

La recherche en infrarouge A coups d'ordinateur

Le Search Program for Infrared Spectra (SPIR), c'est-à-dire le Programme de recherche des spectres infrarouges, a permis aux utilisateurs canadiens de comparer le spectre infrarouge d'un matériau non identifié avec de très nombreux spectres stockés dans la mémoire d'un ordinateur du CNRC.

Une obligation à laquelle tous les scientifiques doivent faire face est celle de se tenir au courant des progrès scientifiques et de passer constamment en revue les documents stockés, toujours en plus grand nombre, dans le domaine des données scientifiques. Un moyen d'y parvenir consiste à avoir facilement accès à un inventaire détaillé des résultats publiés d'expériences ayant eu lieu dans le monde entier.

Quel est le véhicule moderne en ce domaine? C'est l'ordinateur.

La Division de chimie du CNRC, en conjonction avec le Centre de calcul, fournit maintenant un Programme de recherche des spectres infrarouges (SPIR) pour les utilisateurs canadiens. Le système est basé sur le Programme de recherche en infrarouge FIRST-1 développé à l'origine aux États-Unis et disponible par l'intermédiaire de la compagnie DNA Systems Inc., de Saginaw, dans le Michigan.

Ce programme permet aux utilisateurs de comparer rapidement des spectres infrarouges d'un matériau non identifié avec environ 150 000 spectres stockés et codés par l'American Society for Testing and Materials (ASTM). Une vaste collection de spectres est tenue à jour aux laboratoires de la Division de chimie, chemin de Montréal, par l'Institut canadien de l'information scientifique et technique (ICIST). En tant que telle, elle représente la collection la plus complète de spectres fondamentaux de référence au Canada.

Pour avoir accès à ce programme, il suffit que l'utilisateur, où qu'il se trouve au Canada, relie son terminal à l'ordinateur du CNRC à Ottawa, soit par une ligne téléphonique ordinaire, soit par une ligne de données louée. Des renseignements sur les propriétés physiques et chimiques d'un matériau inconnu et les caractéristiques de son spectre en infrarouge sont alors codés et fournis au programme de recherche. A l'aide d'un manuel, des données comme la présence ou l'absence de pointes d'absorption dans certaines régions du spectre, les positions de ces pointes et le facteur de "pondération" pour des régions d'importance particulière, peuvent être facilement préparées en vue d'un traitement par ordinateur.

La recherche par l'ordinateur elle-même a lieu à une vitesse d'environ 2 000 à 5 000 spectres de référence par seconde après quoi une "équivalence" spectrale est retournée à l'utilisateur sous la forme de 20 spectres pris dans la collection et correspondant au plus près à l'information injectée dans l'ordinateur. Chaque spectre pouvant représenter une solution est accompagné d'un facteur de corrélation qui indique jusqu'à quel point la configuration sélectionnée par l'ordinateur est proche de l'information codée concernant le corps inconnu.

Armé de ces renseignements, un utilisateur peut alors retourner au spectre original pour son interprétation. Tout en économisant une grande partie du temps qui serait nécessaire si l'on recherchait à la main dans les documents scientifiques écrits, le SPIR permet aussi au spectroscopiste

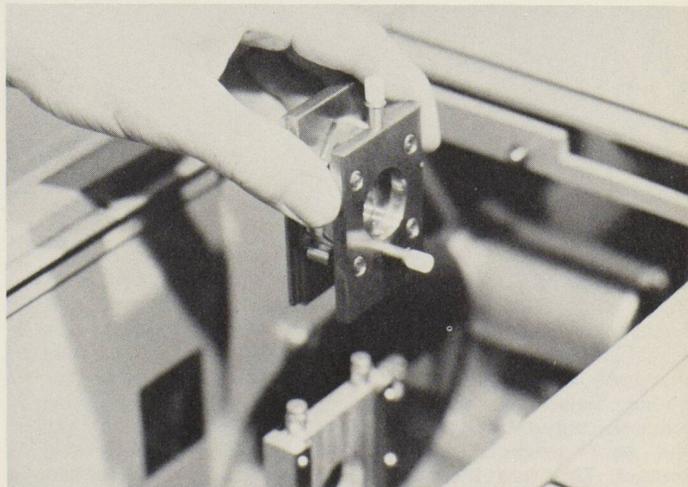
de consacrer ce temps économisé à d'autres occupations. Tout d'abord, un technicien entraîné peut introduire les données dans le terminal de l'ordinateur avant que le spectroscopiste ne soit appelé plus tard à analyser les résultats. Parmi les autres avantages de SPIR se trouve celui de permettre d'avoir accès 24 heures sur 24 au programme de recherche basé à Ottawa.

Les utilisateurs de ce service doivent accepter de payer un "loyer" en plus des sommes prélevées sur la base des recherches unitaires. (Ces coûts se rapportent au temps d'utilisation de l'ordinateur.) Actuellement, les utilisateurs de SPIR comprennent le Ministère de la consommation et des corporations, le laboratoire des Douanes et de l'accise, la compagnie Du Pont of Canada Limited, et l'Ontario Research Foundation, de Sheridan Park. Beaucoup d'autres sources ont montré un intérêt considérable pour le programme.

Le Dr Norman Jones, de la Division de chimie, nous a dit: "Il faut mettre ici l'accent sur le fait que SPIR n'est qu'un service de recherche utilisant les mémoires contenant les spectres codés. Quoique le CNRC fournisse le programme de base et l'accès à l'ordinateur, la comparaison avec les spectres de référence et l'interprétation des résultats sont laissées à l'utilisateur."

"Depuis que le programme a été lancé l'année dernière, les utilisateurs ont trouvé qu'ils en tirent de très grands bénéfices. Si l'on considère la facilité d'accès, la vitesse de localisation des données et l'étendue de la banque de données, SPIR doit permettre de faciliter beaucoup les travaux du spectroscopiste." □

Texte français: **Louis-Georges Desternes**



A cell containing liquid solution of an unknown substance being mounted in the infrared spectrometer.

Cellule contenant une solution liquide d'une substance inconnue, en cours de montage, dans le spectromètre à infrarouge.