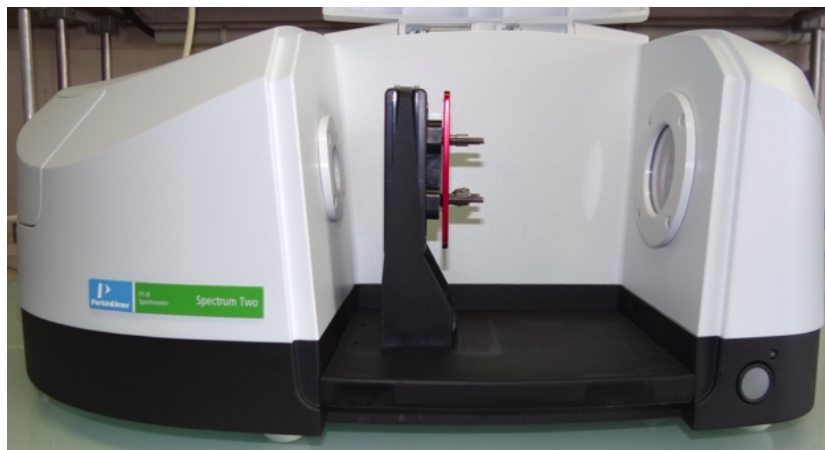



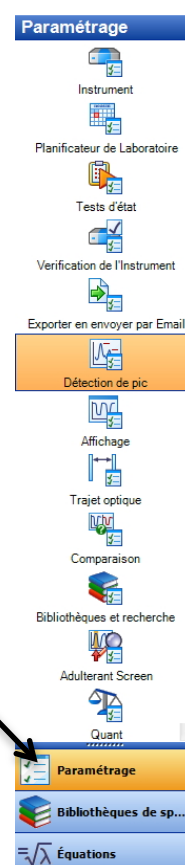
MODE D'EMPLOI DE BASE DU SPECTRUM TWO




Acquisition d'un spectre :


- Cliquer sur l'icône « **spectrum** » du bureau, puis sur OK.
- Cliquer sur Surveiller  pour noter l'énergie de l'appareil dans le CL.

Cliquer dans Paramétrage





Cliquer alors dans la colonne de droite sur Instrument . En bas au centre de la fenêtre qui s'ouvre, entrer les paramètres désirés : *gamme de nombre d'onde, résolution et accumulations* (C'est-à-dire nombre de scans).


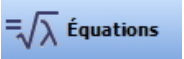
- En haut à gauche de la fenêtre,

Nom d'échantillon	Description
Administrator 02	Échantill 

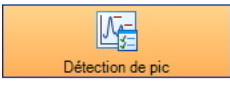

 entrer le *nom de l'échantillon* à analyser et sa *description* si nécessaire.

- Dans la partie basse de la fenêtre,
 - Dans l'onglet « paramétrage-acquisition des données », entrer si nécessaire le chemin d'accès vers le dossier dans lequel sera stocké le spectre.
 - Dans l'onglet « paramétrage-opérations de base », vérifier le mode d'affichage (abscisse, ordonnée) du spectre.
- Faire le background (sans échantillon !) en cliquant sur l'icône « background » 
- Placer l'échantillon puis cliquer sur l'icône « Analyse » 
- **Correction de ligne de base :** Cliquer sur : Traitement → Correction de ligne de base interactive.
- Pour imprimer, faire un clic droit directement sur le spectre.

Obtention du rapport S/N :

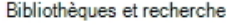

- Dans la colonne de Paramétrage, cliquer dans Vérification de l'Instrument  : cocher Bruit dans l'onglet *Paramétrer Test IPV*.
- Remarque : on peut aussi calculer, à l'aide du calculateur spectral, le rapport S/N selon l'équation suivante : $100/(y_{\max}(\text{All}; \text{nombre d'onde max}; \text{nombre d'onde min}) - y_{\min}(\text{All}; \text{nombre d'onde max}; \text{nombre d'onde min}))$
- Dans équation : cliquer sur Ajouter Nouvelle Equation...
- L'équation est dès lors disponible dans le sous-menu Equation du menu Traitement.
- On demande ensuite le résultat (après acquisition d'un spectre) en cliquant sur l'icône "équation" 

Obtention de la position des pics :

- Dans Paramétrage, cliquer sur Pics , et sur détection de pic . On peut modifier les nombre de pics visibles.
- Imprimer en format portrait.

Création d'une bibliothèque de spectres et Recherche :



- Dans Paramétrage, cliquer dans *Bibliothèques et recherche* .
Dans l'onglet *paramétrage des bibliothèques de spectres*, ajouter *dossier des bibliothèques* (à placer dans le dossier pel-data/libs), faire un clic droit sur libs → nouveau → dossier. Il apparaît alors une nouvelle bibliothèque intitulée *bibliothèque 1*. Changer le nom de la bibliothèque en double cliquant dans le champ *Nom* correspondant (à chercher dans toutes les autres bibliothèques, en bas au centre de l'écran).
ATTENTION : si votre bibliothèque est déjà remplie, il faut la vider en cliquant sur « Administrer », puis sélectionner les lignes et les supprimer.
- Pour, plus tard, pouvoir comparer un spectre à la bibliothèque de spectres réalisée, il faut cocher *inclure votre bibliothèque*. (La comparaison se fait uniquement avec les bibliothèques "inclues")
- Sélectionner la bibliothèque → icône *Détail* : il suffit alors de glisser-déposer vos spectres moyens à partir de la colonne de spectres affichés sur la fenêtre de gauche.
- Il faut ensuite cliquer sur le spectre à comparer puis sur l'icône recherche .
ATTENTION : la plage de nombre d'onde utilisée doit être identique entre les spectres de la bibliothèque et le spectre à comparer.
- Pour imprimer le tableau de résultats, aller dans la barre des menus, fichier → imprimer en format portrait.

Analyse quantitative par la loi de Beer - Lambert :

- Acquérir les spectres qui serviront à la courbe d'étalonnage.
- Acquérir le (ou les) spectre(s) de(s) l'échantillon(s) à doser.
- Sur le bureau, cliquer sur l'icône « **spectrum Quant** ».
- A gauche, cliquer sur « New method » et donner un nom à la méthode à créer dans la fenêtre principale.
- Cliquer sur *étalon* puis sur l'onglet « Add étalon ». Ajouter les différents spectres étalons.
- Dans le tableau, cliquer droit sur *propriétés* et renommer en précisant le nom (C) et l'unité (mol.l⁻¹ ou % ...) de l'abscisse de la droite d'étalonnage. N'oublier pas de rentrer les valeurs de C. Attention : une seule colonne de "*propriétés*" doit apparaître !
- Entrer les valeurs des concentrations des étalons.

- Cliquer sur *algorithm*, vérifier que le choix *Beer's law* est sélectionné puis cliquer sur l'onglet « Beer's law ».
- Choisir la grandeur utilisée en ordonnée dans la courbe d'étalonnage (par double clic) :
 - **Height** : donne la valeur de l'absorbance correspondant à la hauteur d'un pic sélectionné.
 - **Max height** : donne la valeur de l'absorbance correspondant à la hauteur du plus grand pic d'une zone sélectionnée.
 - **Area** : donne la valeur de l'aire située sous un pic sélectionné.
 - **base 1 et base 2** permettent d'encadrer le pic ou la zone sélectionné.
- Dans « select spectrum for parameter display », pour chaque spectre étalon, choisir le même pic (ou la même zone) et relever la valeur (height, max height ou area) correspondante.
- Cliquer ensuite sur l'icône « calibrate », remplir ce qui est demandé.
- Cliquer sur *review* pour visualiser la courbe d'étalonnage, faire apparaître plein écran cette seule courbe avant impression.
- Cliquer sur *prediction*, puis sur « Add samples ».Charger le (ou les) spectre(s) de(s) (l')échantillon(s) à doser.
- Cliquer sur *predict* et la valeur de la concentration de(s) (l')échantillon(s) à doser apparaît.