปรแกรมเลือก Save unsaved datasets คือ โปรแกรมจะทำการจัดเก็บสเปกตรัมที่ทำการเปลี่ยนแปลง แล้วยังไม่ได้ถูกจัดเก็บทุกสเปกตรัมกดปุ่ม Ok



รูปที่ 40 แสดงการบันข้อมูลก่อนการปิดโปรแกรม