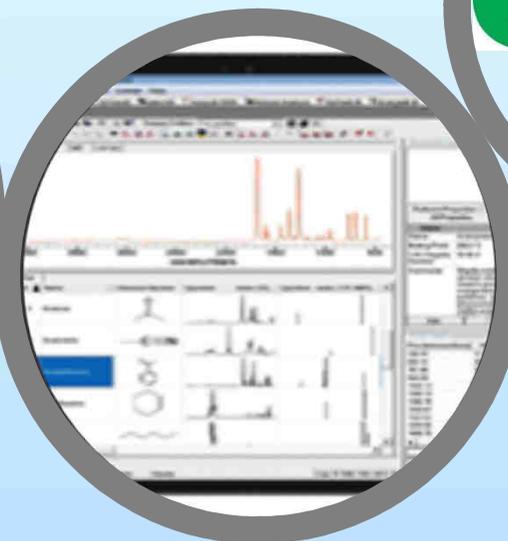
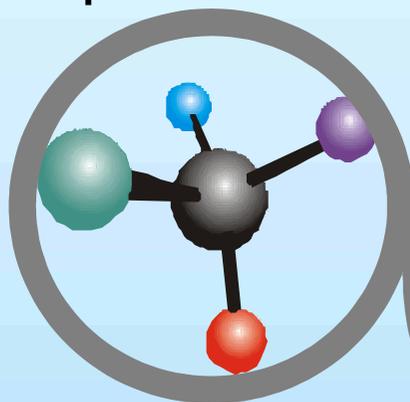


IDENTIFICATION EN SPECTROMETRIE INFRAROUGE

Identification de Produits Inconnus
à l'Aide du logiciel et des Bases
de Données Spectrales Biorad
KnowItAll



Laboratory Equipment & Analysis SAS



Yann Marfisi

LEA

31 Parc Club du Golf

350, Avenue JRGG de la Lauzière

CS 90519

13593 AIX en PROVENCE CEDEX 3

Mobile : + 33 (0)6 71 21 78 84

Email: yann.marfisi@lea-instruments.fr

Analyse Par Spectrométrie Infra-Rouge

Des formes de produits très variées peuvent être analysés



Certaines formes peuvent être plus difficiles à identifier que d'autres



L'identification de Produits – Spectrométrie Infrarouge

Problématique de l'identification d'un produit par spectrométrie infrarouge:

Un Produit = Un ou plusieurs Composants

Un Composant = Un ensemble de Molécules

Une Molécule = Un ensemble de Liaisons Chimiques

Une Liaison Chimique = Un ensemble de Bandes d'Absorption IR

L'identification Des Produits

Applications

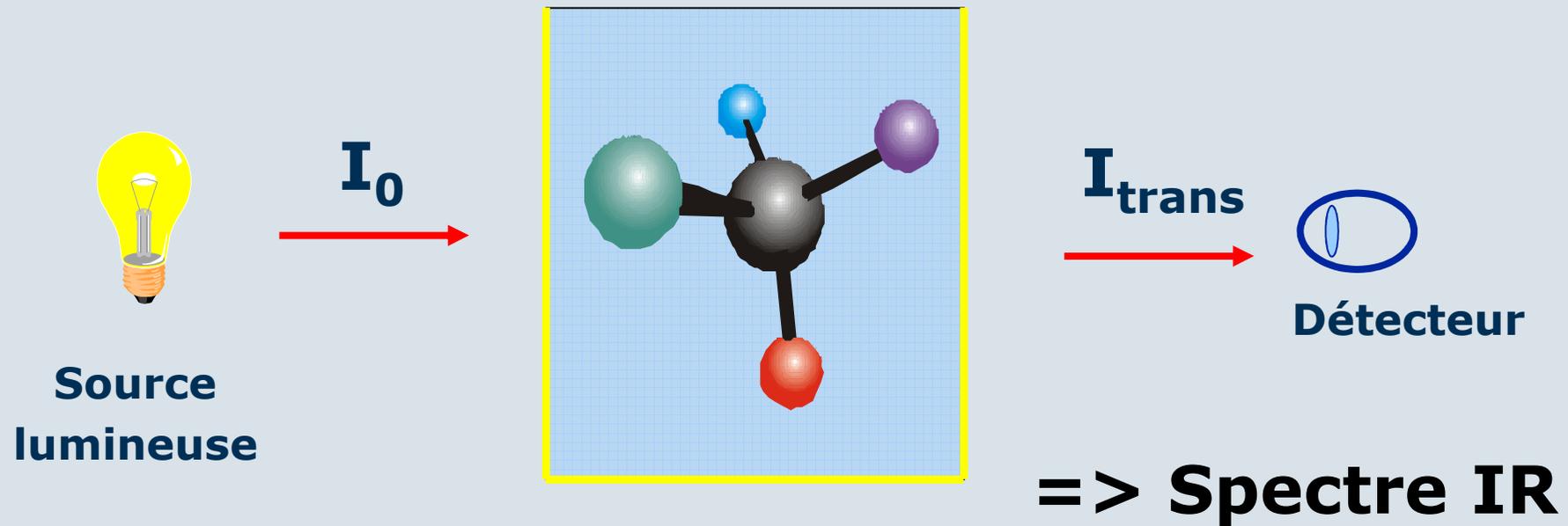
Contrôle Qualité
Identification de Contaminants
Détection d'Adultérations
Mise en évidence de Fraudes
Identification de Produits inconnus
Déformulation

...

IDENTIFICATION INFRAROUGE

- **Rappels sur la Spectrométrie IR**
- Méthodes d'analyse
- Le concept KnowItAll
- Identification avec ID Expert et Deformulation Expert
- Identification avec KnowItAll SearchIt
- Identification avec KnowItAll Mixture Analysis
- Exemples d'identifications
- Conclusion

La Spectrométrie Infrarouge



Transmittance: $T = I_{trans}/I_0$.

Absorbance : $AB = -\log(I/I_0) = ca$

La Spectrométrie Infrarouge

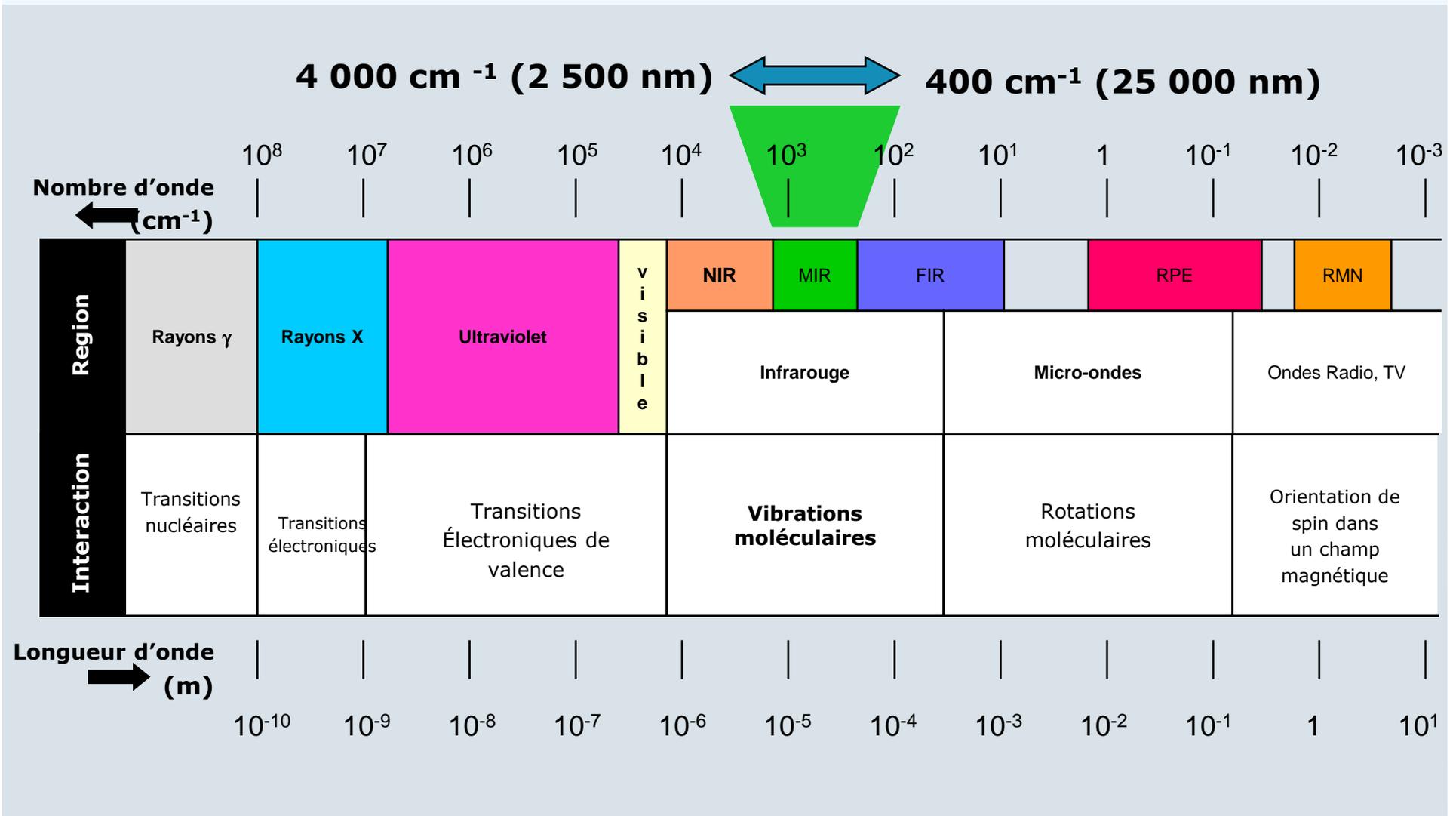
Interaction Rayonnement / Matière

=> modification de l'état énergétique



La Spectrométrie Infrarouge

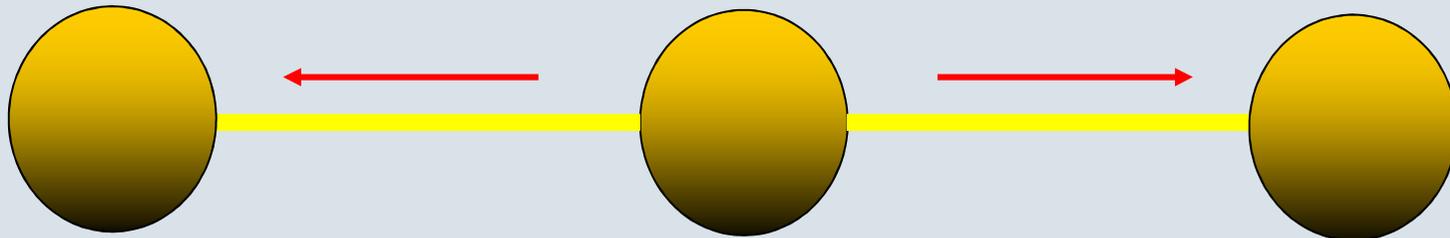
Gamme Spectrale du Moyen Infrarouge



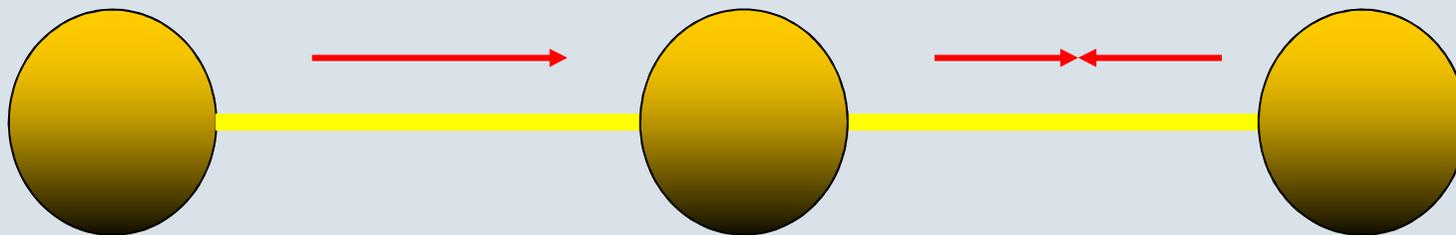
La Spectrométrie Infrarouge

Vibrations Moléculaires

Vibrations d'étirement (stretching)



Symétrique ν_s

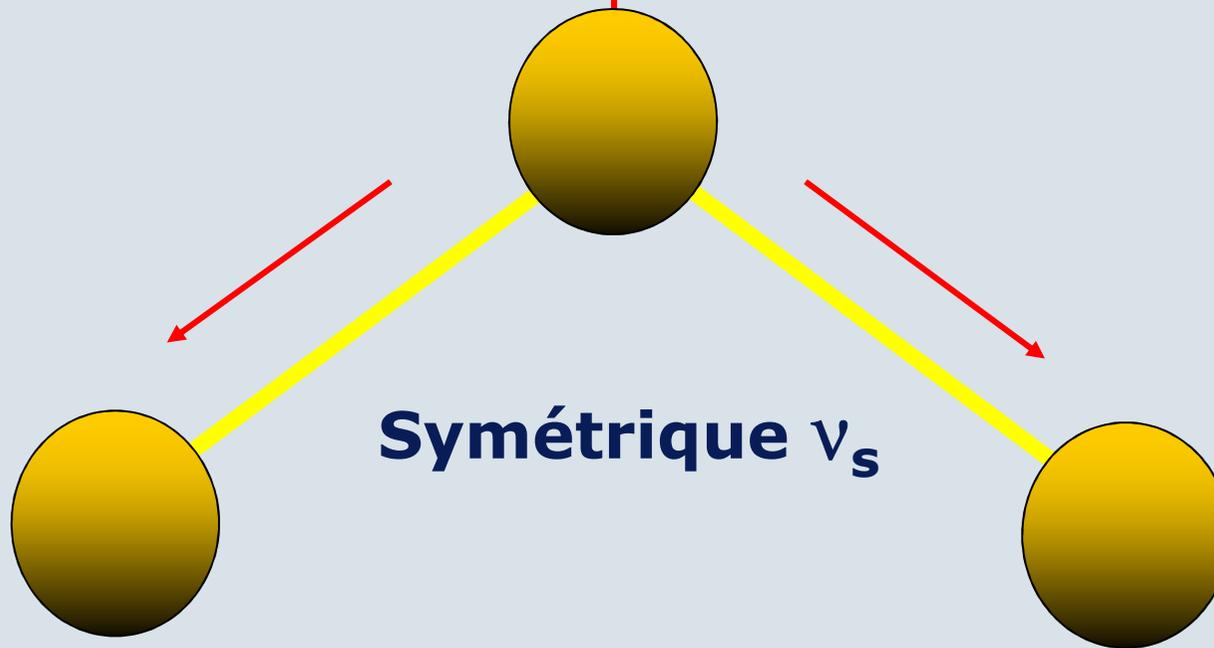


asymétrique ν_s

La Spectrométrie Infrarouge

Vibrations Moléculaires

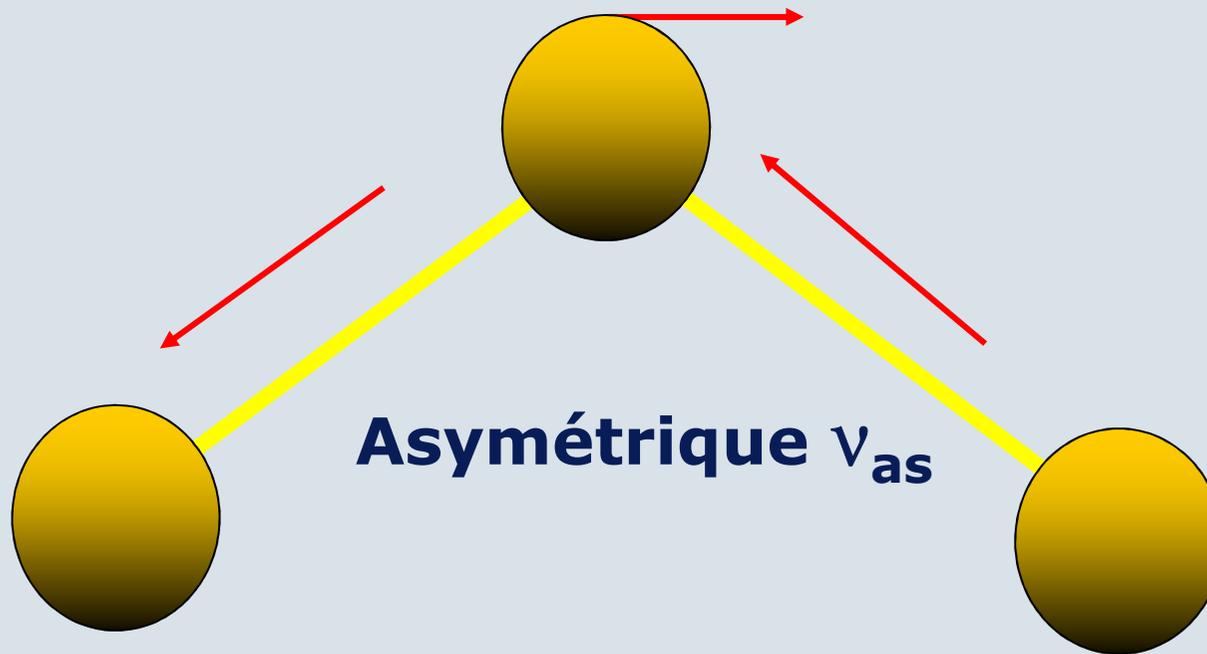
**Vibrations
d'étirement
(stretching)**



La Spectrométrie Infrarouge

Vibrations Moléculaires

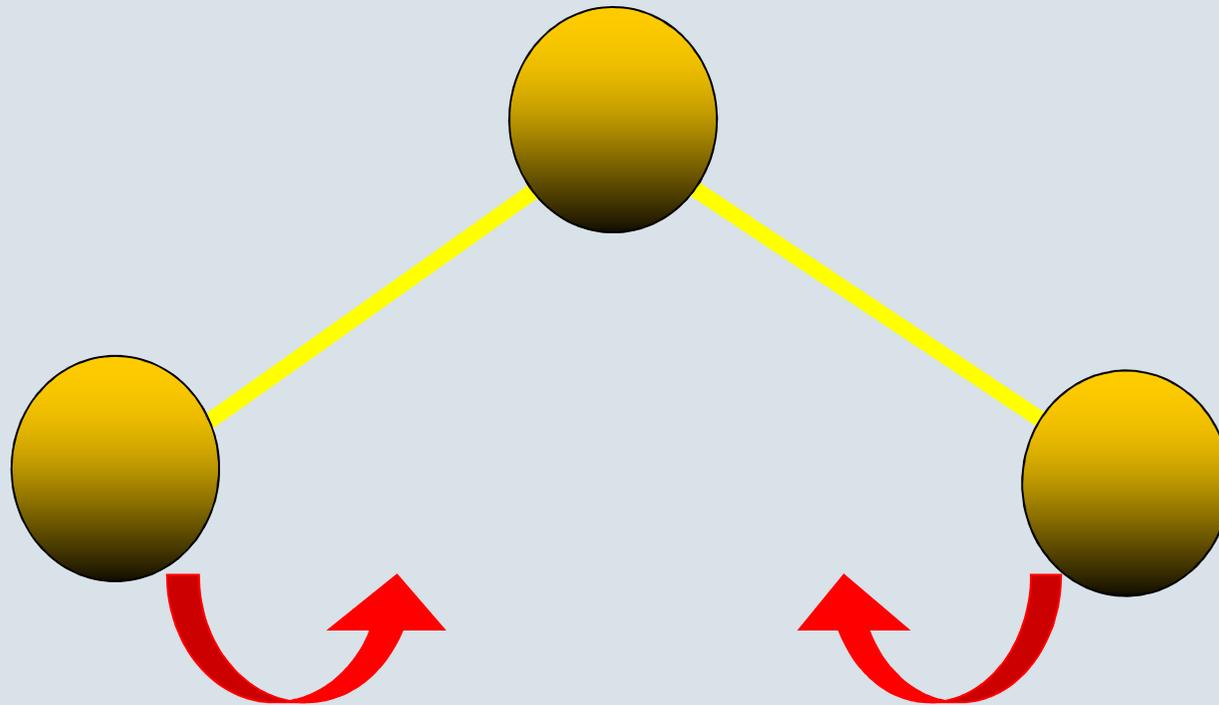
Vibrations d'étirement (stretching)



La Spectrométrie Infrarouge

Vibrations Moléculaires

Vibrations de déformation Cisaillement (Scissoring) σ

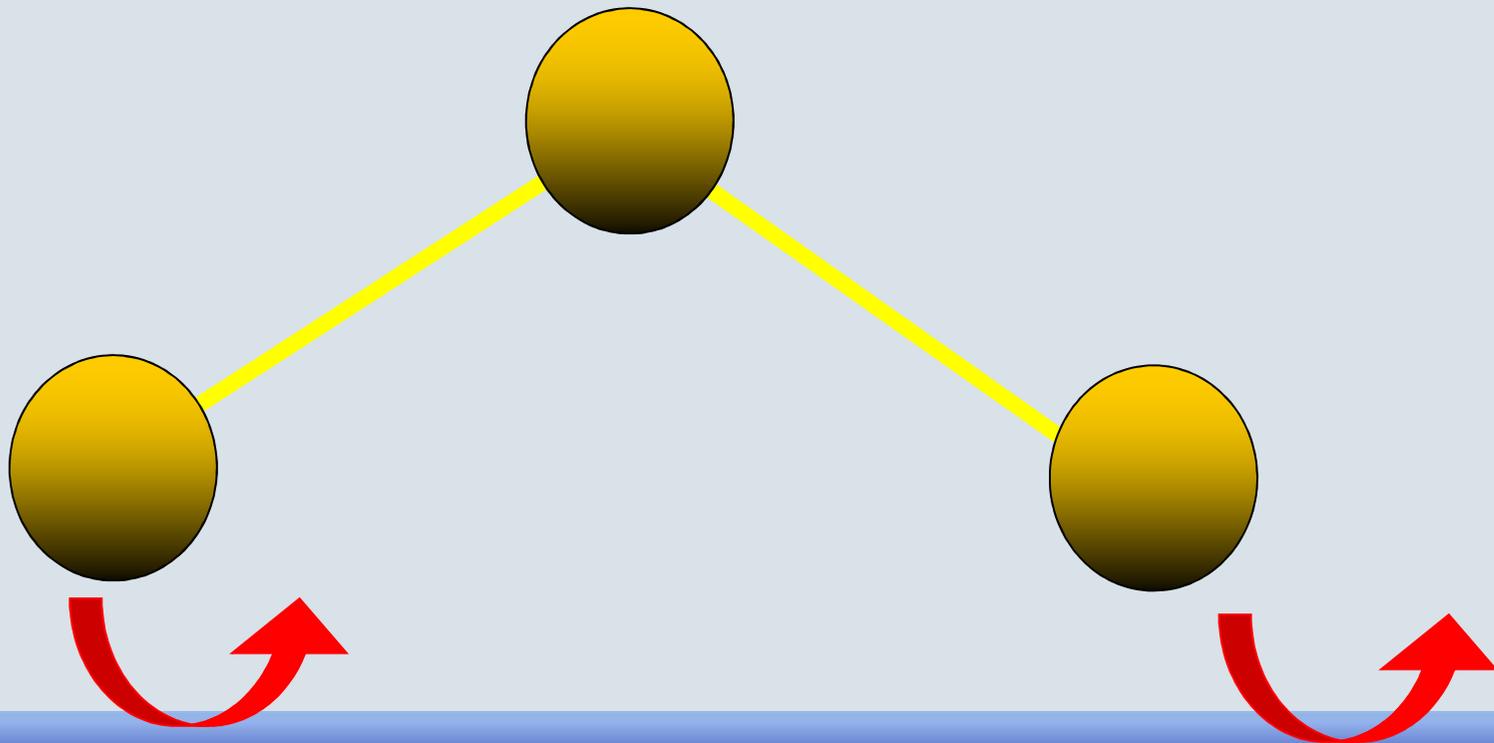


La Spectrométrie Infrarouge

Vibrations Moléculaires

Vibrations de déformation

Rotation (Rocking) ρ

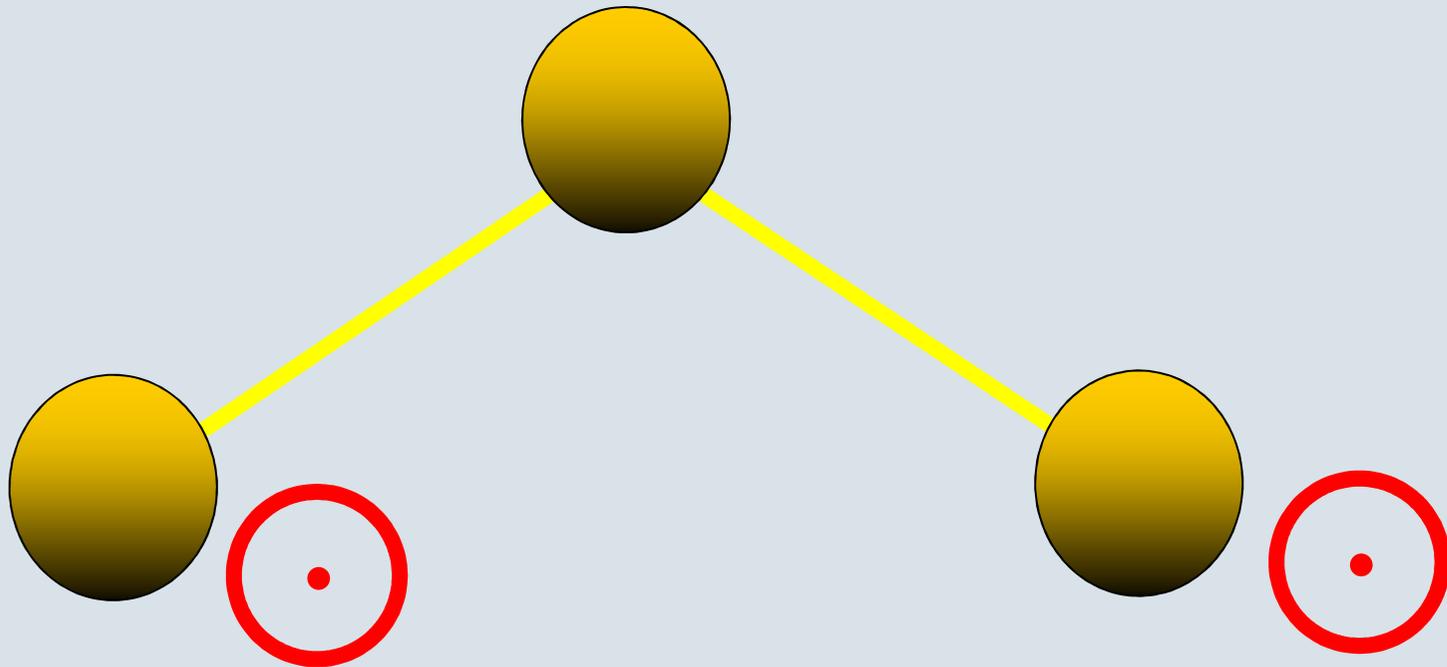


La Spectrométrie Infrarouge

Vibrations Moléculaires

Vibrations de déformation

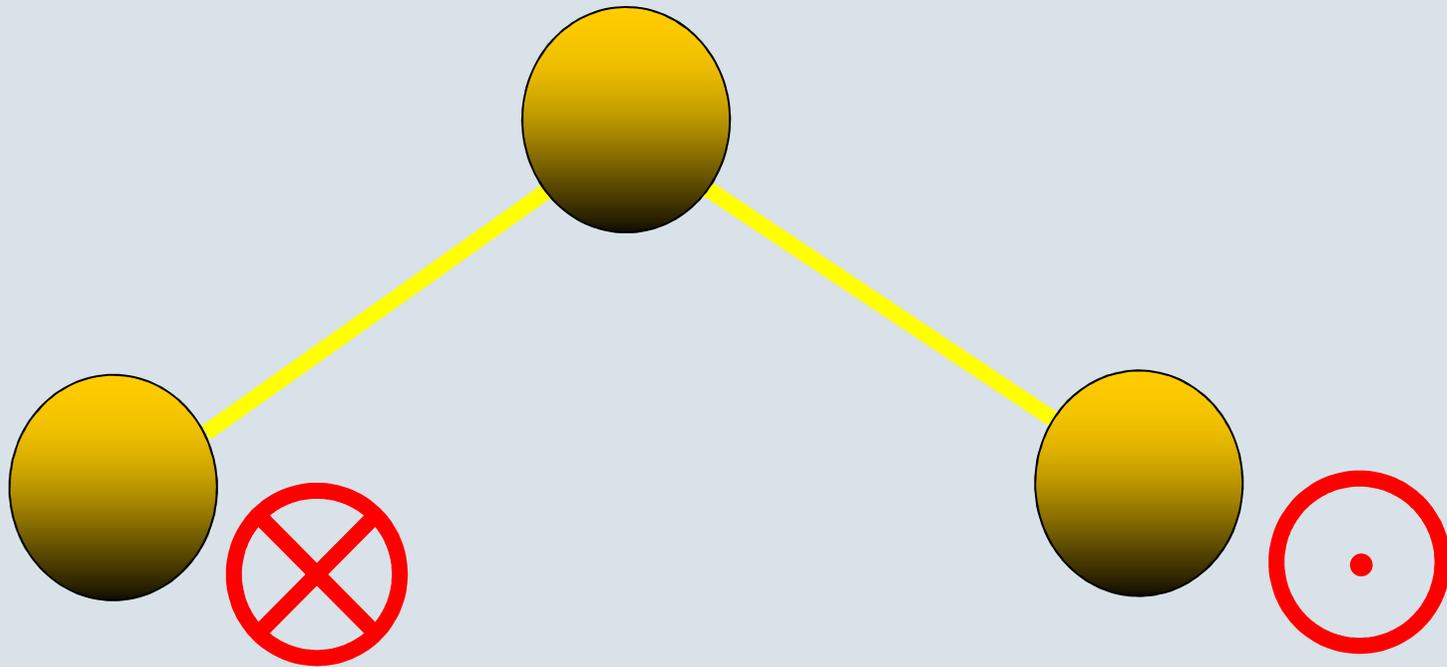
Torsion (twisting) σ



La Spectrométrie Infrarouge

Vibrations Moléculaires

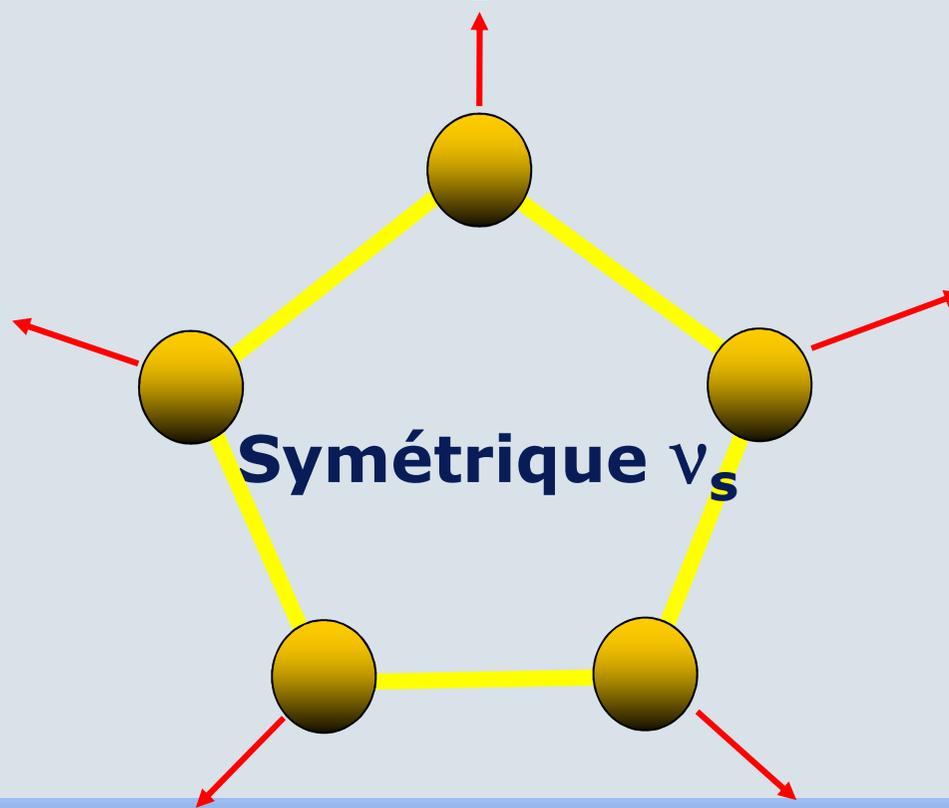
Vibrations de déformation Balancement (wagging) σ



La Spectrométrie Infrarouge

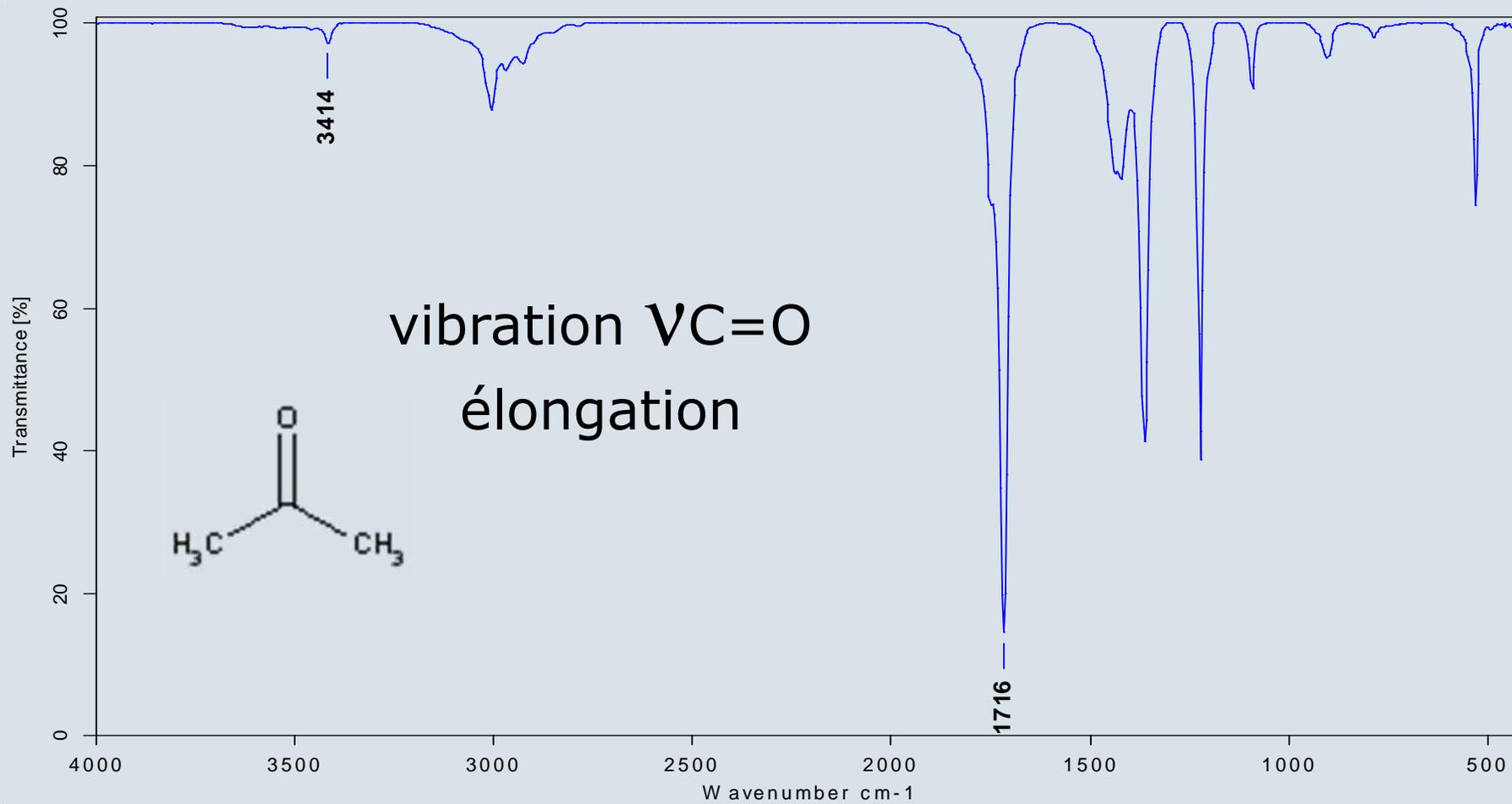
Vibrations Moléculaires

Vibrations d'étirement d'un cycle



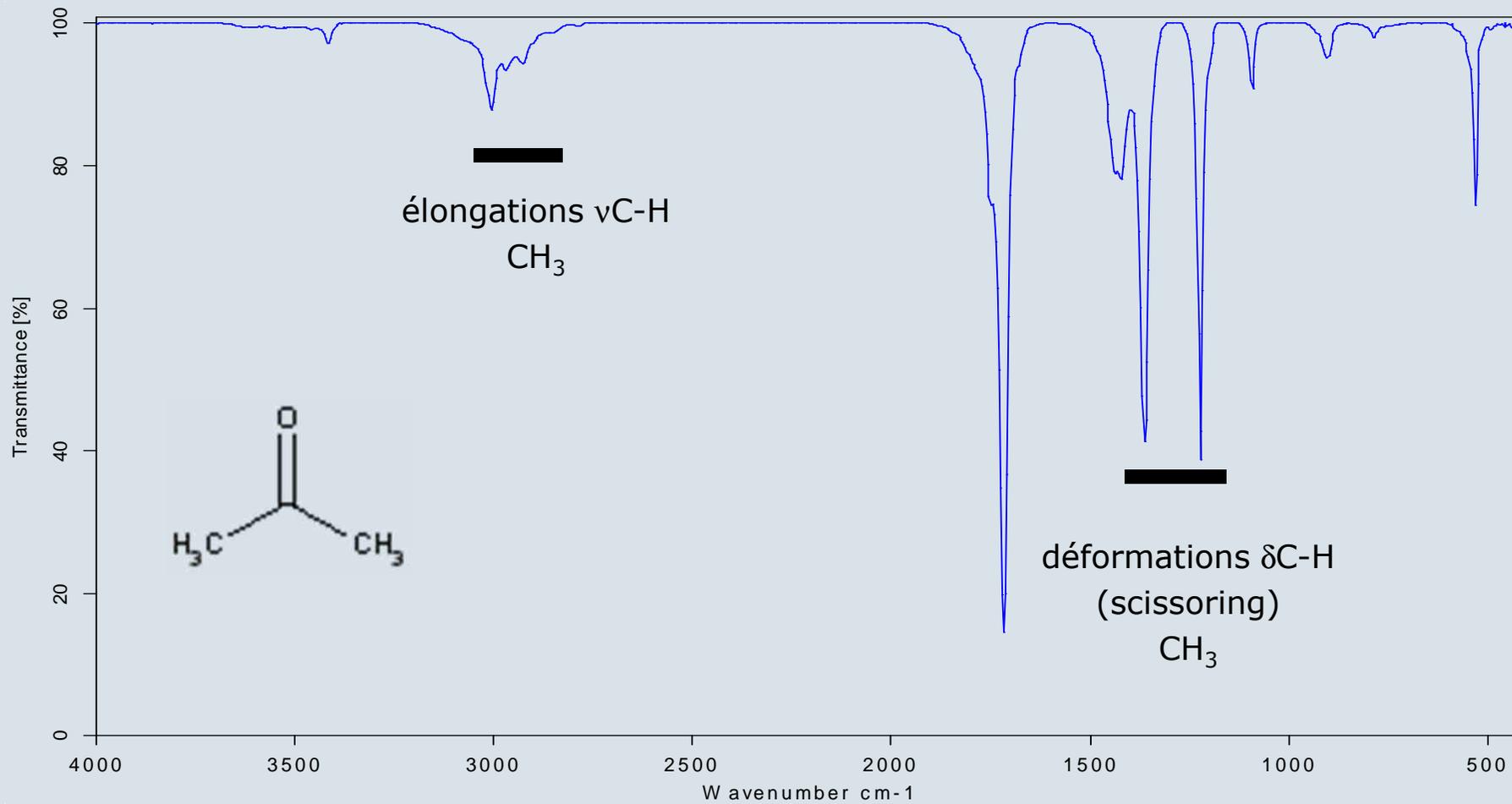
La Spectrométrie Infrarouge

Exemple de l'Acétone



La Spectrométrie Infrarouge

Exemple de l'Acétone



IDENTIFICATION INFRAROUGE

- Rappels sur la Spectrométrie IR
- **Méthodes d'analyse**
- Le concept KnowItAll
- Identification avec ID Expert et Deformulation Expert
- Identification avec KnowItAll SearchIt
- Identification avec KnowItAll Mixture Analysis
- Exemples d'identifications
- Conclusion

Rappels sur la Spectrométrie IR

Méthodes d'analyse

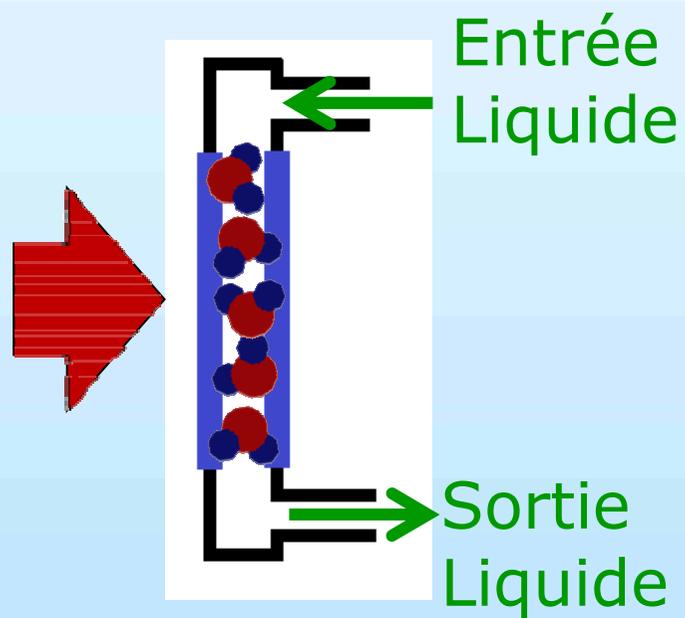
Méthodes utilisées pour l'identification en Moyen Infrarouge:

- Transmission sur solides, liquides et gaz
- **ATR** Pour les Liquides et solides
- Réflexion Spéculaire
- Réflexion Diffuse

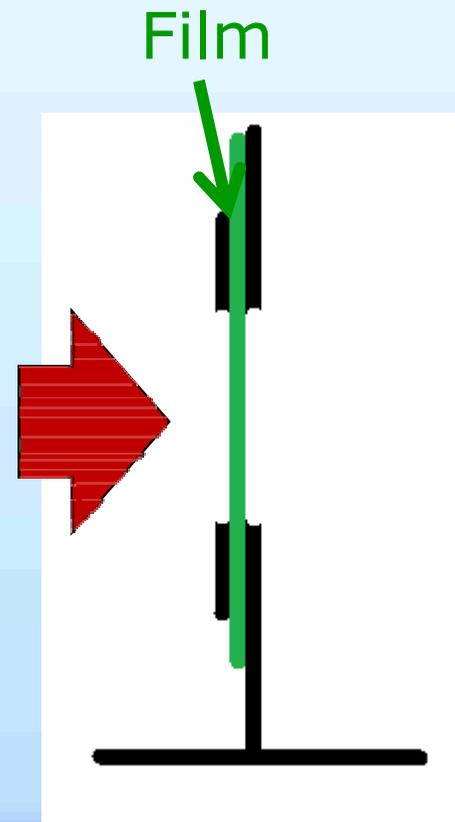
Les Mesures en TRANSMISSION

Nécessite une préparation en général
(Film, pastille, cellule à nettoyer...)

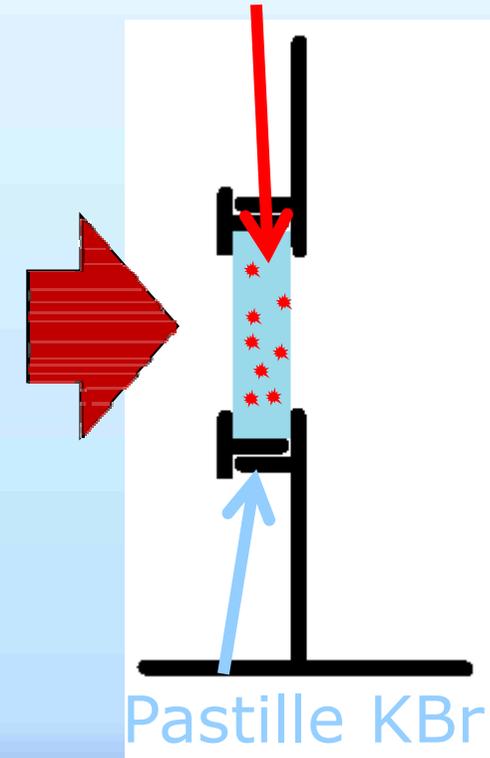
Cellule
Liquides



Support Films

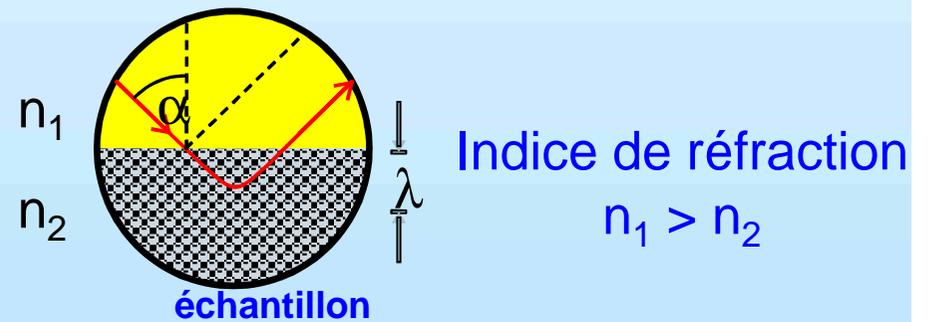
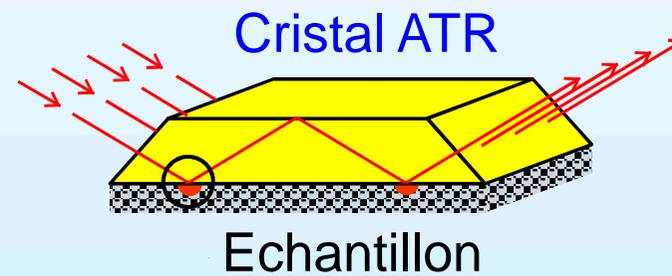


Poudre



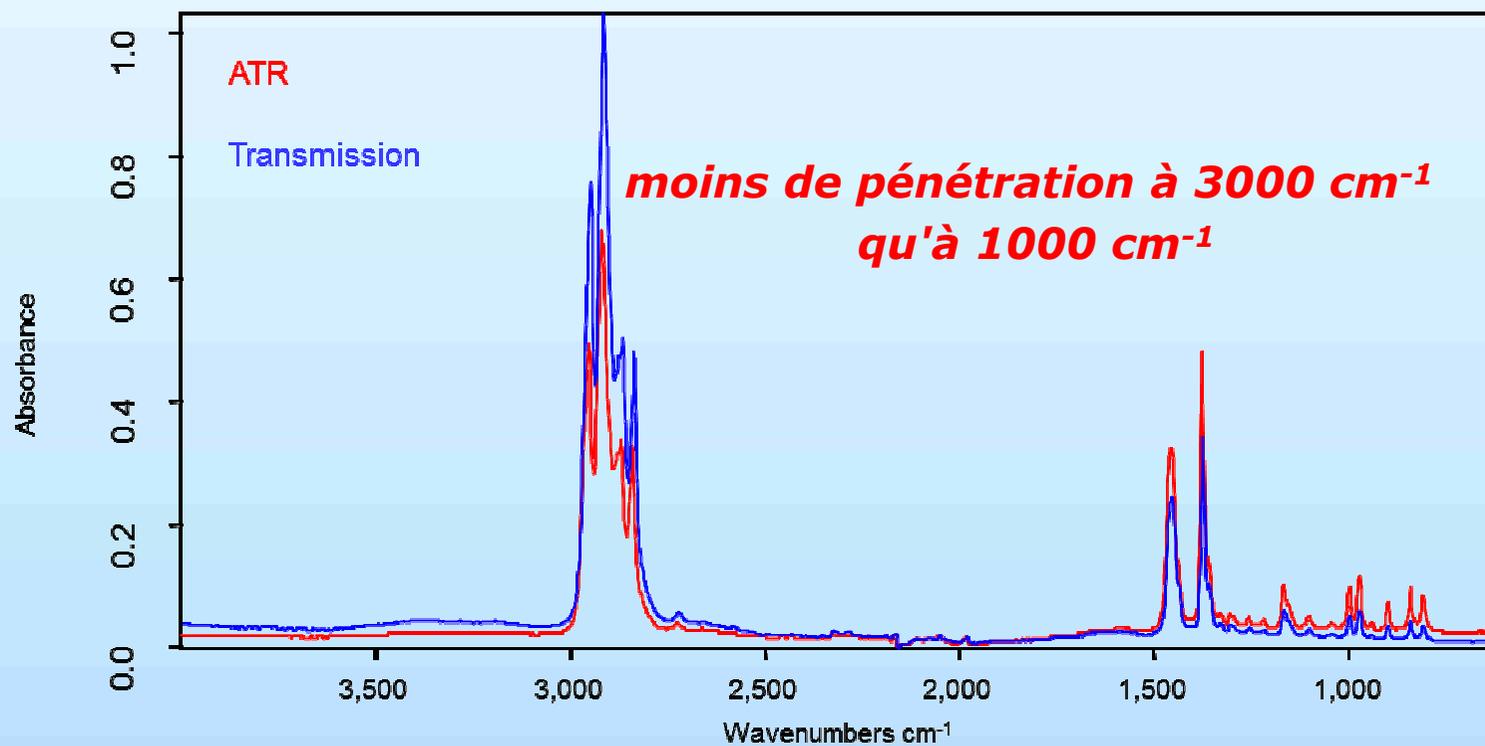
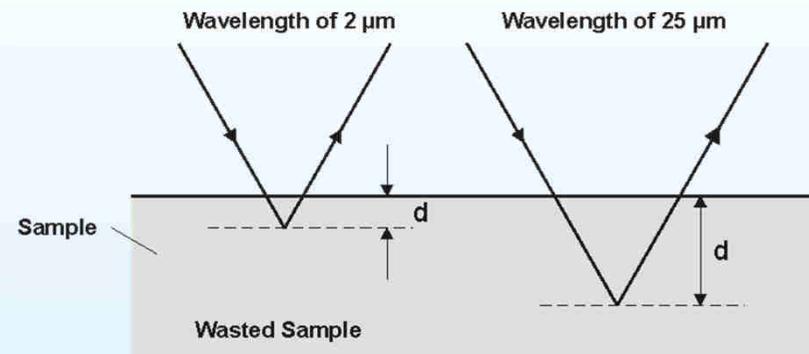
Les Mesures en ATR

Mesure rapide sans préparation



Les Spectres TRANSMISSION vs ATR

$$d_p = \frac{\lambda}{2\pi n_p (\sin^2 \theta - n_{sp}^2)^{1/2}}$$



TRANSMISSION vs ATR

TRANSMISSION	ATR
<p data-bbox="331 389 1021 497">Les bases de données sont historiquement très fournies</p> <p data-bbox="313 561 1039 727">L'intensité des bandes dépend directement de l'épaisseur de l'échantillon</p> <p data-bbox="259 791 1814 951">KnowItAll permet de corriger ces différences pour comparer les spectres ATR avec les bases de données en Transmission et vice versa</p>	<p data-bbox="1160 389 1926 497">Les bases de données sont plus récentes et moins étendues</p> <p data-bbox="1146 561 1944 670">L'intensité des bandes dépend également de la longueur d'onde</p> <p data-bbox="259 791 1814 951">KnowItAll permet de corriger ces différences pour comparer les spectres ATR avec les bases de données en Transmission et vice versa</p>
<p data-bbox="277 989 1075 1212">Les bandes les plus intenses peuvent facilement être saturées par absorption totale (trop concentré)</p>	<p data-bbox="1137 989 1953 1155">La pression exercée par la presse peut influencer l'intensité et la position de certaines bandes</p>
<p data-bbox="259 1244 1890 1401">KnowItAll permet de corriger ces distorsions pour comparer les spectres avec la base de données grâce aux corrections optimisées brevetées</p>	

Les Mesures en ATR

L'ATR est la mesure la plus rapide à mettre en œuvre sans préparation, elle comporte cependant certaines limites:

- C'est une analyse de surface, l'épaisseur de pénétration n'est que de environ $1,66\mu\text{m}$ vers 1000cm^{-1} en général, et non globale.
- La pénétration dépend de la longueur d'onde, il faut donc corriger l'intensité relative des bandes pour les comparer à des bases de données dont les spectres sont en transmission
- La pression exercée par la presse peut influencer l'intensité et la position de certaines bandes (effet sur l'orientation des chaînes de polymères ou le taux de cristallisation par exemple).

Les Mesures en TRANSMISSION

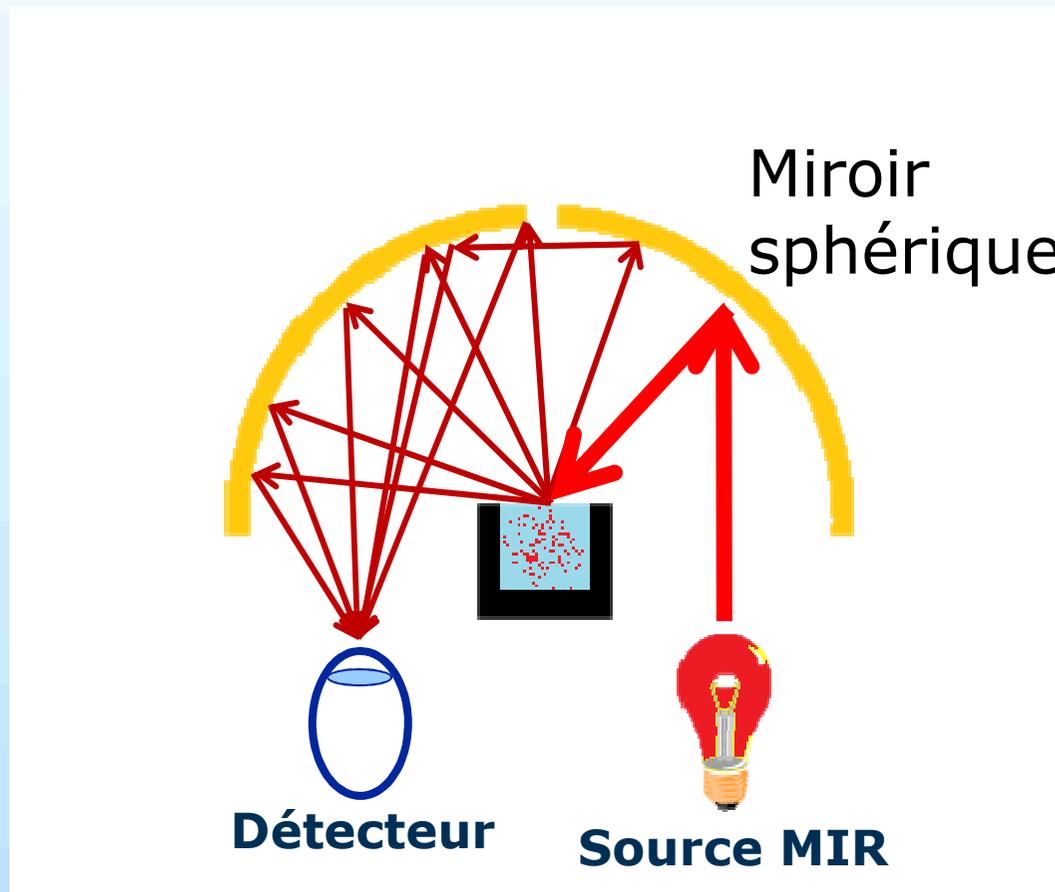
La mesure en transmission est une mesure de moins en moins utilisée par rapport à l'ATR sauf pour les gaz car:

- Elle demande plus de travail en général car il faut préparer l'échantillon (faire un film à partir de granulés, faire une pastille KBr, utiliser une cellule liquide plus difficile à nettoyer...)

mais elle conserve des avantages:

- Les bases de données sont généralement très fournies pour ce mode de mesure
- C'est une analyse globale.
- On peut maîtriser l'épaisseur traversée pour identifier des produits minoritaires

Les Mesures en REFLEXION DIFFUSE ET SPECULAIRE

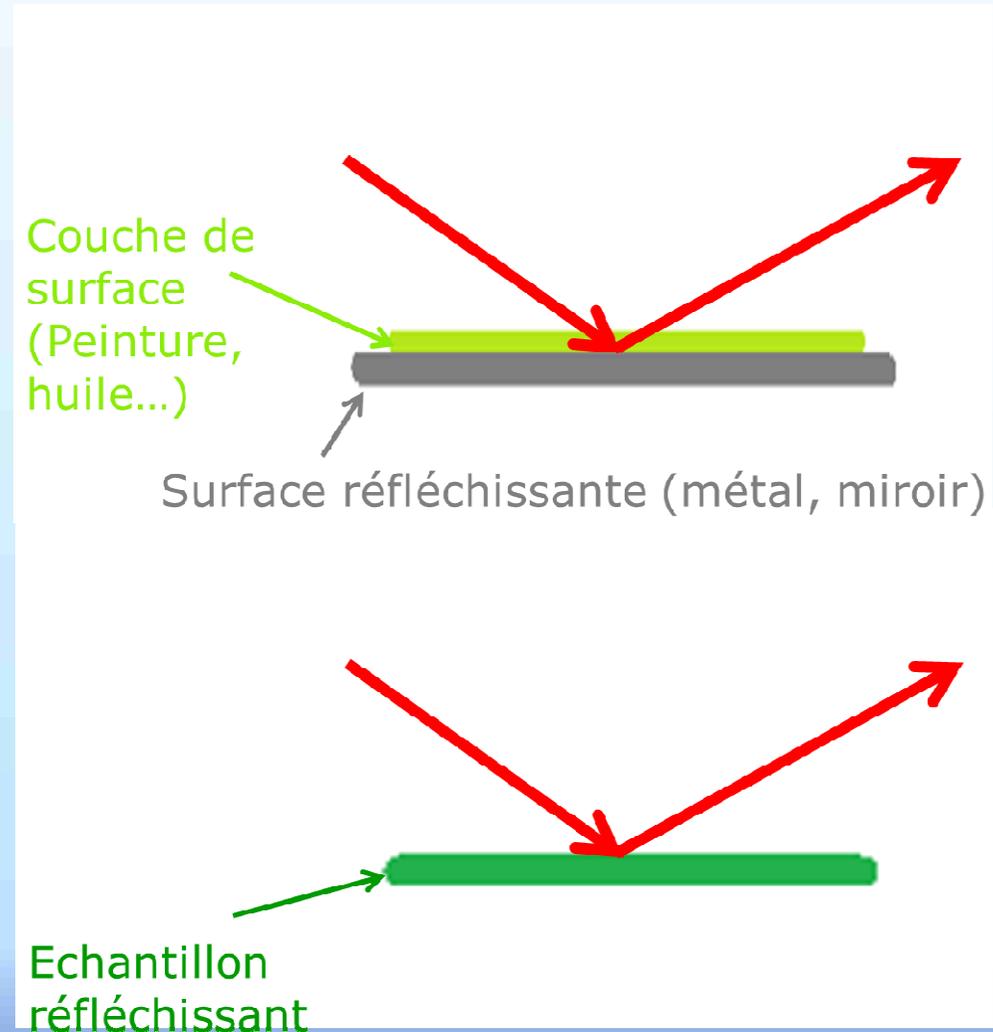


Les Mesures en REFLEXION DIFFUSE ET SPECULAIRE

La mesure en réflexion diffuse n'est en général pas utilisée car:

- Elle demande une dilution dans du KBr (préparation)
- Il faut broyer le produit finement pour pouvoir l'analyser
- La forme des spectres est influencée par la granulométrie du produit
- Ne convient pas pour les mesures de liquides, sauf pour certains cas particuliers
- Cette méthode est plutôt utilisée en proche infrarouge (pas de préparation dans ce cas)

Les Mesures en REFLEXION SPECULAIRE



Les Mesures en REFLEXION SPECULAIRE

La mesure en réflexion spéculaire n'est utilisée que dans certains cas car:

- Les spectres sont très différents et les corrections ne fonctionnent que dans le cas idéal de réflexion spéculaire pure orthogonale.
- L'état de surface à une forte influence sur le résultat
- Elle n'est donc utilisée que dans l'analyse de revêtements et résidus sur surface métallique (c'est dans ce cas de la réflexion absorption)
- Dans les cas où tout prélèvement est proscrit (conservation de documents ou œuvres d'art)

IDENTIFICATION INFRAROUGE

- Rappels sur la Spectrométrie IR
- Méthodes d'analyse
- **Le concept KnowItAll**
- Identification avec ID Expert et Deformulation Expert
- Identification avec KnowItAll SearchIt
- Identification avec KnowItAll Mixture Analysis
- Exemples d'identifications
- Conclusion

Le concept KnowItAll®

KnowItAll est un concept global qui comprend:

- Un logiciel de recherche et d'analyse avancé.
- Un ensemble de bases de données disponibles sous deux formes:
 - Un abonnement annuel avec accès à la totalité des spectres (260 000+)
 - La fourniture de bases de données spécifiques correspondant à l'application du client (Polymères, Minéraux, Produits pharma...)

KnowItAll permet l'utilisation directe des spectres des différents constructeurs

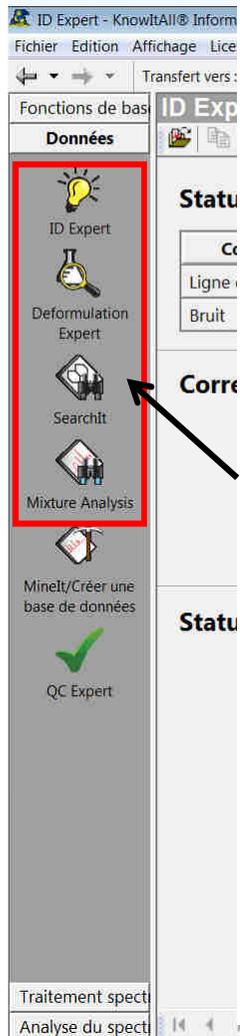
Le logiciel KnowItAll®

Le logiciel KnowItAll permet:

- De rechercher des produits dans des bases de données personnelles ou commerciales, à partir d'un nom, d'une structure, d'un spectre (IR, Raman, PIR ou Autres) ou de données combinées
- De créer des fichiers structure et réaction chimiques
- De créer des bases de données
- D'utiliser et créer des méthodes d'analyse chimométriques
- De générer des rapports de résultats

Le logiciel KnowItAll®

Fonctionnalités



Fonctions d'identification d'inconnus à partir des bases de données:

- **ID Expert:** identification totalement automatique
- **Deformulation Expert:** identification automatique à partir de produits purs uniquement
- **SearchIt:** Identification manuelle produit par produit
- **Mixture Analysis:** Identification de mélanges avec des fonctionnalités avancées

Le logiciel KnowItAll®

Fonctionnalités

The screenshot displays the KnowItAll software interface. The title bar reads "ID Expert - KnowItAll® Informatics System, ID Expert". The menu bar includes "Fichier", "Edition", "Affichage", "Licence", and "Aide". Below the menu bar is a "Transfert vers:" field. The main window is titled "ID Expert" and contains a sidebar on the left with various modules. The "QC Expert" module is highlighted with a red box and a green checkmark icon. A black arrow points from the text overlay to this icon. The main area of the window shows the "Statut de la requête" section with a table of "Contrôles" (Ligne de base, Bruit) and a "Nouvelle recherche" button. Below that is the "Statut de la recherche" section with a "Créer un rapport" button. The bottom of the window shows "Traitement spect" and "Analyse du spect" tabs.

Fichier Edition Affichage Licence Aide

Transfert vers :

Fonctions de base

ID Expert

Données

ID Expert

Deformulation Expert

SearchIt

Mixture Analysis

Minelt/Créer une base de données

QC Expert

Traitement spect

Analyse du spect

Statut de la requête

Contrôles
Ligne de base
Bruit

Corrections op

Nouvelle recherche

Statut de la recherche

Créer un rapport

L'onglet **QC Expert** utilise les bases de données personnelles pour effectuer un contrôle qualité du produit analysé.

Le logiciel KnowItAll®

Fonctionnalités

Effectuer un c

Fragments

Aucune structure sélectionnée.

Résumé :

R...	Classification	Groupe	Liais...	Plage	Intensité	Mode
------	----------------	--------	----------	-------	-----------	------

Résumé + Résumé -

(2665.705, -1.052) NUM

L'onglet de menus **Analyse du spectre** pour faire une élucidation structurale à partir des bandes d'absorption.

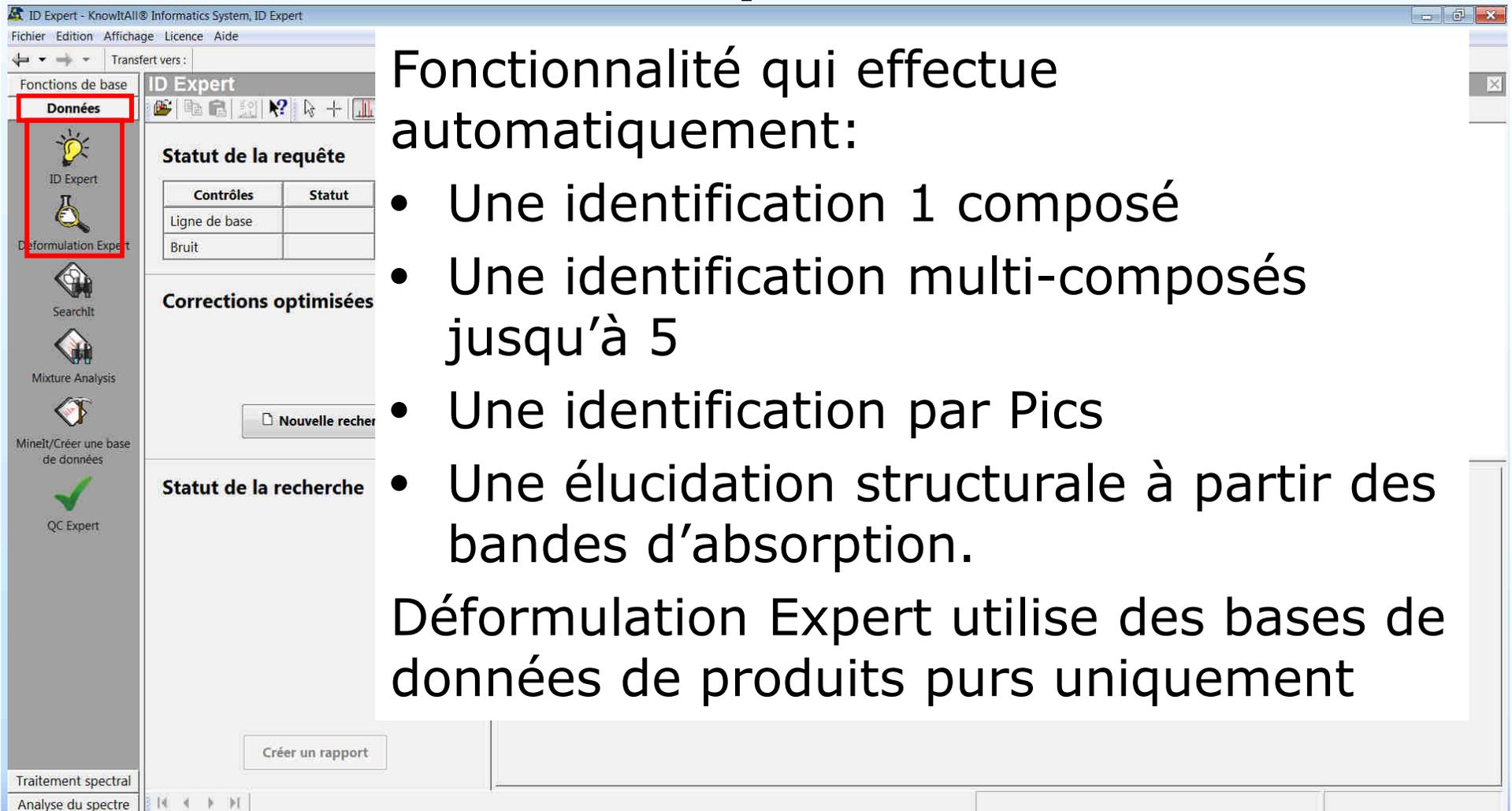
IDENTIFICATION INFRAROUGE

- Rappels sur la Spectrométrie IR
- Méthodes d'analyse
- Le concept KnowItAll
- **Identification avec ID Expert et Déformulation Expert**
- Identification avec KnowItAll SearchIt
- Identification avec KnowItAll Mixture Analysis
- Exemple d'identifications
- Conclusion

Identification IR Totalemment Automatisée

1. ID Expert

2. Déformulation Expert



Fonctionnalité qui effectue automatiquement:

- Une identification 1 composé
- Une identification multi-composés jusqu'à 5
- Une identification par Pics
- Une élucidation structurale à partir des bandes d'absorption.

Déformulation Expert utilise des bases de données de produits purs uniquement

Identification IR Totalement Automatisée

ID Expert

The screenshot displays the ID Expert software interface. On the left, there are three main control panels: 'Statut de la requête', 'Corrections optimisées', and 'Statut de la recherche'. The 'Statut de la requête' panel contains a table with the following data:

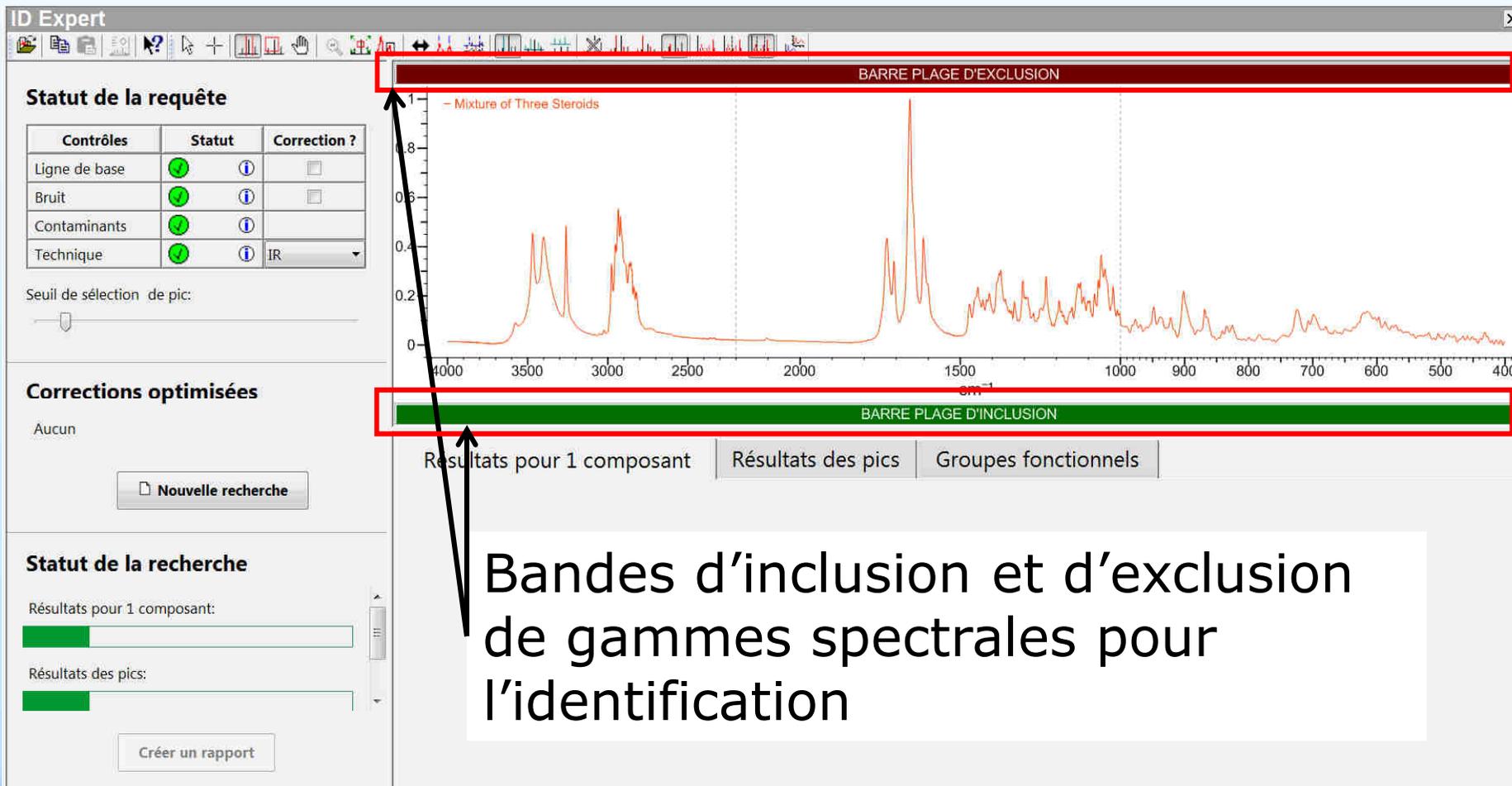
Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	<input type="checkbox"/>
Bruit	✓	<input type="checkbox"/>
Contaminants	✓	<input type="checkbox"/>
Technique	✓	IR

Below this table is a 'Seuil de sélection de pic' slider. The 'Corrections optimisées' panel shows 'Aucun' and a 'Nouvelle recherche' button. The 'Statut de la recherche' panel shows progress bars for 'Résultats pour 1 composant' and 'Résultats des pics', and a 'Créer un rapport' button. The main area on the right shows an IR spectrum plot titled 'Mixture of Three Steroids' with a wavenumber axis from 4000 to 400 cm⁻¹. The plot is bounded by a red 'BARRE PLAGE D'EXCLUSION' at the top and a green 'BARRE PLAGE D'INCLUSION' at the bottom. Below the plot are tabs for 'Résultats pour 1 composant', 'Résultats des pics', and 'Groupes fonctionnels'. A black arrow points from the 'Statut de la requête' table to the text box below.

Dès l'ouverture du spectre il contrôle et applique les corrections qu'il juge nécessaires et lance la recherche

Identification IR avec ID Expert

Paramétrage des Corrections



Identification IR avec ID Expert

Avancement de la Recherche

ID Expert

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	ⓘ <input type="checkbox"/>
Bruit	✓	ⓘ <input type="checkbox"/>
Contaminants	✓	ⓘ <input type="checkbox"/>
Technique	✓	ⓘ IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Aucun

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:

Résultats des pics:

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant | Résultats des pics | Groupes fonctionnels

Avancement de la recherche

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 1 Composé

ID Expert

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?

Liste des résultats pour 1 composant triés par HQI

Statut de la recherche
Meilleur résultat: 70.38
Résultats pour 2 composants:

Créer un rapport

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant Résultats des pics Groupes fonctionnels

	Score	Info	Nom	Structure chimique
1	70.38		3-MERCAPTOPROPIONAMIDE,	
2	66.77		17,20alpha,21-TRIHYDROXPREGN-4-EN-3-ONE	
3	66.37		ETHISTERONE	
4	63.42		16alpha,17alpha-DIMETHYL-11beta-HYDROXY-17-3,3-	

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 1 Composé

On peut afficher plusieurs résultats à la fois

The screenshot displays the ID Expert software interface. The top section shows the IR spectrum with a legend: SAX #64303; 3-MERCAPTOPROPIONAMIDE, THIOCARBAMATE (green line), SYX #80; ETHISTERONE (orange line), and Mixture of Three Steroids (black line). The x-axis is labeled 'cm⁻¹' and ranges from 4000 to 400. Below the spectrum is a table of search results for one component, with the 'Résultats pour 1 composant' tab selected. The table has columns for Score, Info, Nom, and Structure chimique. The results are as follows:

	Score	Info	Nom	Structure chimique
1	70.38		3-MERCAPTOPROPIONAMIDE	
2	66.77		17,20alpha,21-TRIHYDROXPREGN-4-EN-3-ONE	
3	66.37		ETHISTERONE	
4	63.42		16alpha,17alpha-DIMETHYL-11beta-HYDROXY-17-	

Statut de la requête

Contrôles Statut Correction ?

Nouvelle recherche

Statut de la recherche

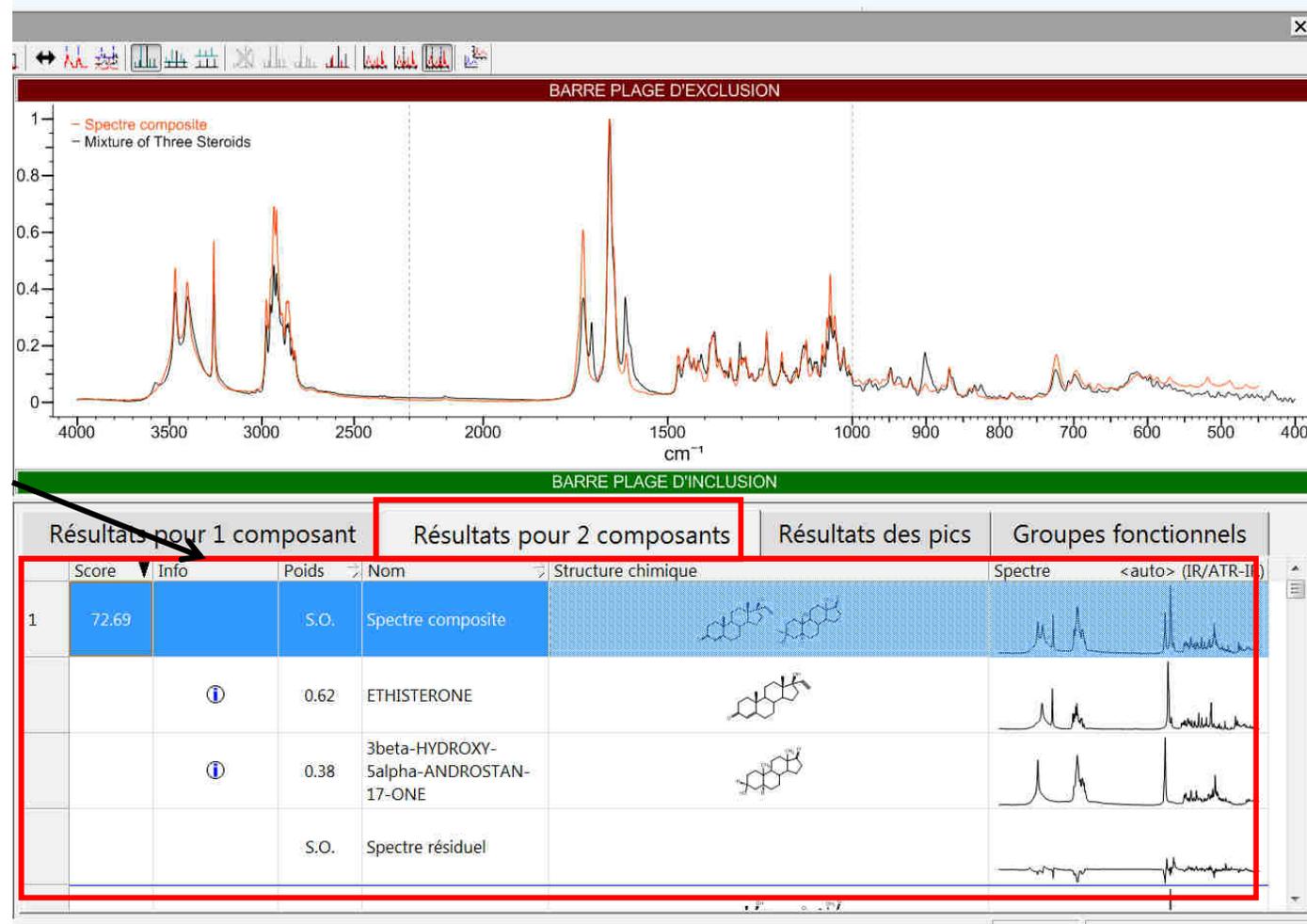
Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 70.4%

Créer un rapport

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 2 Composés

Liste des résultats pour 2 composés triés par HQI permettant d'afficher le spectre composite (comme montré) les spectres trouvés et le résidu



Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 2 Composés

Contribution du premier

Signature de base

Bruit	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Contaminants	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Technique	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Distorsion d'intensité, Décalage horizontal, Décalage vertical

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 70.4%

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 72.69%

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant		Résultats pour 2 composants		Résultats pour 3 composants		Résultat
Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre	<auto> (IR/ATR-IR)
72.69		S.O.	Spectre composite			
	<input checked="" type="checkbox"/>	0.62	ETHISTERONE			
	<input checked="" type="checkbox"/>	0.38	3beta-HYDROXY-5alpha-ANDROSTAN-17-ONE			
		S.O.	Spectre résiduel			

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 2 Composés

Contribution du deuxième

Statut

Contrôle	Statut	Correction
Ligne de base	✓	ⓘ
Bruit	✓	ⓘ
Contaminants	✓	ⓘ
Technique	✓	ⓘ IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Distorsion d'intensité, Ecrêtage vertical ⓘ

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 70.4%

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 72.7%

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

RAY #72942; 3beta-HYDROXY-5alpha-ANDROSTAN-17-ONE
mixture of Three Steroids

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant **Résultats pour 2 composants** Résultats pour 3 composants Résultat

Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
72.69		S.O.	Spectre composite		
	ⓘ	0.62	ETHISTERONE		
	ⓘ	0.38	3beta-HYDROXY-5alpha-ANDROSTAN-17-ONE		
		S.O.	Spectre résiduel		

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 2 Composés

Contribution des deux

Statut

Ligne de base	✓	i	<input type="checkbox"/>
Bruit	✓	i	<input type="checkbox"/>
Contaminants	✓	i	
Technique	✓	i	IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Distorsion d'intensité, Décalage horizontal, Décalage vertical

Statut de la recherche

Meilleur résultat: 72.7%

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 72.7%

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

0.8
0.6
0.4
0.2
0

4000 3500 3000 2500 2000 1500 1000 900 800 700 600 500 400

cm⁻¹

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant		Résultats pour 2 composants		Résultats des pics		Groupes fonctionnels	
Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre	<auto>	(IR/ATR-IR)
1	72.69	S.O.	Spectre composite				
		0.62	ETHISTERONE				
		0.38	3beta-HYDROXY-5alpha-ANDROSTAN-17-ONE				
		S.O.	Spectre résiduel				

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 3 Composés

ID Expert

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	<input type="checkbox"/>
Bruit	✓	<input type="checkbox"/>

Statut de la recherche

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 72.7%

Résultats pour 3 composants:

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant | Résultats pour 2 composants | **Résultats pour 3 composants** | Résultat: < >

Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
76.39		S.O.	Spectre composite		
	ⓘ	0.43	ETHISTERONE		
	ⓘ	0.30	EPIANDROSTERONE		
	ⓘ	0.27	PREDNISOLONE IN KBr		

Liste des résultats pour 3 composés triés par HQI

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 3 Composés

ID Expert

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	<input type="checkbox"/>
Bruit	✓	<input type="checkbox"/>
Contaminants	✓	<input type="checkbox"/>
Technique	✓	IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Distorsion d'intensité, Ecrêtage vertical

Statut de la recherche

Meilleur résultat: 70.4%

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 72.7%

Résultats pour 3 composants:

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

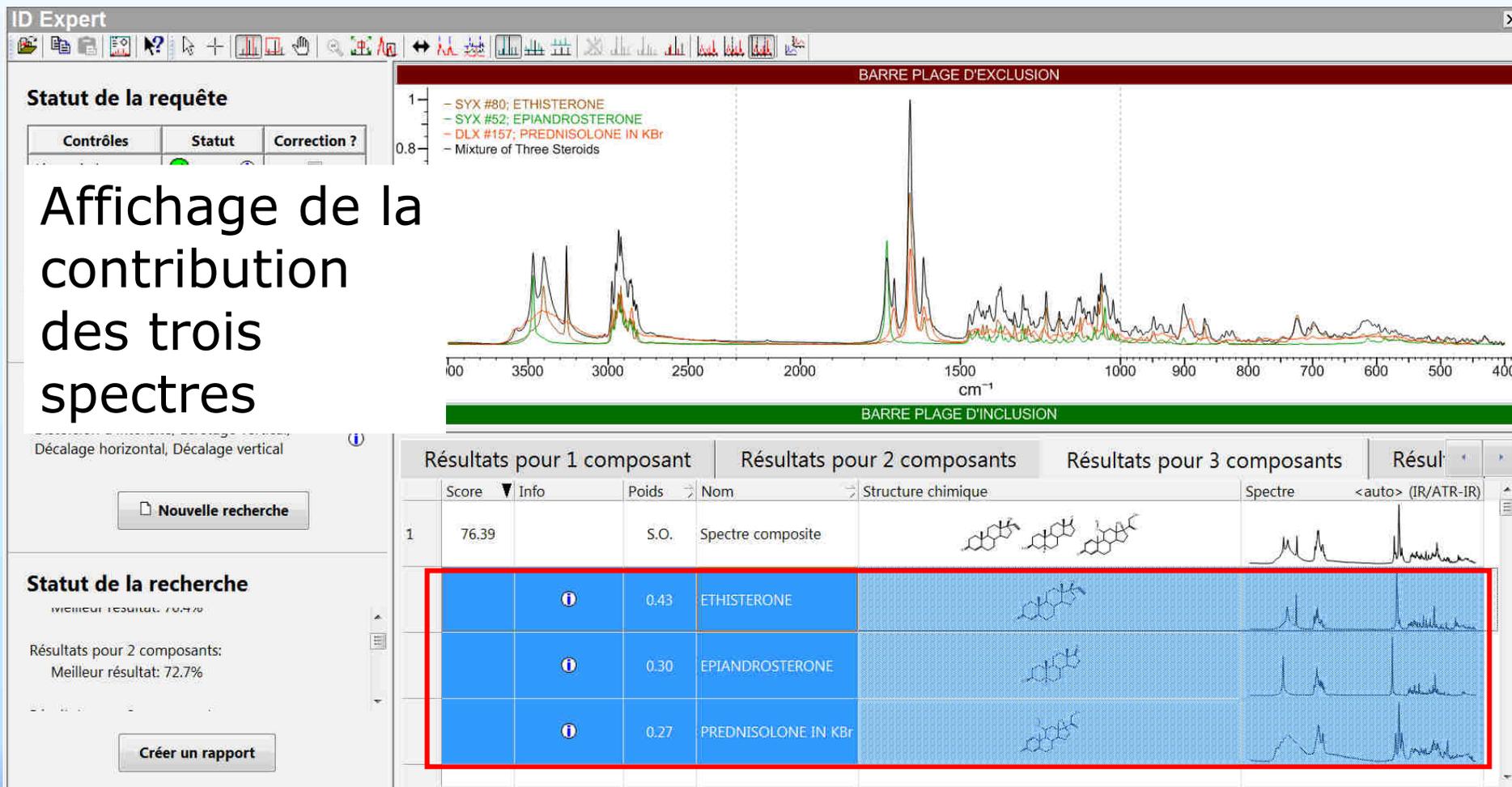
Résultats pour 1 composant | **Résultats pour 2 composants** | **Résultats pour 3 composants** | **Résultat:**

	Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
1	76.39		S.O.	Spectre composite		
		<i>i</i>	0.43	ETHISTERONE		
		<i>i</i>	0.30	EPIANDROSTERONE		
		<i>i</i>	0.27	PREDNISOLONE IN KBr		

Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 3 Composés

Affichage de la contribution des trois spectres



Identification IR avec ID Expert

Résultats pour 3 Composés

ID Expert

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	ⓘ
Bruit	✓	ⓘ
Contaminants	✓	ⓘ
Technique	✓	ⓘ IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Distorsion d'intensité, Ecrêtage vertical, Décalage horizontal, Décalage vertical ⓘ

Statut de la requête

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 72.7%

Créer un rapport

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant | **Résultats pour 2 composants** | **Résultats pour 3 composants** | **Résultat**

Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
		S.O.	Spectre composite		
	ⓘ	0.43	ETHISTERONE		
	ⓘ	0.30	EPIANDROSTERONE		
	ⓘ	0.27	PREDNISOLONE IN KBr		

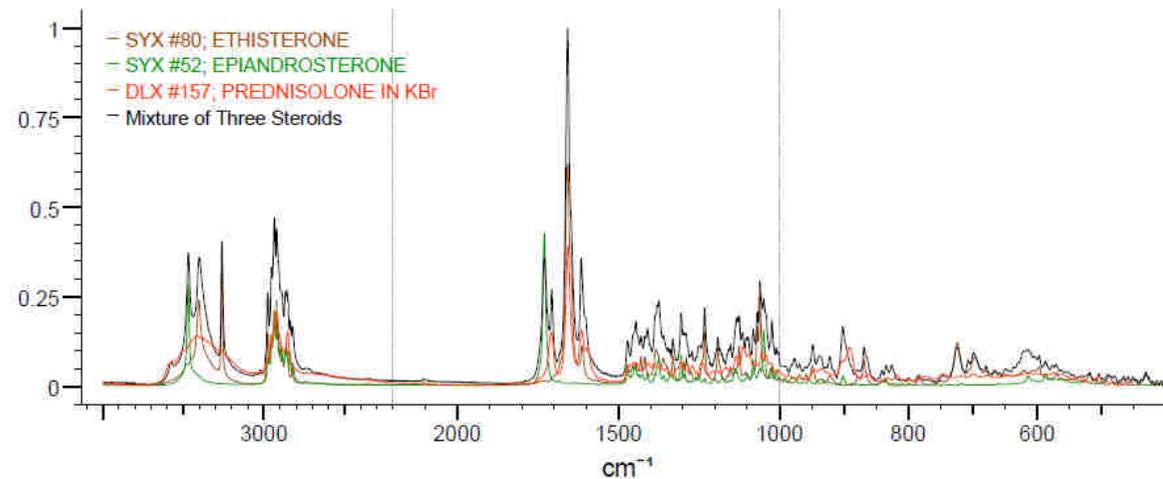
Identification IR avec ID Expert

Rapport

BIO-RAD

Bio-Rad Laboratories
Informatics Division

06/09/2018 13:12



Corrections manuelles : Aucun

Plage: Entier

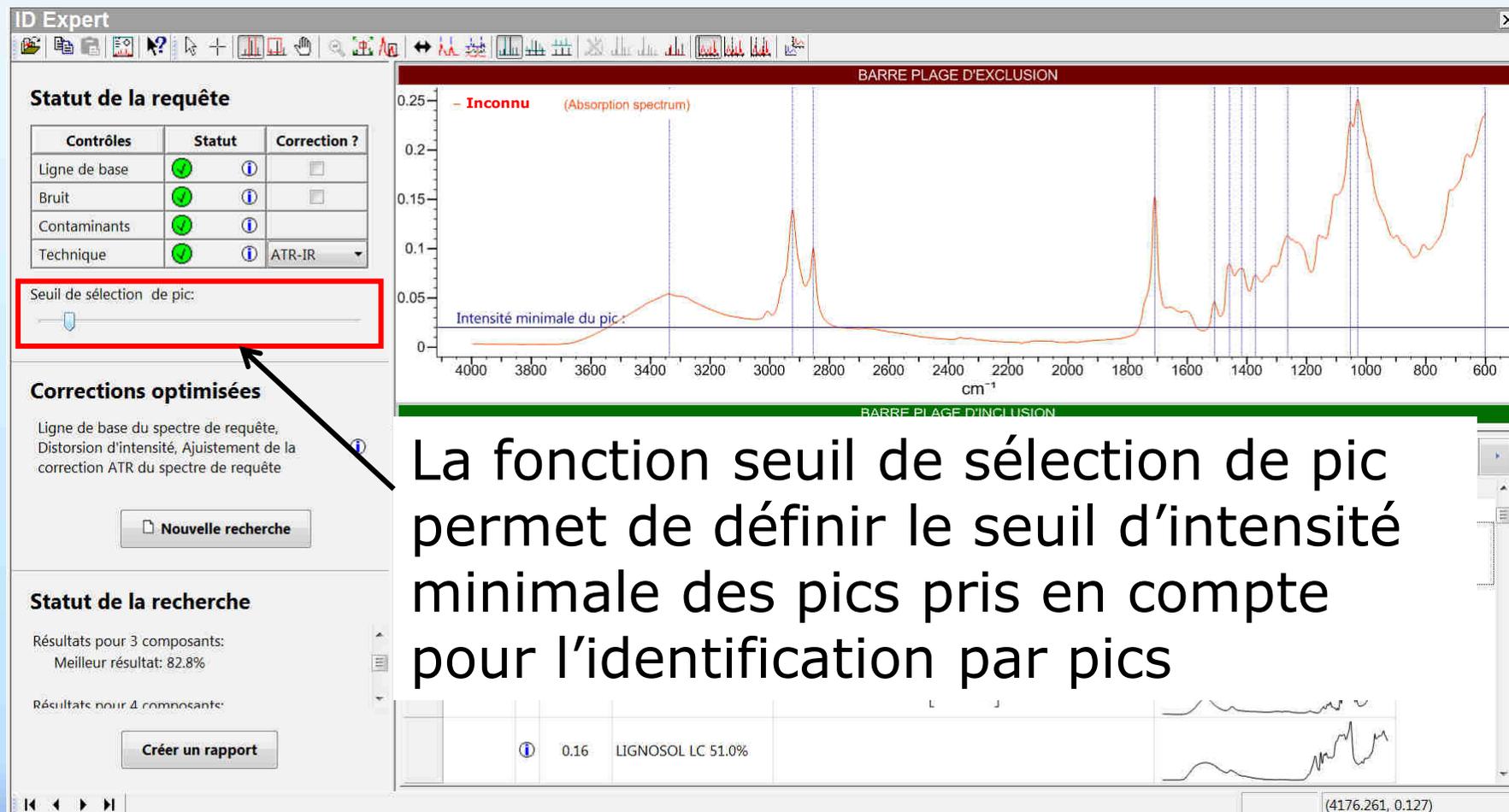
Algorithme de recherche : Dérivée première de distance euclidienne

Chemin de requête : S.O.

Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
		0.43	ETHISTERONE	<chem>CC12CCC3C(C1CC2=O)CC4=CC(=O)CC34</chem>	
		0.30	EPIANDROSTERONE	<chem>CC12CCC3C(C1CC2=O)CC4=CC(=O)CC34</chem>	
		0.27	PREDNISOLONE IN KBr	<chem>CC12CCC3C(C1CC2=O)CC4=CC(=O)CC34</chem>	

Identification IR avec ID Expert

Identification par pics



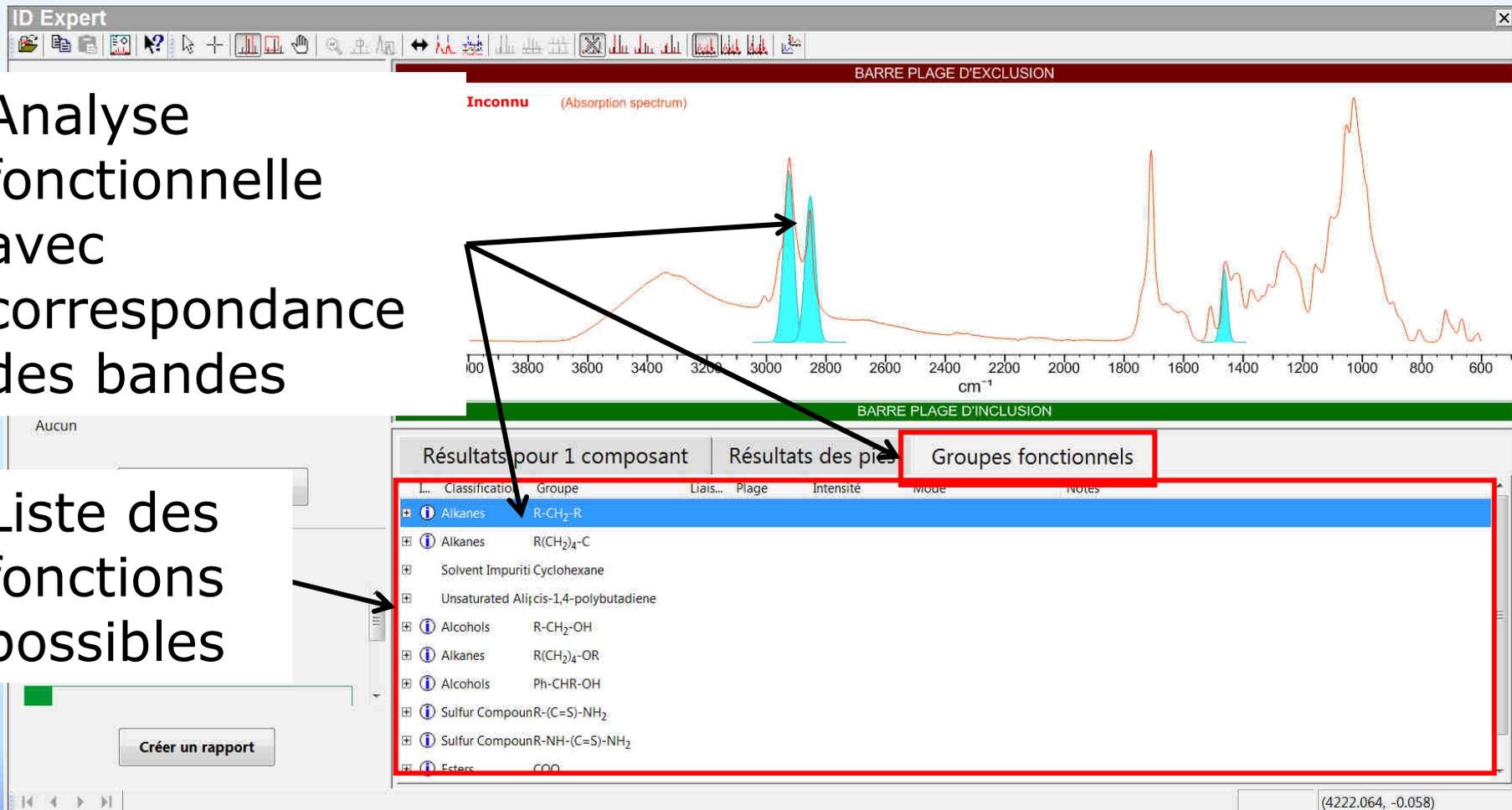
La fonction seuil de sélection de pic permet de définir le seuil d'intensité minimale des pics pris en compte pour l'identification par pics

Identification IR avec ID Expert

Analyse fonctionnelle

Analyse fonctionnelle avec correspondance des bandes

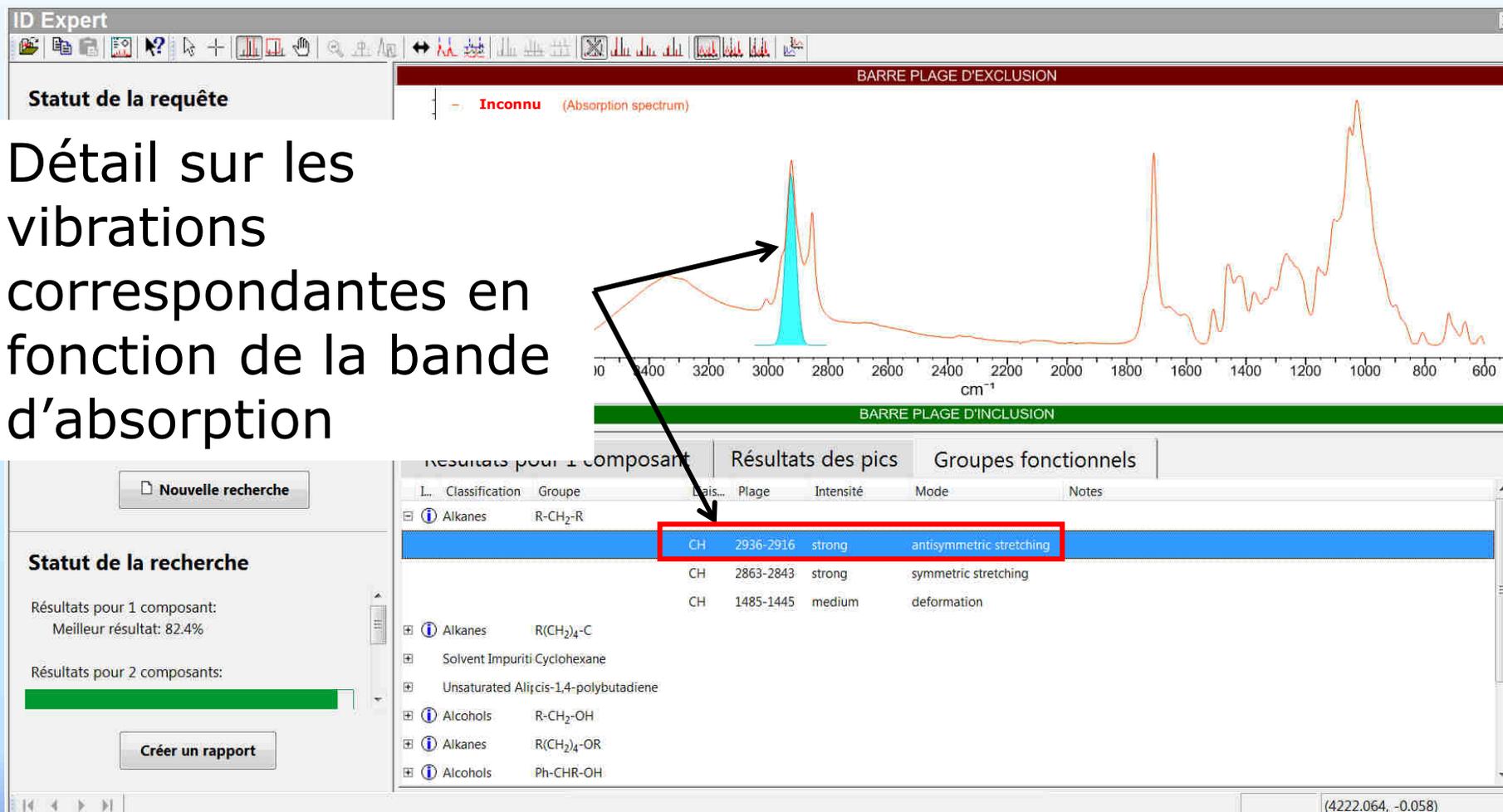
Liste des fonctions possibles



Identification IR avec ID Expert

Analyse fonctionnelle

Détail sur les vibrations correspondantes en fonction de la bande d'absorption



IDENTIFICATION INFRAROUGE

- Rappels sur la Spectrométrie IR
- Méthodes d'analyse
- Le concept KnowItAll
- Identification avec ID Expert et Deformulation Expert
- **Identification avec KnowItAll SearchIt**
- Identification avec KnowItAll Mixture Analysis
- Exemples d'identifications
- Conclusion

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Dans le menu d'onglet Données choisir SearchIt

The screenshot shows the KnowItAll SearchIt software interface. The 'Données' menu is highlighted in red, and the 'SearchIt' option is also highlighted in red. A black arrow points from the 'Données' menu to the 'SearchIt' option. The main window shows search parameters and a list of databases.

Paramètres de recherche

Base : [Rapide] [Structure] [Propriété/Nom]

Spectral : [IR] [Vapor Phase IR] [Proche IR] [Raman]

Pic : [IR] [Vapor Phase IR] [Proche IR] [Raman]

Disponibles pour la recherche :

Les bases de données Inter... Limiter à la technique spectrale : [Tout] [Rafrâchir] [Avancé...]

Références	Nom	Code DB	Emplacement
<input type="checkbox"/> Référence - avec licence			
<input type="checkbox"/> Référence - sans licence			
<input type="checkbox"/> Utilisateur			
<input type="checkbox"/> Liste de résultats			
	ATR-IR - Controlled & Prescription Drugs 1 - Bio-Rad Sadtler	DWX	<Dernière version>
	ATR-IR - Controlled & Prescription Drugs 2 - Bio-Rad Sadtler	DW2X	<Dernière version>
	ATR-IR - Controlled & Prescription Drugs 3 - Bio-Rad Sadtler	DW3X	<Dernière version>
	ATR-IR - Flavors & Fragrances - Bio-Rad Sadtler	FFWX	<Dernière version>
	ATR-IR - Inorganics 1 - Bio-Rad Sadtler	YWX	<Dernière version>
	ATR-IR - Inorganics 2 - Bio-Rad Sadtler	YW2X	<Dernière version>
	AIR-IR - NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards Compounds - Bio-Rad Sadtler	NAX	<Dernière version>
	ATR-IR - Nutraceu... - Bio-Rad Sadtler	GNV	<Dernière version>

[Ajouter tout] [Ajouter] [Retirer] [Retirer tout]

Sélectionné pour la recherche :

Nom	Code DB	Emplacement
ATR-IR - Controlled & Prescription Drugs 1 - Bio-Rad Sadtler	DWX	C:\Users\Public\Documents\Bio-Rad Laboratories\KnowItAll\Databases\IR\ATR-IR - Controlled ...
ATR-IR - Controlled & Prescription Drugs 2 - Bio-Rad Sadtler	DW2X	C:\Users\Public\Documents\Bio-Rad Laboratories\KnowItAll\Databases\IR\ATR-IR - Controlled ...
ATR-IR - Controlled & Prescription Drugs 3 - Bio-Rad Sadtler	DW3X	C:\Users\Public\Documents\Bio-Rad Laboratories\KnowItAll\Databases\IR\ATR-IR - Controlled ...
ATR-IR - Flavors & Fragrances - Bio-Rad Sadtler	FFWX	C:\Users\Public\Documents\Bio-Rad Laboratories\KnowItAll\Databases\IR\ATR-IR - Flavors & F...
ATR-IR - Inorganics 1 - Bio-Rad Sadtler	YWX	C:\Users\Public\Documents\Bio-Rad Laboratories\KnowItAll\Databases\IR\ATR-IR - Inorganics ...

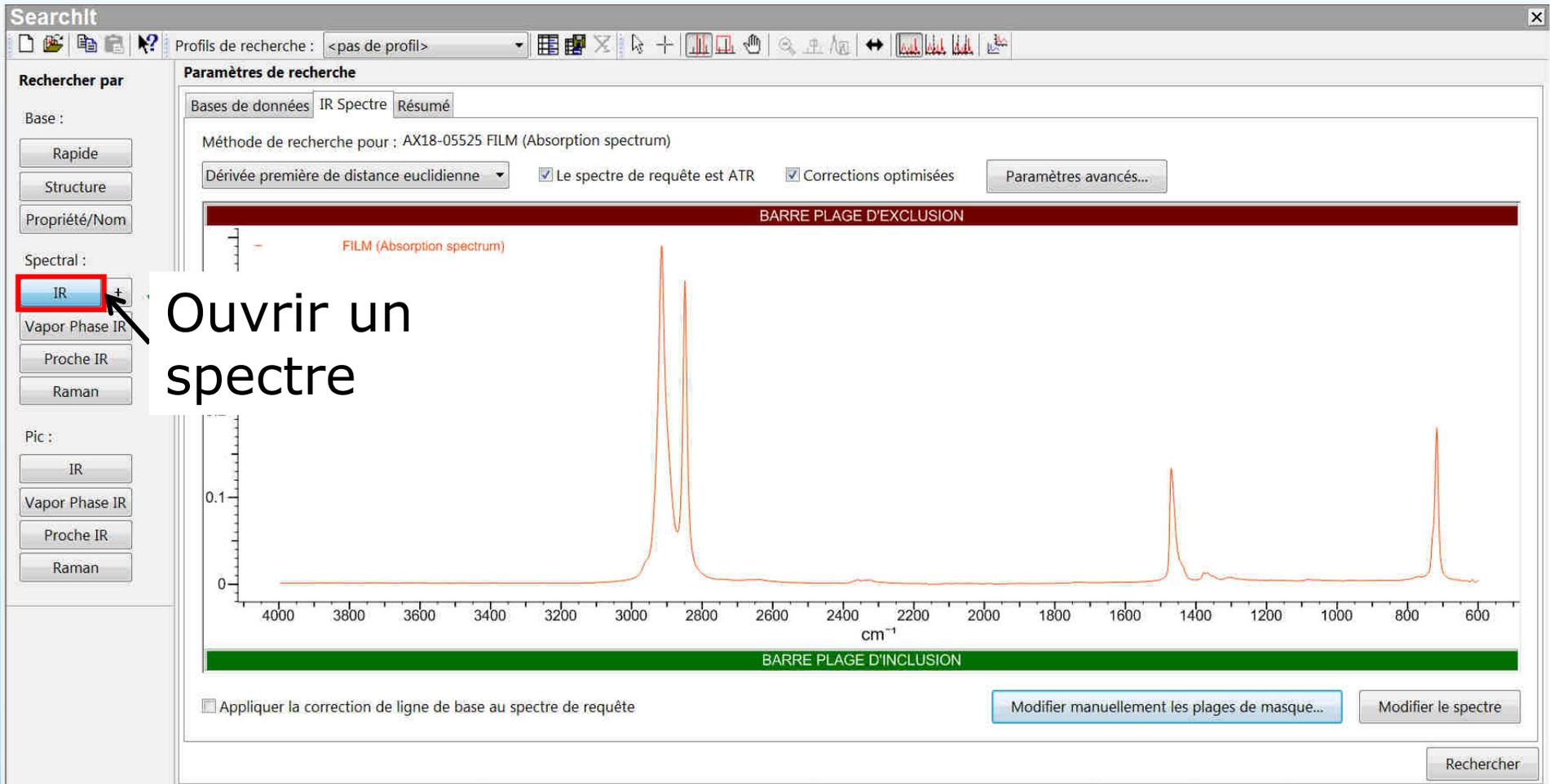
[Sélectionner en parcourant...]

Limite de taille de liste de résultats : [50] [Tous les résultats]

[Rechercher]

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Ouverture d'un spectre IR quel que soit son format



The screenshot displays the SearchIt software interface. On the left, under the 'Spectral' section, the 'IR' button is highlighted with a red box and an arrow. A text overlay 'Ouvrir un spectre' is positioned next to it. The main window shows the 'Paramètres de recherche' section with the search method set to 'AX18-05525 FILM (Absorption spectrum)'. The search parameters include 'Dérivée première de distance euclidienne', 'Le spectre de requête est ATR', and 'Corrections optimisées'. The central plot area shows an IR absorption spectrum with a red line and a green baseline. The x-axis is labeled 'cm⁻¹' and ranges from 4000 to 600. The y-axis ranges from 0 to 0.1. A red bar at the top of the plot is labeled 'BARRE PLAGE D'EXCLUSION' and a green bar at the bottom is labeled 'BARRE PLAGE D'INCLUSION'. At the bottom right, there are buttons for 'Modifier manuellement les pages de masque...', 'Modifier le spectre', and 'Rechercher'.

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Paramétrage du spectre IR

SearchIt

Profils de recherche : <pas de profil>

Rechercher par

Base :

Rapide

Structure

Propriété/Nom

Spectral :

IR + ✓

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Pic :

IR

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Paramètres de recherche

Bases de données IR Spectre Résumé

Méthode de recherche pour : AX18-05525 FILM (Absorption spectrum)

Dérivée première de distance euclidienne Le spectre de requête est ATR Corrections optimisées Paramètres avancés...

Affichage du spectre à identifier

FILM (Absorption spectrum)

0.3

0.2

0.1

0

4000 3800 3600 3400 3200 3000 2800 2600 2400 2200 2000 1800 1600 1400 1200 1000 800 600

cm⁻¹

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Appliquer la correction de ligne de base au spectre de requête

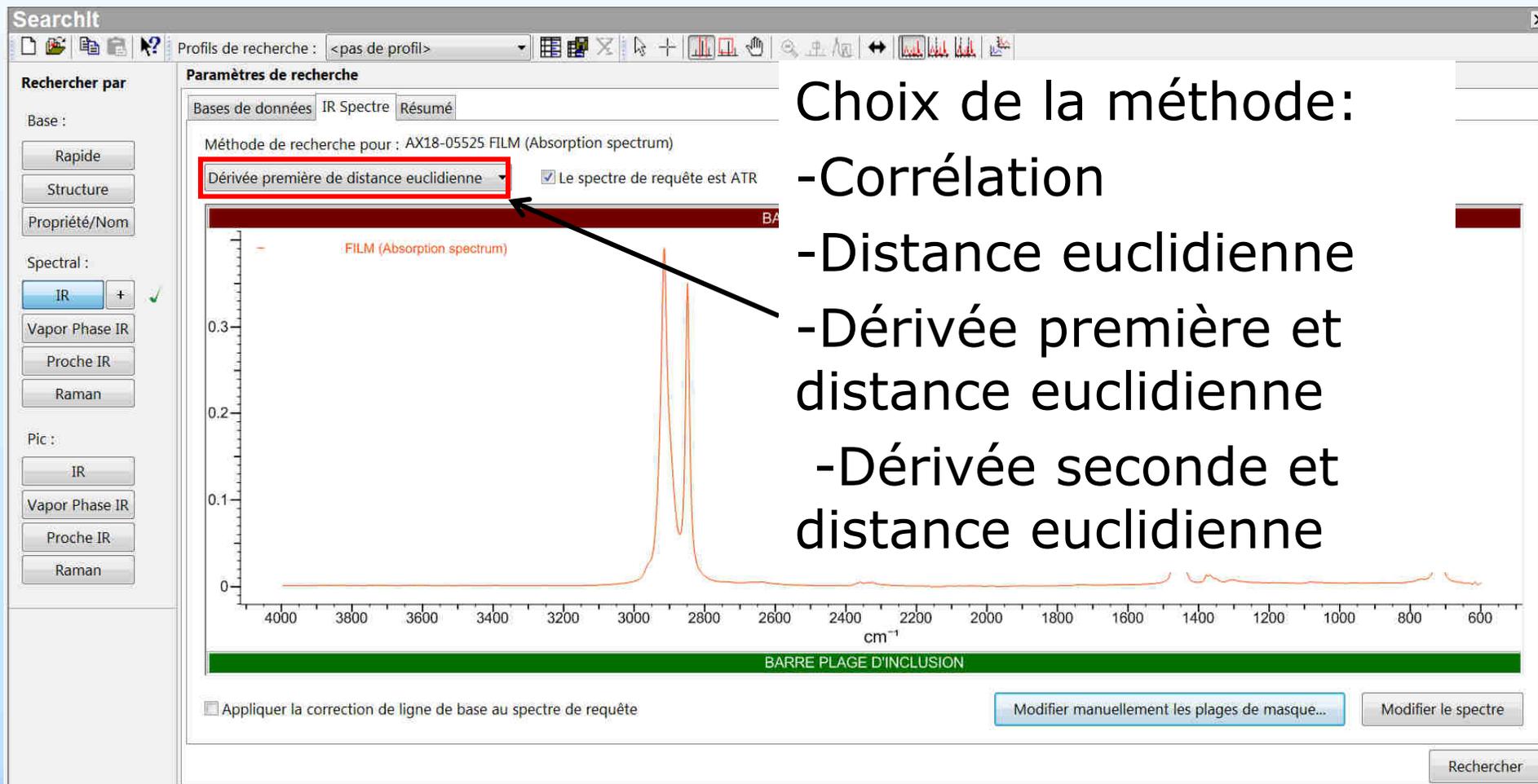
Modifier manuellement les plages de masque...

Modifier le spectre

Rechercher

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Définition du mode d'analyse



The screenshot displays the SearchIt software interface. On the left, the 'Rechercher par' (Search by) panel includes options for 'Rapide', 'Structure', 'Propriété/Nom', 'Spectral' (with 'IR' selected), and 'Pic'. The main 'Paramètres de recherche' (Search parameters) section shows 'Méthode de recherche pour : AX18-05525 FILM (Absorption spectrum)' and a dropdown menu for 'Dérivée première de distance euclidienne' (First derivative of Euclidean distance), which is highlighted with a red box and an arrow. A checkbox for 'Le spectre de requête est ATR' is checked. Below this is a plot of the IR spectrum for 'FILM (Absorption spectrum)' with a y-axis from 0 to 0.3 and an x-axis from 4000 to 600 cm⁻¹. A green bar at the bottom of the plot indicates the 'BARRE PLAGE D'INCLUSION' (Inclusion range bar). At the bottom right, there are buttons for 'Modifier manuellement les pages de masque...', 'Modifier le spectre', and 'Rechercher'.

Choix de la méthode:

- Corrélation
- Distance euclidienne
- Dérivée première et distance euclidienne
- Dérivée seconde et distance euclidienne

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Définition du mode de mesure

SearchIt

Profils de recherche : <pas de profil>

Rechercher par

Base :

Rapide

Structure

Propriété/Nom

Spectral :

IR + ✓

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Pic :

IR

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Paramètres de recherche

Bases de données IR Spectre Résumé

Méthode de recherche pour : AX18-05525 FILM (Absorption spectrum)

Dérivée première de distance euclidienne Le spectre de requête est ATR Corrections optimisées Paramètres avancés...

FILM (Absorption spectrum)

BARRE PLAGE D'INCLUSION

0.3

0.2

0.1

0

4000 3800 3600 3400 3200 3000 2800 2600

cm⁻¹

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Appliquer la correction de ligne de base au spectre de requête

Modifier manuellement les pages de masque...

Modifier le spectre

Rechercher

Indique le type de spectre au logiciel.
Permet au logiciel d'effectuer la correction ATR ou inverse si nécessaire.

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Définition des corrections spectrales

SearchIt

Profils de recherche : <pas de profil>

Rechercher par

Base :

Rapide

Structure

Propriété/Nom

Spectral :

IR + ✓

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Pic :

IR

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Paramètres de recherche

Bases de données IR Spectre Résumé

Méthode de recherche pour : AX18-05525 FILM (Absorption spectrum)

Dérivée première de distance euclidienne

Le spectre de requête est ATR

Corrections optimisées

Paramètres avancés...

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

FILM (Absorption spectrum)

0.3

0.2

0.1

0

4000 3800 3600 3400 3200 3000 2800 2600 2400 2200 2000 1800 1600 1400 1200 1000 800 600

cm⁻¹

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Appliquer la correction de ligne de base au spectre de requête

Modifier manuellement les plages de masque...

Modifier le spectre

Rechercher

Applique des corrections aux spectres à identifier et ceux de la base de données si nécessaire

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Définition de la gamme spectrale

Rechercher par

Base :

Rapide

Structure

Propriété/Nom

Spectral :

IR + ✓

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Pic :

IR

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Paramètres de recherche

Méthode de recherche : IR

Masques d'inclusion/exclusion spectrale

Masques d'exclusion spectrale

Sélectionnez les éléments de la liste d'éléments que vous souhaitez que la plage spectrale soit exclue :

- Acétone
- Dichlorométhane
- Dioxyde de carbone**
- Disulfure de carbone

Modifier... Utiliser la plage

Masques d'inclusion spectrale

Plage haute : Plage basse :

Supprimer Ajouter

Appliquer la correction de ligne de base au spectre de requête

Modifier manuellement les plages de masque...

Modifier le spectre

Rechercher

Cette fonction permet d'utiliser des masques d'exclusion prédéfinis au spectre

BARRE PLAGE D'INCLUSION

cm⁻¹

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Définition de la gamme spectrale

La liste d'exclusions permet d'exclure rapidement les bandes correspondant à des polluants ou des solvants habituels

The screenshot displays the SearchIt software interface. On the left, there are search options like 'Rechercher par' (Rapide, Structure, Propriété/Nom) and 'Spectral' (IR, Vapor Phase IR, Proche IR, Raman). The main window shows 'Paramètres de recherche' with a 'Masques d'inclusion/exclusion spectrale' dialog box open. This dialog box has a section for 'Masques d'exclusion spectrale' with a list containing 'Acétone', 'Dichlorométhane', 'Dioxyde de carbone', and 'Disulfure de carbone'. A red box highlights this list, and an arrow points to it from the text on the right. Below the list are buttons for 'Modifier...' and 'Utiliser la plage complète'. There is also a section for 'Masques d'inclusion spectrale' with 'Plage haute' and 'Plage basse' fields, and buttons for 'Supprimer', 'Ajouter', and 'Utiliser la plage entière'. The background shows an IR spectrum plot with a red bar indicating an exclusion range and a green bar indicating an inclusion range. At the bottom, there are buttons for 'Appliquer la correction de ligne de base au spectre de requête', 'Modifier manuellement les plages de masque...', 'Modifier le spectre', and 'Rechercher'.

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Lancer la recherche

The screenshot displays the SearchIt software interface. On the left, the 'Rechercher par' (Search by) panel includes options for 'Base' (Rapide, Structure, Propriété/Nom) and 'Spectral' (IR, Vapor Phase IR, Proche IR, Raman). The 'Pic' (Peak) panel also lists IR, Vapor Phase IR, Proche IR, and Raman. The main 'Paramètres de recherche' (Search Parameters) section shows 'Bases de données' (IR Spectre, Résumé) and 'Méthode de recherche pour : AX18-05525 FILM (Absorption spectrum)'. Search parameters include 'Dérivée première de distance euclidienne', 'Le spectre de requête est ATR' (checked), and 'Corrections optimisées' (checked). A 'Rechercher' button is highlighted with a red box and an arrow pointing to it from the text 'Lance la recherche' (Launch the search) overlaid on the plot area. The plot shows an IR absorption spectrum for 'FILM (Absorption spectrum)' with a y-axis from 0 to 0.3 and an x-axis from 4000 to 600 cm⁻¹. A red bar at the top indicates the 'BARRE PLAGE D'EXCLUSION' (Exclusion Range) and a green bar at the bottom indicates the 'BARRE PLAGE D'INCLUSION' (Inclusion Range). Other buttons include 'Appliquer la correction de ligne de base au spectre de requête', 'Modifier manuellement les plages de masque...', and 'Modifier le spectre'.

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Affichage des résultats

Spectre inconnu et sélectionné

Informations détaillées

The screenshot displays the Minelt software interface. The main window shows an ATR-IR spectrum for a sample identified as 'BWX #20; Polyethylene, high density FILM (Absorption spectrum)'. The x-axis represents wavenumber in cm⁻¹, ranging from 4000 to 400. The spectrum shows characteristic peaks for polyethylene, with a prominent doublet around 2900 cm⁻¹ and a sharp peak at approximately 1470 cm⁻¹. A red box highlights the 'Structure/propriétés' panel on the right, which displays the chemical structure of polyethylene: $\text{---}[\text{CH}_2\text{---CH}_2]\text{---}_n$. Below the spectrum, a table lists search results sorted by HQI (Hit Quality Index).

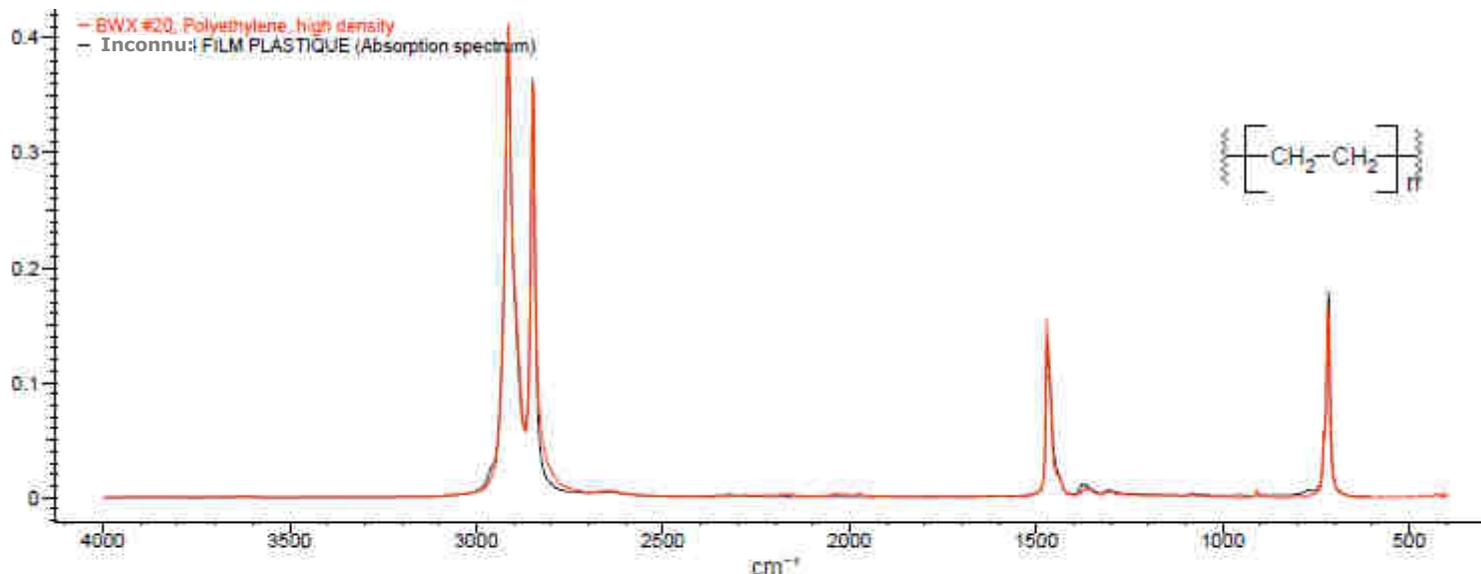
Table	Tracé	HQI	Etiquette	Co	DB	ID	Nom	Spectre
1		89.56			BWX	20	Polyethylene, high density	
2		88.47			BWX	192	Ethylene/methacrylic acid copolymer 96/4	
3		88.28			GX	2096	KEMAMINE T-2801	

Liste des résultats de l'identification classés par HQI

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Rapport d'analyse

Film Plastique 1 Identification



ROI	Etiquette	rectific	DB	ID	Nom	Spectre
98.99			BWX	20	Polyethylene, high density	

Nom	Valeur
Nom	Polyethylene, high density
CAS Registry Number	25213-02-9
Catalog Number	041
Comments	white pellets
Density	0.95 g/cm ³
Instrument Name	Bio-Rad FTS
Lot Number	500209020
Melting Point	121 °C
Mol Weight	125000 g/mol
Refractive Index	1.54
Source of Sample	Scientific Polymer Products, Inc.
Source of Spectrum	Forensic Spectral Research
Technique	ATR-Neat (DuraSample II)

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Apport des corrections spectrales

SearchIt

Profils de recherche : <pas de profil>

Rechercher par

Base :

Rapide

Structure

Propriété/Nom

Spectral :

IR + ✓

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Pic :

IR

Vapor Phase IR

Proche IR

Raman

Paramètres de recherche

Bases de données IR Spectre Résumé

Méthode de recherche pour : Antimites 5529 (Transmittance spectrum)

Corrélation

Le spectre de requête est ATR Corrections optimisées Paramètres avancés...

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

— Antimites 5529 (Transmittance spectrum)

0.5

0.4

0.3

0.2

0.1

0

4000 3800 3600 3400 3200 3000 2800 2600 2400 2200 2000 1800 1600 1400 1200 1000 800 600

cm⁻¹

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Appliquer la correction de ligne de base au spectre de requête

Modifier manuellement les plages de masque...

Modifier le spectre

Rechercher

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Résultat spectre brut

Minelt

PubChem Afficher les profils : <pas de profil>

IR

- HSX #6627; p-DICHLOROBENZENE
- Antimites 5529 (Transmittance spectrum)

Structure/propriétés

Clc1ccc(Cl)cc1

Sous-structs sél.		Original Data Files	
Propriétés préférées		Sous-structs	
Toutes les propriétés		Attachements	
Nom	Valeur		
Nom	p-DICHLOROBENZENE		
Boiling Point	174C		
Classification	Scholl= SOLVENT		
Density	1.458 G/CC		
Formula	C6H4Cl2		
InChI	InChI=1S/C6H4Cl2/c7-		
InChIKey	OCJBOOLMMGQPQU-		
Melting Point	53C		
Mol.Weight	147.0		
Optical Properties	Index of Refraction= 1.5210		
Sample Description	HYDROCARBON - HALOGENATED		

Table	Tracé	Etiquette	DB	ID	Nom	Spctre
1	HQI 76.87		BWX	71	Poly(phenylene sulfide)	
2	71.04		MBX	2534	BIS(4-CHLOROPHENYL) DISELENIDE	
3	68.36		HSX	6627	p-DICHLOROBENZENE	
					1-BROMO-4-	

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Résultat après corrections avancées brevetées

Minelt

Afficher les profils : <pas de profil>

IR

- HSX #6627; p-DICHLOROBENZENE
- Antimites 5529 (Transmittance spectrum) (ATR corrigé)

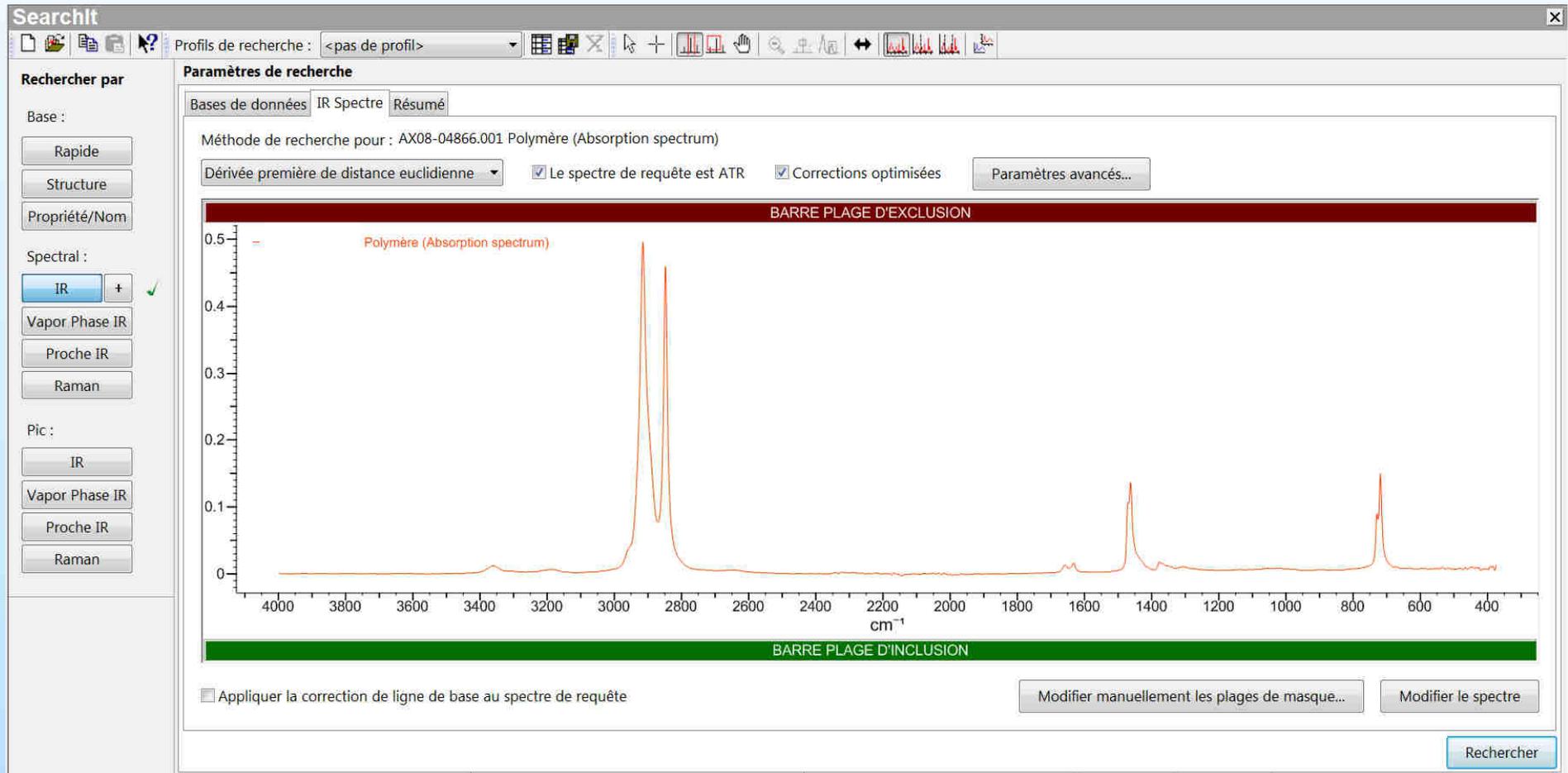
Structure/propriétés

Sous-structs sél.		Original Data Files	
Propriétés préférées		Sous-structs	
Toutes les propriétés		Attachements	
Nom	Valeur		
Nom	p-DICHLOROBENZENE		
Boiling Point	174C		
Classification	Scholl= SOLVENT		
Density	1.458 G/CC		
Formula	C6H4Cl2		
InChI	InChI=1S/C6H4Cl2/c7-		
InChIKey	OCJBOOLMMGQPQU-		
Melting Point	53C		
Mol.Weight	147.0		
Optical Properties	Index of Refraction= 1.5210		
Sample Description	HYDROCARBON - HALOGENATED		

Table	Tracé	HQI	Etiquette	Co	DB	ID	Nom	Spéctre	<auto> (IR/ATR-IR)
1	87.03		HSX	6627			p-DICHLOROBENZENE		
2	83.83		BWX	71			Poly(phenylene sulfide)		
3	82.23		MBX	2534			BIS(4-CHLOROPHENYL) DISELENIDE		

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

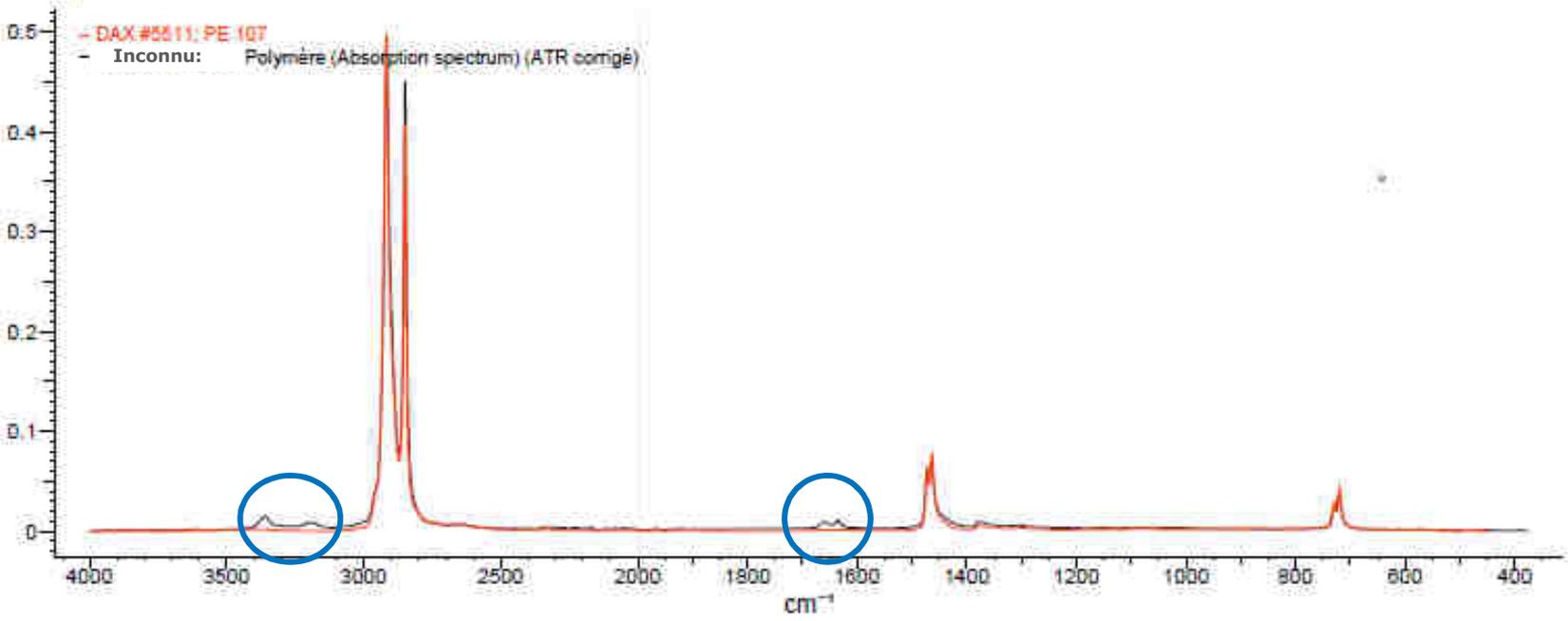
Utilisation de la barre d'exclusion pour l'identification



Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Utilisation de la barre d'exclusion

Polymère A1 Identification Produit 1

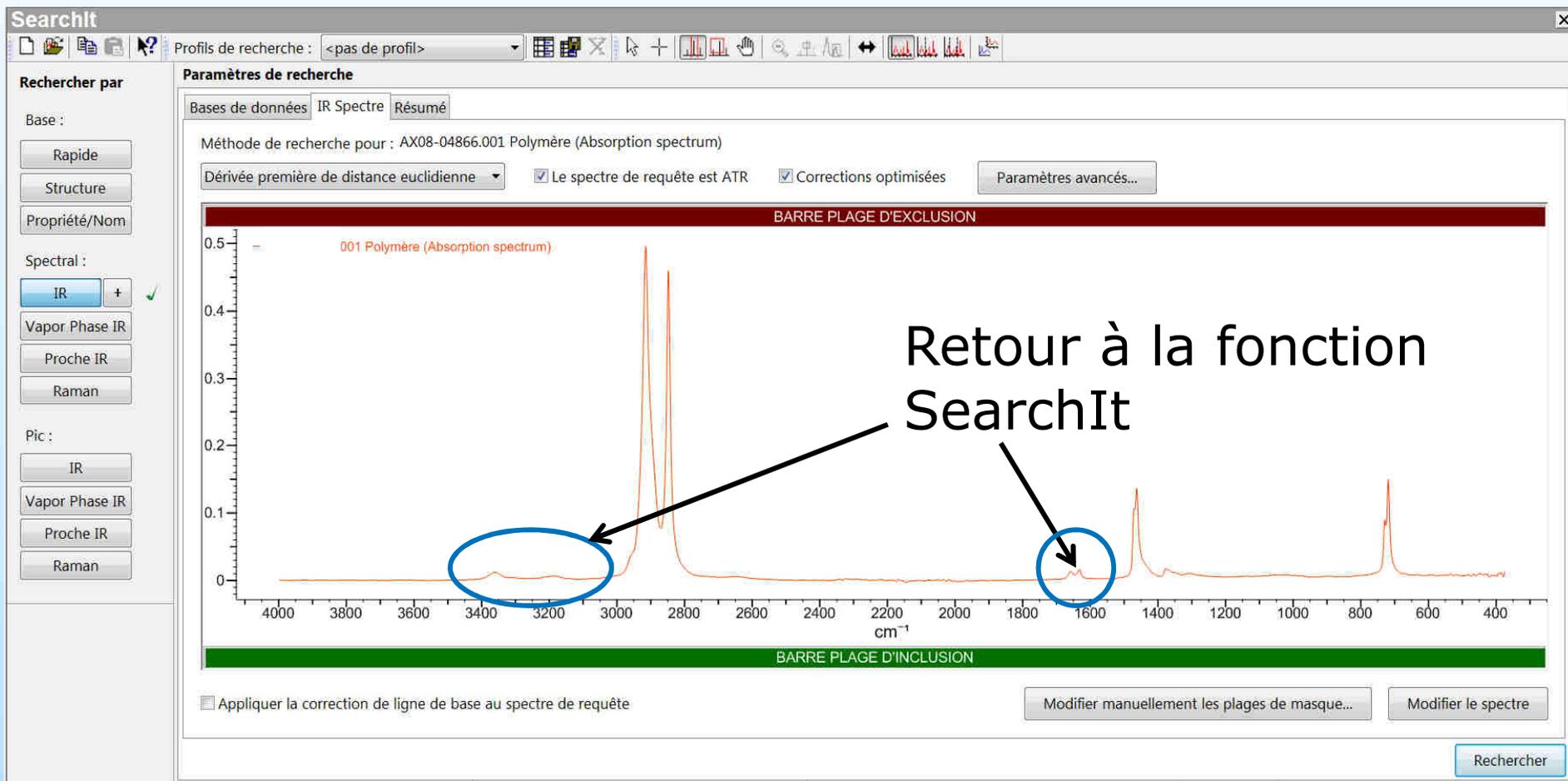


Nom	Valeur
Nom	PE 107
Chemical Description	POLYETHYLENE
Classification	POLYMERS - POLYETHYLENES
Source of Sample	Dart Industries, Inc., Rexene Polymers Division
Technique	FILM

HQI	Etiquette	rectific	DB	ID	Nom	Spectre
87.74			DAX	5511	PE 107	

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

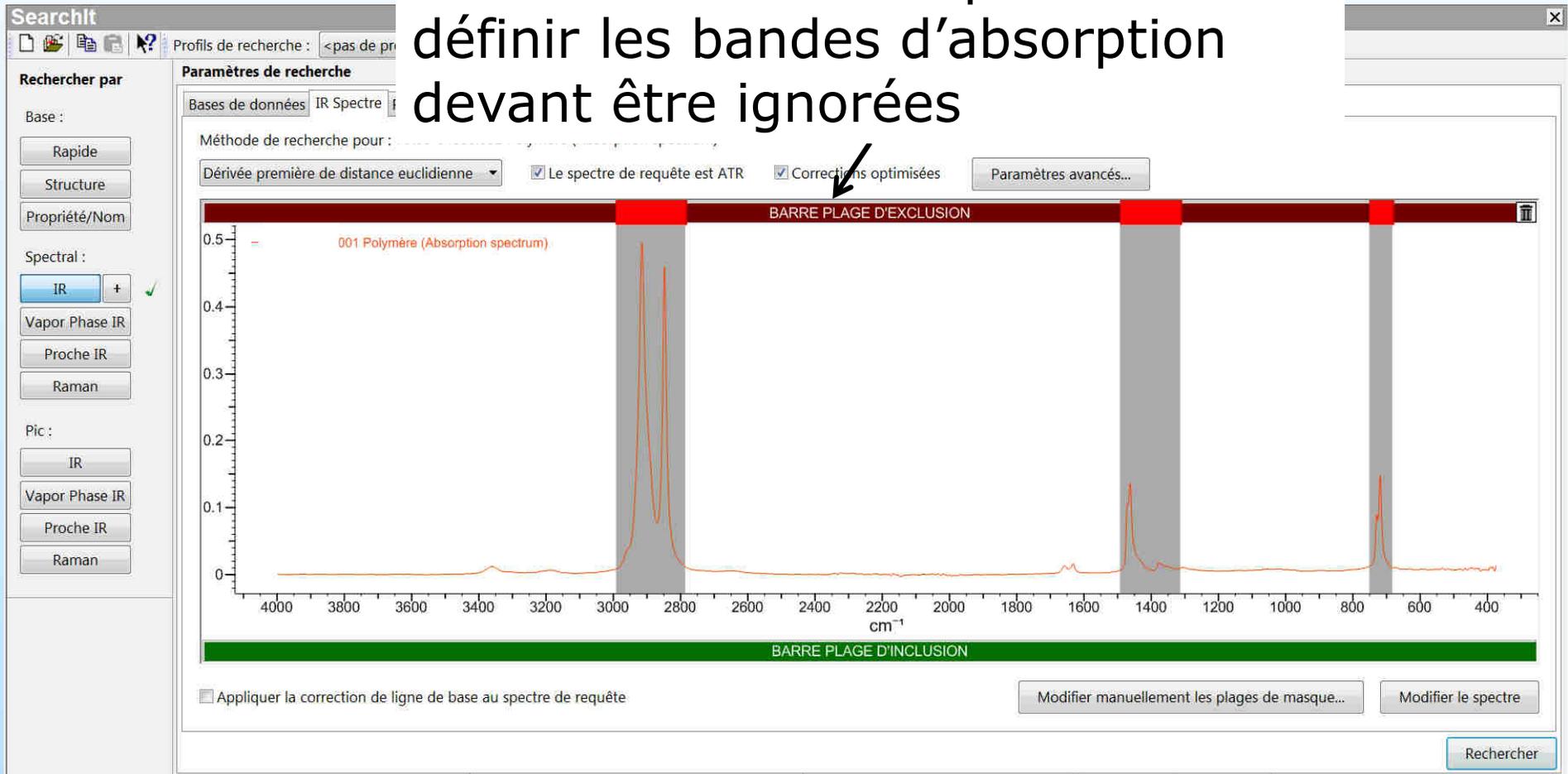
Utilisation de la barre d'exclusion pour l'identification



Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Utilisation de la barre d'exclusion pour l'identification

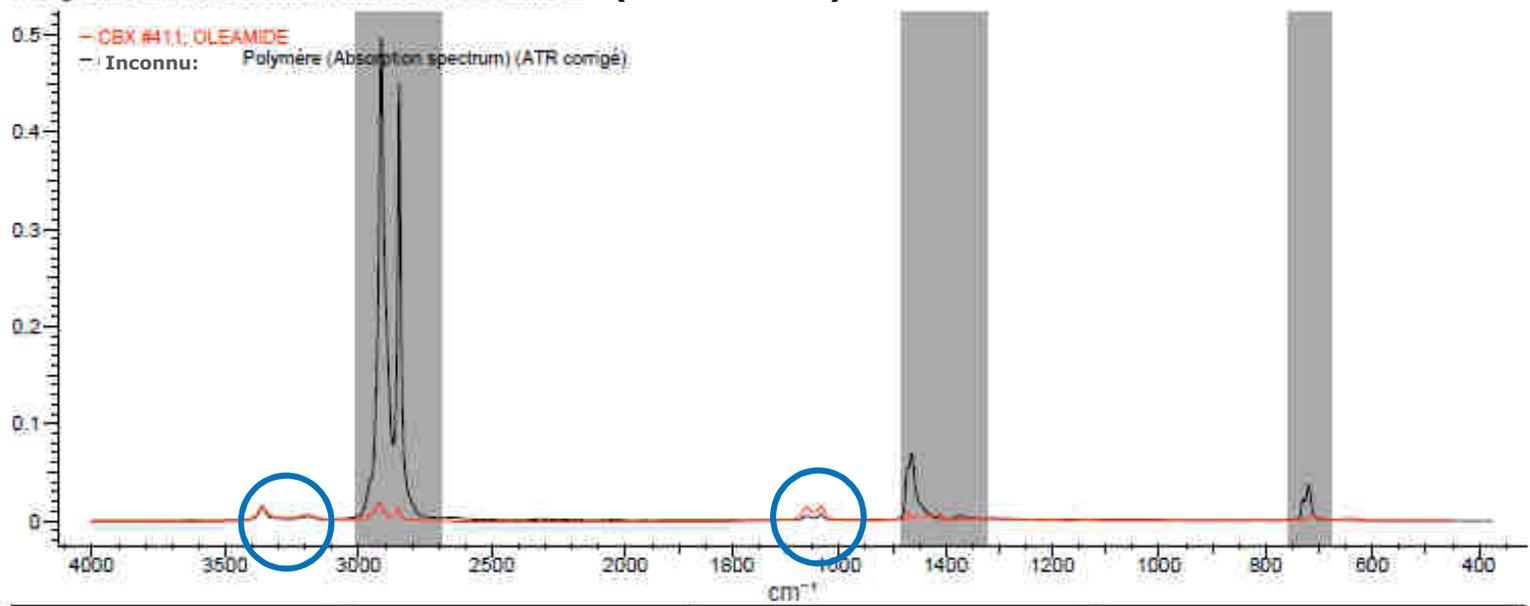
La barre d'exclusion permet de définir les bandes d'absorption devant être ignorées



Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Utilisation de la barre d'exclusion

Polymère A1 Identification Produit 2 (Contaminant)



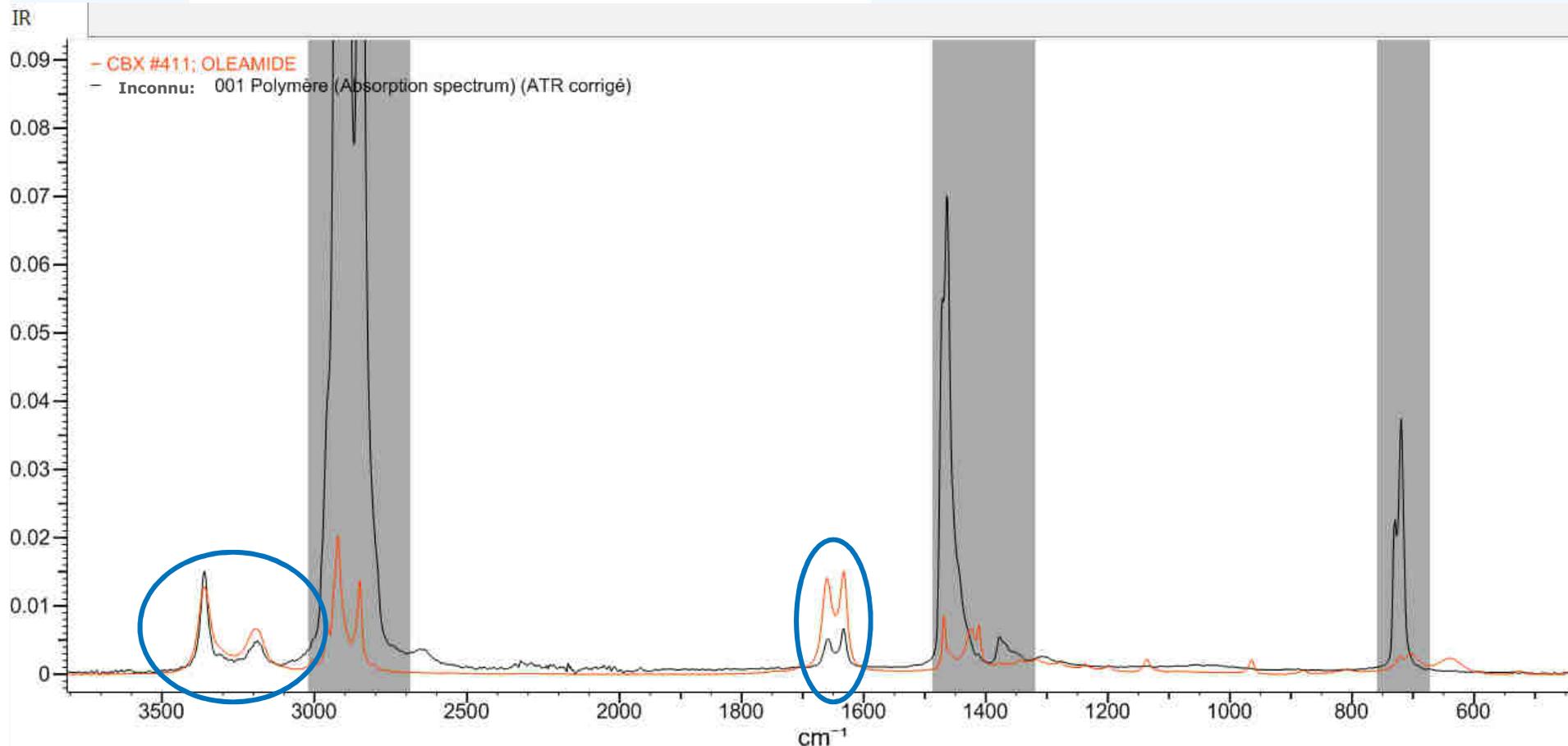
Nom	Valeur
Nom	OLEAMIDE
Boiling Point	260C
CAS Registry Number	301-02-0
Catalog Number	S-00589
Density	0.885
Flash Point	205C
Formula	C18H35NO
Melting Point	68-78C
Mol Weight	281.48
Source of Sample	Chem Service, Inc., West Chester, Pennsylvania

HQI	Etiquette	rectific	DB	ID	Nom	Spectre
62.61			CBX	411	OLEAMIDE	

Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

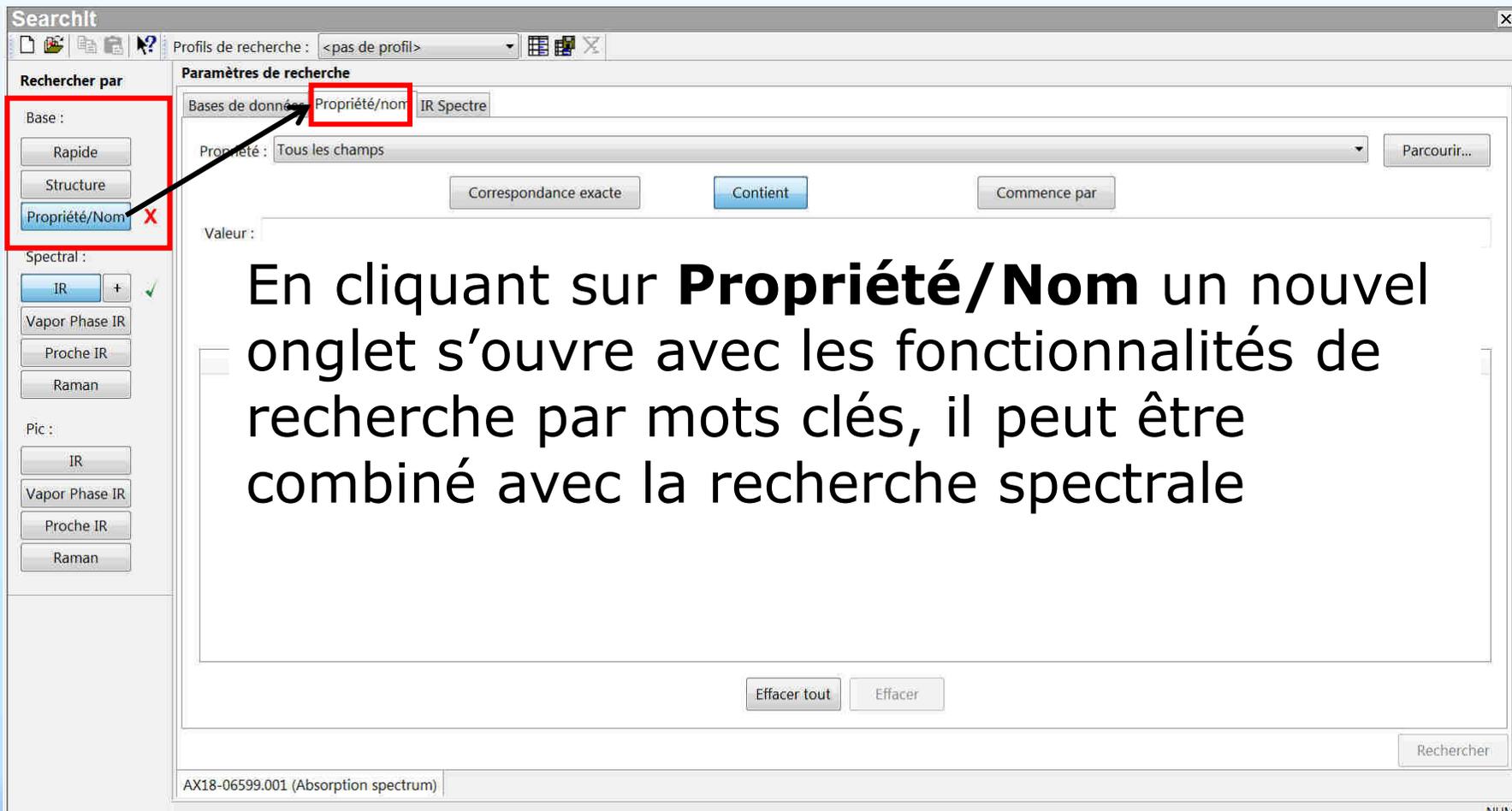
Utilisation de la barre d'exclusion

Polymère A1 Produit 2 Zoom



Identification IR avec KnowItAll® SearchIt

Utilisation des Propriétés du produit



The screenshot displays the SearchIt software interface. On the left, under 'Rechercher par', the 'Propriété/Nom' option is highlighted with a red box and a red 'X' icon. An arrow points from this option to the 'Propriété/nom' tab in the 'Paramètres de recherche' section, which is also highlighted with a red box. The 'Bases de données' dropdown is set to 'Propriété/nom' and 'IR Spectre'. The 'Propriété' dropdown is set to 'Tous les champs'. Below these are buttons for 'Correspondance exacte', 'Contient', and 'Commence par'. A large text box contains the following text:

En cliquant sur **Propriété/Nom** un nouvel onglet s'ouvre avec les fonctionnalités de recherche par mots clés, il peut être combiné avec la recherche spectrale

At the bottom of the interface, there are buttons for 'Effacer tout', 'Effacer', and 'Rechercher'. The status bar at the bottom shows 'AX18-06599.001 (Absorption spectrum)' and the NIIM logo.

IDENTIFICATION INFRAROUGE

- Rappels sur la Spectrométrie IR
- Méthodes d'analyse
- Le concept KnowItAll
- Identification avec ID Expert et Déformulation Expert
- Identification avec KnowItAll SearchIt
- **Identification avec KnowItAll Mixture Analysis**
- Exemple d'identifications
- Conclusion

Identification IR avec KnowItAll®

Mixture Analysis

Mixture Analysis - KnowItAll® Informatics System, ID Expert

Fichier Edition Affichage Licence Aide

Transfert vers: ReportIt ID Expert Deformulation Expert SearchIt Base de données MineIt QC Expert ProcessIt IR Analyzelt IR Analyzelt Polymer IR

Fonctions de base

Données

Mixture Analysis

Profils de recherche: <pas de profil>

Paramètres de recherche

Bases de données Spectre de mélange Composants inclus Composants exclus Résumé

Méthode de recherche pour: SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)

Dérivée première de distance euclidienne Le spectre de requête est ATR Corrections optimisées Paramètres avancés...

Nombre maximal de composants: 2

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Appliquer la correction de base au spectre de requête

Modifier manuellement les plages de masque... Edition Importation...

Rechercher

Traitement spectre SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)

Analyse du spectre

NI/IM

Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Paramètres de recherche

Bases de données | Spectre de mélange | **Composants inclus** | **Composants exclus** | Résumé

Méthode de recherche pour: SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)

Dérivée première de distance euclidienne | Le spectre de requête est ATR | Corrections optimisées | Paramètres avancés...

Nombre maximal de composants: 2

— SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorp)

0.2
0.15
0.1
0.05
0

4000 3800 3600

Appliquer la correction de base au spectre de requête

Rechercher

SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)

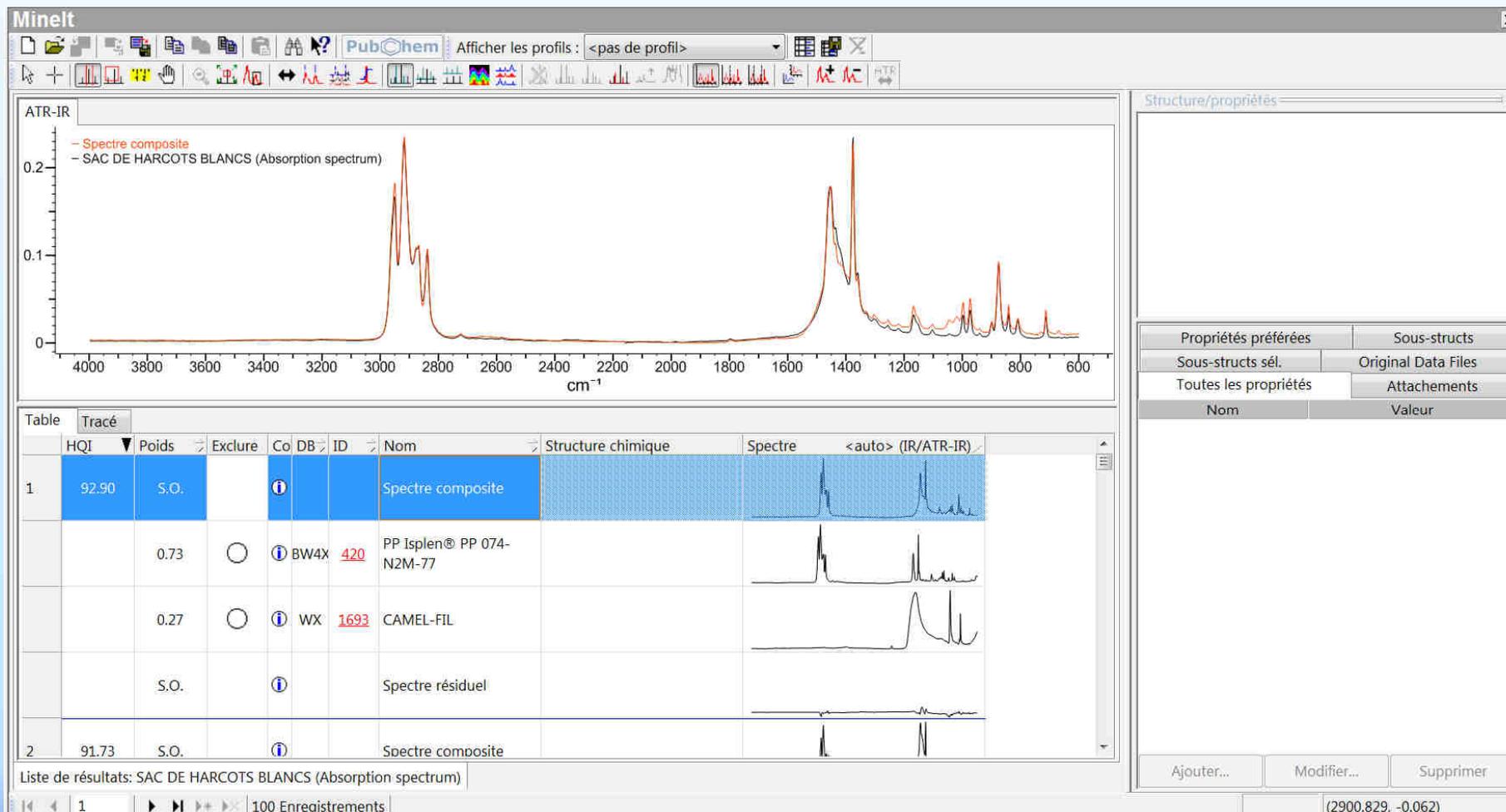
NIIM

Ici il y a des fonctionnalités:

- Le nombre de composants attendus
- La possibilité d'inclure un spectre dont on connaît l'identification (spectre d'un solvant, produit connu comme présent...)
- La possibilité d'exclure des composants

Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Affichage des Résultats – Spectre Composite



Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Affichage des Résultats – Spectres des produits identifiés

Minelt

PubChem Afficher les profils : <pas de profil>

ATR-IR

— BW4X #420; PP Isplen® PP 074-N2M-77
— WX #1693; CAMEL-FIL
— SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)

Table

Table	Tracé	HQI	Poids	Exclure	Co	DB	ID	Nom	Structure chimique	Spectre
1		92.90	S.O.					Spectre composite		
			0.73	<input type="radio"/>			BW4X 420	PP Isplen® PP 074-N2M-77		
			0.27	<input type="radio"/>			WX 1693	CAMEL-FIL		
			S.O.					Spectre résiduel		
2		91.73	S.O.					Spectre composite		

Liste de résultats: SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)

3 100 Enregistrements

Structure/propriétés

Propriétés préférées		Sous-structs	
Sous-structs sél.		Original Data Files	
Toutes les propriétés		Attachements	
Nom	Valeur		
Nom	CAMEL-FIL		
Chemical Description	CALCIUM CARBONATE		
Density	(Specific Gravity)= 2.70-2.71		
Solution Data	pH= (SATURATED SOLUTION) 9.5		
Source of Sample	Genstar Stone Products Company		
Technique	ATR, NEAT		
Weight	22.57 LBS/GAL		

Ajouter... Modifier... Supprimer

Copr. © 1980, 1981-2018 Bio-Rad. All Rights Reserved. (2594.083, -0.024)

Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Affichage des Résultats – Spectres des produits identifiés

The screenshot displays the Minett software interface. At the top, there is a toolbar with various icons and a menu bar. Below the toolbar is a plot area showing ATR-IR spectra. The plot has a y-axis from 0 to 0.2 and an x-axis from 4000 to 400 cm⁻¹. Three spectra are overlaid: a green line for 'BW4X #420; PP Isplen® PP 074-N2M-77', a red line for 'WX #1693; CAMEL-FIL', and a black line for 'SAC DE HARCOTS BLANCS (Absorption spectrum)'. Below the plot is a table with columns: Table, Tracé, HQI, Poids, Exclude, Co, DB, ID, Nom, Structure chimique, and Spectre. The 'Exclude' column contains radio buttons. The row for 'PP Isplen® PP 074-N2M-77' has its 'Exclude' button selected. The row for 'CAMEL-FIL' also has its 'Exclude' button selected. To the right of the table is a 'Structure/propriétés' panel with a table of properties for 'CAMEL-FIL'. At the bottom of the interface, there is a status bar with navigation icons and the text '100 Enregistrements'.

Table	Tracé	HQI	Poids	Exclude	Co	DB	ID	Nom	Structure chimique	Spectre
1		92.90	S.O.	<input type="checkbox"/>				Spectre composite		
			0.73	<input checked="" type="checkbox"/>			BW4X 420	PP Isplen® PP 074-N2M-77		
			0.27	<input checked="" type="checkbox"/>			WX 1693	CAMEL-FIL		
			S.O.	<input type="checkbox"/>				Spectre résiduel		
2		91.73	S.O.	<input type="checkbox"/>				Spectre composite		

Propriétés préférées

Propriétés préférées	Sous-structs
Sous-structs sél.	Original Data Files
Toutes les propriétés	Attachements
Nom	Valeur
Nom	CAMEL-FIL
Chemical Description	CALCIUM CARBONATE
Density	(Specific Gravity)= 2.70-2.71
Solution Data	pH= (SATURATED SOLUTION) 9.5
Source of Sample	Genstar Stone Products Company
Technique	ATR, NEAT
Weight	22.57 LBS/GAL

Ajouter... Modifier... Supprimer

Copr. © 1980, 1981-2018 Bio-Rad. All Rights Reserved. (2594.083, -0.024)

Possibilité d'exclure un spectre qui ne convient pas et de relancer la recherche

Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Exclure des composants

Mixture Analysis

Profils de recherche : <pas de profil>

Paramètres de recherche

Bases de données | Spectre de mélange | Composants inclus | **Composants exclus** | Résumé

Composants exclus :

GNX #642; GALL CLEANSE Natural Dietary Supplement / Silibinin Complex

DW2X #2186; 5b-Pregnan-12a-bromo-3a,21-diol-11,20-dio...

GNX #315; Devil's Claw Yucca capsule

BWX #41; Polyethylene, chlorosulfonate (Cl 43% by wt)

Appliquer la correction de ligne de base

Le spectre est ATR

Exclure les composés qui sont similaires dans une limite de : %

Interrompre

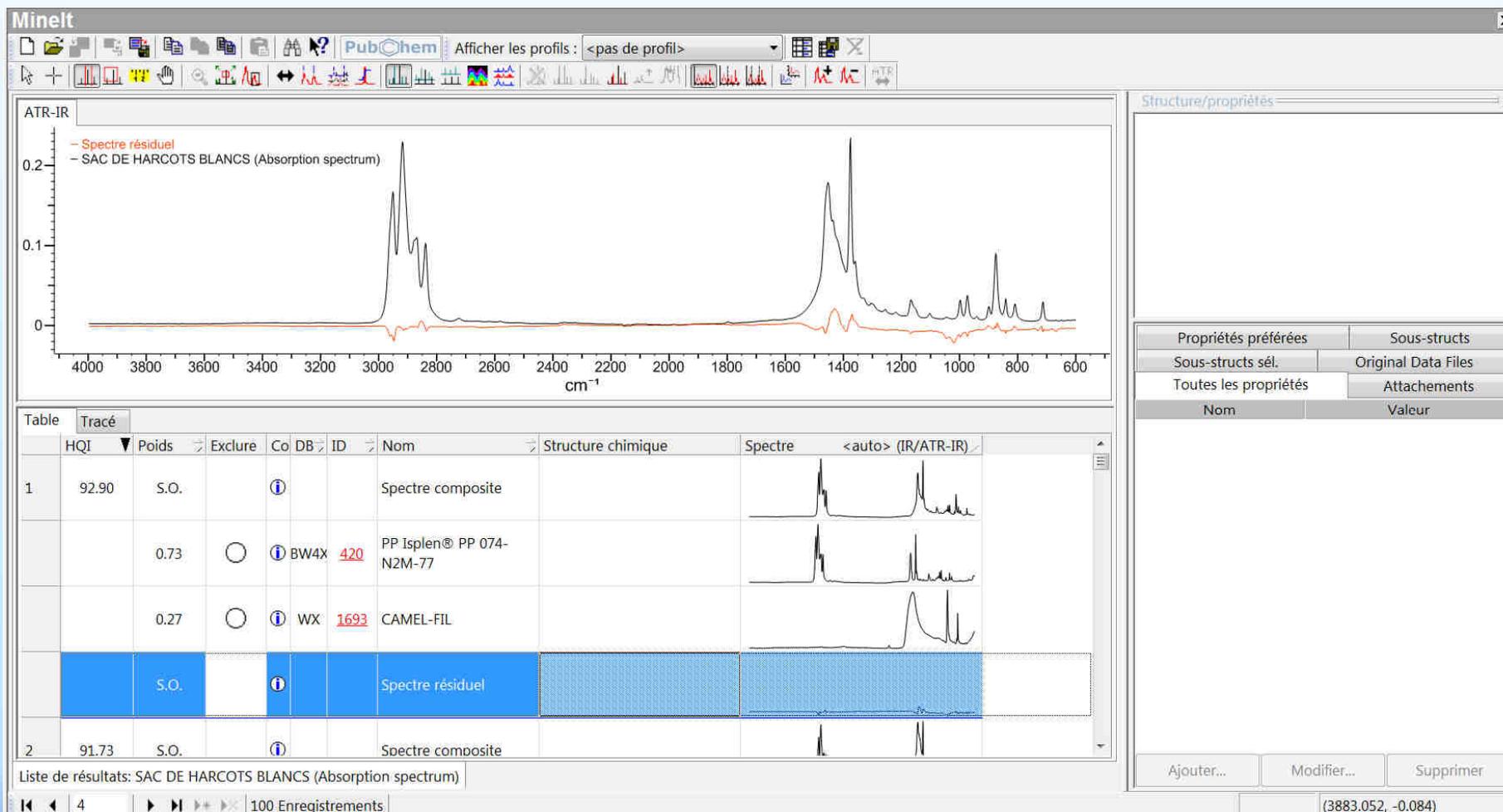
Rechercher

AX18-06599.001 (Absorption spectrum)

NI/IM

Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Affichage des Résultats – Spectre Résiduel

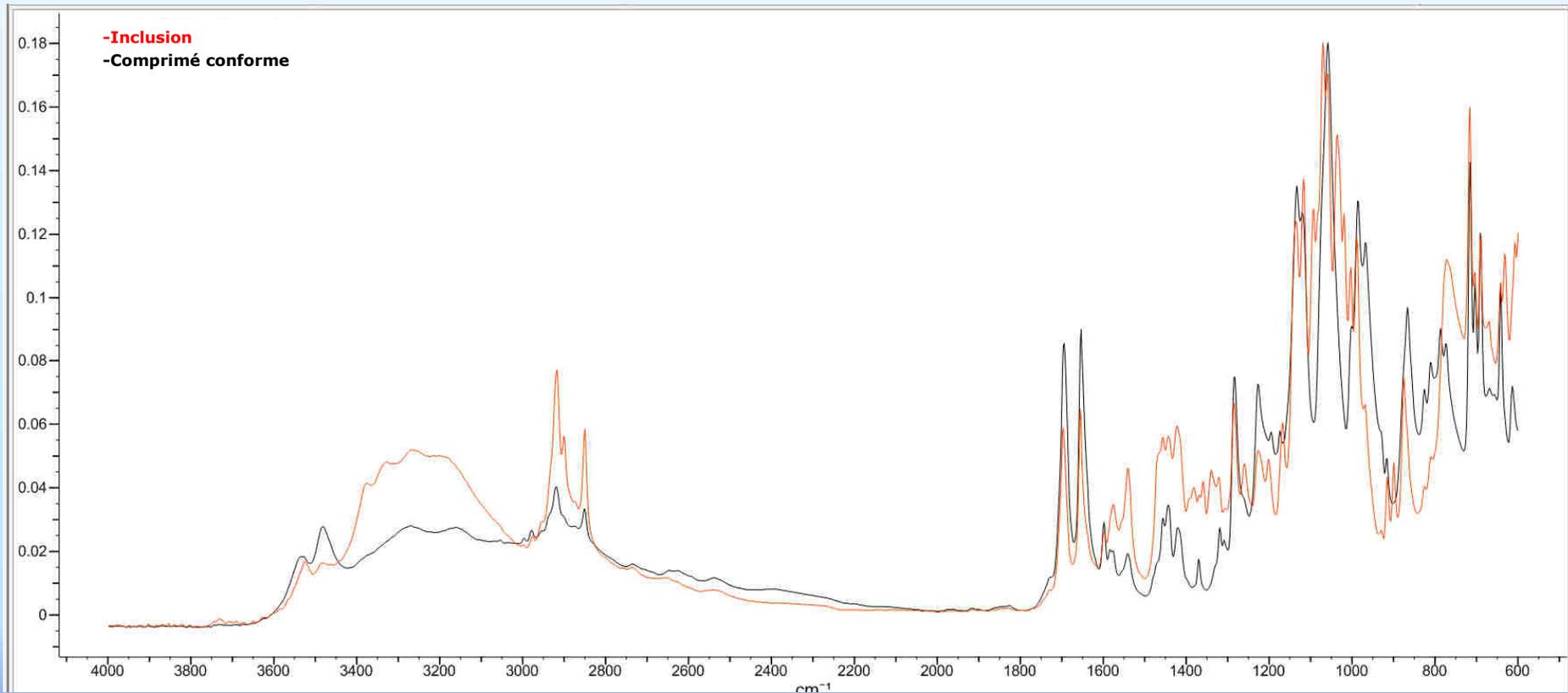


Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Analyse d'un comprimé Pharmaceutique non conforme

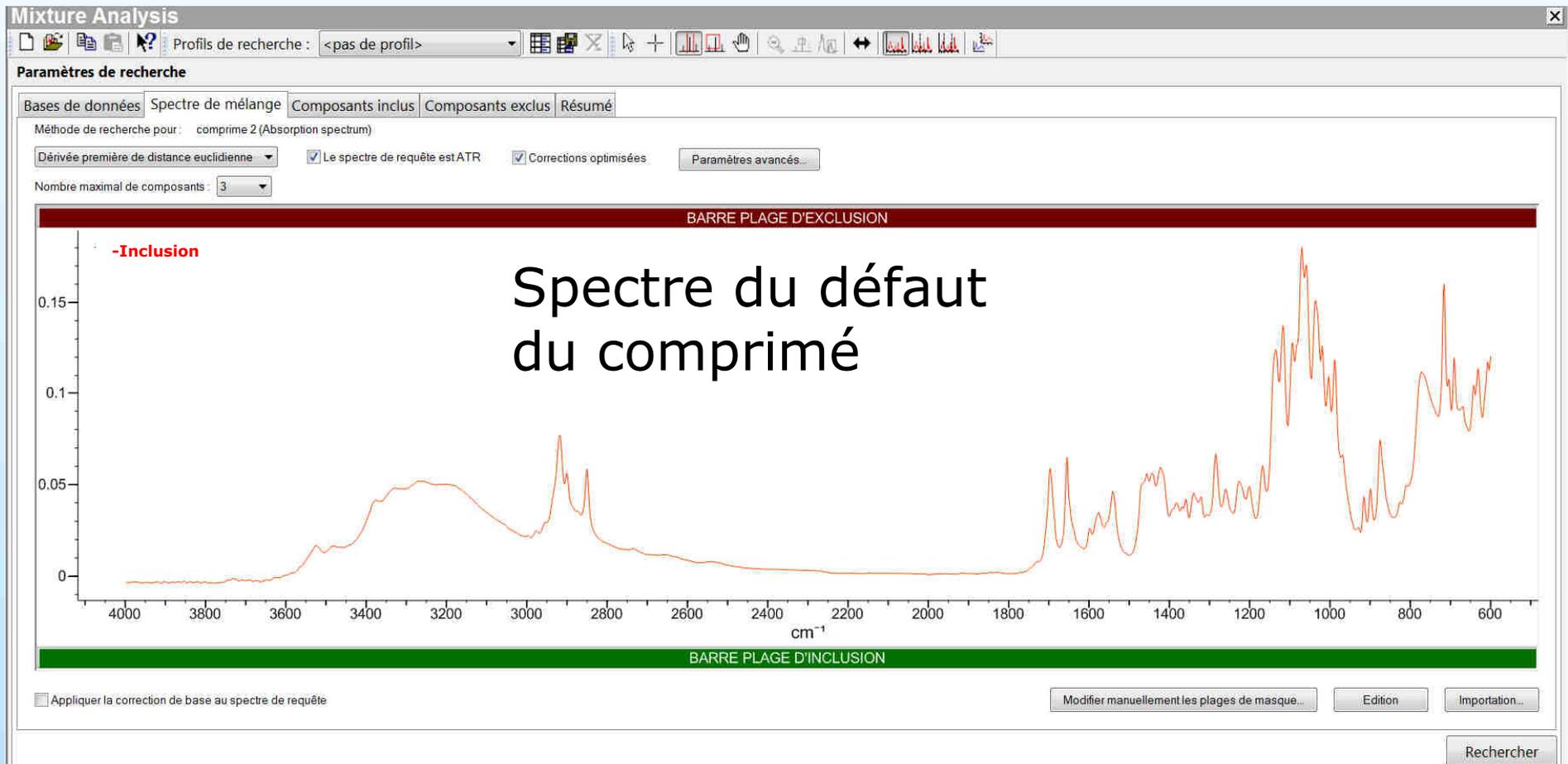
Défaut visuel sur un comprimé: inclusion d'une particule de couleur différente dans la pastille.

=> Analyse de la particule par microscopie IR



Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Analyse d'un comprimé non conforme



Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Analyse d'un comprimé non conforme

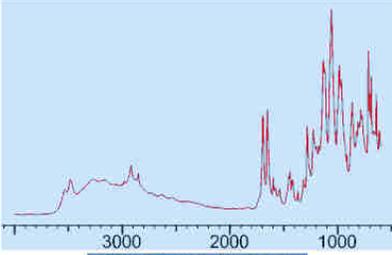
Mixture Analysis

Profils de recherche : <pas de profil>

Paramètres de recherche

Bases de données | Spectre de mélange | Composants inclus | Composants exclus | Résumé

Composants inclus :



Ajouter...
Supprimer

On ajoute la référence
comme produit inclus qui
sera utilisé par l'algorithme
et considéré comme présent

Appliquer la correction de ligne de base

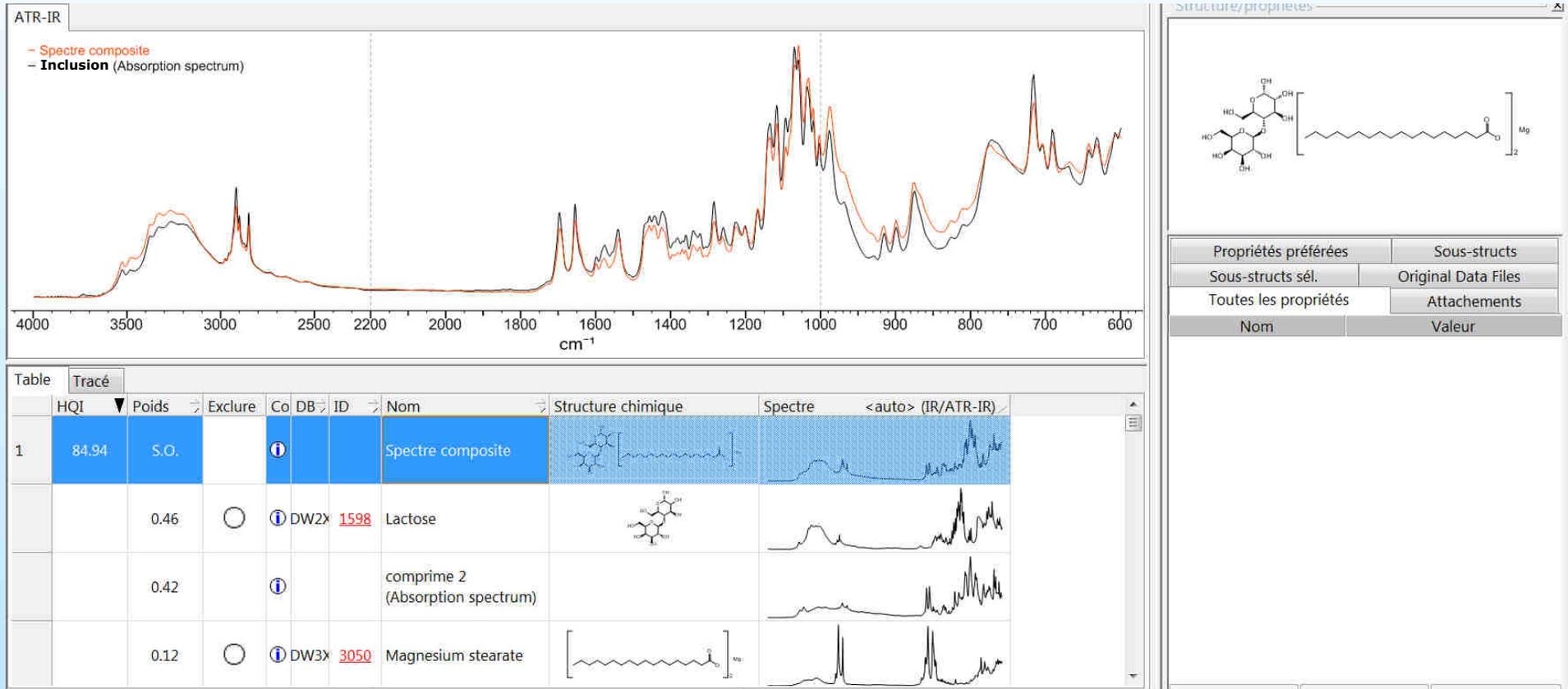
Le spectre est ATR

Taille de l'image :

Rechercher

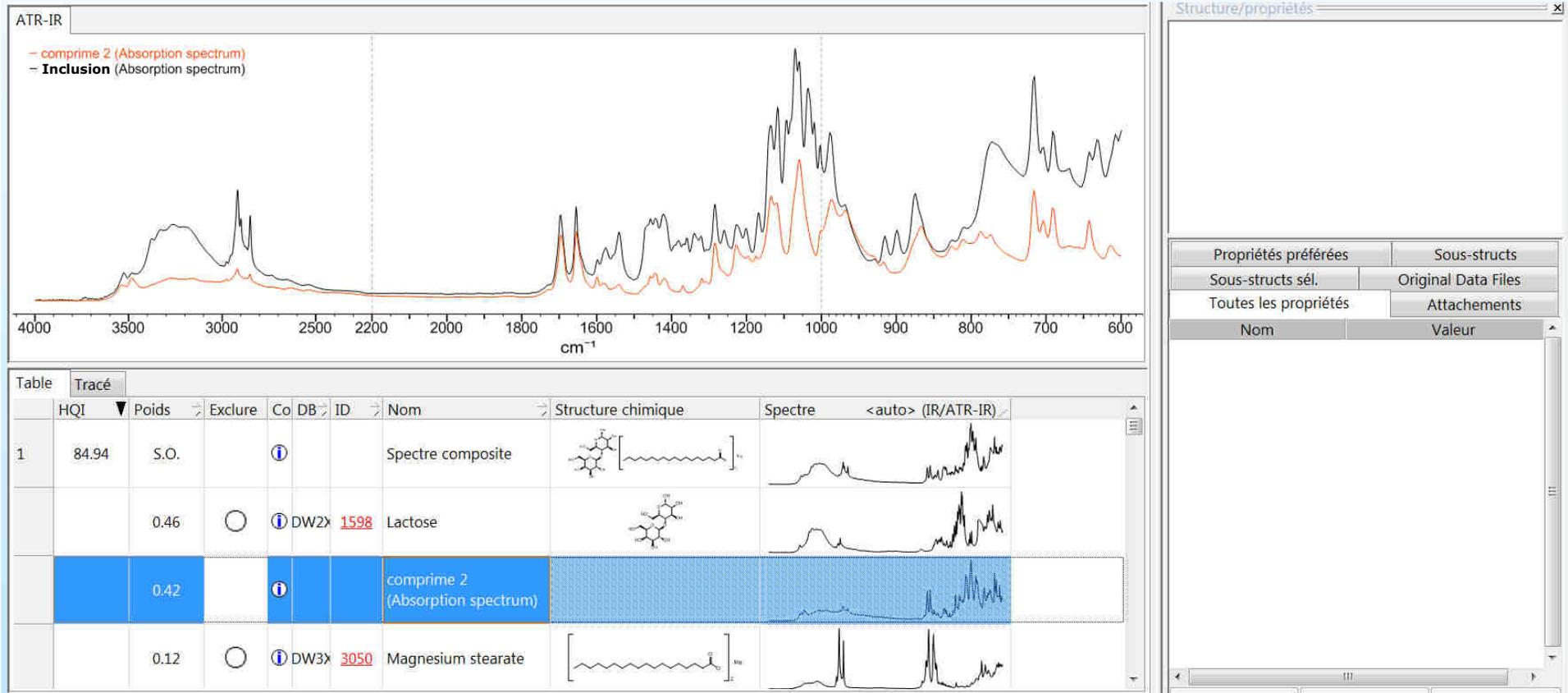
Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Spectre Composite sur 3 composés



Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

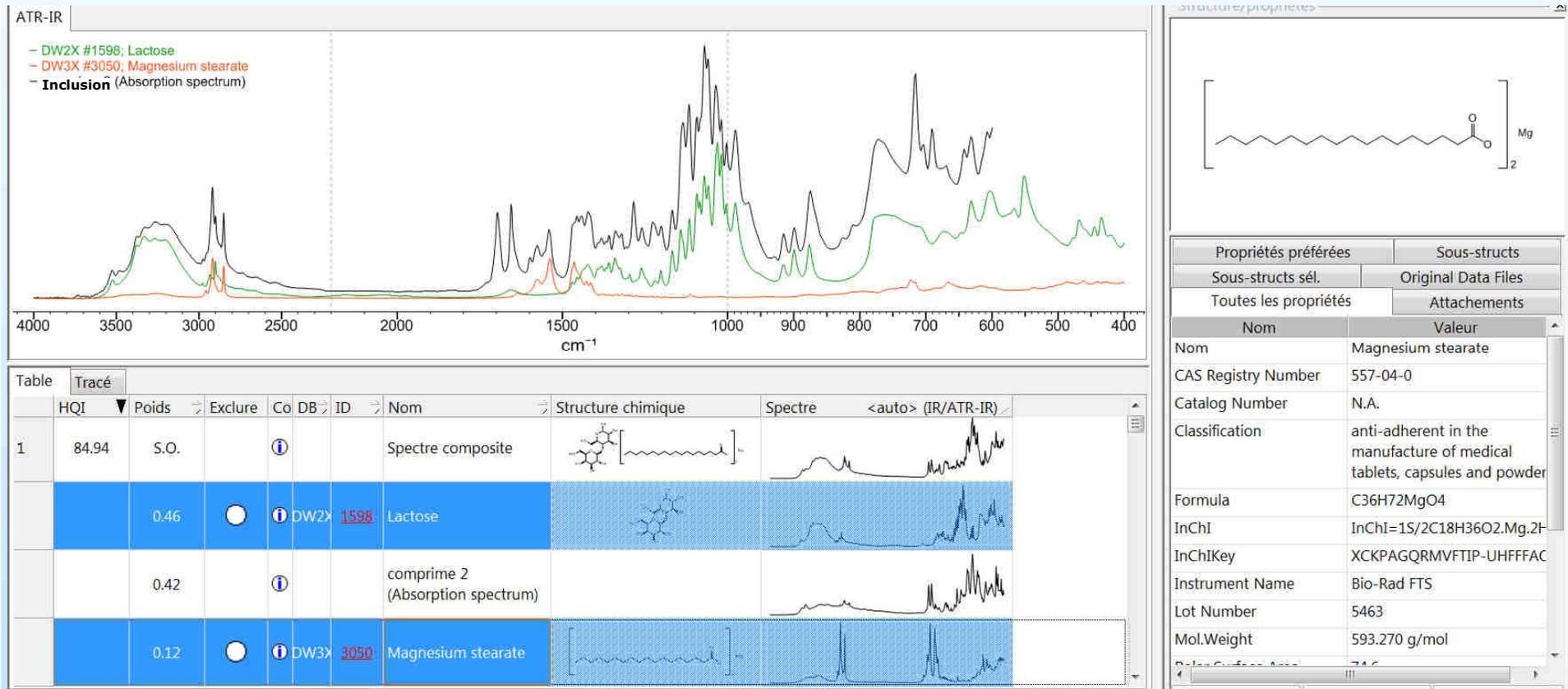
Spectre Comprimé Conforme



Identification IR avec KnowItAll® Mixture Analysis

Spectre Composé 1 Lactose

Spectre Composé 3 Stéarate de Mg



=> Le défaut est une particule de:
Lactose - Mg Stéarate en excès

IDENTIFICATION INFRAROUGE

- Rappels sur la Spectrométrie IR
- Méthodes d'analyse
- Le concept KnowItAll
- Identification avec ID Expert et Deformulation Expert
- Identification avec KnowItAll SearchIt
- Identification avec KnowItAll Mixture Analysis
- **Exemples d'identifications**
- Conclusion

Identification IR avec ID Expert

Exemples de produit à 1 "Composé"

Huile végétale

ID Expert

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

— HAX #448: OLEIC ACID-DIETHANOLAMIDE; DIETHANOLAMIDE OLEYL
 — 412895 (Transmittance spectrum, Manipulated) (ATR corrigé)

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	● (i)	<input type="checkbox"/>
Bruit	● (i)	<input type="checkbox"/>
Contaminants	● (i)	
Technique	● (i)	ATR-IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Ligne de base du spectre de requête, Ligne de base du spectre de référence, Décalage horizontal, Décalage horizontal dépendant de l'intensité, Ajustement de la correction ATR du spectre de requête, Polarisation de correction ATR

Fermé, Distorsion d'intensité, Ecrêtage vertical, Décalage vertical

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 91.0%

Résultats pour 2 composants:
Cliquer pour continuer à chercher

Résultats des pics:
Correspondances non trouvées

Groupes fonctionnels:
10 groupes fonctionnels trouvés

Résultats pour 1 composant

Score	Info	Cor	Nom	Spectre	Structure chimique
91.03	(i)	(i)	OLEIC ACID-DIETHANOLAMIDE; DIETHANOLAMIDE OLEYL		
90.98	(i)	(i)	INCROMIDE ALD		
90.88	(i)	(i)	REWOMID DO 280/SE		
90.66	(i)	(i)	STANDAMID KDO		
90.53	(i)	(i)	CARSAMIDE T		
90.44	(i)	(i)	INCROMIDE LLA		

Identification IR avec ID Expert

Exemples de produit à 1 "Composé"

Produit Pharmaceutique à identifier

ID Expert
✕

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✔	i
Bruit	✔	i
Contaminants	✔	i
Technique	✔	i

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Ligne de base du spectre de requête,
Distorsion d'intensité

Nouvelle recherche

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 96.4%

Résultats pour 2 composants:
Cliquer pour continuer à chercher

Créer un rapport

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant		Résultats des pics	Groupes fonctionnels
Score	Info	Nom	Structure chimique
96.39	i	Methyl 4-hydroxybenzoate	<chem>CC(=O)Oc1ccc(O)cc1</chem>
61.32	i	MEDIATRIC LIQUID	
60.25	i	2-ETHYLHEXYL-p-OXYBENZOATE	<chem>CCCCC(CC)C(=O)Oc1ccc(O)cc1</chem>

Identification IR avec ID Expert

Exemples de produit à 1 "Composé"

Produit Pharmaceutique à identifier

ID Expert
✕

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✔	ℹ
Bruit	✔	ℹ
Contaminants	✔	ℹ
Technique	✔	ℹ ATR-IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Ligne de base du spectre de référence ℹ

Nouvelle recherche

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 87.1%

Résultats pour 2 composants:
Cliquer pour continuer à chercher

Créer un rapport

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant		Résultats des pics	Groupes fonctionnels	
Score	Info	Nom	Structure chimique	
1	87.13	ℹ	Lactose	
2	86.30	ℹ	Ginko 60mg tablet	
3	83.29	ℹ	Papain	
4	76.07	ℹ	Nitrofurantoin	
			ISOSORBIDE	

Identification IR avec ID Expert

Exemples de produit à 2 "Composés"

Film Plastique 3 Identification à deux produits

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	ⓘ
Bruit	✓	ⓘ
Contaminants	✓	ⓘ
Technique	✓	ⓘ ATR-IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Décalage vertical ⓘ

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 64.7%

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 77.3%

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant

Résultats pour 2 composants

Résultats des pics

Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
77.28		S.O.	Spectre composite	<chem>[*]C(=O)O[*]</chem>	
	ⓘ	0.51	POLYESTER*THERMOPLASTIC, 20% GLASS REINFORCED		
	ⓘ	0.49	Poly(vinyl chloride) carboxylated 1.8%	<chem>[*]C(=O)O[*]</chem>	
		S.O.	Spectre résiduel		

Identification IR avec Déformulation Expert

Exemples de produit à 2 "Composés"

Film Plastique à déformuler

Deformulation Expert

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✔	ⓘ
Bruit	✔	ⓘ
Contaminants	✔	ⓘ
Technique	✔	ⓘ ATR-IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Distorsion d'intensité, Décalage vertical ⓘ

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 74.3%

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 81.2%

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Résultats pour 1 composant **Résultats pour 2 composants** **Résultats des pics**

Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
81.21		S.O.	Spectre composite	<chem>[*]C(=O)c1ccc(cc1)C(=O)O[*]</chem>	
	ⓘ	0.61	Poly(ethylene terephthalate)	<chem>[*]C(=O)c1ccc(cc1)C(=O)O[*]</chem>	
	ⓘ	0.39	Polyethylene, chlorinated (Cl 42% by wt.)	<chem>[*]C(Cl)CCl[*]</chem>	
		S.O.	Spectre résiduel		

Identification IR avec ID Expert

Exemple de produit à 3 "Composés"

Cube Allume Feu "Naturel"

ID Expert

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

— GX #1216; HYDROFOL ACID 565
— AX18-06599.001 (Absorption spectrum)

BARRE PLAGE D'INCLUSION

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	ⓘ
Bruit	✓	ⓘ
Contaminants	✓	ⓘ
Technique	✓	ⓘ ATR-IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Ligne de base du spectre de requête,
Distorsion d'intensité, Décalage horizontal ⓘ

Nouvelle recherche

Statut de la recherche

Résultats pour 4 composants:
Cliquer pour continuer à chercher

Résultats des pics:

Créer un rapport

Résultats pour 2 composants | Résultats pour 3 composants | Résultats des pics | Groupes fonctionn...

	Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
3	82.47		S.O.	Spectre composite		
		ⓘ	0.46	HYDROFOL ACID 565		
		ⓘ	0.37	Cellulose (20 micron)		
		ⓘ	0.17	LIGNOSITE 704		

Identification IR avec ID Expert

Exemple de produit à 3 "Composés"

Cube Allume Feu "Naturel"

ID Expert

BARRE PLAGES D'EXCLUSION

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	<input checked="" type="checkbox"/>
Bruit	✓	<input type="checkbox"/>
Contaminants	✓	<input type="checkbox"/>
Technique	✓	ATR-IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Ligne de base du spectre de requête, Distorsion d'intensité, Décalage horizontal

Statut de la recherche

Résultats pour 4 composants:
Cliquer pour continuer à chercher

Résultats des pics:

Propriétés de l'enregistrement

Nom	Valeur
Abréviation de base de données	GX
Titre de la base de données	IR - Fats, Waxes & Derivatives - Bio-Rad Sadtler
ID d'enregistrement	1216
Nom	HYDROFOL ACID 565
Chemical Description	ERUCIC ACID, 80%
Saponification Number	164-171
Solution Data	Acid Number= 163-170
Source of Sample	Archer Daniels Midland Company
Technique	MELT (LIQUID PHASE)
Values	Iodine Value= 78-85

Points des pics

Groupes fonction	Spectre
<auto> (IR/ATR-IR)	
HYDROFOL ACID 565	
Cellulose (20 micron)	
LIGNOSITE 704	

Identification IR avec Deformulation Expert

Exemple de produit à 3 "Composés"

Poudre Blanche

Deformulation Expert

Statut de la requête

Contrôles	Statut	Correction ?
Ligne de base	✓	ⓘ
Bruit	✓	ⓘ
Contaminants	✓	ⓘ
Technique	✓	ⓘ ATR-IR

Seuil de sélection de pic:

Corrections optimisées

Ligne de base du spectre de requête, Distorsion d'intensité ⓘ

Statut de la recherche

Résultats pour 1 composant:
Meilleur résultat: 62.3%

Résultats pour 2 composants:
Meilleur résultat: 87.3%

BARRE PLAGE D'EXCLUSION

BARRE PLAGE D'INCLUSION

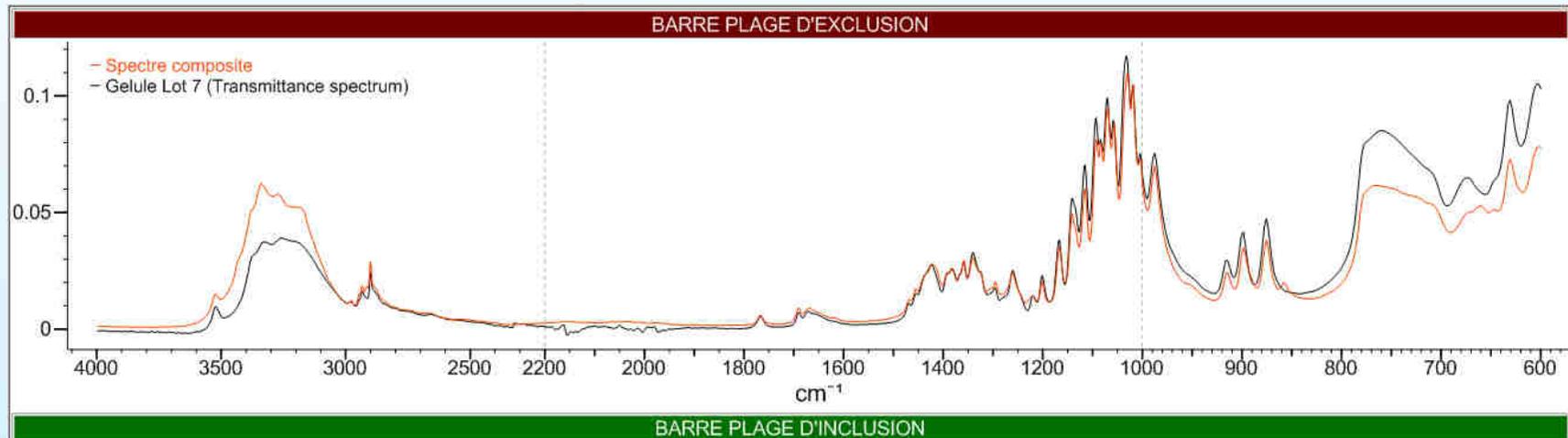
Résultats pour 1 composant | **Résultats pour 2 composants** | **Résultats pour 3 composants** | **Résultat:**

Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre
84.97		S.O.	Spectre composite		
	ⓘ	0.48	Cocaine hydrochloride		
	ⓘ	0.40	4-Acetamidophenol		
	ⓘ	0.12	Caffeine		

Identification IR avec Deformulation Expert

Exemple de produit à 4 "Composés"

Saisie d'une Gélule de Spirolactone



Résultats pour 2 composants		Résultats pour 3 composants		Résultats pour 4 composants		Résu
Score	Info	Poids	Nom	Structure chimique	Spectre	< auto > (IR/ATR-IR)
1	89.76	S.O.	Spectre composite			
		0.62	Lactose			
		0.14	L-INOSITOL			
		0.13	3-CARBAMOYL-1-METHYLPYRIDINIUM CHLORIDE			
		0.11	Spirolactone			

IDENTIFICATION INFRAROUGE

- Rappels sur la Spectrométrie IR
- Méthodes d'analyse
- Le concept KnowItAll
- Identification avec ID Expert et Deformulation Expert
- Identification avec KnowItAll SearchIt
- Identification avec KnowItAll Mixture Analysis
- Exemples d'identifications
- **Conclusion**

IDENTIFICATION INFRAROUGE

Fonctionnement des Bases de Données

KnowItAll offre la possibilité d'utiliser les bases de données de différentes manière:

- ❖ L'accès à l'ensemble des bases de données avec un abonnement annuel
- ❖ La fourniture permanente d'une base de donnée spécifique
- ❖ La création et l'utilisation de bases de données client

Vous pouvez également tester toutes les fonctionnalités et bases de données avec une licence d'essais de 15 jours

IDENTIFICATION INFRAROUGE

Conclusion

- ❖ KnowItAll est la plateforme qui utilise la plus large base de données avec + de 260000 spectres
- ❖ L'algorithme breveté est très rapide et efficace
- ❖ KnowItAll offre une grande flexibilité:
 - Analyse de produits purs
 - Analyse de mélanges semi-automatique ou automatique
 - Déformulation
 - Combinaison de différentes informations pour l'identification
- ❖ Utilisation directe des données brutes de tous les constructeurs
- ❖ LEA est le représentant pour la France de BIORAD et nous dispensons des formation pour le logiciel