

## Manipulation Des Spectrophotomètres Infrarouges Perkin Elmer Et Bomem



### A: Acquisition des données:

**A1-** Utilisez les cellules "A", "B", "C" (étiquette collé sur la cellule), les disques de ZnSe, (séléniure de zinc) ou des disques de NaCl.

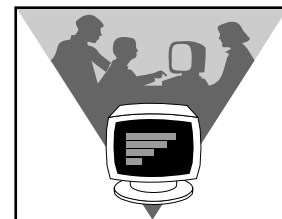
**A2-** Préparez votre cellule méticuleusement et selon la technique prescrite.

**A3-** Insérez votre cellule dans le spectrophotomètre infrarouge Perkin Elmer ou Bomem.



**IMPORTANT:** Ne touchez pas au clavier du spectrophotomètre infrarouge Perkin Elmer.

**A4-** Au clavier de l'ordinateur, tenez la touche "Alt" enfoncée et appuyez sur la touche "S" (spectre) si vous utilisez le spectrophotomètre infrarouge Perkin Elmer ou "Alt" "K" pour le spectrophotomètre infrarouge Bomem. Dans ce dernier cas, il y aura dix fois plus d'acquisition.



**A5-** En se faisant, vous démarrez un programme qui vous demandera les trois (3) questions suivantes: ↻



**N.B.:** Selon que vous utilisez le spectrophotomètre "BOMEM" ou "PERKIN ELMER", les questions II et III sont inversées.

#### I-Enter Method File Name:

⌵ Si vous avez la cellule "A", "B", "C", déplacez, à l'aide des curseurs,



la partie illuminée



sur la lettre correspondante, et appuyez sur "Enter".

ii- Si vous utilisez des disques de ZnSe (sélénure de zinc) ou de NaCl, indiquez "AIR".



II-Memo: Identifiez votre produit à l'aide du clavier. Ex. : " Acide benzoïque"

III-Enter Collect File Name: Votre spectre est enregistré sous forme de fichier sur le réseau informatique; vous inscrivez ici le nom de ce fichier  
.....en appliquant les règles de tenue de laboratoire présentées  
.....dans les notes de cours CHM-302  
.....**XY = Initiales**  
.....**PP = Numéro de page du cahier**  
.....**wz = Numéro du produit**

**XY-PP-WZ**



**IMPORTANT** : Le nom du fichier doit, **prioritairement**, comporter un maximum de **huit (8)** lettres et/ou chiffres sans espace ni autres symboles ou caractères que celui présenté ci haut.



**IMPORTANT**: Si vous utilisez le spectrophotomètre "BOMEM" le "Collect File Name" débute par "G:\ ". **N'EFFACEZ RIEN.**

A6- Le programme terminera l'acquisition de données et vous avertira que:

**Votre spectre est sauvé dans le lecteur réseau « données »  
sous ↻:\Lab3014-IR**

A7- Retirez votre cellule, lavez-la et serrez-la dans le dessiccateur prévu à cet effet.

## **B: Traitement du spectre**



B1- Copiez votre spectre sur votre **clef USB**



**IMPORTANT**: Ne faites aucune correction de votre spectre directement à partir du réseau.

## B2- Corrections (seulement si nécessaire) ↻



**I-** Si votre spectre présente trop de bruit de fond, procédez comme suit ↻



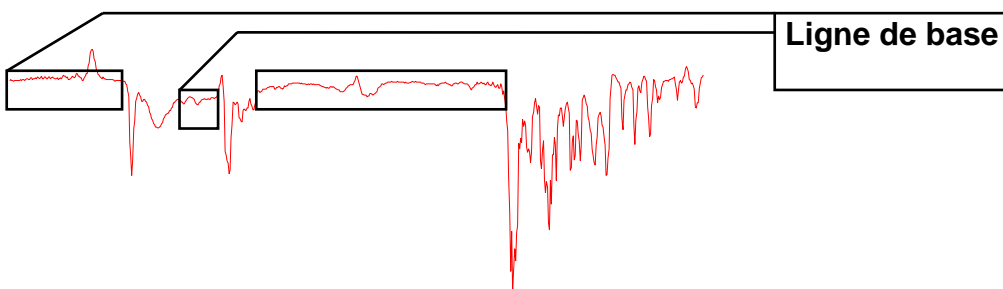
- i- Sélectionnez au haut de l'écran le bouton "Applications", puis, "Smoothing". Alors, vous voyez à l'écran deux spectres. Celui du bas est votre spectre initial et celui du haut est votre spectre altéré par la fonction "Smoothing".
- ii- Dans le tableau de droite, sélectionnez "Sav-Golay".
- iii- Vous pouvez réduire le bruit de fond sur l'ensemble du spectre en sélectionnant le bouton "All" ou sur une partie du spectre en entrant, à l'aide du clavier, les limites en  $\text{Cm}^{-1}$  dans les fenêtres "Left Limit" et "Right Limit"; sélectionnez la touche "Apply". Vous pouvez également poser ces limites manuellement en déplaçant les lignes bleues du spectre supérieur. Pour s'y faire, ↻
  - a- Positionnez le pointeur sur une de ces lignes;
  - b- Tenez le bouton gauche de la souris enfoncé et, en déplaçant la souris, placez cette ligne à l'endroit choisi.
  - c- Faites de même pour la deuxième limite.
- iv- Positionnez le pointeur sur la flèche supérieure de la fenêtre "Point". Tenez le bouton gauche de la souris enfoncé tout en surveillant le niveau de bruit de fond du spectre supérieur. Lorsque le résultat est satisfaisant, relâchez le bouton. Si vous l'avez trop diminué, refaites la même opération avec la flèche inférieure de la fenêtre "Point".
- v- Quand le résultat est définitif, sélectionnez le bouton "OK" puis sélectionnez "Replace".
- vi- Pour chaque région où vous désirez réduire le bruit de fond, refaites les étapes de "B2".

**ii-** Si votre spectre présente une ligne de base trop déformée, procédez comme suit ➔

**i-** Sélectionnez au haut de l'écran le bouton "Application", puis, "Baseline correction". Alors, vous voyez à l'écran deux spectres. Celui du bas est votre spectre initial et celui du haut est votre spectre altéré par la fonction "Baseline".



**N.B.:** La ligne de base est l'ensemble des segments qui réunissent toutes les bases des pics. **Plus ces segments sont rectilignes, plus l'interprétation de votre spectre sera simplifiée.**

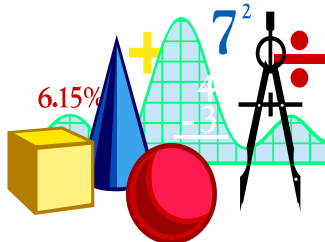


- ii-** Dans le tableau de droite, sélectionnez "Multiple-Point" de même que "(Force points onto data) Yes"
- iii-** Dans le spectre inférieur, vous voyez quatre points fixés automatiquement par le logiciel; ils peuvent être déplacés, mais non enlevés. Pour s'y faire: ➔
- a-** Positionnez le pointeur sur un point.
  - b-** Tenez le bouton gauche de la souris enfoncé.
  - c-** Déplacez le point de haut en bas ou de gauche à droite.
- iv-** Vous pouvez, afin d'améliorer la rectitude de la ligne de base, ajouter et enlever d'autres points. Pour s'y faire: ➔
- a-** Pour ajouter un point, positionnez le pointeur à un endroit où la ligne de base doit être corrigée et appuyez sur le bouton droit de la souris. Ajoutez autant de points qu'il le faut afin d'améliorer la rectitude de votre spectre.
  - b-** Pour enlever un point, positionnez le pointeur sur ce point et appuyez deux fois sur le bouton gauche de la souris.



N.B.: Dans la région des empreintes digitales, "Fingers print" ( $1600 \text{ CM}^{-1}$  à  $800 \text{ CM}^{-1}$ ), la ligne de base est pratiquement inexistante en raison d'une trop forte absorbance. Ne la corrigez qu'avec deux points, l'un au début et l'autre à la fin de cette région.

v- Quand le résultat est définitif, sélectionnez le bouton "OK" puis sélectionnez "Replace".



### B3- Annotation des pics. ↻

I- Il n'est pas souhaitable que tous les pics soient annotés. Les plus importants en transmittance sont suffisants.

II- Sélectionnez, dans le menu "Edit" "Peak Picking" ou l'icône  ↻

i- Le nombre indiqué dans la fenêtre "Peak height Treshold" signifie que tous les pics dont la hauteur est égale ou inférieure à ce dernier, NE SERONT PAS RETENUS dans la table de pics.

ii- Vous pouvez faire varier ce nombre en le changeant à l'aide du clavier, ou en positionnant le pointeur sur le bouton "+" ou "-"; appuyez alors sur le bouton gauche de la souris.

La hauteur minimum (Treshold) des pics à inclure à la table de pics augmentera ou diminuera selon le cas. Si la case "Fine" est sélectionnée, le treshold s'incrémentera au centième d'unité, ou au dixième, si la case "Coarse" a été sélectionnée. Le bouton glisseur fera varier le treshold par unité si la case "Fine" est sélectionnée ou par dizaine si "Coarse" est sélectionnée.

iii- Ignorez la fenêtre "Peak Separation".

III- La fenêtre "Smoothing point" enlève du bruit de fond seulement pour fin de calcul, et non sur le spectre. Si, en ajustant le (Treshold), vous constatez que des annotations de pics sont dus à du bruit de fond, augmentez le nombre dans la fenêtre "Smoothing point"

IV- Lorsque votre table de pics est satisfaisante, appuyez sur "OK".

### B4- Positionnement du spectre. ↻

I- Positionnez le pointeur sous la ligne de base.

II- Appuyez deux fois sur le bouton gauche de la souris. Le curseur en ordonné est alors superposé à la ligne de base.

III- Amener le pointeur lentement dans le haut de la fenêtre du spectre. Il prend la forme d'un triangle.

IV- Appuyez sur le bouton gauche de la souris et amenez la ligne de base le plus près du haut de la fenêtre sans toute fois la faire disparaître. NE tenez PAS compte des pics au dessus de celle-ci.

V- Si vos pics n'occupent pas tout l'espace de la fenêtre en ordonné ou s'ils excèdent la fenêtre, modifiez leur dimension comme suit : ➔

i- Vérifiez que le bouton marqué d'un "Y" soit activé; ( sa couleur sera plus pâle.) S'il ne l'est pas, sélectionnez-le. La contraction ou l'expansion de votre spectre se fera alors en ordonné.

ii- Positionnez le pointeur sur le bouton "+" ou "-" respectivement selon que vous dilatiez ou que vous contractiez votre spectre et appuyez sur le bouton gauche de la souris. Si la vitesse est trop rapide, manipulez, à l'aide du pointeur, le bouton glisseur situé entre les boutons "+" et "-". Il faut toujours apercevoir la ligne de base et le sommet des pics.



B5- Imprimez votre spectre comme suit. ➔

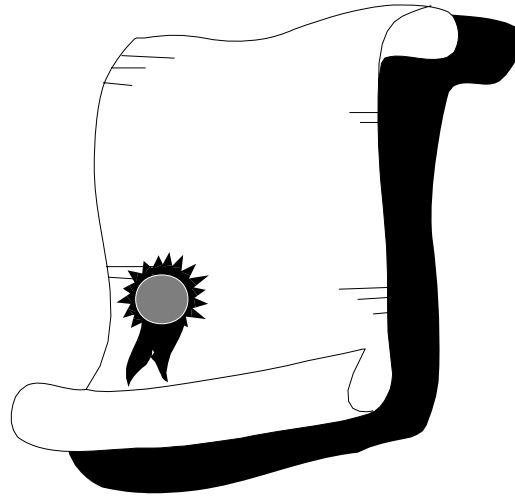
I- Sélectionnez le bouton représentant une imprimante ➔ .

II- Sélectionnez le bouton "Setup".

III- Sélectionnez la case "Paysage".

IV- Sélectionnez "OK".

BRAVO, VOUS OBTENEZ VOTRE DIPLÔME!!!



NOTE: Si, lors d'un party, alors que vous avez exagéré sur la chose, vous perdez ce document, vous pourrez le retrouver dans notre réseau informatique de la façon suivante ➔

Procédez comme suit ➔

I- Exécutez l'icône "Logiciels" ➔



II- Exécutez l'icône "Infrarouge" ➔



III- Exécutez "Spectre" ➔



Imprimez le fichier "Spectre". ➔

