スペクトル解析法のいろいろ

原スペクトル

- エネルギー透過率
- エネルギー反射率（位相取得困難）
- 複素振幅透過率（振幅・位相）
- 吸光度スペクトル
- 干渉波形

データ処理法 → アルゴリズム

- 差スペクトル → 差の演算
- ベースライン補正 → スプライン補間
- スムージング → 単純移動平均法 / 多項式適合法（Savitzky-Golay） / 周波数領域法（フィルタリング）
- 微分スペクトル → 微分演算
- ピークサーチ → 微分演算
- フィッティング（非線形最適化法） → シンプレックス法 / ガウス・ニュートン法 / マルカート法
- ディコンボリューション → ガウス・ザイデル法
- ケモメトリクス → 多変量解析（多次元スペクトル解析・主成分分析）

物理モデル

- 光学モデル（透過・反射 ATR）
- 光学多層膜計算
- ローレンツ振動子の誘電関数
- ドルーデの誘電関数
- デバイの誘電関数
- 有効媒質近似の誘電関数
- ローレンツ関数 ガウス関数
- Kramers-Kronig 解析

得たい物理量

- 複素屈折率 複素誘電率
- 吸収係数
- 多成分の濃度検量
- 分子振動の周波数
- 分子振動の緩和時間
- 格子振動の周波数
- 格子振動の緩和時間
- 半導体のキャリア密度、移動度 電気伝導度