



## 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  
Chimio-métrie

#### 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

