



SCIENCES ANALYTIQUES

EXPLOITATION DES SPECTRES VIBRATIONNELS IR, NIR ET RAMAN – POUR LA CARACTÉRISATION ET LE DOSAGE DE CONSTITUANTS

OBJECTIFS

Donner aux participants les outils nécessaires aux traitements et à l'exploitation des spectres

CONTENU PÉDAGOGIQUE

RAPPEL SUR LES DONNÉES SPECTROSCOPIQUES VIBRATIONNELLES

Bases physico-chimiques des spectroscopies vibrationnelles
Analyse comparative des spectres IR, NIR et Raman
Chimimétrie

TRAITEMENT DE SIGNAL : FILTRAGE ET DÉCONVOLUTION

Principes et intérêts du filtrage de spectre
Filtrage dérivation et lissage
Bases de l'analyse de Fourier
Convolution et déconvolution
Applications analytiques :
– Amélioration de la résolution « résolution enhancement »
– Ajustement de pics – détermination de structure en IR
– Elimination de la fluorescence en spectroscopie Raman
– Optimisation d'étalonnage en proche infra – rouge

OUTILS STATISTIQUES POUR LA MODÉLISATION

Schéma général de la modélisation des spectres
Base de données – population
Prétraitements des spectres
Sélection des gammes spectrales
Gestion des hors normes

CALCUL DE DISTANCES ENTRE SPECTRES

Principes et objectifs
Mesure de distance entre spectres
Test d'appartenance et identification spectrale
Comparaison des différentes méthodes
Applications à l'identification de matières premières en Proche infrarouge



DURÉE

4 jours
28 heures



SESSIONS

- 4 - 7 juin 2018



LIEU

Lyon



FRAIS D'INSCRIPTION (DÉJEUNER INCLUS)

2 100 €HT



PUBLIC CONCERNÉ

Ingénieurs
Pharmaciens
Techniciens supérieurs

ANALYSE FACTORIELLE

Représentation algébrique des spectres
Modèles factoriels et dimensionnalité
Validation croisée
Mise en oeuvre d'une ACP
Exploitation des résultats (scores et loadings)
Application au suivi en ligne d'un mélange

CALIBRATION

Les limites des méthodes classiques de calibration
Principe de la régression PLS
Mise en oeuvre et validation
Application au dosage d'un principe actif dans un comprimé pharmaceutique

Coordonnées

CPE Lyon Formation Continue

Campus Saint-Paul – Bâtiment F • 10, Place des Archives – 69002 LYON

04.72.32.50.60

