


Fundamentals de la Spectroscopie moléculaire: Hardware

DÉVELOPPER UNE
SCIENCE TOUJOURS MEILLEURE

AGILENT ET VOUS



Agilent Technologies s'engage
auprès du monde de
l'enseignement et donne accès
à ses propres ressources.

Ce diaporama a été créé par Agilent à des fins
pédagogiques uniquement. Contacter Agilent
Technologies au préalable pour toute utilisation
des images, schémas ou dessins.

Table des matières

Introduction

- [Classification](#)

Spectroscopie moléculaire

- [Généralités](#)
- [Spectroscopie UV-visible](#)
 - [Installation générale](#)
 - [Source de lumière](#)
 - [Appareils de dispersion](#)
 - [Détecteurs](#)
 - [Système](#)
 - [Analyse qualitative et quantitative](#)
 - [Applications](#)
 - [Exemples](#)
 - [Capacités](#)

- [Spectroscopie de fluorescence](#)
 - [Installation générale](#)
 - [Source de lumière](#)
 - [Système](#)
 - [Applications](#)
 - [Exemples](#)
 - [Capacités](#)
- [Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier](#)
 - [Installation générale](#)
 - [Interférogramme](#)
 - [Analyse qualitative et quantitative](#)
 - [Système](#)
 - [Applications](#)
 - [Exemples](#)
 - [Capacités](#)
- [Informations complémentaires](#)



Introduction

Classifications

La spectroscopie est un vaste domaine regroupant plusieurs sous-disciplines qui peuvent être classées selon le type de matériau analysé. Cette présentation se concentrera sur la **spectroscopie moléculaire**.

ATOMES

Spectroscopie atomique

- Spectroscopie d'absorption atomique
- MP-AES
- ICP-OES
- ICP-MS

MOLÉCULES

Spectroscopie moléculaire

- UV-VIS
- UV-VIS-PIR
- FTIR
- Fluorescence

CRISTAUX

- Cristallographie aux rayons X

NOYAUX

- Résonance magnétique nucléaire

Spectroscopie moléculaire

Généralités

La combinaison d'atomes en molécules crée des états énergétiques uniques et ainsi des spectres uniques des transitions entre les états.

Les spectres moléculaires peuvent être obtenus grâce :

- Aux états de rotation de l'électron
- Aux rotations moléculaires
- À la vibration moléculaire
- Aux états électroniques

Spectroscopie moléculaire

Spectroscopie moléculaire	
	Par application
UV-VIS	Étudie les interactions entre l'énergie électromagnétique ultraviolette, visible et proche infrarouge, et la matière
FTIR	Étudie les interactions entre l'énergie électromagnétique infrarouge et la matière
Fluorescence	Étudie l'émission d'énergie électromagnétique, après l'interaction entre l'énergie électromagnétique ultraviolette et visible et la matière



Introduction

Programme des Premiers développements

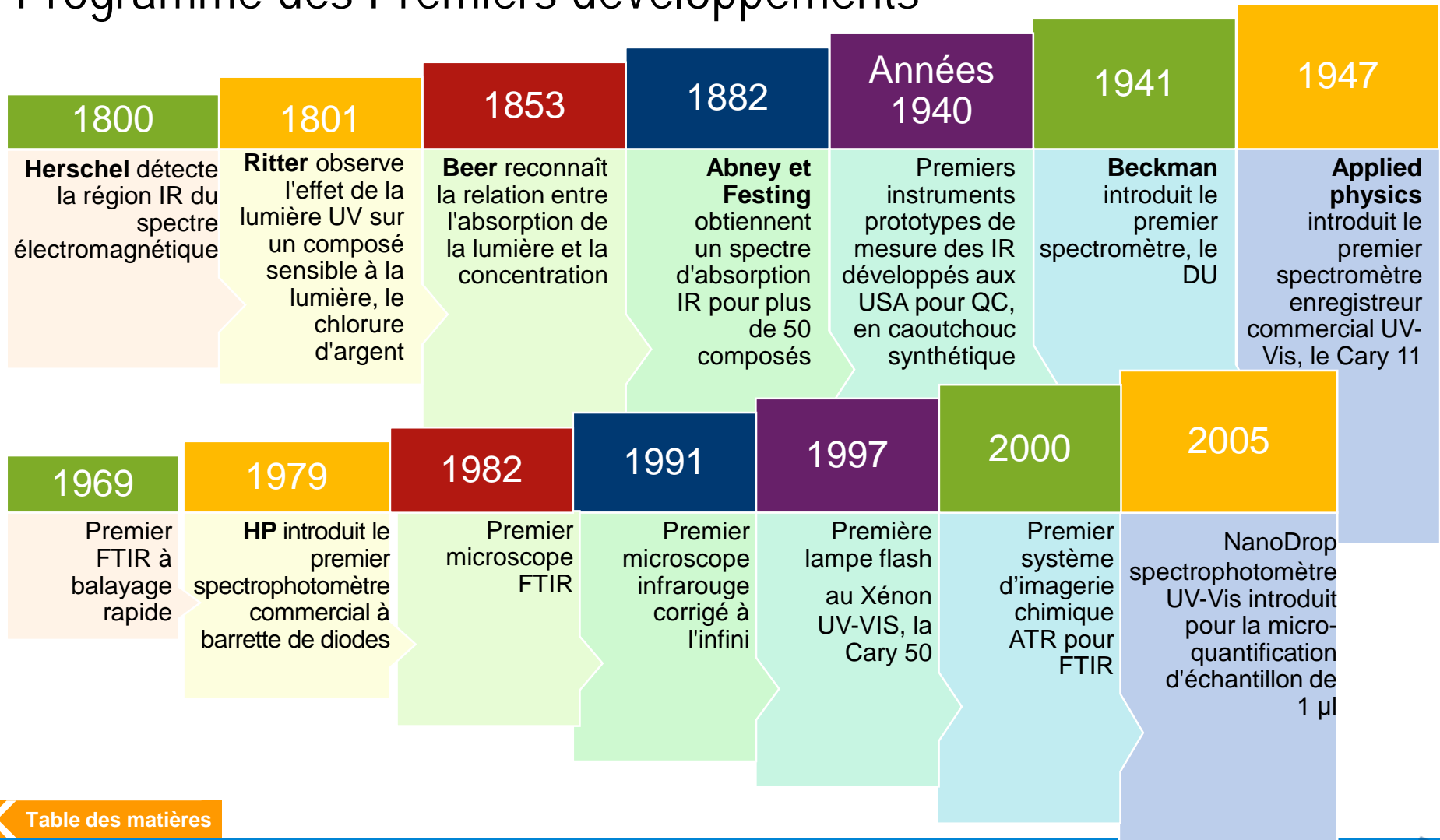


Table des matières



Spectroscopie UV-Vis

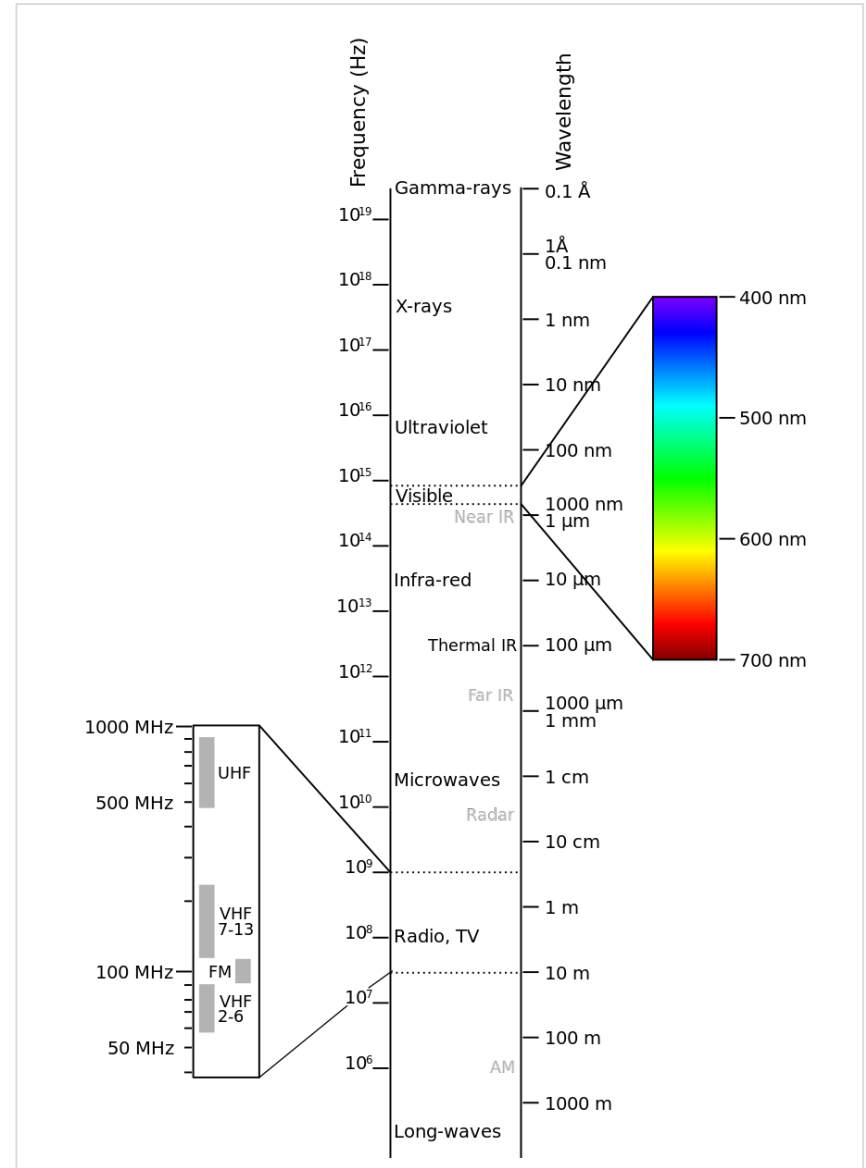
Généralités

Le **spectre électromagnétique** couvre plusieurs ordres de grandeur en termes de fréquence et de longueur d'onde.

La lumière visible représente seulement une petite fraction du spectre électromagnétique.

- Ultraviolet : 190 à 400 nm
- Visible : 400 à 800 nm
- Infrarouge : 800 à 100 000 nm

« Spectre électromagnétique » par Victor Blacus



Source : [Wikipédia](#)

Spectroscopie UV-Vis

Généralités

Un spectrophotomètre mesure la quantité de lumière transmise à travers ou réfléchi à partir d'un échantillon.

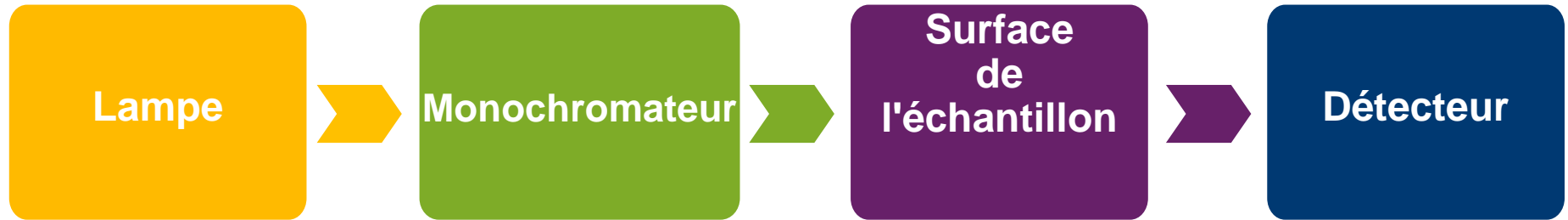
Tous les vrais spectrophotomètres de recherche peuvent mesurer le pourcentage de lumière transmise ou réfléchi pour toutes les longueurs d'onde d'environ 190 nm (ultraviolet moyen) à au moins 900 nm (proche-infrarouge) avec une résolution inférieure à 2 nm.

Pour une mesure en solution, le pourcentage de lumière transmise est exprimé par l'absorbance, qui est directement proportionnelle à la concentration.



Spectroscopie UV-Vis

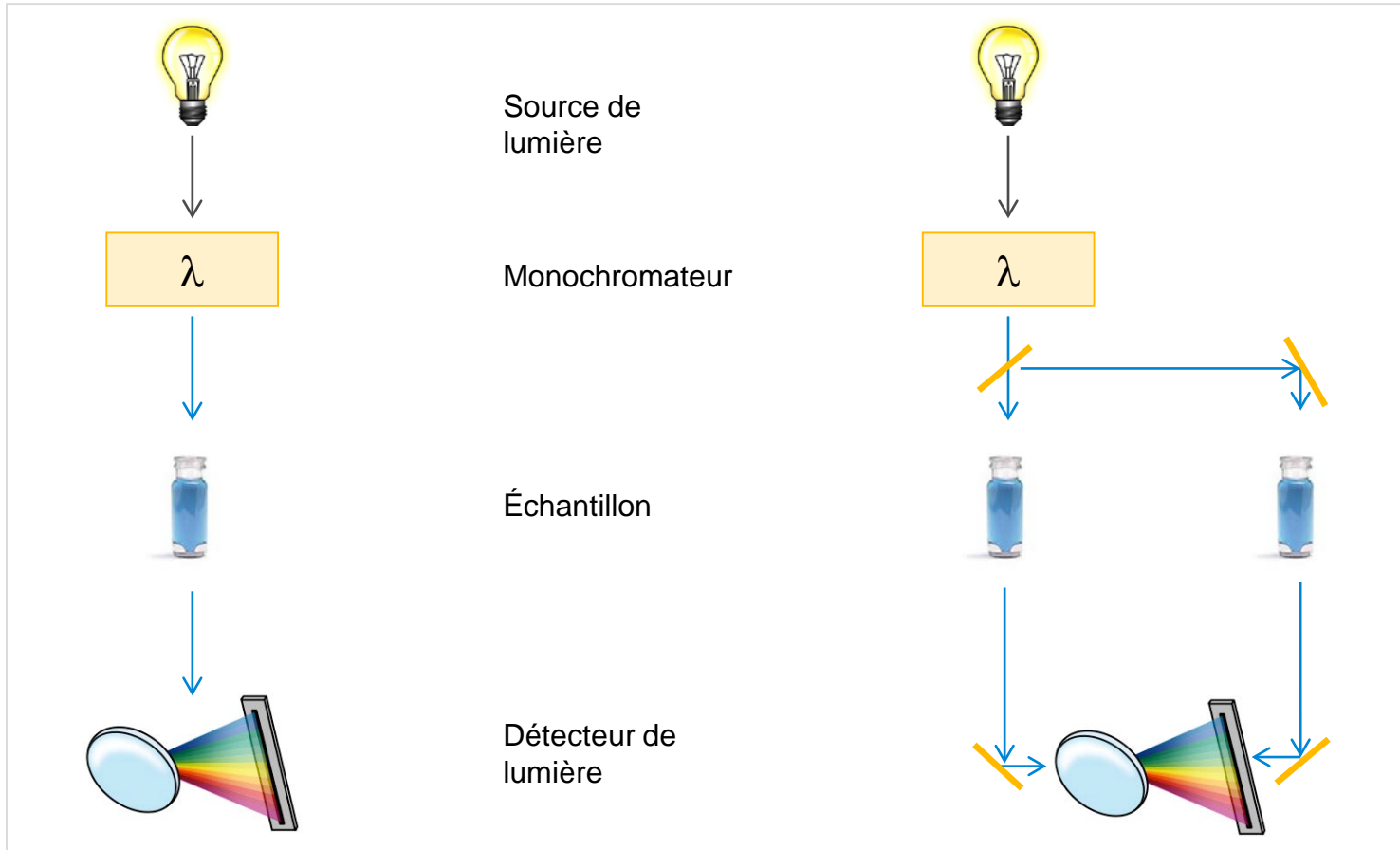
Installation générale



- La lampe (source) émet de la lumière à travers une gamme de longueurs d'onde
- Le monochromateur (appareil de dispersion) sélectionne une longueur d'onde
- L'échantillon absorbe la lumière (surface de l'échantillon)
- La lumière transmise est mesurée (détecteur)
- La concentration est déterminée en comparaison avec les étalons

Spectroscopie UV-Vis

Installation générale : Spectromètre à simple faisceau vs. faisceau rationnel



L'approche du double faisceau rationnel permet la correction des variations d'intensité lumineuse.

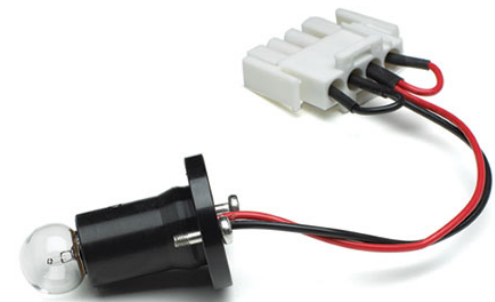
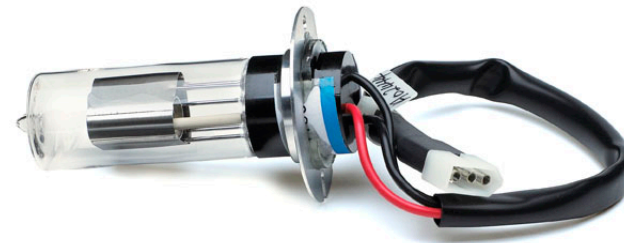
Spectroscopie UV-Vis

Source lumineuse

La source lumineuse idéale pourrait produire une intensité constante sur toutes les longueurs d'onde avec un bruit faible et une stabilité à long terme.

Sources généralement utilisées dans les spectrophotomètres UV-Vis :

- **Lampe à arc au deutérium** → intensité utile dans la région ultraviolet
- **Lampe tungstène-halogène** → bonne intensité sur la partie du spectre ultraviolet et toute la gamme visible
- **Lampe au Xénon** → bonne continuité sur toutes les régions ultraviolet-visible



Source de deutérium (au-dessus) et lampe tungstène-halogène (en dessous) utilisées avec les systèmes ultraviolets

Spectroscopie UV-Vis

Appareils de dispersion

Les appareils de dispersion dispersent les longueurs d'onde de lumière à des angles différents. S'ils sont combinés avec une fente de sortie appropriée, ces appareils peuvent être utilisés pour sélectionner une longueur d'onde particulière (ou plus précisément, une bande d'onde étroite) de lumière d'une source continue.

Il existe deux types d'appareils :

- **Prismes**

Ils génèrent un arc-en-ciel de lumière ; l'inconvénient est que l'angle de dispersion est sensible à la température.

- **Réseaux holographiques**

Ils ne sont pas sensibles à la température ; la lumière arrivant sur le réseau est réfléchiée à différents angles, selon la longueur d'onde.

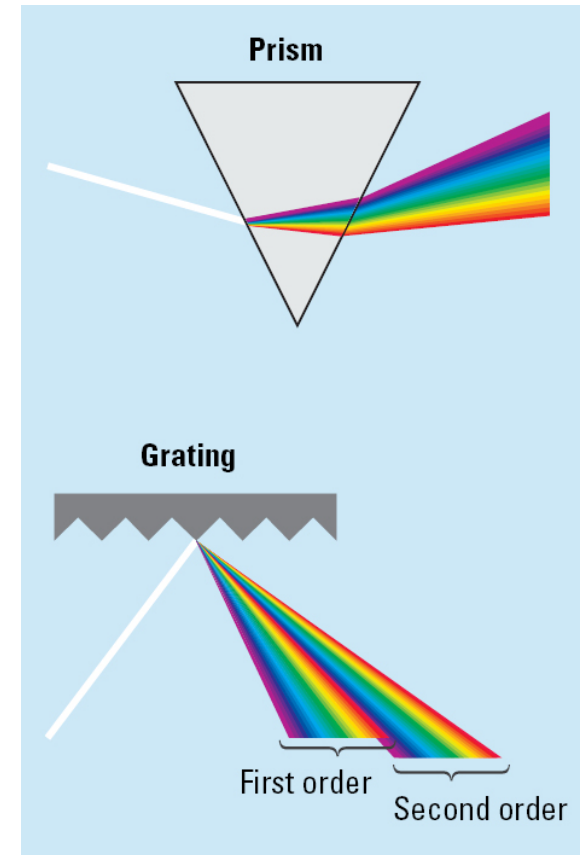


Schéma des appareils de dispersion. Les spectromètres les plus modernes utilisent la dispersion par réseau

Source : [Principes de base de la spectroscopie UV-visible](#)

Spectroscopie UV-Vis

Détecteurs

Un détecteur convertit un signal lumineux en signal électrique. Idéalement, il devrait donner une réponse linéaire sur une large gamme avec un excellent rapport signal/bruit et une haute sensibilité.

Détecteur de type photomultiplicateur

Combine la conversion du signal avec différentes étapes d'amplification dans le tube ; la gamme de longueurs d'onde entière est scannée.

Détecteur à photodiode

La lumière arrivant sur le matériau semiconducteur permet aux électrons de le traverser, réduisant ainsi la charge dans un condensateur connecté à travers le matériau. La quantité de charge nécessaire pour recharger le condensateur est proportionnelle à l'intensité de la lumière ; toute la gamme de longueurs d'onde est mesurée en une fois.

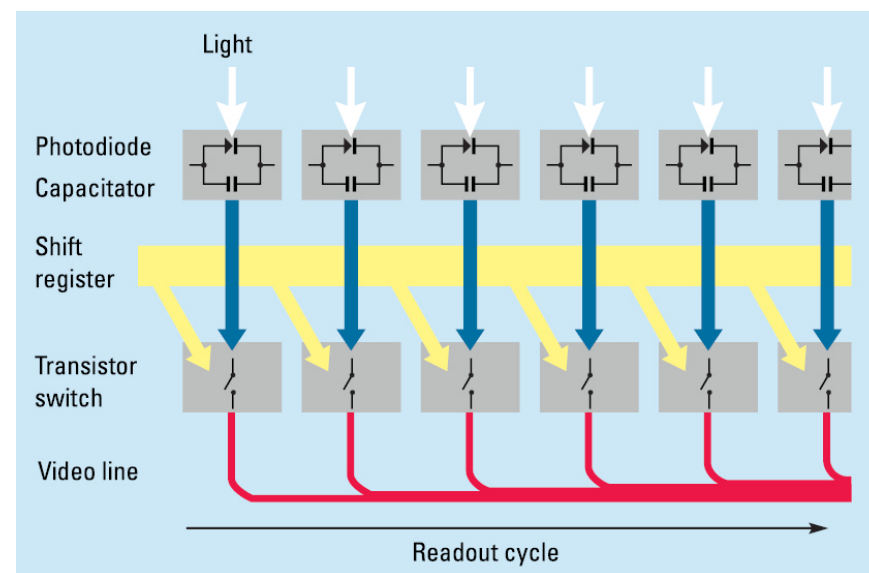
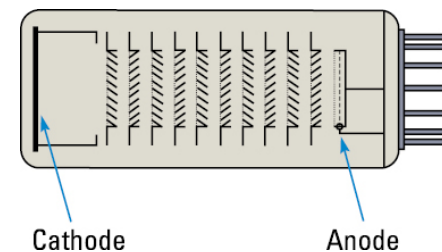


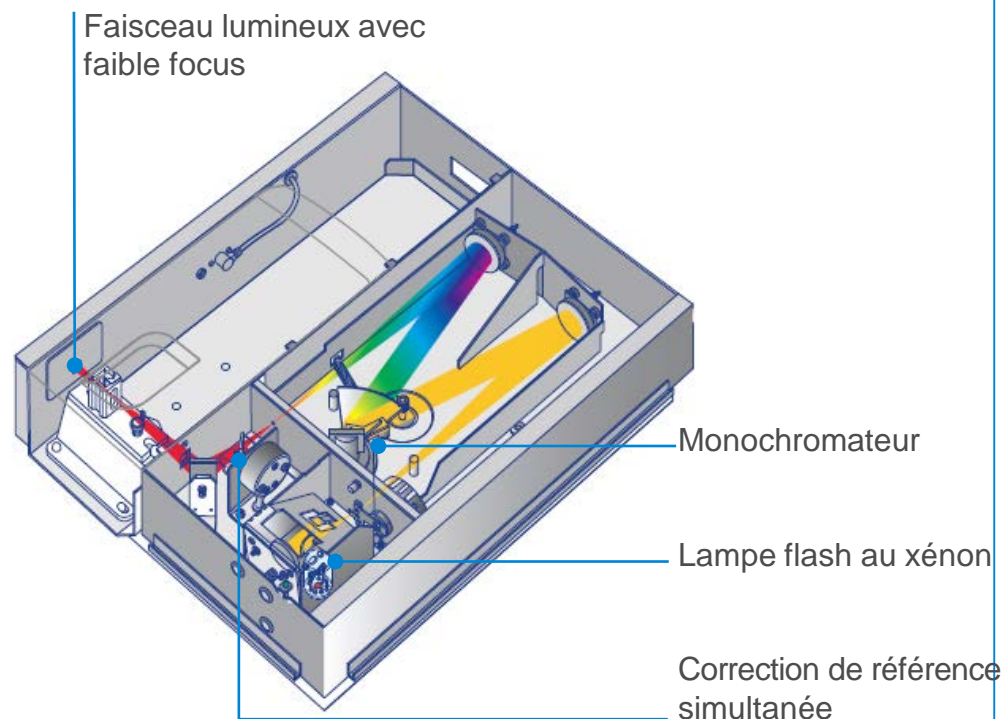
Schéma du détecteur de type photomultiplicateur (au-dessus) et de la barrette de photodiodes (en dessous).

Spectroscopie UV-Vis

Système

Principales applications

- Suivi de cinétique
- Caractériser les composés inconnus ou nouvellement synthétisés
- Évaluation de la pureté de l'ADN
- Quantification de l'ADN et des protéines
- Analyse des nutriments présents dans l'eau, les aliments et les produits agricoles



Spectroscopie UV-Vis

Analyse quantitative et qualitative

Les spectres UV-Visible montrent généralement quelques bandes d'absorption larges. La plupart de l'absorption par les composés organiques provient de la présence de liaisons π (c'est-à-dire, insaturées).

Un chromophore est un groupe moléculaire contenant généralement une liaison π . Lors de l'insertion dans un hydrocarbure saturé (qui ne présente aucun spectre d'absorbance UV-Visible), il produit un composé avec une absorption entre 185 et 1 000 nm.

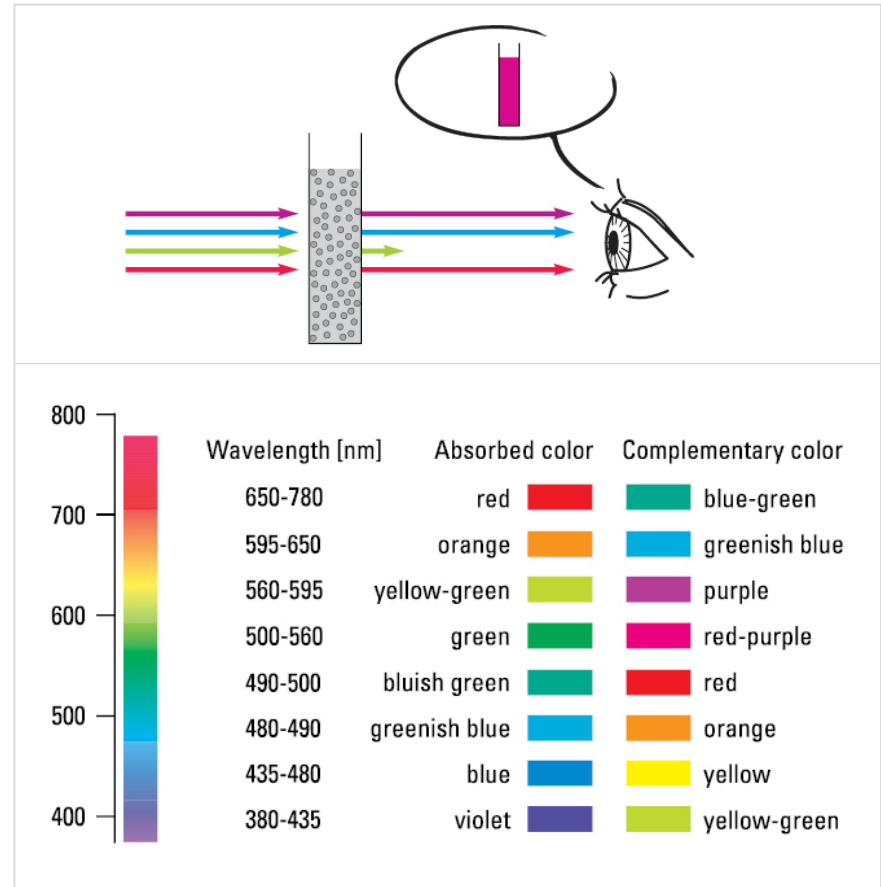
Chromophores sélectionnés et leurs maximums d'absorbance

Chromophore	Formule	Exemple	λ_{\max} (nm)
Carbonyle (cétone)	RR'C=O	Acétone	271
Carbonyle (aldéhyde)	RHC=O	Acétaldéhyde	293
Carboxyle	RCOOH	Acide acétique	204
Amide	RCONH ₂	Acétamide	208
Nitro	RNO ₂	Nitrométhane	271

Spectroscopie UV-Vis

Analyse quantitative et qualitative

La couleur est une propriété importante d'une substance. La couleur de la matière est liée à son absorbance ou à sa réflexivité. L'œil humain voit la couleur complémentaire à celle qui est absorbée.



*Transmission et couleur (au-dessus)
Absorbance et couleurs
complémentaires (en dessous)*

Source : [Principes de base de la spectroscopie UV-visible](#)

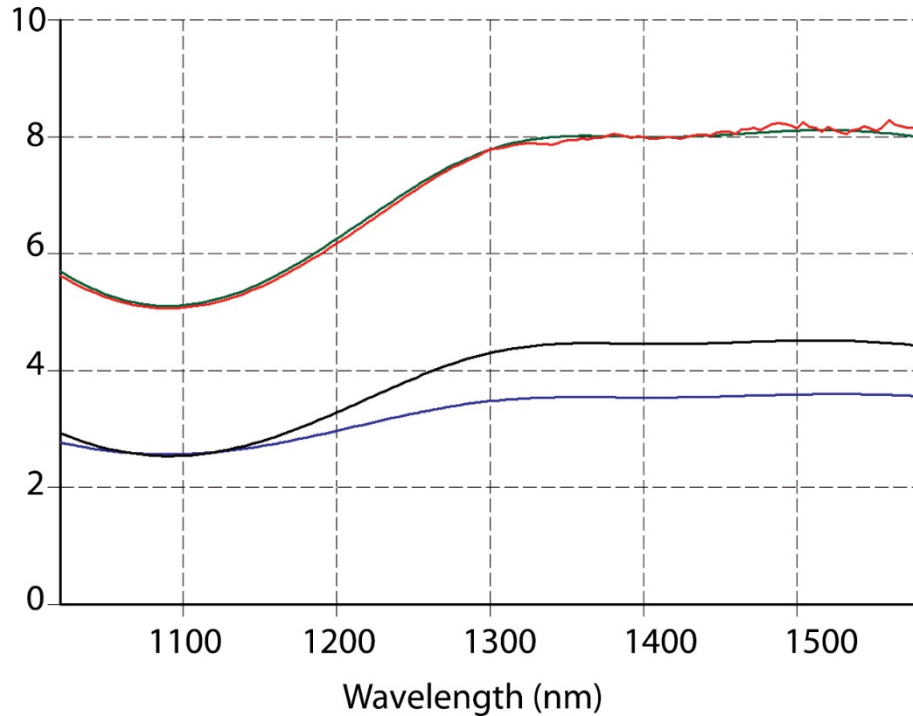
Spectroscopie UV-Vis

Applications

MARCHÉ	APPLICATIONS
Matériau	<ul style="list-style-type: none">• Matériaux en vrac• Composants optiques : filtres, lentilles, miroirs, séparatrices, polariseurs, verre• Films fins, revêtements optiques et anti-réfléchissants, matériaux nanocomposites, peintures, cellules solaires• Lunettes de protection• Pulpe et papier• Matériel de camouflage• Lunettes de soleil• Tissus/textiles
Produits chimiques	<ul style="list-style-type: none">• AQ/CQ sur les matières premières et les produits finis issus de la fabrication industrielle• Identification chimique ou étude des processus chimiques : laboratoires de chimie synthétique, recherche en photochimie, caractérisation de nanoparticules, recherche en chimie des surfaces• Chimie analytique• Mesures des couleurs : Peintures et textiles (correspondance des couleurs, AQ/CQ sur les tissus, mesures SPF)
Biotechnologie et pharmaceutique	<ul style="list-style-type: none">• Analyses de fixation médicamenteuse• Réactions enzymatiques• Analyse d'échantillons biologiques turbides, de tissus, de cellules• Mesures d'ions intracellulaires• Acide nucléique (ARN/ADN) et détermination des protéines• Mesures de dénaturation/renaturation de l'ADN et des protéines

Spectroscopie UV-Vis

Mesure de l'absorbance du filtre en verre Schott



Le spectre du filtre 1 UG11 (bleu), du filtre 2 UG11 (noir) et le spectre du filtre 1 UG11 et du filtre 2 UG 11 ensemble (rouge). Le spectre vert est le résultat prévu en se basant sur l'addition des spectres bleu et noir.

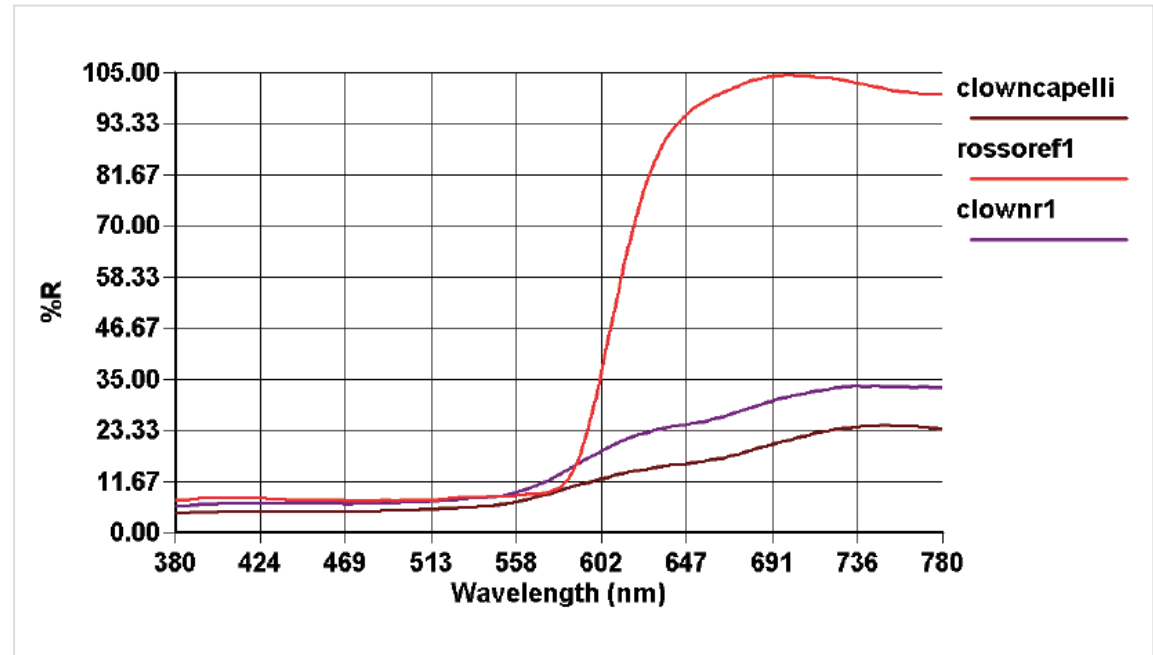
Deux filtres ont été mesurés séparément et ajoutés numériquement (prévu). Ces résultats sont identiques aux deux filtres mesurés ensemble (mesuré).

Spectroscopie UV-Vis

Mesure de la couleur d'une peinture sur des toiles



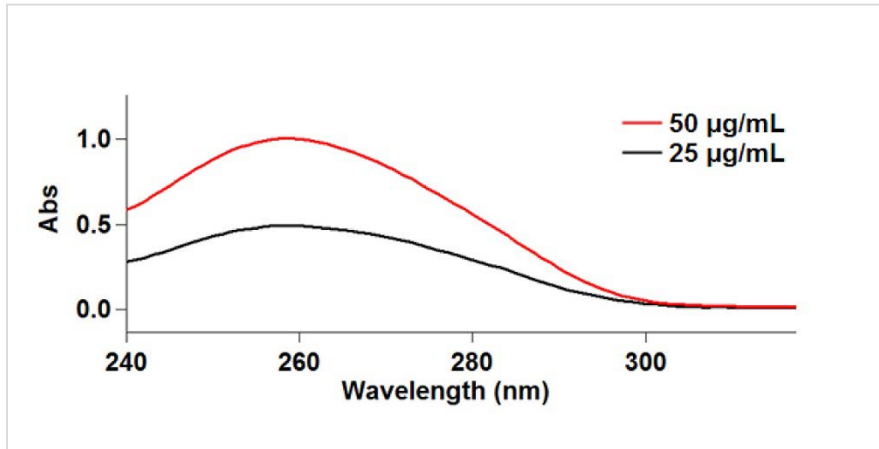
Spectres montrant que les échantillons clownnr1 et clowncapelli sont faits de matériaux similaires.



Source : [Mesure de la couleur d'une peinture sur des toiles directement avec une réflexion diffuse externe utilisant le spectrophotomètre UV-Vis Agilent Cary 60](#)

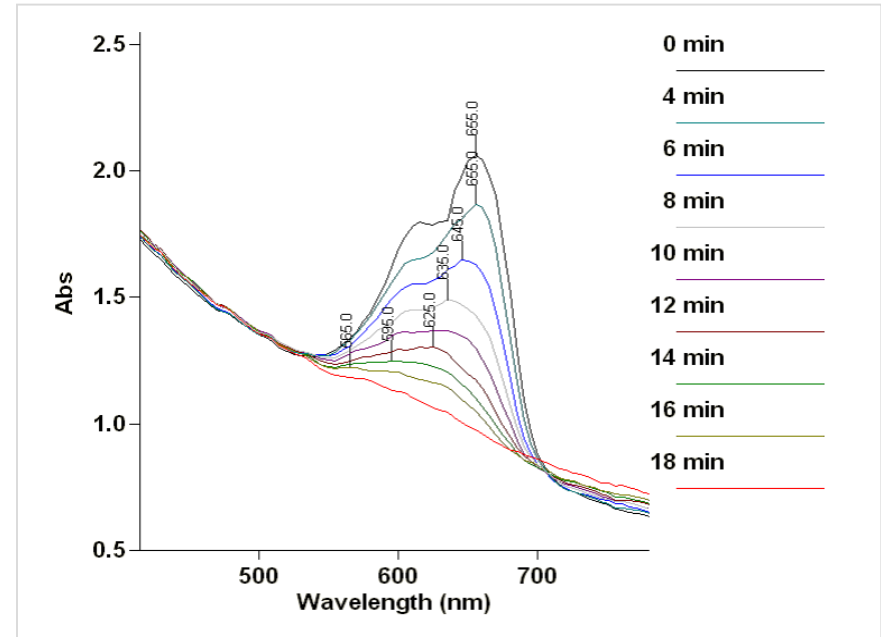
Spectroscopie UV-Vis

Analyse de pureté et analyse cinétique



Balayages d'échantillons d'ADN de 150 µL à 4 °C à deux concentrations montrant le pic d'absorbance caractéristique à 260 nm. Noter le pic d'absorbance de 1,0 unité d'absorbance pour 50 µg/mL d'ADN par rapport au pic d'absorbance de 0,5 unité d'absorbance pour 25 µg/mL d'ADN, démontrant la conformité avec la loi de Beer-Lambert.

Source : [Mesure de la pureté de faibles volumes d'ADN à 4 °C en utilisant le spectrophotomètre UV-Vis Agilent Cary 60 avec micro-sonde de fibre optique](#)



Cinétique spectrale en utilisant de la fibre optique *in situ* sur du bleu de méthylène sous exposition d'une lampe UV haute intensité (Lampe Oriell 500 W Hg(Xe)) pendant 20 minutes dans la plage de 400 à 800 nm. Les étiquettes reflètent les longueurs d'onde maximum d'absorbance.

Source : [Mesures simples, automatisées des propriétés photocatalytiques des espèces colorimétriques en utilisant le spectrophotomètre UV-Vis Agilent Cary 60 avec de la fibre optique.](#)

Spectroscopie UV-Vis

Capacités

La relation linéaire simple entre l'absorbance et la concentration, et la facilité relative de la mesure de la lumière UV-Visible ont fait de la spectroscopie UV-Visible la base de milliers de méthodes analytiques quantitatives.

Spectroscopie UV-Visible

Avantages

- Large application en matière d'analyse quantitative et qualitative
- Peut être utilisée pour plusieurs types de molécules et d'ions organiques et inorganiques
- Facilité d'utilisation
- Rapide
- Faible besoin de maintenance
- Mesure non destructive

Limitations

- Limites de détection supérieures (moins bonnes) que la fluorescence
- Des bandes d'absorption superposées peuvent interférer
- Peut être difficile pour les composés sensibles à la lumière si utilisation d'une source D2 et Q1 (non applicable lors de l'utilisation d'une source de xénon)

Spectroscopie de fluorescence

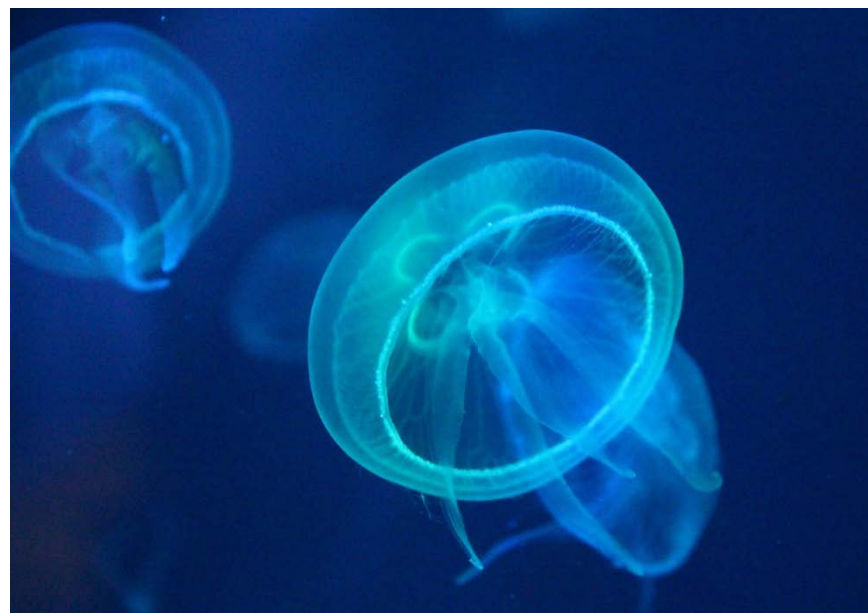
Généralités

La fluorescence est l'émission de photons suivant l'excitation par les photons d'une énergie supérieure.

Les spectromètres de fluorescence offrent une haute sensibilité (picoMolaire) car ils détectent un signal par rapport à un fond noir, contrairement aux spectrophotomètres.

Les instruments facilitant la recherche utilisent des monochromateurs avec balayage pour l'excitation et l'émission.

De nombreux systèmes de fluorescence peuvent aussi mesurer la phosphorescence et la luminescence.



Spectroscopie de fluorescence

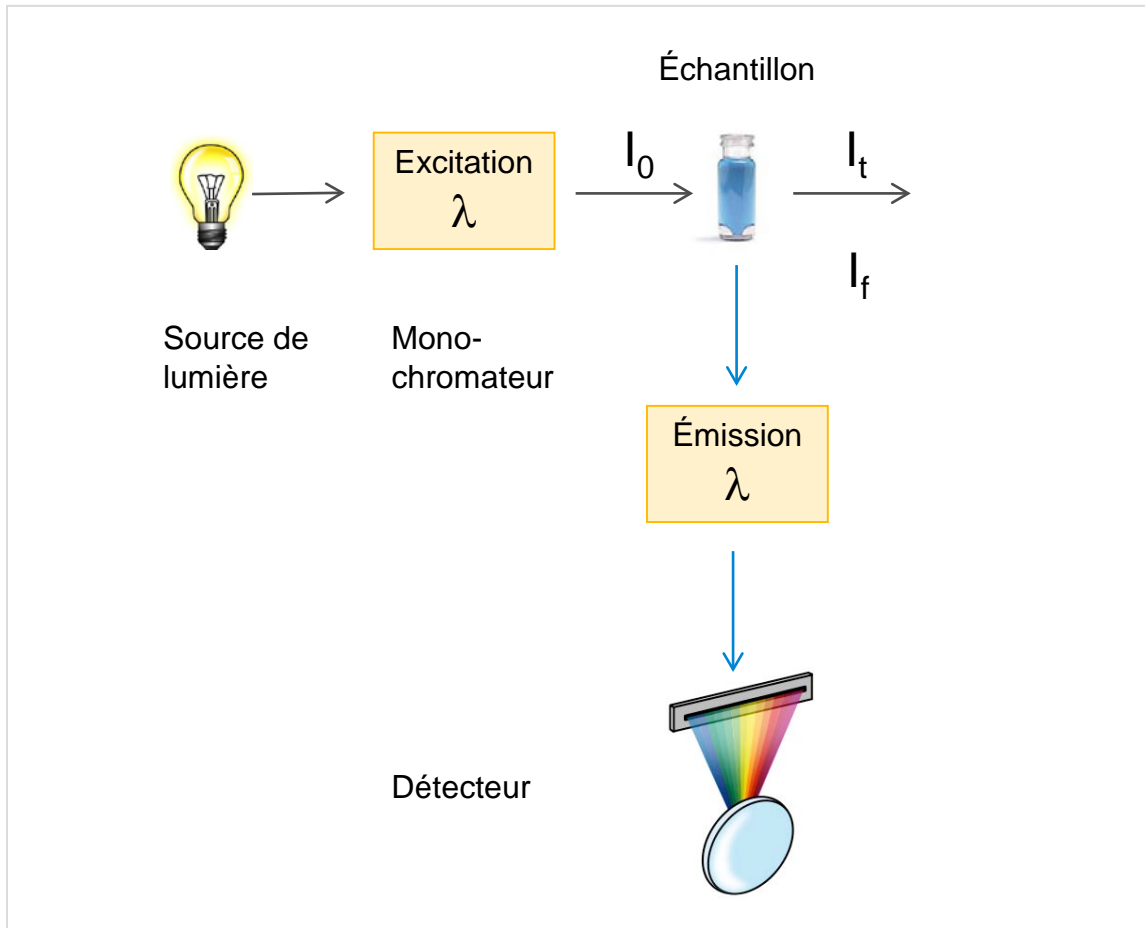
Installation générale



- La lampe (source) émet de la lumière à travers une gamme de longueurs d'onde
- Le monochromateur sélectionne la longueur d'onde d'excitation
- La surface de l'échantillon maintient l'échantillon, l'analyte absorbe la lumière
- Lumière émise à une longueur d'onde plus grande
- Le monochromateur sélectionne la longueur d'onde d'émission
- La lumière transmise est mesurée (détecteur)

Spectroscopie de fluorescence

Installation générale



Remarque : Le détecteur n'est pas dans l'alignement direct de la source lumineuse afin de minimiser le risque de lumière incidente transmise ou réfléchie atteignant le détecteur.

Spectroscopie de fluorescence

Source lumineuse

Différentes sources lumineuses sont utilisées dans les spectrophotomètres de fluorescence :

- **Lampe au xénon** : spectre d'émission continu avec une intensité quasi-constante de 300 à 800 nm
- **Lampe à vapeur de mercure** : une lampe en ligne, ce qui signifie qu'elle émet de la lumière proche des pics des longueurs d'onde
- **Lasers** : limités en termes de sélection de longueur d'onde ; ne peuvent pas vraiment être changés

Spectroscopie de fluorescence

Systeme

Principales applications

- Stabilité thermique de biocatalyseurs
- Caractérisation d'étiquettes biologiques pour l'imagerie cellulaire en direct
- Mélanges d'hydrocarbures dans les huiles de pétrole
- Caractérisation de l'oligomérisation de RCPG

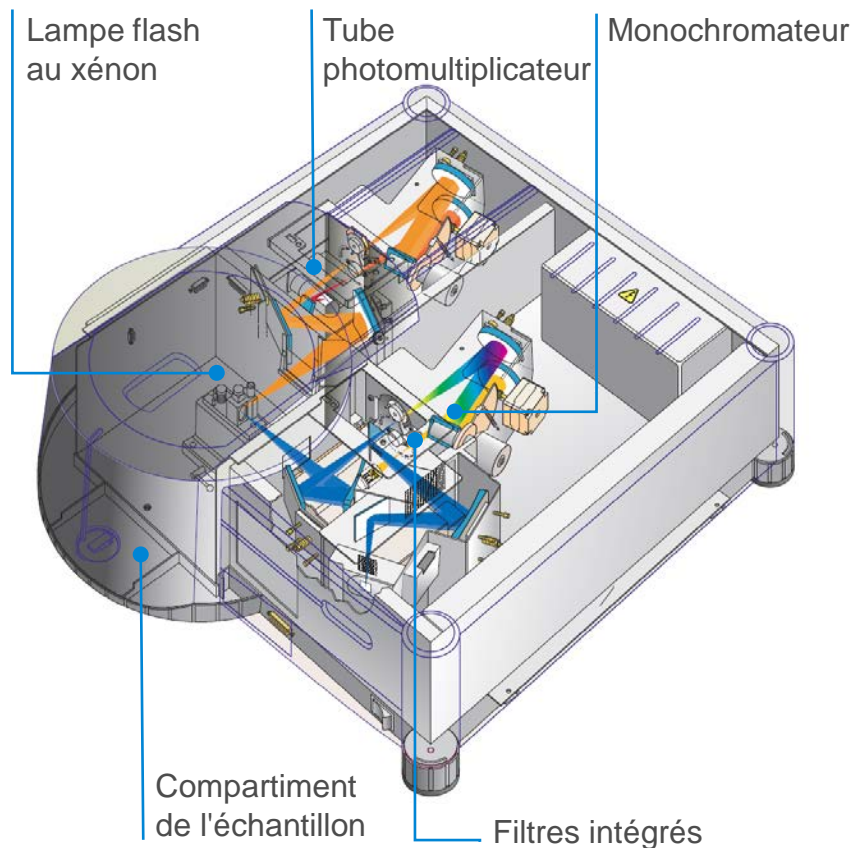


Table des matières

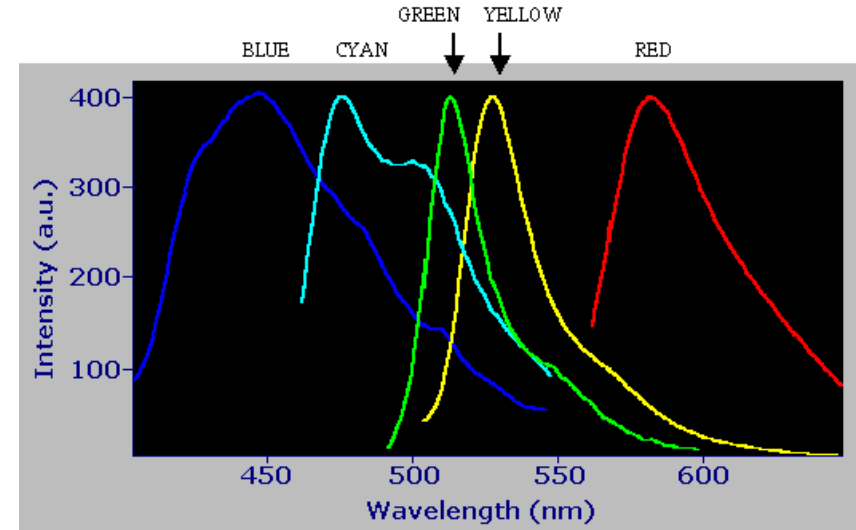
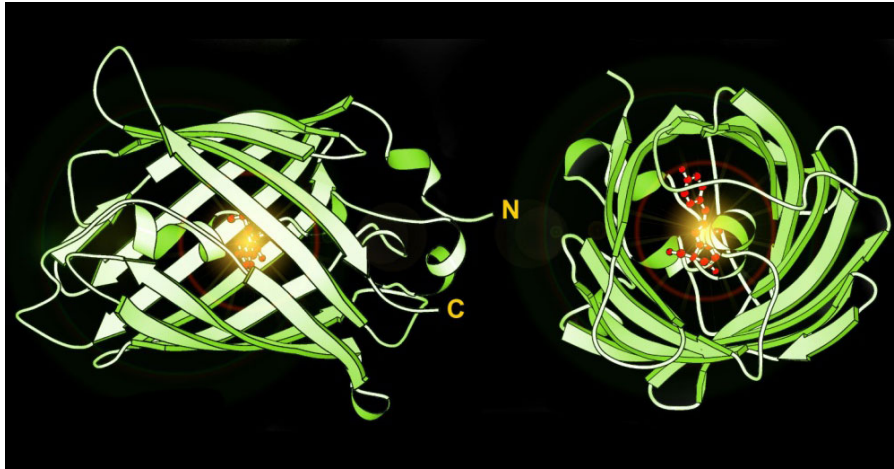
Spectroscopie de fluorescence

Applications

MARCHÉ	APPLICATIONS
Produits chimiques	<ul style="list-style-type: none">• Recherche en photochimie• Caractérisation de nanoparticules• Recherche en chimie de surface• Chimie analytique
Pharmaceutique et biotechnologie	<ul style="list-style-type: none">• Recherche biochimique et biophysique• Quantification de protéines et études structurales : interactions protéine-protéine, études des membranes• Enzymologie : Cinétique enzymatique utilisant un substrat fluorescent• Biologie moléculaire : Quantification d'ADN et d'ARN

Spectroscopie de fluorescence

Expression cytosolique de la protéine fluorescente verte

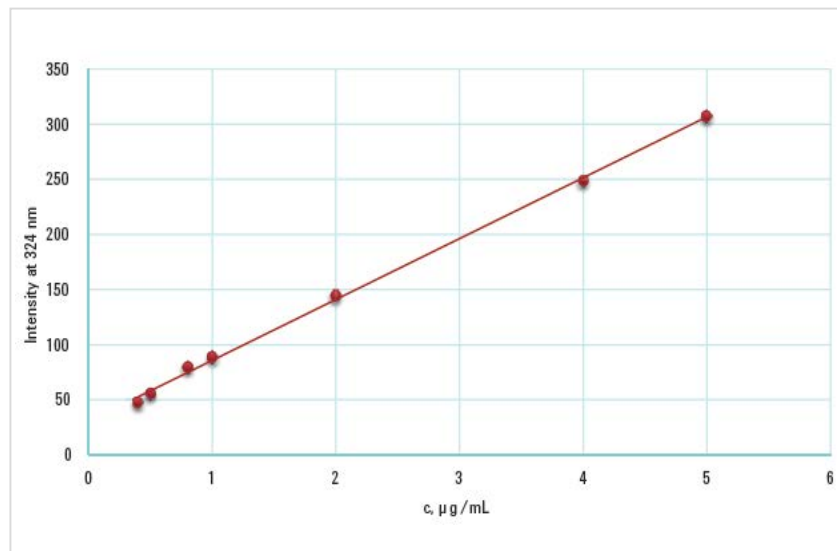
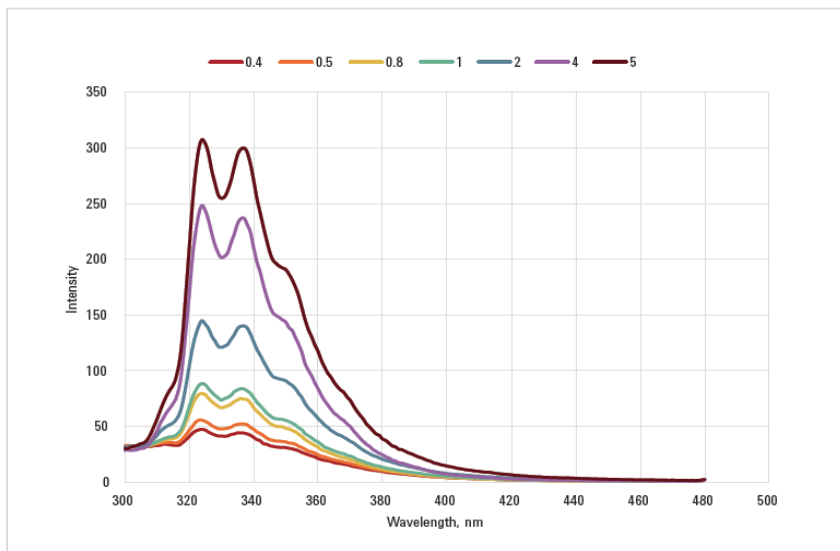


Représentation schématique de la protéine fluorescente verte. À gauche : Fluorophore tripeptide en rouge. À droite : Intensité vs. émission du spectre complet des protéines fluorescentes.

Source : [Expression cytosolique de la protéine fluorescente verte \(GFP\) et de ses dérivés dans de la levure *Saccharomyces cerevisiae* : détection in vivo utilisant Agilent Cary Eclipse](#)

Spectroscopie de fluorescence

Quantification des hydrocarbures aromatiques polycycliques ou des huiles de pétrole



Spectres de fluorescence de la naphthalène, Ex. longueur d'onde de 250 nm, Ex. fente de 10 nm, Em. fente de 5 nm (gauche); tracé d'étalonnage (les points pour la même concentration sont une moyenne) pour la détermination fluorométrique de la naphthalène à 324 nm, Ex. longueur d'onde de 250 nm, Ex. fente de 10 nm, Em. fente de 5 nm.

Source : [Quantification des hydrocarbures aromatiques polycycliques complexes ou des huiles de pétrole dans de l'eau avec le spectrophotomètre à fluorescence Cary Eclipse selon ASTM D 5412-93 \(2000\)](#)

Spectroscopie de fluorescence

Capacités

À de faibles concentrations, l'intensité de fluorescence sera généralement proportionnelle à la concentration du fluorophore.

Les effets d'extinction peuvent influencer le résultat. L'extinction décrit la diminution de l'intensité de fluorescence d'une substance donnée et peut résulter de différents processus comme les réactions en état excité ou l'extinction de collision.

Spectroscopie de fluorescence

Avantages

- Extrêmement sensible aux composés aromatiques et insaturés
- Peut s'appliquer aux autres composés avec dérivatisation ou étiquetage
- Facilité d'utilisation
- Faible besoin de maintenance

Limitations

- Limité à certains types de composés
- Les mélanges peuvent nécessiter un traitement
- Possibilité d'extinction

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

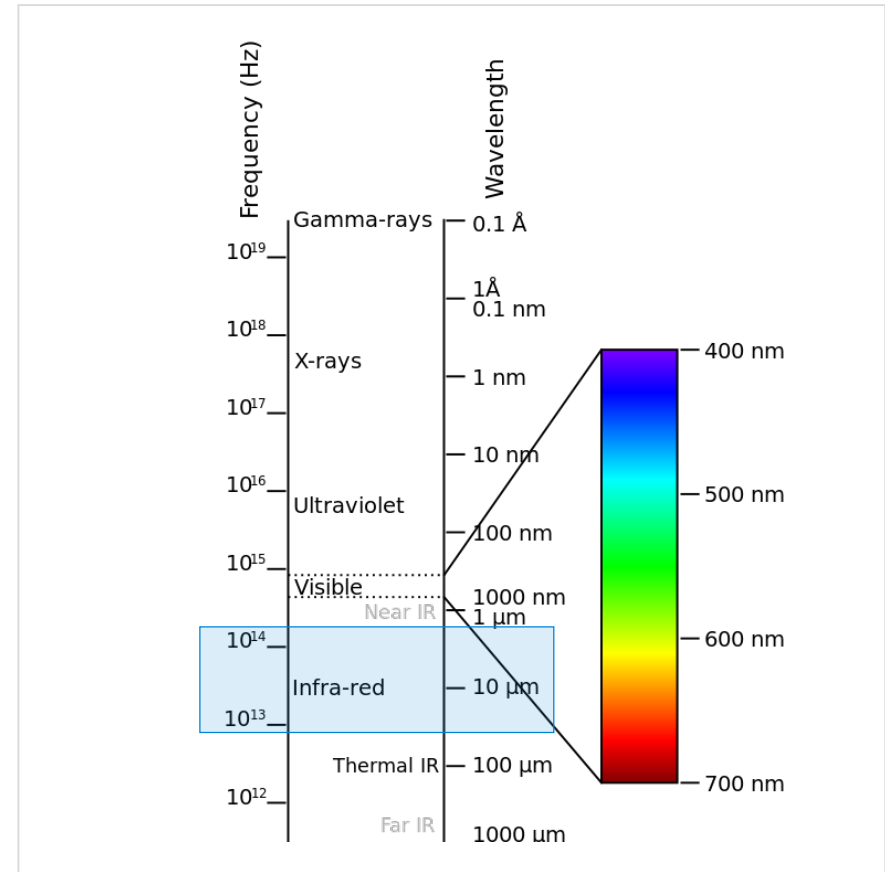
Généralités

La lumière infrarouge a une longueur d'onde plus longue et une fréquence plus faible que la lumière visible.

Le spectre infrarouge est divisé en radiations proche-, moyen-, et lointain-infrarouge. La région la plus souvent utilisée est le moyen-infrarouge (fréquence : $4\ 000$ et 400 cm^{-1}).

La spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) est une technique qui obtient un spectre infrarouge d'absorption, d'émission, de photoconductivité, ou de diffusion Raman d'un solide, liquide, ou gaz.

Un spectromètre FTIR collecte simultanément des données de haute résolution spectrale sur un large domaine spectral.



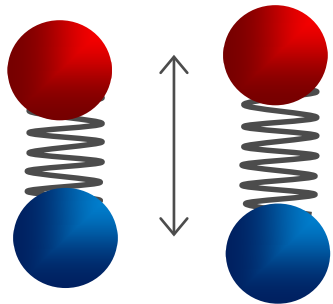
« Spectre électromagnétique » par Victor Blacus

Source : [Wikipédia](#)

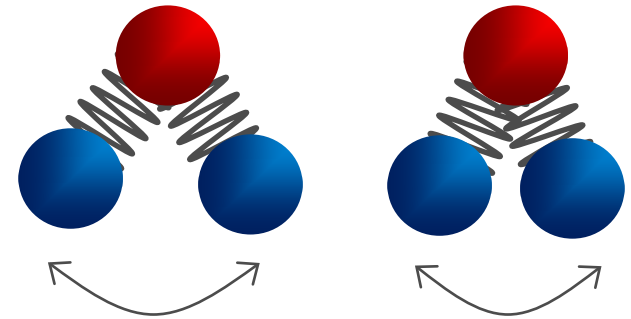
Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Généralités

La lumière infrarouge absorbée peut causer des vibrations moléculaires.
La spectroscopie infrarouge mesure le changement d'amplitude.



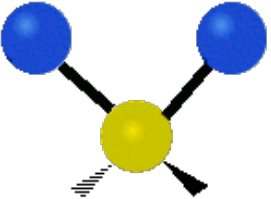
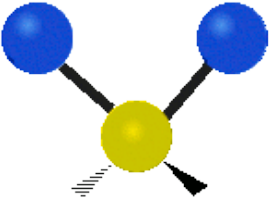
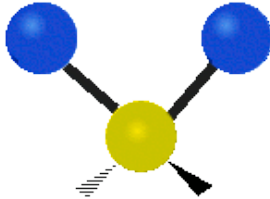
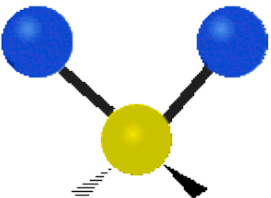
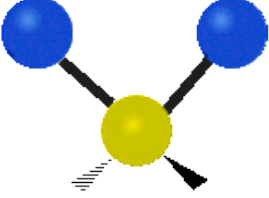
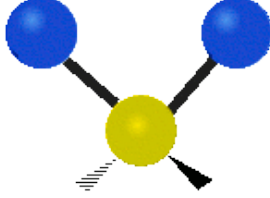
$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$



$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

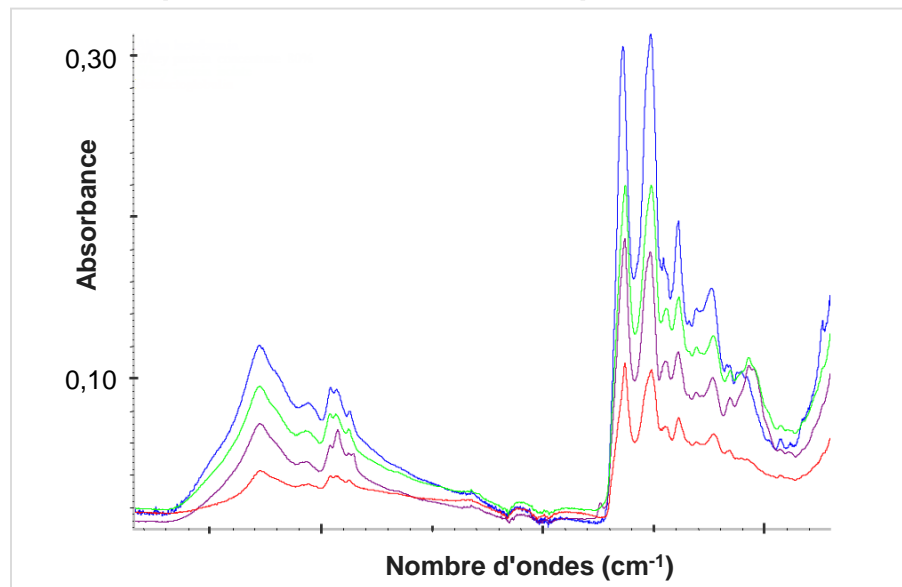
Généralités

Étirement symétrique	Étirement asymétrique	Effet de ciseaux
		
Bascule	Agitations	Torsion
		

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Généralités

- Les liaisons actives aux IR produisent des pics
- Ces liaisons vibrent à des fréquences spécifiques
- De petites variations dans le positionnement et la hauteur de pics permettent la différenciation
- Le spectre IR est comparable à l'empreinte digitale du composé



IR

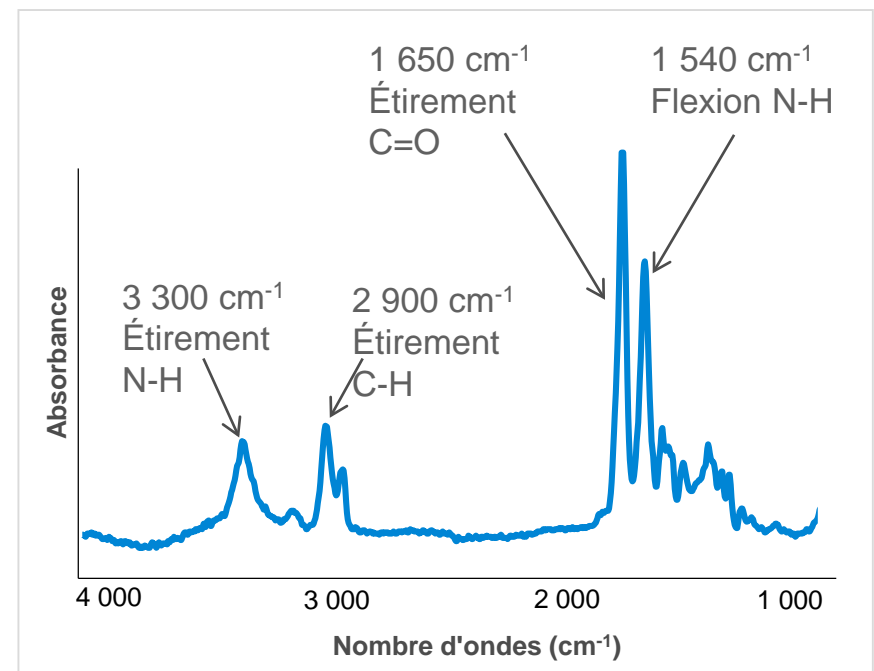
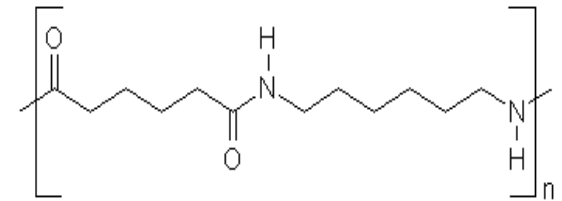


Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Généralités

Le nombre d'ondes où des liaisons différentes absorbent (généralement appelées « groupes fonctionnels ») indique la force de la liaison. Les liaisons les plus fortes absorbent plus de nombres d'ondes.

Chaque groupement fonctionnel absorbe à sa propre fréquence caractéristique, rendant possible l'élucidation de la structure chimique d'un matériau à partir de son spectre infrarouge.



Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Généralités

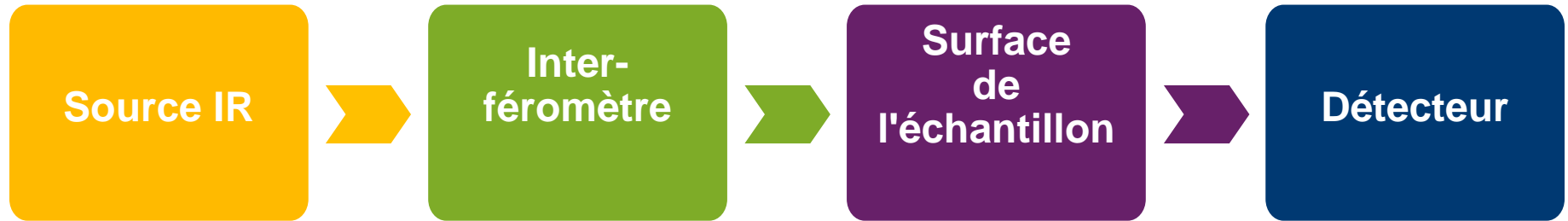
Liaisons moléculaires et longueurs d'onde

Liaison	Type de vibration	Nombre d'ondes Plage (cm ⁻¹)
C-H	Alcane (étirement)	3 000 – 2 850
	-CH ₃ (flexion)	1 450 & 1 375
	-CH ₂ (flexion)	1 465
	Alcène Étirement	3 100 – 3 000
	(flexion hors plan)	1 000 – 650
Aromatique	(étirement)	3 150 – 3 050
	(flexion hors plan)	900 – 600
Alcyne	(étirement)	~ 3 300
Aldéhyde		2 900 – 2 700
C=C	Alcène	1 680 – 1 600
	Aromatique	1 600 & 1 475
C≡C	Alcyne	2 250 – 2 100
C=O	Aldéhyde	1 740 – 1 720
	Cétone	1 725 – 1 705
	Acide carboxylique	1 725 – 1 700
	Ester	1 750 – 1 730
	Amide	1 680 – 1 630
	Anhydride	1 810 – 1 760

Liaison	Type de vibration	Nombre d'ondes Plage (cm ⁻¹)
C-O	Alcools, esters, éthers, acides carboxyliques, anhydrides	1 300 – 1 000
O-H	Alcools, phénols Libre	3 650 – 3 600
	Liaison H Acides carboxyliques	3 400 – 3 200 3 400 – 2 400
N-H	Amines et amides primaires et secondaires (étirement) (flexion)	3 500 – 3 100 1 640 – 1 550
C-N	Amines	1 350 – 1 000
C=N	Imines et oximes	1 690 – 1 640

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Installation générale



- La source IR génère un faisceau infrarouge (source lumineuse large)
- L'interféromètre (configurations miroir) crée un schéma d'interférence
- La surface de l'échantillon définit l'échantillon, le faisceau infrarouge passe à travers l'échantillon
- Le détecteur génère un interférogramme
- L'ordinateur convertit l'interférogramme en spectre

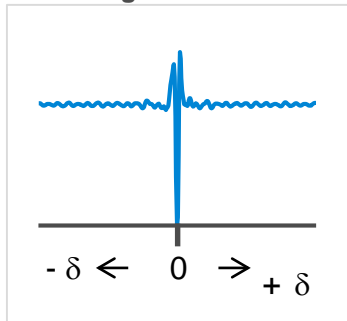
Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Interférogramme

Un interférogramme est un graphique de l'intensité infrarouge vs. la position du miroir mobile.

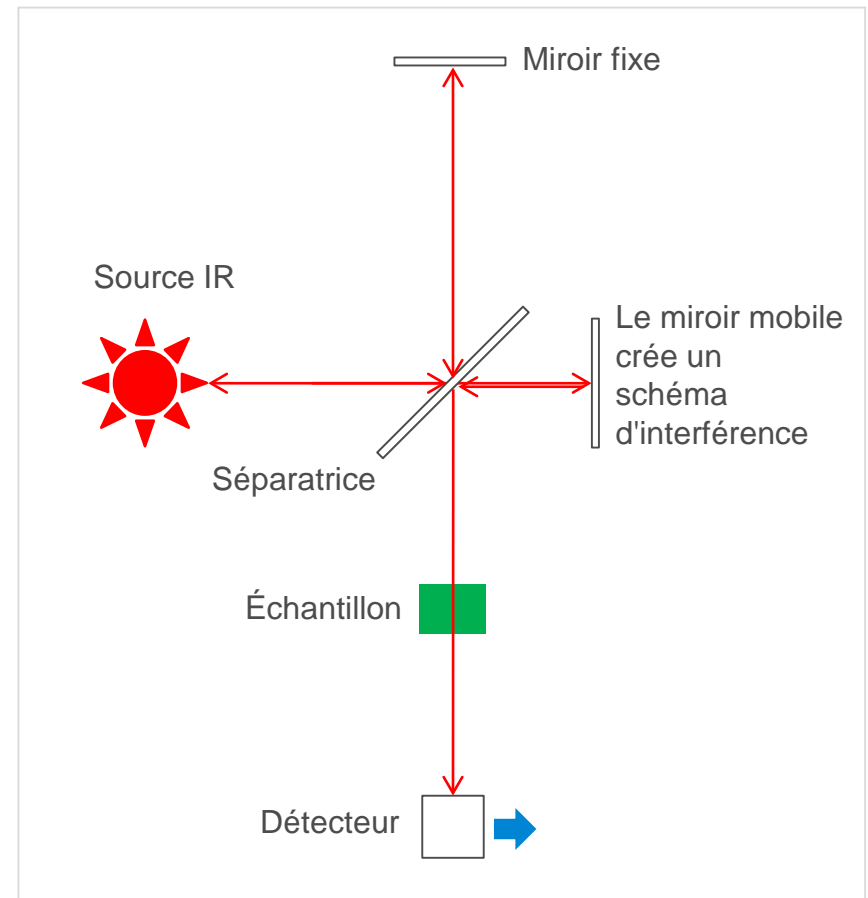
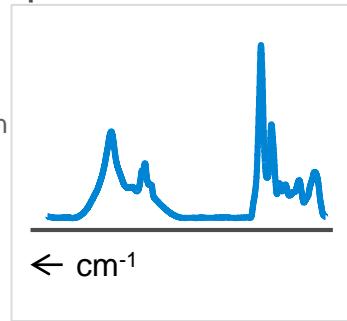
L'algorithme de la transformée de Fourier convertit un interférogramme en spectre en séparant les fréquences d'absorbance individuelles et en créant un graphique intensité vs. nombre d'ondes.

Interférogramme



Transformation de Fourier

Spectre

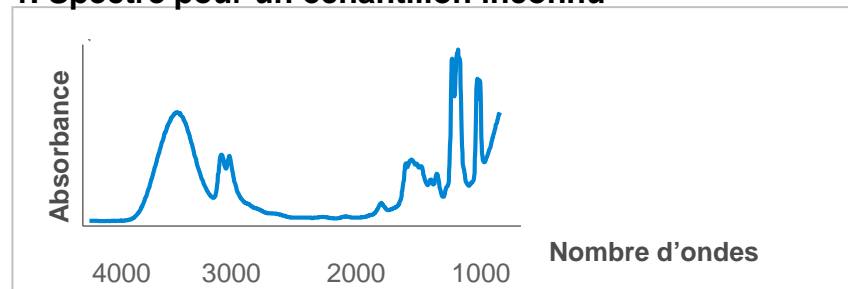


Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

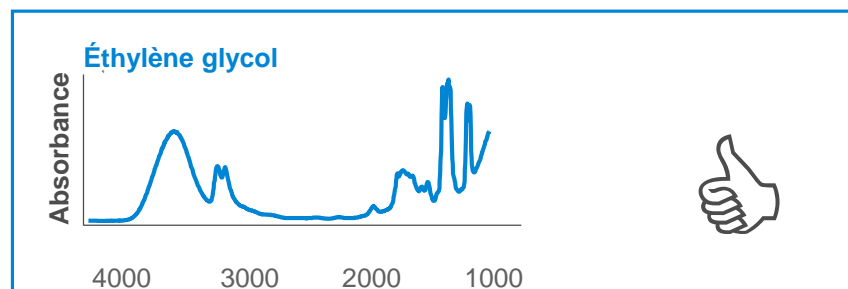
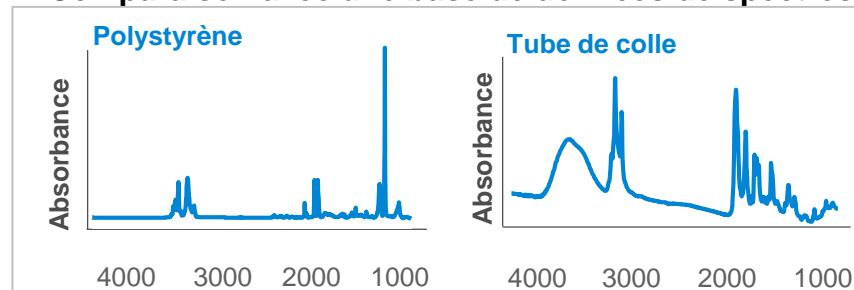
Analyse qualitative

- Les composés peuvent être identifiés par leur spectre infrarouge unique
- Les spectres infrarouges apportent une vision dans la structure moléculaire (par exemple, la présence d'un groupe cyano)
- Les ordinateurs peuvent rechercher les bases de données infrarouge pour identifier le composé

1. Spectre pour un échantillon inconnu



2. Comparaison avec une base de données de spectres

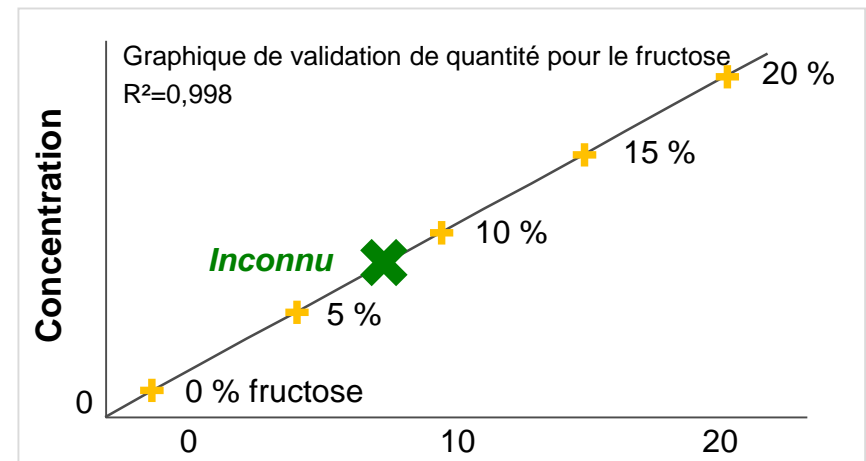
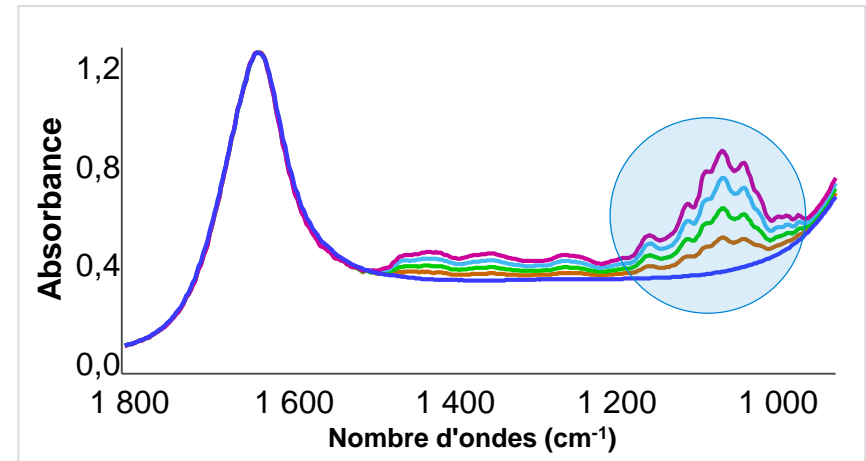


Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Analyse quantitative

Quantification

- La loi de Beer-Lambert peut être appliquée en spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier
- Comparer l'échantillon à la courbe d'étalonnage vs. concentration d'un étalon
- Applicable aux mélanges – quantification simultanée



Courbe d'étalonnage du fructose de 0-20 %

Source : Matériel de formation interne Agilent

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier Système

Principales applications

- Imagerie biomédicale (tissu)
- Imagerie chimique
- Contrôle des procédés (biodiesel)
- Recherche/contrôle de polymère/matériau
- Applications médico-légales (taux d'alcool dans le sang)

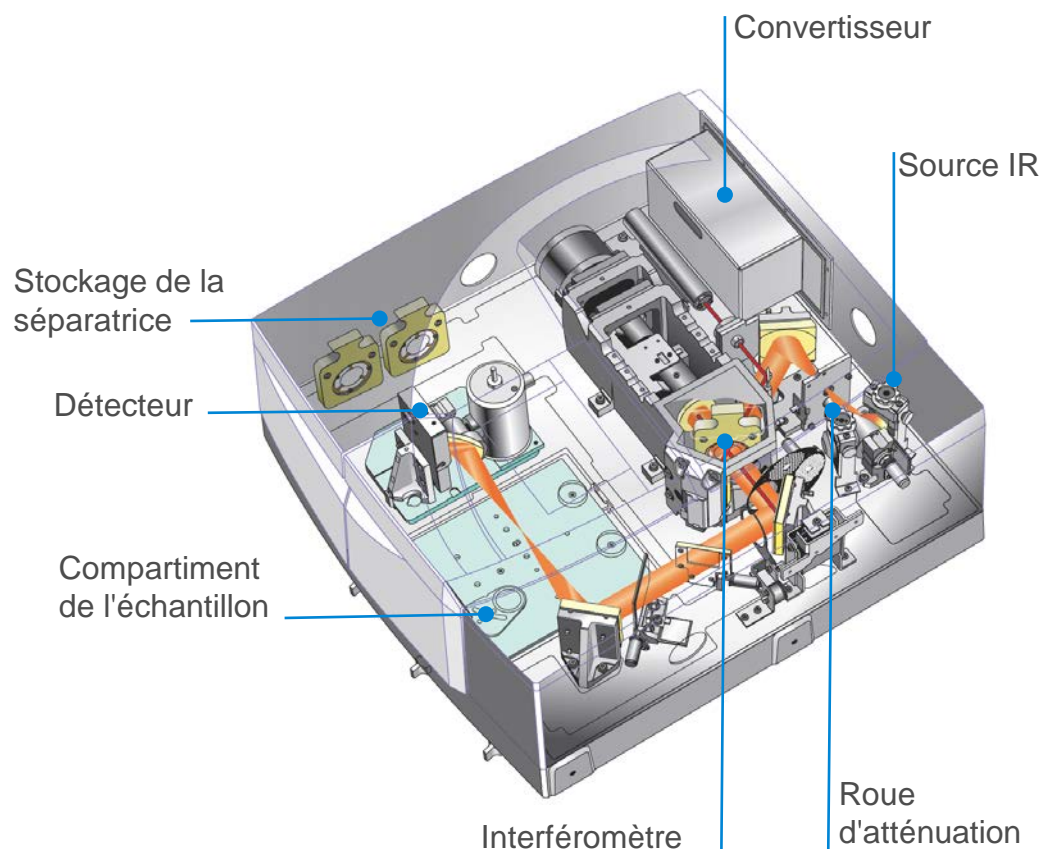


Table des matières

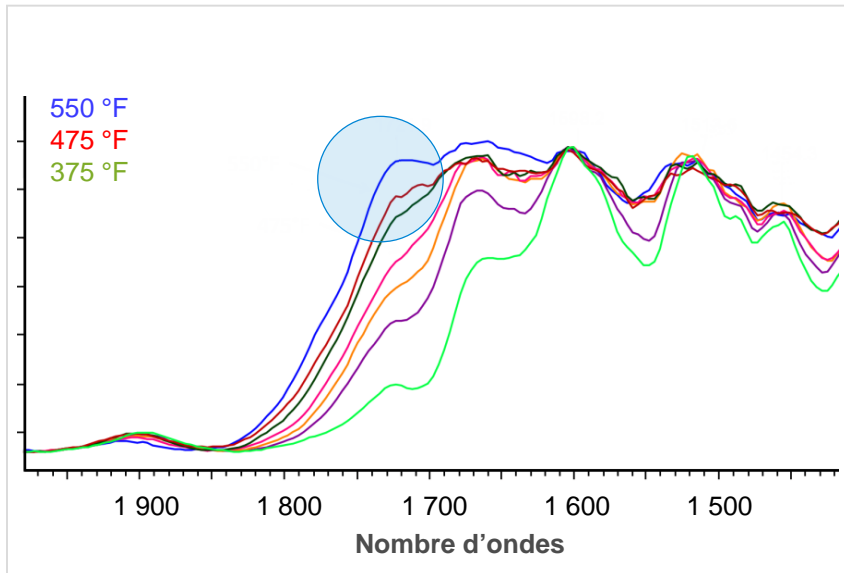
Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Applications

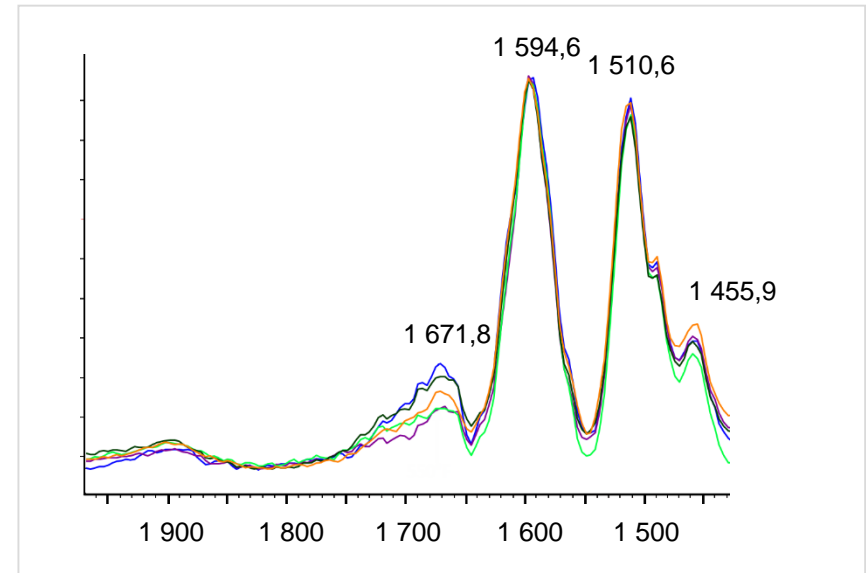
MARCHÉ	APPLICATIONS
Matériaux	<ul style="list-style-type: none">• La chaleur et les UV endommagent les composés, la polymérisation des composés• Identification du revêtement de la surface, propreté et préparation des surfaces, usure du revêtement et altération• Contrôle-qualité, conservation artistique et historique, recherche de matériaux
Secteurs de l'énergie et de la chimie	<ul style="list-style-type: none">• Contrôle-qualité de matières premières et de produits liquides entrant, y compris les composés organiques, les tensioactifs, les lubrifiants et les huiles alimentaires
Alimentaire	<ul style="list-style-type: none">• Contrôle-qualité de matières premières et de produits finis entrant

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Détermination de l'endommagement des composés



Bande de matériau composite « sans sable » Epoxy 1 thermiquement dégradée Les parcelles de composés sont exposées à une plage de température pendant 1 heure. La bande d'absorption à 1 722 cm⁻¹ (cercle bleu) provient de la vibration d'étirement du groupe carbonyle associée à l'oxydation de la résine, et indique une surexposition thermique.



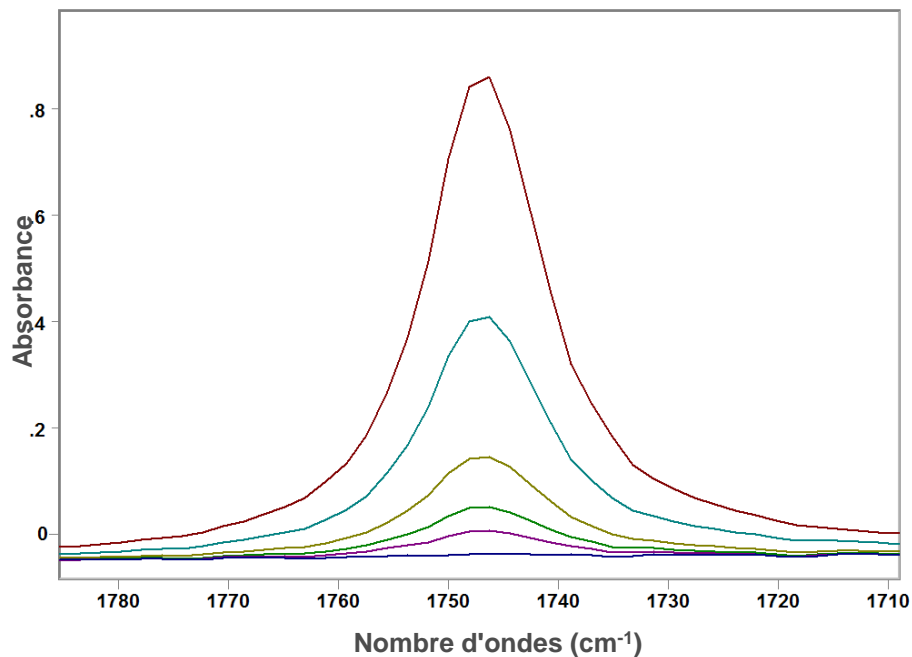
Bande de matériau composite avec sable Epoxy 1 thermiquement dégradé Les parcelles de composés sont exposées à une plage de température pendant 1 heure. La vibration de 1 722 cm⁻¹ est absente dans l'environnement anaérobie.

La diminution d'absorbance à 1 672 cm⁻¹ fournit une bonne corrélation négative à l'exposition thermique.

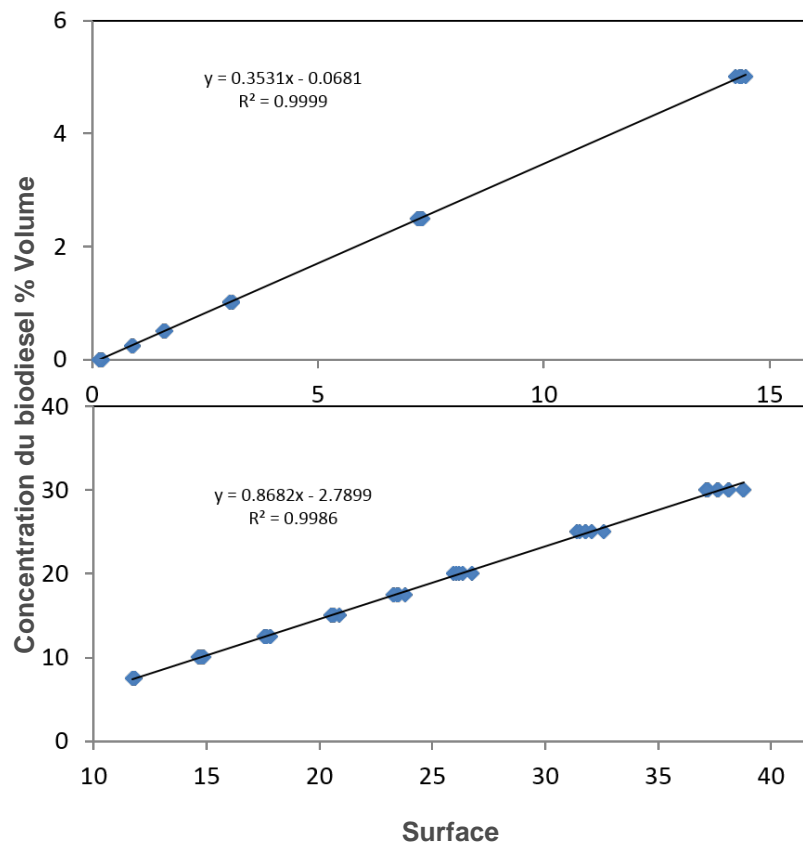
Source : [Évaluation non destructive de dégradation thermique de composés avec le nouveau spectromètre FTIR portatif Agilent 4300](#)

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Mesure de la concentration en biodiesel dans un carburant diesel à haute teneur en cétane



Spectres infrarouges superposés des carburants diesels et étalonnage pour différentes concentrations en biodiesel dans un carburant diesel à haute teneur en cétane. Région d'absorbance 1 713 à 1 784 cm⁻¹ utilisée pour l'étalonnage de la plage de concentration de 0 à 6 %.



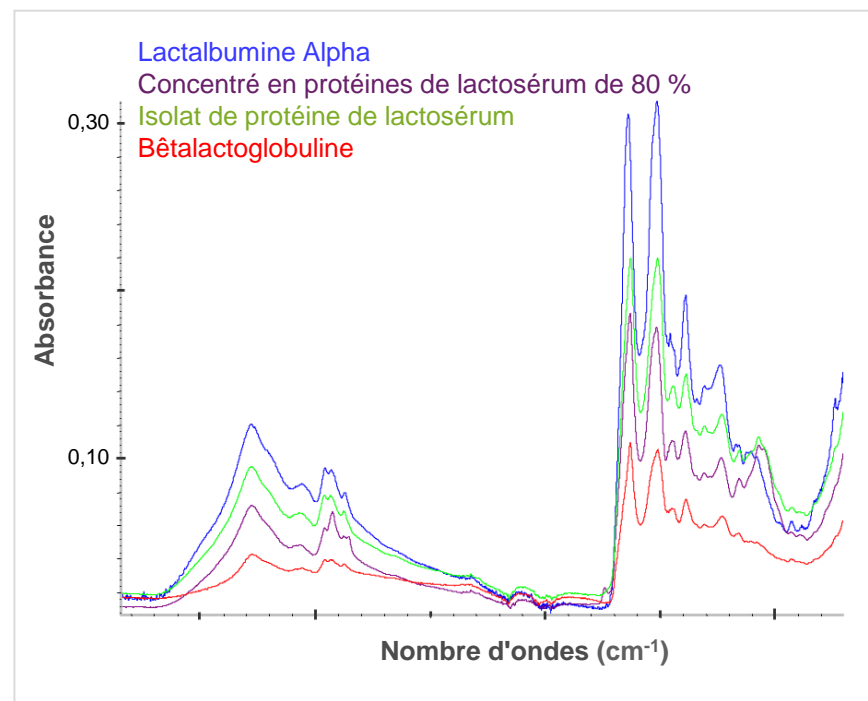
Source : [ASTM D7806-12 pour le biodiesel dans les carburants diesel à base de pétrole](#)

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Contrôle-qualité des poudres de lait

L'acquisition de spectre a été effectuée en :

- Plaçant une petite quantité de poudre de protéine sur la surface ATR en diamant.
- Pressant les échantillons contre le cristal de diamant en utilisant la pince de pression. (Une tarre sur la pince évite de trop serrer.)
- Acquisition des spectres 64 co-ajoutés (temps d'acquisition ~30 sec à une résolution de 4 cm^{-1}) entre 4 000 et 650 cm^{-1} .



Spectres infrarouges de poudres de lait sélectionnées enregistrés sur l'analyseur ATR-FTIR Cary 630

Source : [AQ/CQ de poudres de lait en utilisant le spectromètre Agilent Cary 630 ATR-FTIR](#)

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Mesure de l'acrylamide dans des chips de pomme de terre

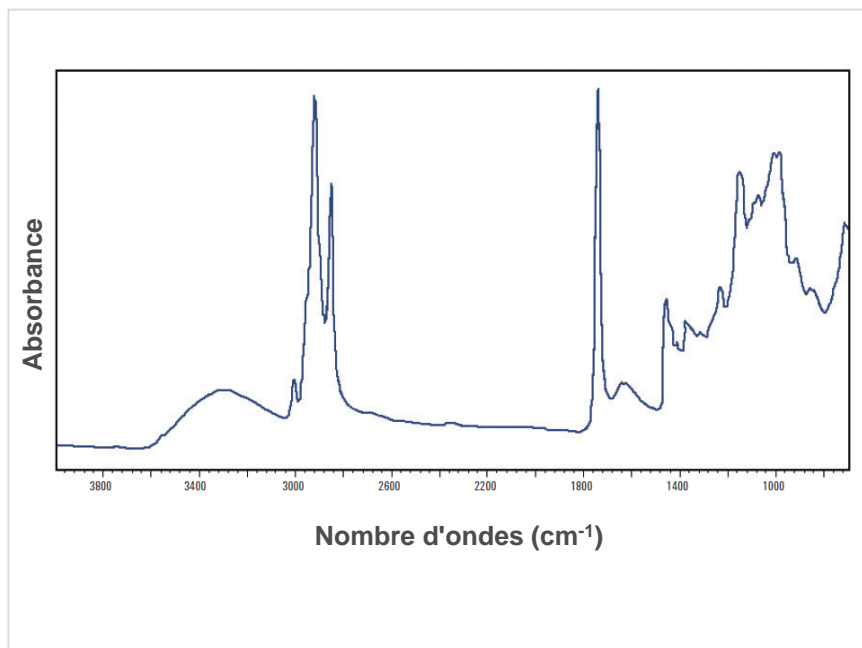
Sensor	Potato Chip Type	Factors	SE ($\mu\text{g/L}$)	r	
Portable Cary 630 MIR	aRegular	Calibration	7	65	0.95
		Cross Val.	7	74	0.93
		Prediction*	7	75	0.90
	bSeasoned	Calibration	7	59	0.96
		Cross Val.	7	75	0.92
	cSweet	Calibration	7	74	0.99
Cross Val.		7	98	0.98	

a "Regular" refers to potato chips containing only potatoes, vegetable oils and salt.

b "Seasoned" refers to potato chips containing additional ingredients.

c "Sweet" refers to sweet-potato chips.

* independent variable predictions made on regular potato chips only



Résultats et spectre d'un gâteau de chips de pomme de terre comme mesurés par l'analyseur FTIR portatif équipé avec la technologie d'échantillon ATR avec diamant à réflexion simple.

Source : [Compendium de spectroscopie moléculaire - Assurer la qualité, la production et la sécurité alimentaire](#)

Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier

Capacités

La spectroscopie infrarouge est une technique puissante et versatile qui peut être utilisée pour analyser les gaz, les liquides et les solides.

Elle est souvent utilisée pour identifier les structures car les groupements fonctionnels font apparaître des bandes caractéristiques en termes d'intensité et de positionnement (fréquence).

C'est une technique simple, fiable, largement utilisée dans la recherche appliquée à l'industrie.

Spectroscopie de fluorescence

Avantages

- Simple à effectuer
- Analyse précise et rapide
- Peut supporter plusieurs types et tailles de solutions différents
- Peut être qualitatif et quantitatif
- Nécessite souvent peu ou pas de préparation d'échantillons
- Non destructif

Limitations

- La molécule doit réagir à la lumière infrarouge
- Information élémentaire minimale

Abréviations

Abréviation	Définition
A	absorbance
b	chemin (cm)
c	vitesse de la lumière ($3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$)
ϵ	coefficient d'extinction ou absorption molaire ($\text{l mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$)
E	champ électrique oscillant
<i>E</i>	énergie
FTIR	infrarouge à transformée de Fourier
h	constante de Planck ($6,62 \times 10^{-34} \text{ Js}$)
I	radiation transmise
I_0	radiation incidente
λ	longueur d'onde
T	transmission
UV-VIS	ultraviolet – visible
ν	fréquence (s^{-1})



Informations complémentaires

Pour des informations complémentaires sur les produits Agilent, consulter www.agilent.com ou www.agilent.com/chem/academia

Pour nous soumettre des questions ou remarques concernant cette présentation: academia.team@agilent.com

Early history	“The Early History of Spectroscopy” by Nicholas C. Thomas, <i>J Chem Edu</i> , Vol 68, 6, August 1991	
Primer	Fundamentals of UV-visible spectroscopy	5980-1397EN
Application	Measuring optical densities over 10 Abs on the Agilent Cary 7000 Universal Measurement Spectrophotometer (UMS)	5991-2528EN
Application	Measuring the color of a paint on canvas directly with external diffuse reflectance using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer	5991-3783EN
Application	Simple, automated measurements of the photocatalytic properties of colorimetric species using the Agilent Cary 60 UV-Vis spectrophotometer with fiber optics	5990-7864EN
Application	Cytosolic expression of Green Fluorescent Protein (GFP) and its derivatives in the yeast <i>Saccharomyces cerevisiae</i>: Detection in vivo using the Agilent Cary Eclipse	SI-A-1831
Application	Quantification of complex polycyclic aromatic hydrocarbons or petroleum oils in water with Cary eclipse fluorescence spectrophotometer according to astm d 5412-93 (2000)	5991-3166EN
Application	Non-Destructive Evaluation of Composite Thermal Damage with Agilent’s New Handheld 4300 FTIR	5991-4037EN
Application	ASTM D7806-12 for Biodiesel in Petroleum-based Diesel Fuel Oil	5991-5591EN
Application	QA/QC of dairy powders using the Agilent Cary 630 ATR-FTIR analyzer	5991-0784EN
Application	Molecular Spectroscopy Compendium - Ensure food quality, production, and safety	5991-3818EN
Web	CHROMacademy – free access for students and university staff to online courses	
Videos & Images	www.agilent.com/chem/teachingresources	

Table des matières



MERCI

Numéro de publication: 5991-6592FR

◀ **Table des matières**

À des fins pédagogiques uniquement

March 7, 2016

50

 **Agilent Technologies**

**ACADEMIC
& INSTITUTIONAL
RESEARCH**