
INTRODUCTION UVWINLAB

GENERAL

Ce manuel est une introduction au logiciel UVwinlab. A partir de d' exemples vous deviendrez familiers avec les fonctions principales de ce logiciel.

- Les méthodes de base(une méthode comprend tous les paramètres nécessaires pour une tache analytique spécifique).
 - ⇒ Scan:Balayage pour l'enregistrement de spectres
 - ⇒ Time Drive:enregistrement de l'ordonnée en fonction du temps (mesures de cinétique par exemple).
 - ⇒ Wavelength Program:mesures à plusieurs longueurs d'onde
 - .

- Les traitements de données.

- Les options de visualisation des spectres.

1.1 Préalables.

Avant de démarrer le tutorial, l'installation du spectromètre, du PC de l'imprimante, et du logiciel Uvwinlab doit être terminée.

Vous trouverez les instructions d'installation dans les documents du spectrophotomètre, et dans la documentation du logiciel UV Winlab.

Vous devrez avoir une connaissance de l'environnement Windows. Vous devrez savoir

⇒ comment démarrer un logiciel à partir de Windows.

⇒ comment utiliser la souris.

⇒ comment déplacer, sélectionner et changer la taille des fenêtres.

⇒ comment entrer des paramètres .

Si vous travaillez avec Windows pour la première fois, lisez la documentation Windows afin de devenir familier avec cet environnement .

1.2 Avant de démarrer

Avant de démarrer le premier exemple dans le chapitre suivant:

1) Lire les pages de sécurité au début de la documentation du spectromètre.

2) allumer le spectromètre, l'imprimante et le PC comme indiqué dans la prochaine section.

3) Démarrer le logiciel UV Winlab comme indiqué dans la prochaine section.

Après ces différentes étapes vous pouvez démarrer le premier exemple du chapitre 2.

1.3 Demarrage

Spectromètre

- 1) ouvrir le couvercle du compartiment échantillon.
- 2) Vérifier que le trajet du faisceau dans le compartiment échantillon est libre.
 - Pas d'objet(cables,etc.) dans le trajet du faisceau;
 - portoirs référence et échantillon vides;
 - Accessoires correctement installés.

Notes: Si le trajet du faisceau est obstrué pendant la procédure de démarrage ,le spectromètre ne sera pas initialisé correctement.

- 3) Fermer le couvercle du compartiment échantillon.

- 4) allumer l'appareil.

- 5) attendre jusqu'à l'apparition de l'écran d'attente.

Toutes les versions de spectromètre n'ont pas cet écran.

Note: Avant de démarrer les analyses laisser la lampe chauffer et se stabiliser pendant 10 minutes environ.

PC, Logiciel et imprimante

- 1) Allumer le PC et l'imprimante.
- 2) démarrer MS Windows.
- 3) ouvrir le groupe contenant l'icône UV Winlab(normal.ement PE Applications)
- 4) double cliquer sur l'icône UV Winlab.
Le Pc charge les modules ,Instrument Server,Data Server et Graph Server.
- 5) A la fin de l'initialisation la fenêtre des méthodes est ouverte

1.4)Arrêt du système.

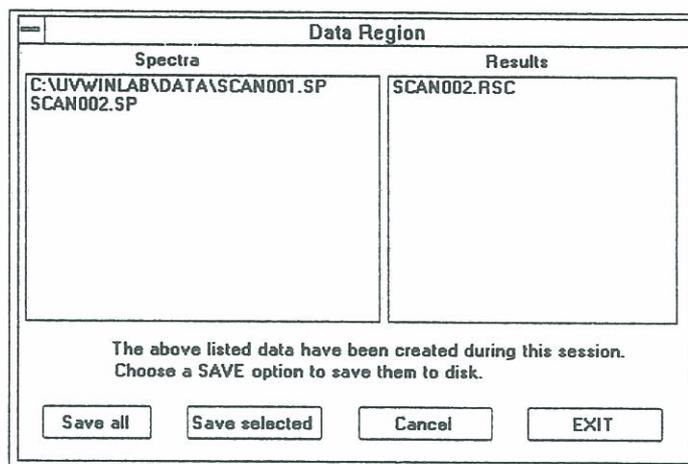
Quand vous souhaitez arrêter le système, procéder dans l'ordre suivant:

1) fermer la fenêtre des méthodes.

2) sortir de UV Winlab.

3) La fenêtre **Data Region** apparaît. Les données créées pendant la journée sont listées.

Figure 1.1 Fenêtre **Data region** quand on sort de UV Winlab.



4) Sélectionner les fichiers que vous voulez sauvegarder sur le PC. Les fichiers qui ne sont pas sélectionnés seront perdus en sortant de UV Winlab.

a) Si vous voulez sauvegarder tous les fichiers, cliquer sur **Select all**.

...ou...

b) Sélectionner les fichiers que vous voulez sauvegarder (les fichiers sont sélectionnés suivant les conventions Windows.)

c) cliquer sur **Save Selected**.

...ou...

d) Si vous ne souhaitez pas sauvegarder de fichiers cliquer sur **Exit**.

1.5) La fonction AIDE

Quand vous déplacez la souris sur une icône ou sélectionnez un paramètre dans la méthode, une information est fournie sur la ligne d'information en bas de l'écran.

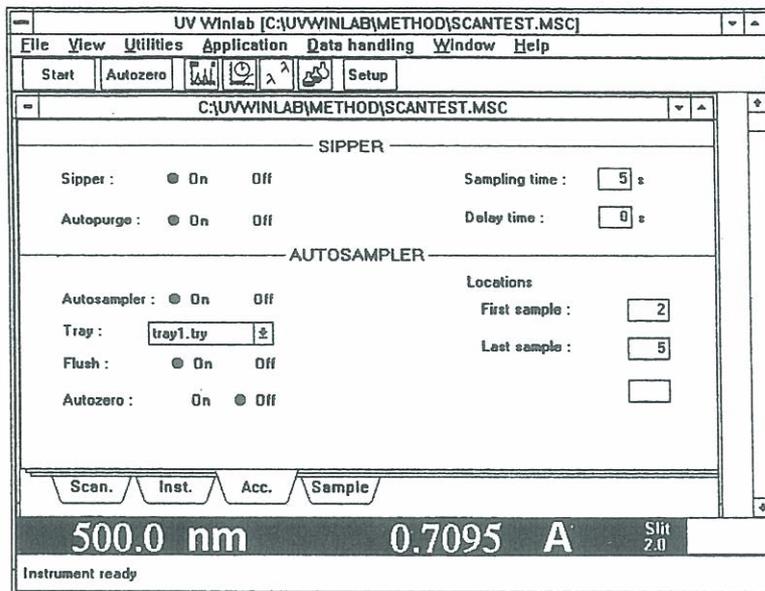
Vous trouverez une information détaillée sur le logiciel et les paramètres dans une aide en ligne. Vous avez accès à cette aide en utilisant le menu **Help** ou en pressant la clé **F1**.

1.6) Quand des accessoires sont installés

Quand des accessoires sont installés dans votre spectromètre, vous trouverez une page supplémentaire **Accessory** dans l'éditeur de méthode. La page **Accessoire** est utilisée pour contrôler les accessoires. Un exemple est montré ci-dessus.

Quand vous utilisez ce tutorial, le spectromètre opère sans accessoire. Eteindre tous les accessoires. Vous n'aurez qu'à sélectionner **Off** pour chaque accessoire.

Figure 1.2 La page Accessoire pour l'injecteur automatique et le système d'aspiration.



2.1 Au sujet de cet exemple

Le premier exemple introduit les principes opératoires de base du logiciel UV Winlab. Comme exemple ; nous utiliserons une méthode de balayage pour enregistrer le spectre de l'acétone. Cet exemple prend environ 30 minutes.

Matériel nécessaire:

eau désionisée, acétone, fiole jaugée(500ml), pipette, 2 cuves en quartz.

2.2 introduction

un balayage de spectre est une technique fondamentale en spectroscopie UV/VIS. aussi le tutorial démarre avec cette fonction .

En balayant un spectre vous pouvez déterminer les longueurs d'ondes pour des mesures de concentration, de cinétiques, etc..

Le logiciel UV Winlab opère en utilisant des méthodes. Pour chaque tâche analytique une méthode de base est présente. (une méthode est un set complet de paramètres pour une tâche analytique). Pour balayer un spectre une méthode de balayage (Scan) est utilisée.

Un balayage de spectre s'effectue de la manière suivante:

1. Vous ouvrez l'édition de méthode pour les méthodes de balayage.
2. Vous éditez la méthode suivant la tâche analytique.
3. Vous démarrez la méthode et le spectre est balayé.
4. Les résultats sont affichés dans la fenêtre **Graph1** et **Results**.

Dans cet exemple vous balaierez le spectre de l'acétone. Quand vous balayez le spectre d'une substance inconnue (comme nous le supposons dans cet exemple) vous devez balayer sur la gamme complète de longueurs d'onde; sinon vous risquez de manquer un pic d'absorption.

Après l'acquisition du spectre; celui-ci est en mémoire et vous pouvez agrandir n'importe quelle partie du spectre, créer des listes de pics, effectuer des calculs, etc.

Le chapitre 3 vous introduira au traitement des données.

2.3 acquisition du spectre

Avant de démarrer l'exemple ;allumer le spectromètre,PC,imprimante,et démarrer le logiciel,comme décrit dans la section 1.3.

2.3.1 Préparation de l'échantillon

Préparer une solution d'acétone dans l'eau(1/100).
Garde cette solution,elle servira dans les chapitres suivants.

1) pipetter 5 ml d'acétone dans une fiole jaugée de 500ml.

2) compléter avec de l'eau désionisée.

Garder cette solution bien fermée afin d'éviter l'évaporation.

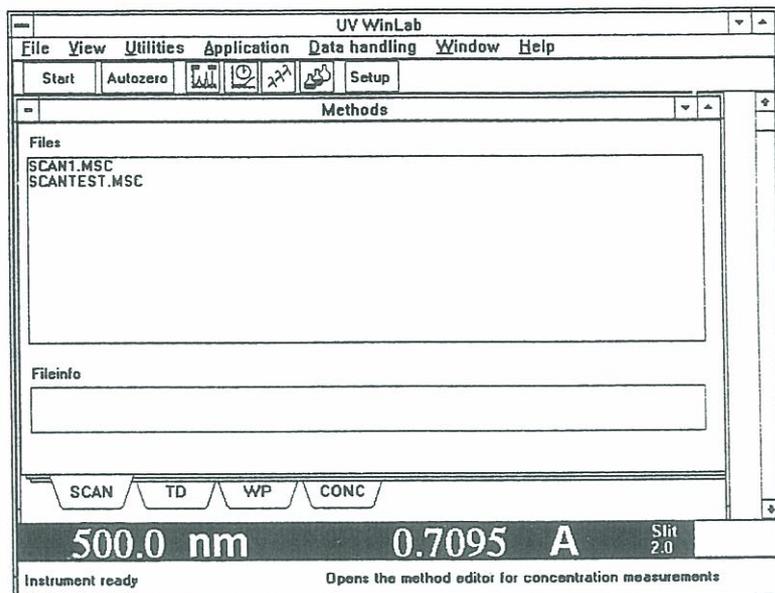
2.3.2 Ouvrir la méthode

1)Après le démarrage de UV Winlab, la fenêtre des **méthodes** apparait,listant les méthodes existantes.

Pour chaque type d'acquisition une méthode prédéfinie est présente et les méthodes sont listées sur des pages séparées:

SCAN(méthode de balayage de spectres),**TD**(Time Drive,acquisition en fonction du temps),**WP**(Wavelength Program ,mesures à plusieurs longueurs d'onde),et **CONC**(mesure de concentration).

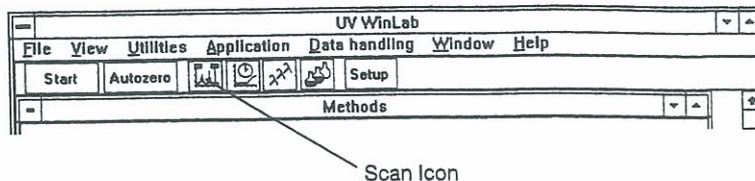
Figure 2.1 La fenêtre des méthodes.



2)Passer d'un type de méthode à l'autre en cliquant sur l'étiquette correspondante en bas de l'écran.

3) Cliquer sur l'icône Scan

Figure 2.2 L'icône Scan.



4) L'édition de méthode pour la première méthode de balayage (scan1) est ouverte. Vous entrez les paramètres dans cette fenêtre.

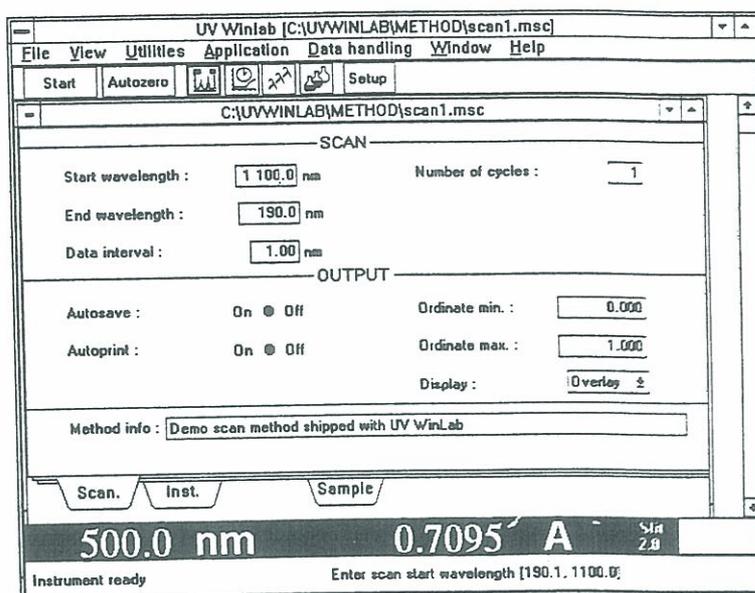


Figure 2.3 La fenêtre Edition de méthode.

2.3.3 Modifier la méthode

Les méthodes sont éditées en utilisant l'éditeur de méthodes. Mais cette fenêtre n'est pas la seule présente quand on travaille avec UVWinlab.

1) Derrière la fenêtre d'édition de méthode, les fenêtres Result, Graph1, et Data region sont affichées sous forme d'icônes.

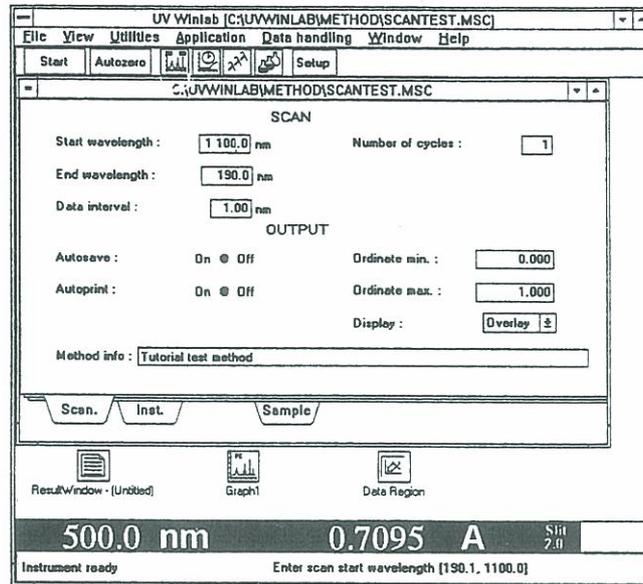
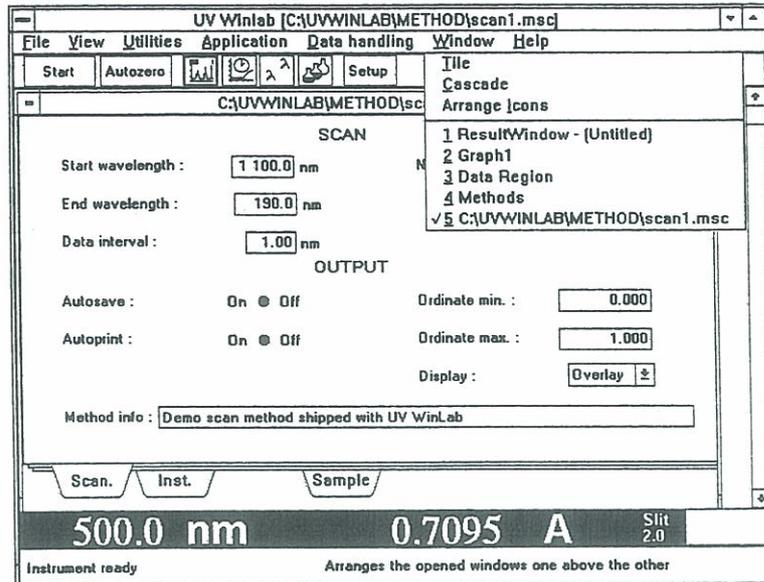


Figure 2-4 Fenêtre d'édition de méthode et les icônes.

Quand vous ne pouvez pas voir ces icônes, augmenter la taille de la fenêtre de UV Winlab, ou utiliser la barre scroll, ..ou..

2) ouvrir le menu **Windows**.

En bas, vous trouverez la liste des fenêtres présentes.



La fonction de chaque fenêtre est:

c:\UVWINLAB\METHOD\scan1.msc édition de méthode pour entrer les paramètres des méthodes.

-graph1

affichage des résultats graphiques(spectres par exemple) de la méthode actuelle ou de la commande actuelle.

-ResultWindow

affichage des résultats numériques de la méthode actuelle ou de la commande actuelle

-Data Region

la Data Region est la mémoire temporaire dans laquelle les données sont stockées tant que le logiciel est ouvert. Quand le logiciel est fermé ces données sont perdues, à moins de les sauvegarder sur le disque.

Regardons de plus près la fenêtre:

1) passons d'une fenêtre à l'autre:

a) cliquer sur la fenêtre souhaitée si elle est visible.

..ou..

b) double-cliquer sur l'icône

..ou..

c) ouvrir le menu **Window** et cliquer sur le nom de la fenêtre requise.

2) Fermer les fenêtres **Results, graph1, et data region** de nouveau.

3) sélectionner une nouvelle fois la fenêtre d'édition de méthode

appelée **C:\UVWINLAB\METHOD\SCAN1.MSC**) en utilisant un des moyens cités en 1)

Edition de la méthode

Maintenant entrons les paramètres de la méthode dans la fenêtre d'édition de méthode:

1) La fenêtre d'édition de méthode comprend plusieurs pages. Passer d'une page à l'autre en cliquant sur les étiquettes en bas de la fenêtre.

2) Entrer les différentes valeurs sur la première page, Scan:

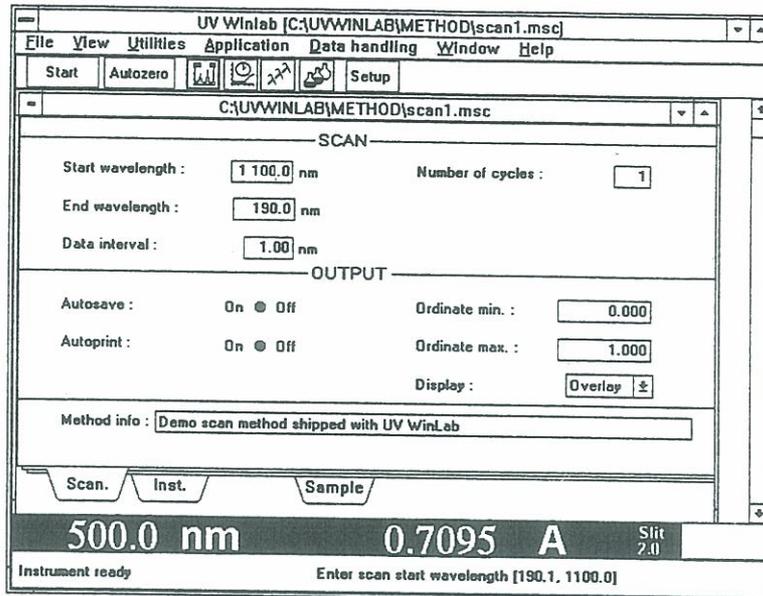


Figure 2-6 Edition de méthode, page Scan

3) cliquer sur l'étiquette **Inst.**. Entrer les paramètres instrumentaux suivants sur cette page:

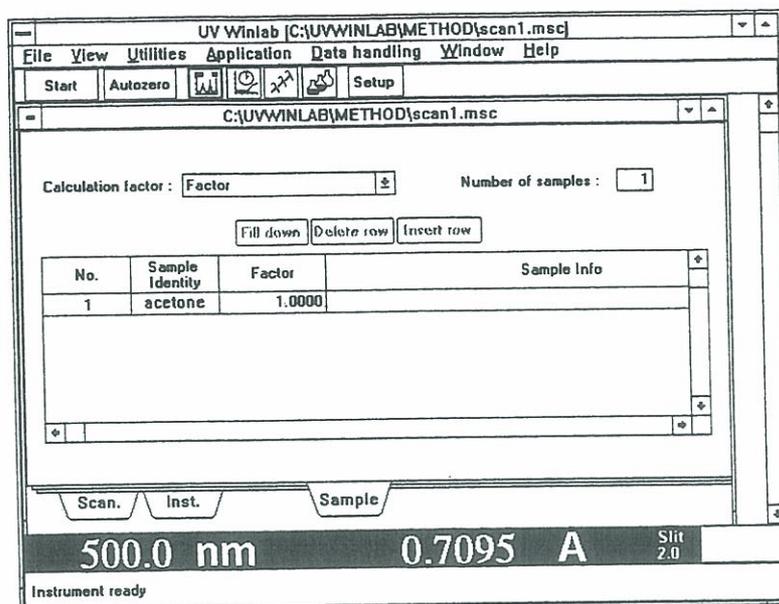


Figure 2-7 Edition de méthode, Page Instrument.

4) Cliquer sur l'étiquette **Sample**. Le nom de l'échantillon, des informations, et des facteurs de calcul sont entrés sur cette page.

a) Dans cet exemple vous voulez mesurer seulement un échantillon, aussi utiliser les valeurs par défaut.

b) Dans la colonne **Sample Identity** entrer le nom de l'échantillon **acétone**. Ce nom sera aussi utilisé comme nom de fichier pour le stockage du spectre.

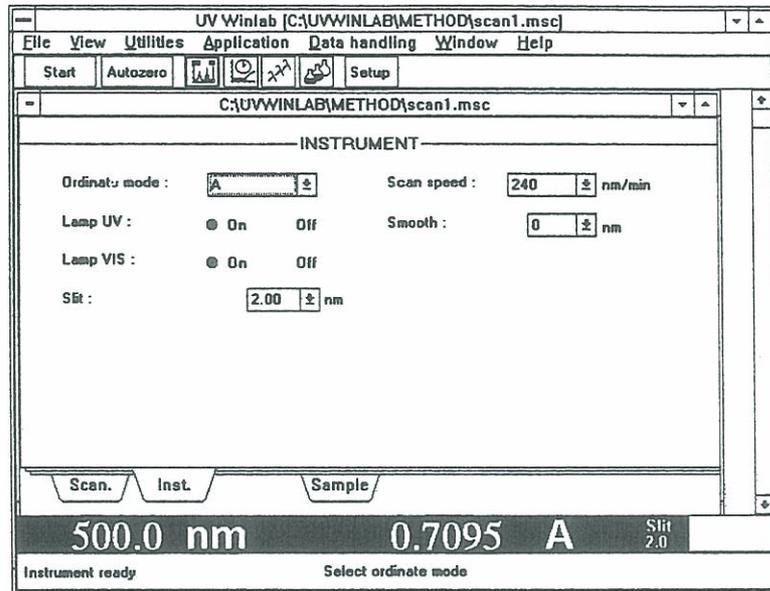


Figure2-8 Edition de méthode,Page Echantillon

5) Quand des accessoires sont installés dans votre spectromètre, vous trouverez une page supplémentaire **Accessory**. Dans ce cas voir section 1.6.

6) Vous avez rentré tous les paramètres. Maintenant sauvegardez la méthode.

a) La fenêtre d'édition de méthode doit être active. Ouvrez le menu **Fichier** et cliquez sur **Save As** (Vous souhaitez sauvegarder la méthode sous un nouveau nom)

b)Le dialogue Method SaveAs est ouvert.Entrez comme nouveau nom de méthode scantest.

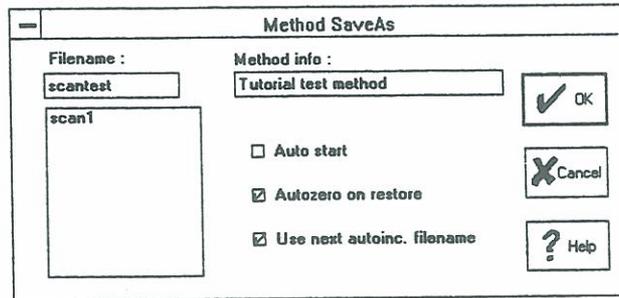


figure 2.9 dialogue Save As

c)Vous pouvez en plus sélectionner d'autres options.

Sélectionnez **Autozero on restore**. A chaque fois que vous réactivez la méthode un autozero ou enregistrement d' une ligne de base est effectué avant les mesures.

d)Sélectionnez **Use next autoinc.filename**. Quand vous utilisez des noms de fichiers du type scan001,scan002,ils seront automatiquement incrémentés et les nouveaux échantillons seront sauvegardés sous le prochain numéro de fichier libre .

7) Vous pouvez maintenant démarrer la méthode.

2.3.4 Démarrer la méthode

1) Placer une cellule en quartz contenant une solution d'un blanc, en position référence. Dans ce cas de l'eau désionisée sera utilisée comme blanc.

2) Cliquer sur le bouton **Start**.

Le bouton **Start** devient **Stop** et un **Autozero** est proposé. Il est conseillé d'effectuer une correction de ligne de base avant de démarrer les mesures.

3) Placer une cellule en quartz contenant également le blanc, en position échantillon. Fermer le capot du compartiment échantillon.

4) Cliquez sur **OK**.

Une correction de ligne de base est réalisée de la longueur d'onde maximum à la minimum.

5) Le premier échantillon est demandé. Placer la cuve avec l'échantillon en position échantillon.

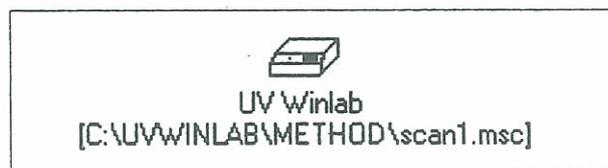
Afin d'éviter l'évaporation vous pouvez mettre un couvercle sur la cuve ou du papier parafilm.

6) Cliquer sur **OK**.

L'analyse démarre et le spectre est enregistré. Pendant l'analyse, les valeurs d'absorbance sont affichées sur l'écran et le spectre est tracé en temps réel dans la fenêtre **Graph1**.

7) Minimisez UV Winlab en cliquant sur le bouton correspondant de la fenêtre **UV Winlab**.

L'application est alors sous forme d'une icône. L'acquisition continue et vous pouvez effectuer d'autres tâches simultanément.



8) Double-cliquer sur l'icône **UV Winlab**. L'application est de nouveau plein écran.

9) A la fin de l'acquisition le bouton **Start** apparaît de nouveau. Le spectre est affiché dans la fenêtre **Graph1**.

2.3.5 Résultats

Quand vous regardez le spectre, vous pouvez voir que nous avons mal évalué l'échantillon et ainsi nous n'avons pas sélectionné les paramètres optimaux.

L'acétone absorbe dans une gamme réduite de longueur d'onde et absorbe si fort que le spectre est hors échelle en ordonnée.

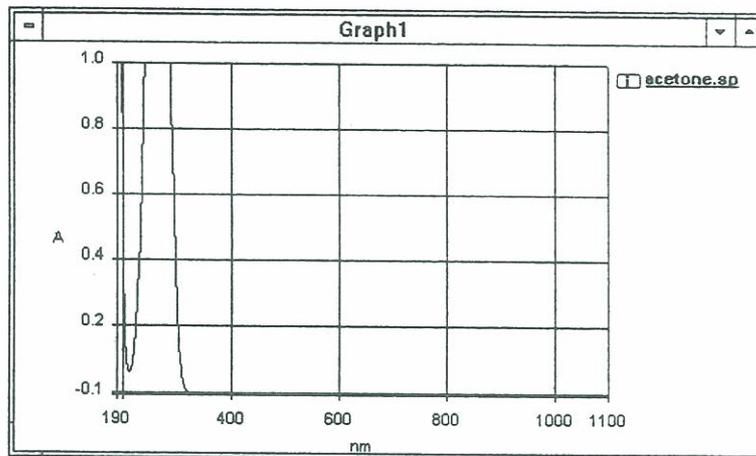


Figure 2-11 Le spectre de l'acétone.

Toutefois les données complètes sont stockées dans le PC et vous pouvez modifier les échelles dans la fenêtre **Graph1** pour voir le spectre complet.

Changer l'affichage graphique.

Pour changer l'affichage graphique procéder de la manière suivante.

1) Cliquez sur l'icône Expansion d'ordonnée ,ou ouvrez le menu View et cliquez sur Expand Ordinate.

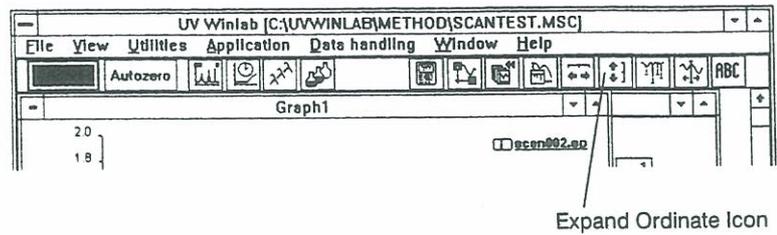
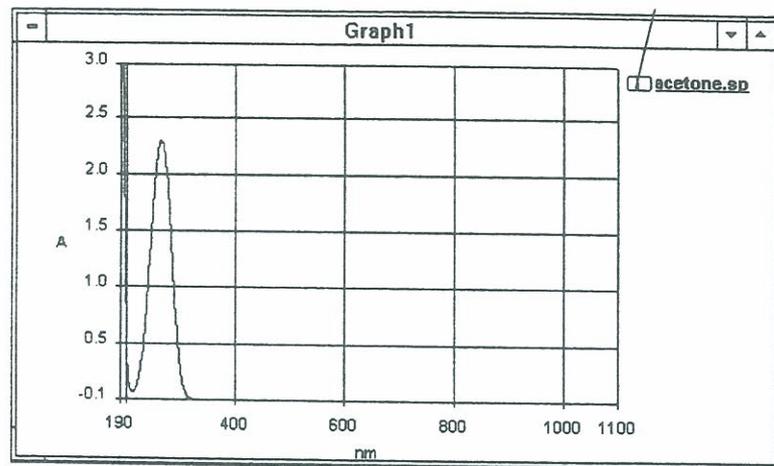


Figure 2-12 L'icône Expand Ordinate(Expansion Ordonnée.)

2) L'échelle Ordonnée est agrandie.

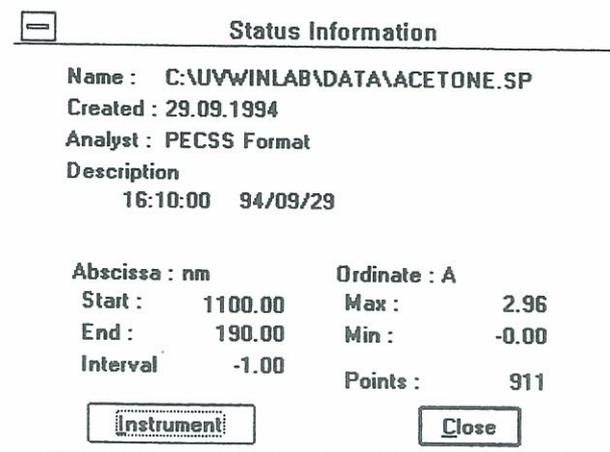


Vous pouvez aussi cliquer sur l'icône Expand Ordinate au cours de l'acquisition et adapter l'échelle en temps réel.

La fenêtre **Graph1** contient des informations supplémentaires sur le spectre.

1) Cliquer sur le bouton d'information situé à la gauche du nom du spectre. Une fenêtre d'information contenant les paramètres d'acquisition du spectre apparaît.

Figure 2-14 Les paramètres du spectre.



2) Cliquer sur **Instrument**.

Les paramètres instrumentaux utilisés pour enregistrer le spectre sont indiqués.

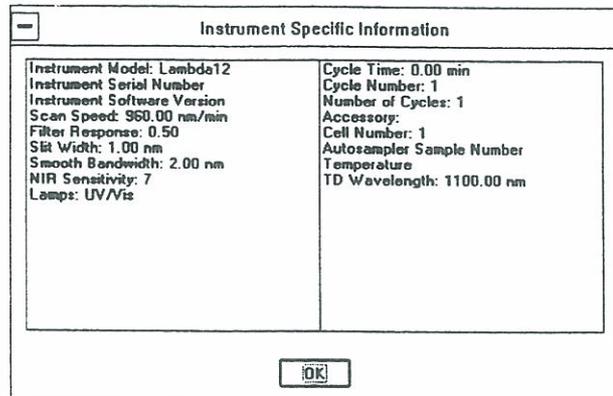


Figure 2-15 Les paramètres instrumentaux.

3) Cliquer sur **Close**.

La fenêtre **Status information** apparaît de nouveau.

4) Cliquer sur **Close**.

Imprimer le spectre.

Vous pouvez imprimer le contenu d'une fenêtre active. Utilisez cette option pour imprimer le spectre.

1) La fenêtre **Graph1** doit être la fenêtre active.

2) Ouvrir la fenêtre **File** et cliquer sur **Print**. Le spectre dans la fenêtre **Graph1** est imprimé.

Sauver le spectre

Vous pouvez sauvegarder le contenu d'une fenêtre active. Utilisez cette option pour sauvegarder le spectre.

1) La fenêtre **Graph1** doit être active

2) Ouvrez le menu **File** et cliquez sur **Save**. Un dialogue est ouvert.

3) Entrer **acétone** comme nom de fichier, laissez les autres valeurs par défaut et cliquez sur **OK**. Le spectre est sauvegardé.

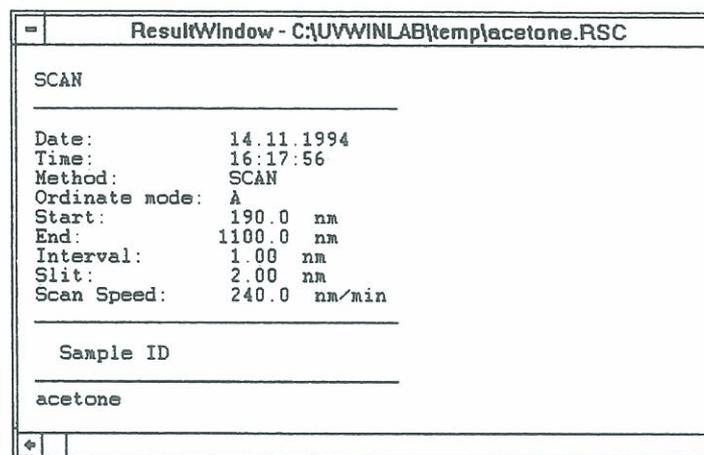
La fenêtre des résultats.

Maintenant jettons un oeil sur la fenêtre **Results**:

1) Cliquez sur la fenêtre **Results** si une partie de celle-ci est visible,
..ou..
Ouvrir le menu **Window** et cliquer sur **ResultWindow**.

2) La fenêtre **Results** est affichée ci-dessous. Elle contient les informations sur le spectre enregistré.

Figure 2-16 La fenêtre **Results**.



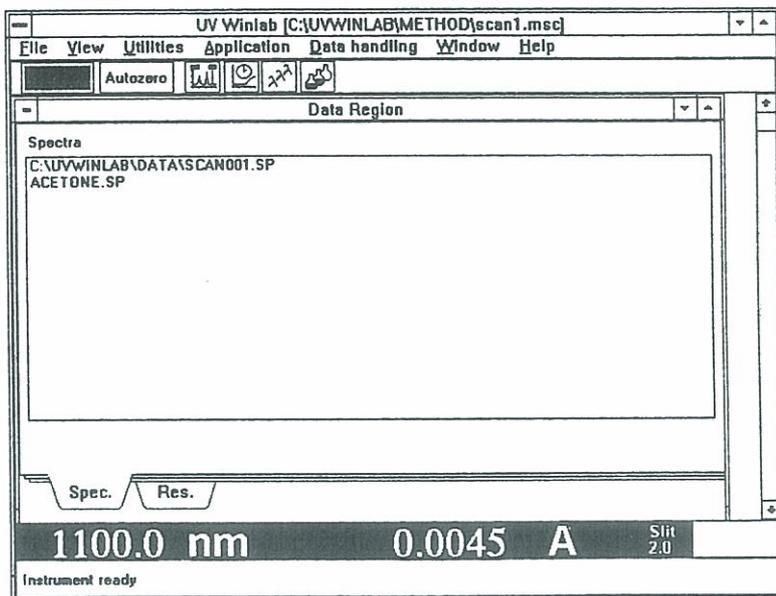
La fenêtre Data Region

Finalement ,regardons la fenêtre **Data region**.

1) Cliquer sur l'icône **Data Region** si elle est visible,
...ou..
Ouvrez le menu **Window** et cliquer sur **Data Region**.

2) La fenêtre **Data region** contient 2 pages, listant les fichiers résultats (**Res.**) et les fichiers spectre (**Spec.**). Vous passez d'une page à l'autre en utilisant les étiquettes en bas de l'écran.

Figure 2-17 La fenêtre Data region.



3) Fermer la fenêtre **Data Region**.

La fenêtre des méthodes.

Retournons à la fenêtre **Methods**:

1) Ouvrez le menu **Window** et cliquez sur **c:\UVWINLAB\METHODS\SCANTEST**

2) Fermer la fenêtre d'édition de méthode.

3) La fenêtre **Methods** apparaît de nouveau. Il y a une nouvelle méthode de balayage, **scantest**. Vous l'avez sauvegardé précédemment.

4) Double-cliquez sur le nom de la méthode **scantest**.

5) La fenêtre d'édition de méthode apparaît de nouveau. Double-cliquez sur le nom de la méthode dans la fenêtre **Methods** est une manière d'ouvrir le fenêtre de l'éditeur de méthode.

6) Fermer de nouveau l'édition de méthode.

Visualisation du spectre.

3.1 au sujet de cet exemple.

Dans cet exemple ,nous allons regarder de plus près le spectre de l'acétone enregistré dans le chapitre précédent.

Nous allons utiliser les options View et Data handling pour agrandir le spectre, étiquetter les pics et ajouter du texte dans le spectre.

Cet exemple prend environ 30min.

3.2 Introduction.

UV Winlab vous permet de changer les échelles de tracé du spectre.

Vous pouvez agrandir les bandes intéressantes , superposer plusieurs spectres, déplacer un curseur vertical et horizontal, et ajouter du texte au spectre.

Les spectres peuvent de plus être traités avec les commandes du menu Data handling. Vous pouvez créer une liste de pics , et lister toutes les données du spectre. Vous pouvez également effectuer des calculs sur le spectre.

3.3 Visualisation du spectre.

3.3.1 Quand votre travail a été interrompu.

Avant de commencer cet exemple ,allumez le spectromètre,PC,imprimante,et démarrez le logiciel UV Winlab comme décrit dans la section 1.3(page 1-3)

3.3.2 ouvrez le spectre.

ouvrez le spectre de l'acétone que vous avez enregistré dans le chapitre précédent:

- 1) Ouvrez le menu File.Cliquez sur Open...
- 2) Sélectionnez le fichier acetone.sp
- 3)Cliquez sur OK.

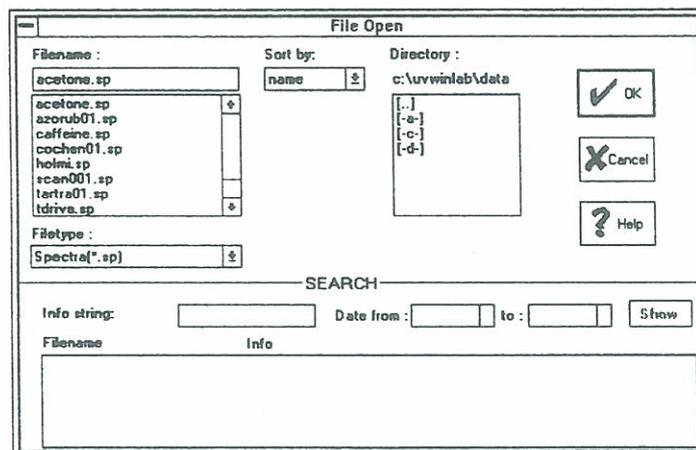


Figure 3-1 Le dialogue File Open.

4)Le spectre est lu à partir du disque dur et affiché dans la fenêtre **Graph1**

5)Ouvrez le menu **Windows** et cliquez sur **Data region**.

6) La fenêtre **Data region** apparait .La **Data region** contient le spectre acetone.sp.

3.3.3 Générer une liste des pics

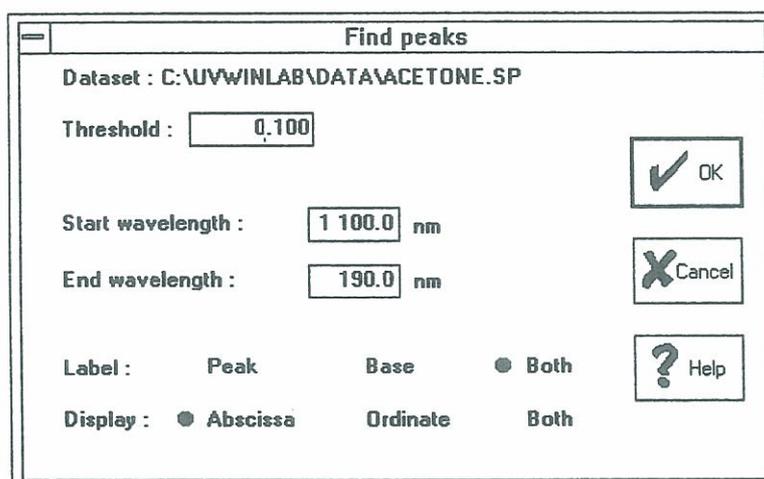
Quelques fois vous devez connaître la position exacte des bandes d'absorbance;par exemple pour sélectionner les longueurs d'onde analytiques pour les méthodes de concentration.Un moyen d'obtenir ces données est de créer une liste de pics.

1)La fenêtre **Graph1** doit être la fenêtre active.

2) Ouvrez le menu **Data handling** et cliquez sur **Peak...**

3)Le dialogue **Find Peaks** apparait.Utilisez les paramètres par défaut,et cliquez sur **OK**.

Figure 3-2 Le dialogue **Find Peaks**.



4) Les maxima et minima sont pointés. Vous pouvez déplacer les labels des pics avec la souris.

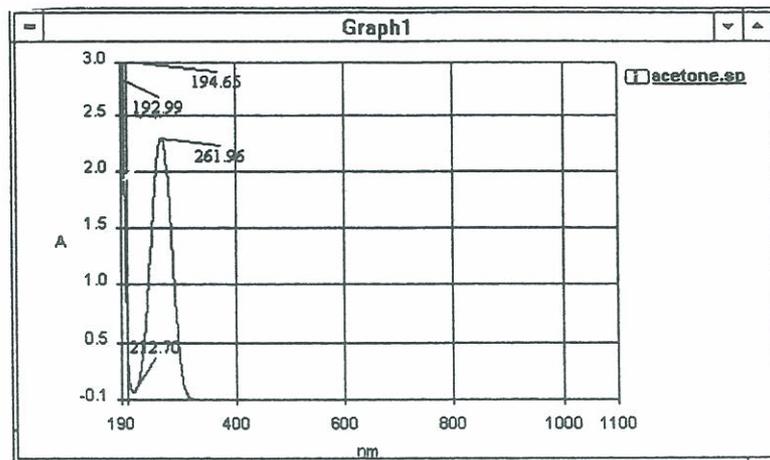


Figure 3-3 Spectre avec les labels des pics

5) Pour imprimer le spectre avec les labels, ouvrez le menu **File** et cliquez sur **Print**.
Vous pouvez imprimer toute fenêtre de cette manière.

6) Déplacer la fenêtre **Results** devant. (Rappel: pour le faire, vous pouvez cliquer sur une partie de la fenêtre si celle-ci est visible; ou ouvrir le menu **Window** et cliquer sur **ResultWindow**).

7) La liste des pics est affichée dans la fenêtre **Results**.
*(Les résultats numériques sont toujours affichés dans la fenêtre **Results**, que ce soit pour des résultats d'une mesure ou tout autre commande).*

ResultWindow - C:\UVWINLAB\temp\ACETONE.pk											
ACETONE	SP	911	1100.00	190.00	-0.00	2.96	0.00	A	0	0	10
		16:10:00	94	09/29							
261.96		2.28	212.70	0.06	194.65	2.97	192.99		2	01	
END 4 PEAK(S) AND/OR BASE(S) FOUND											

Figure 3-4 La liste des pics

8) Sauver la liste des pics. Ceci -ci se fait de la même manière que pour un spectre.

a) La fenêtre **Results** doit être la fenêtre active.

b) Ouvrir le menu **File** et cliquer sur **Save**.

c) Entrer un nom de fichier (par exemple **scanlst**) et cliquer sur **OK**. La liste des pics est stockée sous le

nom sélectionné avec l'extension **.ls**.

Vous pouvez sélectionner le contenu de toute fenêtre active de cette manière (y compris les fenêtres graphiques)

9) Déplacer la fenêtre **Graph1** sur le devant (voir étape 6).

10) Ouvrir le menu **View**. Cliquer sur **Clear peaks labels**. Les annotations sont éliminées du spectre.

Si les annotations ne sont pas éliminées, vérifier que le spectre est sélectionné; un spectre est sélectionné quand le nom du fichier dans la fenêtre **Graph1** est souligné. Pour sélectionner un spectre, cliquer sur le nom du fichier.

3.3.4 Agrandir un Spectre

Le spectre de l'acétone ci-dessous n'est pas présenté d'une manière optimale:

Le pic est coincé dans le coin gauche du graphique et la majorité du spectre montre une ligne de base plate.

Nous allons voir dans cette section trois manières d'optimiser la présentation du spectre. Chaque manière a ses propres avantages pour différentes applications.

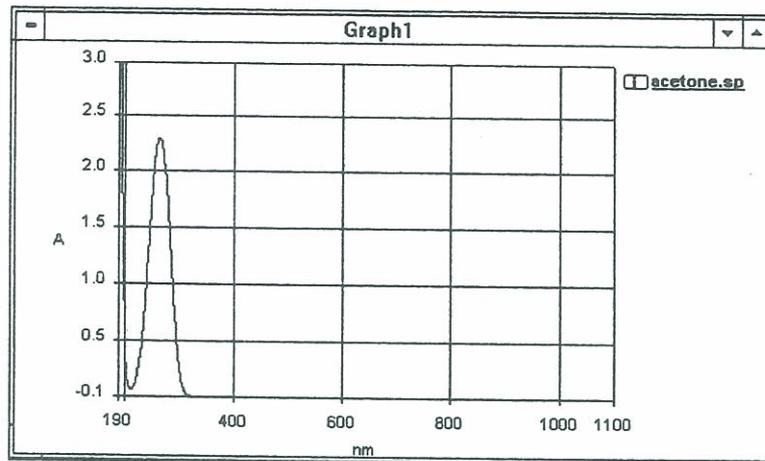


Figure 3-5 Le spectre de l'acétone.

Utilisation des curseurs et du dialogue Format Graph

Vous pouvez entrer les échelles du **Graph1** manuellement, en utilisant le dialogue **Format Graph**. Cette option est utile quand vous voulez standardiser la sortie de vos spectres.

Avant d'entrer les valeurs de tracé du graphe, vous devez connaître l'échelle de votre spectre. Une manière d'obtenir ces données est d'utiliser les curseurs vertical et horizontal.

1) Cliquer sur l'icône du curseur Vertical. Une ligne verticale apparaît (le curseur) et les valeurs d'absorbances et de longueurs d'onde correspondant à la position du curseur dans le spectre apparaissent en bas du graphe.

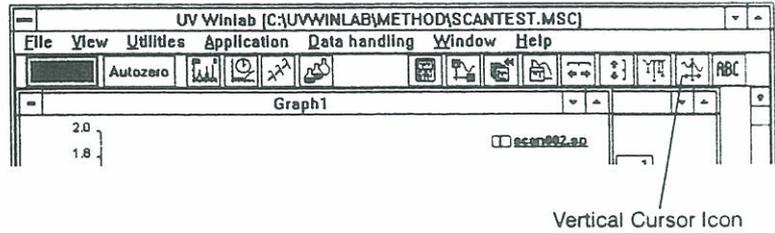


Figure 3-6 L'icône du curseur vertical.

2) Déplacer la flèche de la souris sur le curseur. Appuyer et maintenir appuyé le bouton gauche de la souris et déplacer le curseur.

3) Au fur et à mesure que le curseur se déplace, les valeurs d'absorbances et de longueurs d'onde varient indiquant constamment la position du curseur.

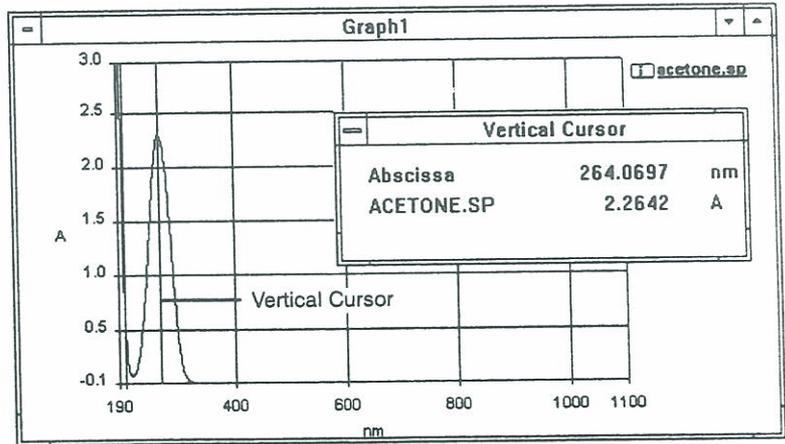


Figure 3-7 Le spectre avec le curseur vertical.

4) Déplacer le curseur à la gauche du pic d'absorbance de l'acétone et relâcher le bouton de la souris. Noter la valeur de longueur d'onde (approx 210nm).

5) Déplacer le curseur à la droite du pic d'absorbance de l'acétone et noter la valeur de longueur d'onde (approx 350nm).

6) Cliquer sur l'icône du curseur vertical. Le curseur disparaît.

7) Ouvrir le menu View et cliquer sur Horizontal Cursor. Le curseur horizontal apparaît.

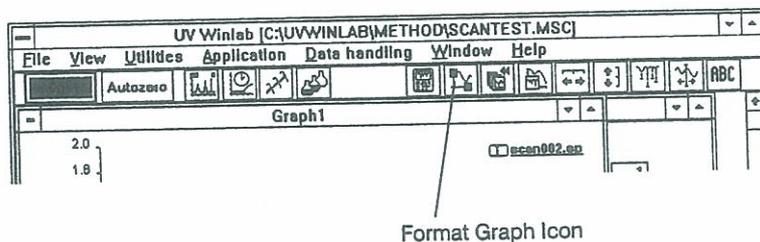
8) Déplacer le curseur sur le maximum du pic et noter la valeur d'absorbance. (Approx 2.8 A).

9) Ouvrir le menu View et cliquer sur Horizontal Cursor pour le faire disparaître.

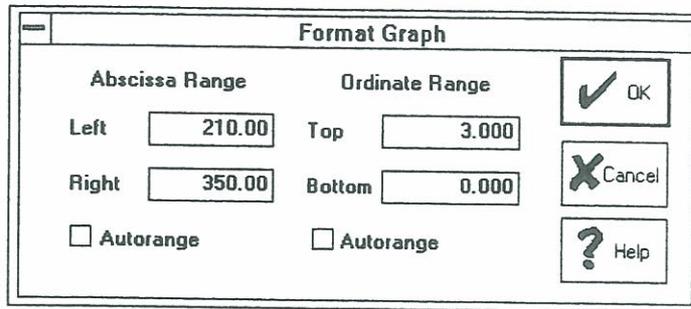
Vous connaissez maintenant les valeurs pour présenter le spectre et vous pouvez ouvrir la fenêtre Format Dialog.

1) Cliquer sur l'icône Format Graph (ou ouvrir le menu View et cliquer sur Format Graph).

Figure 3-8 L'icône Format Graph



2) Entrer les valeurs suivantes:



The 'Format Graph' dialog box is shown with the following settings:

Abscissa Range		Ordinate Range	
Left	210.00	Top	3.000
Right	350.00	Bottom	0.000
<input type="checkbox"/> Autorange		<input type="checkbox"/> Autorange	

Buttons: OK (checked), Cancel (X), Help (?).

Figure 3-9 Le dialogue Format Graph

3) Cliquer sur OK .Le spectre apparait comme ci-dessous.

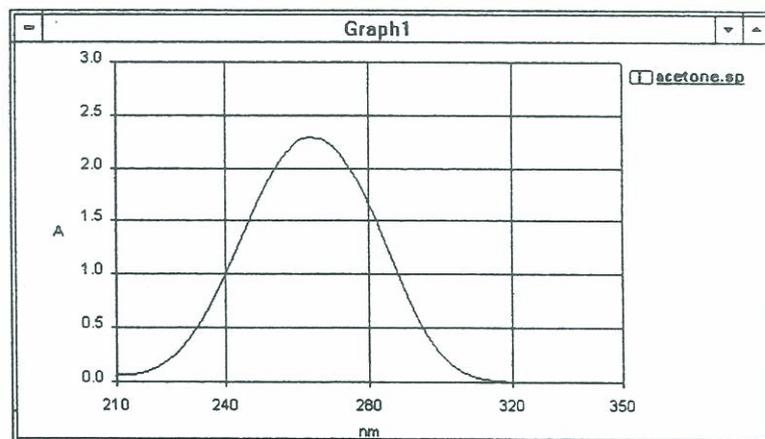


Figure 3-10. Le spectre optimisé.

4) Maintenant imprimons le spectre à cette échelle.

a) La fenêtre **Graph1** doit être la fenêtre active.

b) Ouvrir le menu **File** et cliquer sur **Print**.

c) Le spectre est imprimé.

(Vous pouvez imprimer toute fenêtre de cette manière)

5) Cliquer sur l'icône **Previous Scale**. Le spectre est retracé avec l'échelle précédente.

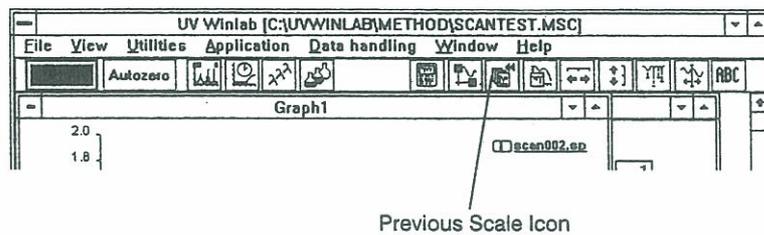


Figure 3-11 L'icône Previous scale

même

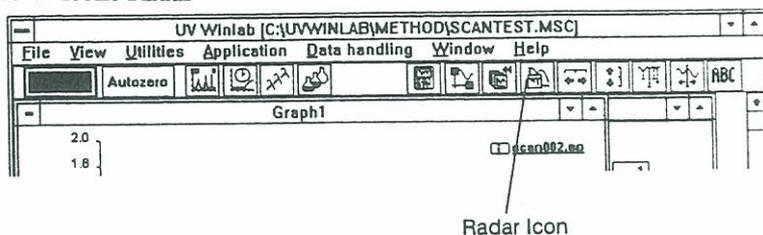
La commande **Format Graph** est très pratique si vous voulez imprimer tous les spectres avec la même échelle. Une manière plus rapide d'agrandir un spectre est d'utiliser la fenêtre **Radar**.

La fenêtre Radar

La fenêtre Radar vous permet d'agrandir une partie du spectre et conserver une vue du spectre complet.

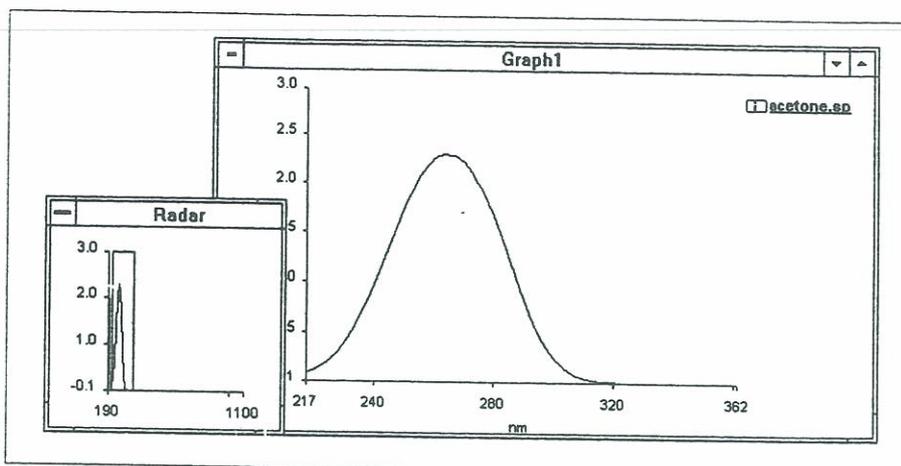
- 1) Cliquer sur l'icône Radar (ou ouvrir le menu View et cliquer sur la Radar Windows).

Figure 3-12 L'icône Radar



- 2) La fenêtre Radar apparaît, montrant le spectre entier et un rectangle. Le rectangle est utilisé pour agrandir.
- 3) Vous pouvez agrandir la taille du rectangle. Déplacer la flèche de la souris sur le bord droit du rectangle. Appuyer sur le bouton gauche de la souris et maintenir appuyé. Changer la taille du rectangle en déplaçant la souris.
- 4) Répéter l'étape 3 pour le bord gauche, jusqu'à ce que seul le pic d'absorption de l'acétone soit inclus et
inclus et
que le spectre soit approximativement semblable à la figure 3-13.

Figure 3-13 La fenêtre Radar.



5)Le spectre dans la fenêtre Graph1 montre uniquement la partie sélectionnée,le pic a été agrandi.

6)Cliquer de nouveau sur l'icone Radar pour fermer la fenêtre Radar.

7)Cliquer sur l'icone Previous Scale.Le spectre est retracé avec l'échelle précédente.

Le « Zoom »- La manière la plus rapide.

Quand vous n'avez pas besoin d'une vue complète du spectre ,la manière la plus rapide d'agrandir un spectre est la suivante:

1) Cliquer sur la fenêtre Graph1.

2) Tracer un rectangle autour de la partie du spectre que vous voulez agrandir.

a) appuyer sur le bouton gauche de la souris et déplacer la flèche .

b) Un rectangle apparait.

c) Changer la taille du rectangle en déplaçant la souris et en maintenant le bouton gauche

de

celle-ci appuyé.

d) Si le rectangle n'est pas parfaitement dans la bonne position, déplacer la flèche dans le rectangle, appuyer sur le bouton gauche et déplacer le rectangle vers la bonne

position;

comme montré ci-dessous.

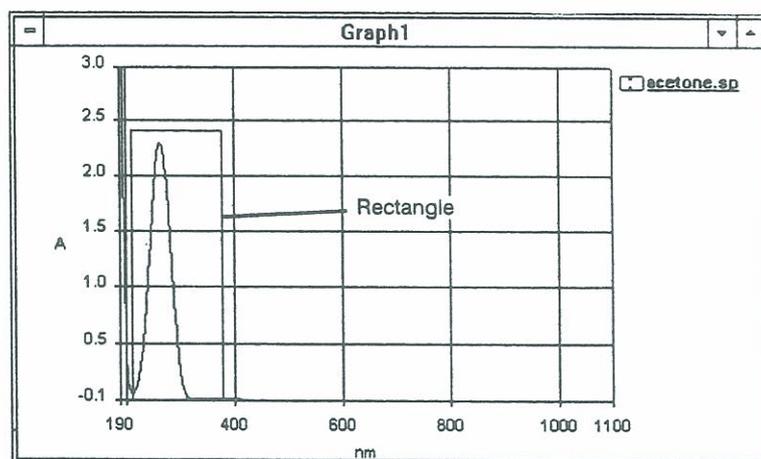


Figure 3-14 Le rectangle pour le Zoom

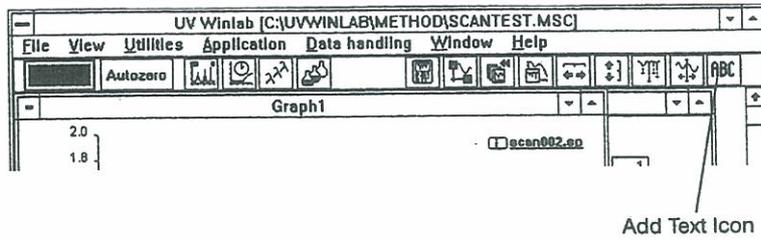
3) Double-cliquer dans le rectangle.

4) La partie sélectionnée dans le triangle est agrandie et affichée dans la fenêtre Graph1.

3.3.4 Ajouter du texte dans le spectre

Vous pouvez ajouter du texte dans un spectre. Une autre manière d'écrire des commentaires est d'utiliser le Report Builder, qui sera introduit dans le chapitre 7.

1) Cliquer sur l'icône **Add Text**.



1

2) Le dialogue **Add Text** apparaît. Entrer le texte **Acétone** (par exemple), et cliquer sur OK. Le texte est ajouté dans le spectre.

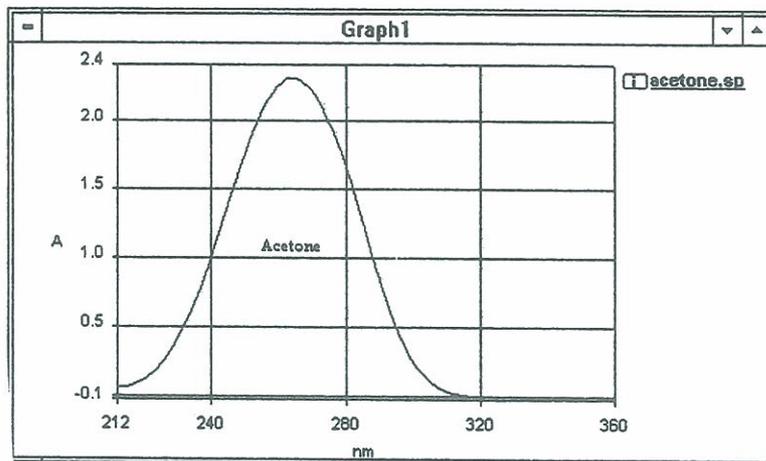


Figure 3-16 Le spectre agrandi avec du texte.

3) Vous pouvez déplacer le texte en le faisant glisser avec la souris.

3-4 Résumé

Dans ce chapitre nous avons utilisé les commandes du menu **View** pour agrandir un spectre.

- Nous avons vu trois manières d'agrandir une partie du spectre.
- Nous avons utilisé les curseurs vertical et horizontal.
- Nous avons créé une liste de pics.
- Nous avons ajouté du texte à un spectre.

3-5 La prochaine étape

Si vous le souhaitez, vous pouvez terminer ce manuel maintenant. Vous trouverez en section 1-4 la procédure pour fermer le logiciel.

Si vous souhaitez continuer, commencer avec le prochain exemple; une mesure d'absorbance en fonction du temps.

4-1 Au sujet de cet exemple

Dans cet exemple nous utiliserons une méthode **Time Drive** pour simuler une réaction enzymatique et enregistrer l'absorbance en fonction du temps de l'échantillon. L'exemple prend environ 20 à 30 min.

Matériel nécessaire:

Craie, eau désionisée, 2 cuves quartz.

4-2 Introduction

Les mesures **Time Drive** sont effectuées en suivant l'absorbance d'un échantillon pendant une période donnée et en enregistrant la courbe. Cette méthode est utilisée pour suivre les réactions cinétiques. Un exemple de courbe (absorbance en fonction du temps) est montré en figure 4-1.

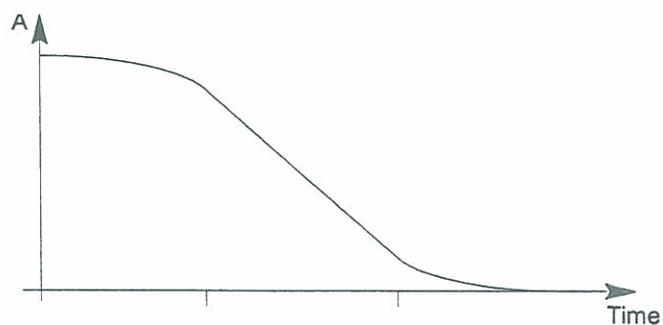


Figure 4-1 Typical Time Drive Curve

Figure 4-1 Courbe Time Drive

Dans ce manuel nous simulerons une réaction de cinétique en mesurant l'absorbance d'une suspension de craie .Au fur et à mesure que la craie tombe ,la solution devient plus transparente, et l'absorbance diminue.La courbe obtenue est similaire à celle d'une réaction enzymatique.

Pour enregistrer la courbe ,nous utiliserons la méthode Time Drive.
La méthode est utilisée de la même manière que la méthode Scan dans le chapitre 2:

1. Vous ouvrez l'éditeur de méthode pour la méthode Time Drive.
2. Vous éditez la méthode suivant la tache analytique.
3. Vous démarrez la méthode et la courbe de Time Drive est enregistrée.
4. Les résultats sont affichés dans les fenêtres **Graph1** et **Results**.

4-3 Effectuer une mesure de Time Drive.

4-3-1 Après une interruption

Avant de démarrer cet exemple ,allumer le spectrophotomètre ,le PC,et l'imprimante, et démarrer le logiciel UV Winlab,comme indiqué dans la section 1.35.

4-3-2 Préparation de l'échantillon.

- 1) Prendre un morceau de craie(craie de tableau).
- 2)Gratter un peu de craie avec une spatule pour obtenir de la poudre.
La poudre devra être fine et homogène.
- 3)Mettre en suspension de la craie.Vous devrez préparer cette suspension immédiatement avant de démarrer l'analyse.

4-3-1 Ouvrir la méthode

- 1)Cliquer sur l'icône Time Drive

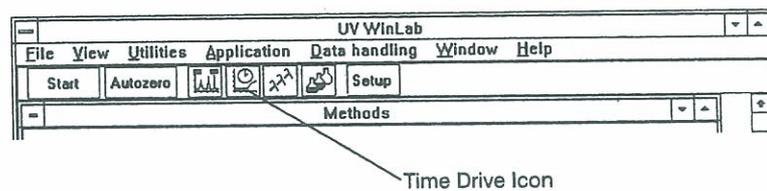


Figure 4-2 L'icône Time drive.

- 2)La fenêtre de l'éditeur de méthode(td1) apparait.Changer les paramètres de la méthode dans cette fenêtre.

4-3-4 Modifier la méthode

La méthode par défaut de Time Drive doit être modifiée pour mesurer la suspension de craie.

1) Entrer les paramètres dans la fenêtre de l'éditeur de méthode. L'éditeur de méthodes comprend plusieurs pages. Pour passer de l'une à l'autre; cliquer sur les étiquettes correspondantes.

2) Entrer les valeurs suivantes sur la première page, Time Drive page:

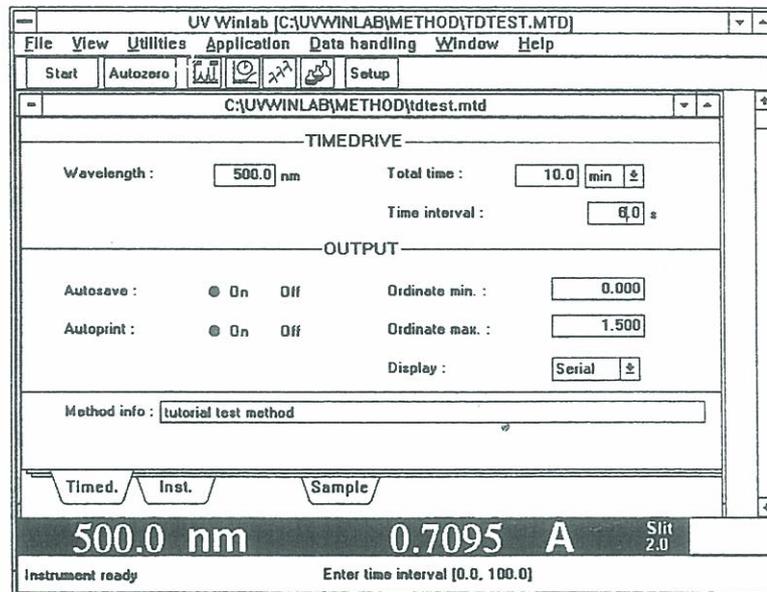


Figure 4-3 Fenêtre de l'éditeur de méthode, page Time Drive.

3) Cliquer sur l'étiquette **Inst** .Entrer les paramètres instrumentaux suivants sur cette page:

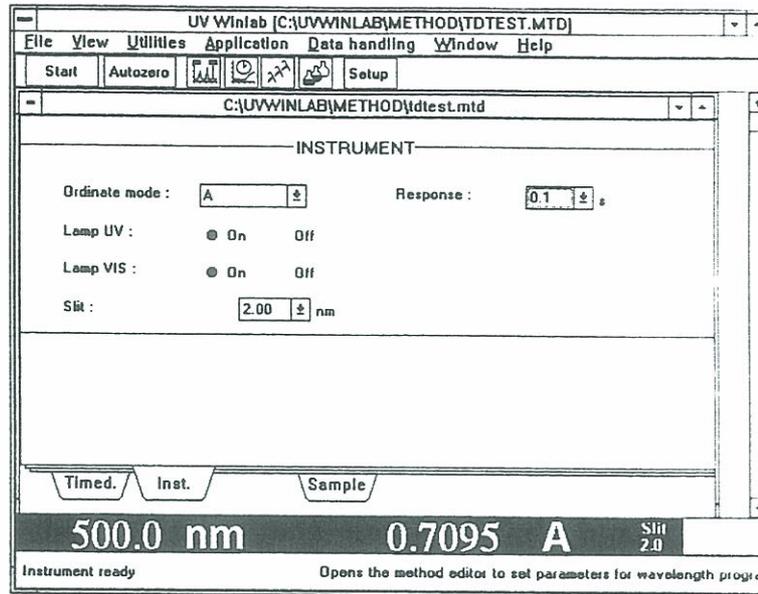


Figure 4-4 Fenêtre de l'éditeur de méthode,page Instrument.

4) Cliquer sur l'étiquette **Sample**. Sur cette page ,vous rentrez le nom de l'échantillon; les informations sur l'échantillon;et les facteurs pour les calculs. Dans cet exemple nous voulons mesurer un seul échantillon; aussi nous utiliserons les valeurs par défaut. La colonne **Sample Identity** sera utilisée comme nom de fichiers pour le stockage des données.

5) Si des accessoires sont installés sur votre spectrophotomètre; vous aurez une page **Accessory** supplémentaire. Dans ce cas ,voir la section 1-6.

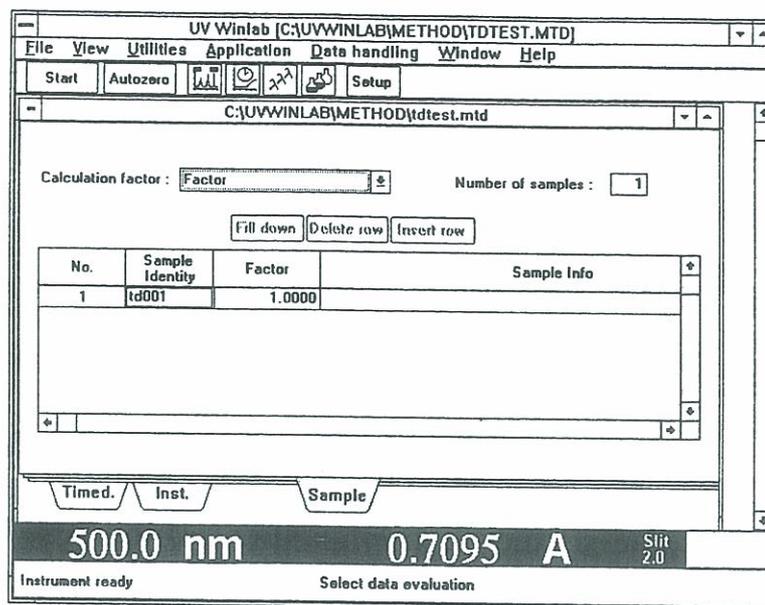


Figure 4-5 Fenêtre de l'éditeur de méthode,page Sample

6)Vous avez entré tous les paramètres .Maintenant sauvegardez la méthode.

a)La fenêtre d'édition de méthode doit être active.Ouvrez le menu File ; et cliquer sur Save as (pour sauvegarder la méthode sous un nouveau nom).

b)Le dialogue Method SaveAs apparait.Entrez tdtest comme nouveau nom de fichier.

c)Vous pouvez sélectionner d'autres options.

Sélectionnez **Autozero on restore** .A chaque fois que vous appellerez la méthode ,un autozero ou une correction de bruit de fond sera effectué avant l'analyse.

d)Sélectionnez **Use next autoinc.filename**.Quand vous utilisez des noms de fichiers du type td001,td002,le numéro sera automatiquement incrémenté et un nouvel échantillon sera sauvegardé sous le premier numéro libre.

7)Vous pouvez maintenant démarrer la méthode.

4-3-5 Démarrage de la méthode

Vous êtes maintenant prêt pour démarrer le méthode.

1) Cliquer sur le bouton **Setup**.

Le spectrophotomètre est préparé pour les mesures. La longueur d'onde requise est sélectionnée ainsi que tous les autres paramètres. Cette option est très utile quand vous effectuez des mesures de cinétiques : la mesure est immédiatement démarrée quand on clique sur le bouton **Start**.

2) Placer une cuve quartz contenant un blanc dans la position de référence.

Dans ce cas utilisez de l'eau déionisée comme blanc.

3) Cliquer sur le bouton **Start**.

Une correction de bruit de fond (autozero) est requise. C'est une bonne pratique analytique d'effectuer un autozéro avant de démarrer l'analyse.

4) Placer une cuve quartz contenant un blanc dans la position échantillon et refermer le capot. Vous devrez par la suite utiliser la même cuve pour l'échantillon.

5) Cliquer sur **OK**.

Un autozéro est effectué à la longueur d'onde sélectionnée.

6) La première solution échantillon est requise.

Mettre de la poudre de craie dans la cuve; et remplir la cuve avec de l'eau déionisée. Agiter bien pour créer une suspension.

7) Placer rapidement la cuve contenant l'échantillon en position échantillon et fermer le couvercle.

8) cliquer sur **OK**.

L'analyse est démarrée et la courbe **Time Drive** est enregistrée. Pendant l'analyse la courbe est affichée dans la fenêtre **Graph1**.

9) Quand la valeur d'absorbance ne varie plus- ce devrait être le cas après 2 à 3 minutes- arrêter la méthode: Cliquer sur le bouton **Stop** et confirmer l'arrêt en cliquant sur **OK**.

10) Les résultats sont imprimés.

4-3-6 Résultats

La fenêtre **Graph1** montre la courbe Time Drive. Les valeurs d'échelle sélectionnées pour le graphique ne sont probablement pas les bonnes. Optimisons la représentation graphique:

1) Cliquer sur l'icône **Expand Ordinate** pour modifier l'échelle des ordonnées.

2) Cliquer sur l'icône **Expand abscissa** pour modifier l'échelle des abscisses.

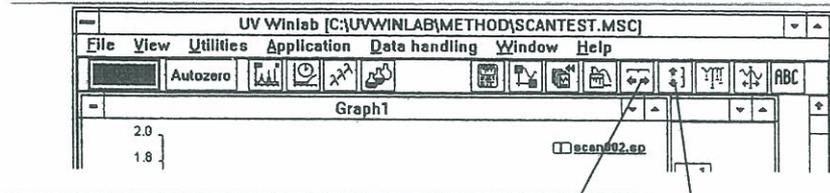
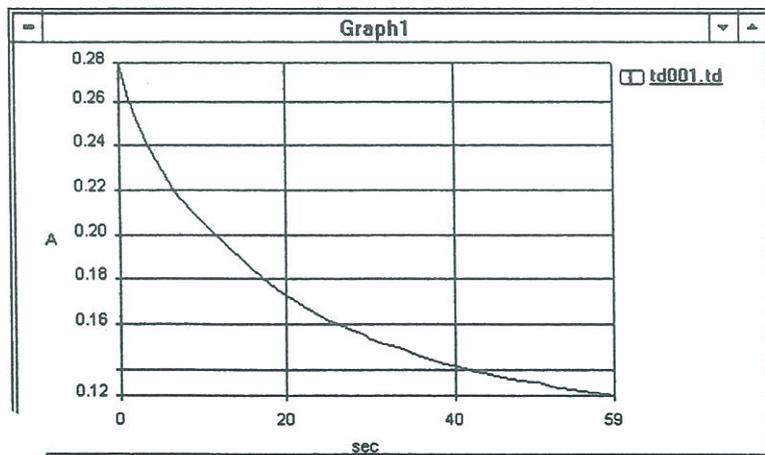


Figure 4-6 Les icônes Expand Ordinate et abscissa

3) La courbe de Time Drive est optimisée.

Figure 4-7 La courbe Time Drive



La courbe de Time Drive de la simulation est montrée en figure 4-7. Au fur et à mesure que craie dépose, l'absorbance diminue.

Il est probable que votre courbe est différente.

Du fait de la différence de taille des particules, l'absorbance maximale au début de la mesure est probablement différente et la diminution d'absorbance est plus lente ou plus rapide.

Si vous avez manqué la diminution presque linéaire initiale de l'absorbance, refaites l'analyse en démarrant la mesure le plus rapidement possible après avoir agité la solution.

Regardons la fenêtre **Results**:

1) Cliquer sur la fenêtre **Results** si une partie de celle-ci est visible,

...ou ...

Ouvrez le menu **Window** et cliquez sur **Resultwindow**.

2) La fenêtre **Results** contient les données numériques de la méthode Time Drive.