

## Семинар 10

### Спектрално търсене в библиотеки от ИЧ и Раман спектри

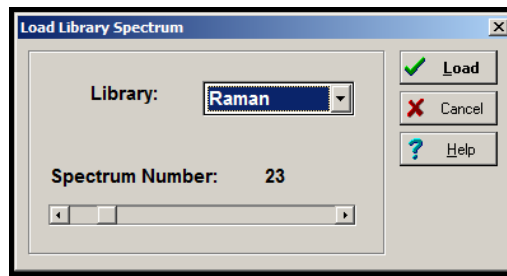
**Описание на програмната система.** IRIS (IR Interpretation System) е потребителски ориентирана програма, която работи в среда на Windows. Програмата поддържа библиотеки от ИЧ спектри, които са представени с пълната спектрална крива в интервала  $3700-500\text{ cm}^{-1}$  през  $4\text{ cm}^{-1}$ .

Функционалните възможности на програмата, които се изучават в този семинар, са следните:

- зареждане спектър на непознато вещество в един от трите работни буфера (екрана), както и разглеждане на резултатите от библиотечното търсене в четвъртия екран;
- показване на спектрите в даден спектрален интервал, в единици абсорбция или пропускливост, както и на съответната таблица на пиковете и структурата на химичното съединение;
- намиране на пиковите таблици на спектрите от библиотеката и на спектъра в даден буфер с праг (*threshold*), определен от потребителя;
- зареждане на спектър от файл с JCAMP-DX формат;
- търсене по пикови таблици, спектрална крива и химично име;


**Зареждане на спектри.** Отворете упътването на програмата `iris_manual.pdf` и внимателно го прочетете. В програмата могат да се зареждат (1) библиотечни спектри и (2) непознати спектри от файл, с JCAMP-DX формат.

**Задача C10.1.** Заредете спектър 23 от спектралната библиотека Raman в буфер A с менюто на програмата. При избор на менюто се показва следният прозорец:




В този прозорец може да избирате библиотека и номер на спектъра от нея.

**Упътване:** Използва се менюто <File>/<Load Library Spectrum>.

**Задача C10.2.** Заредете спектър 117 от спектралната библиотека Raman в буфер в с бързите бутони. Първо отворете буфер в с бързия бутон .

**Упътване:** Използва се бутон .


**Задача C10.3.** Заредете спектър от файла RamMicr1.JSM в буфер С с менюто на програмата. Първо отворете буфер С с бързия бутон .

**Упътване:** Използва се менюто <File>/< Import Spectrum>. След това с намерете работната папка (директория) и файла.



**Менюто преглед (View).** Това меню показва и скрива активните буфери А, в, С и D (празни или със спектър в тях), структурата, пиковата таблица на активния спектър, както и списъка с резултати (hitlist). Допълнително спектрите могат да бъдат показвани един върху друг (Overlaid) или един под друг (Stacked) или да се преобразуват алтернативно в абсорбция и пропускливост.

**Задача C10.4.** Зареденият спектър 117 от спектралната библиотека Raman в буфер в има пикова таблица и структура. Покажете и скрийте прозорците, където се показват пикова таблица или структура.

**Упътване:** Направете отново буфер в активен, като кликнете с мишката в пространството на екрана, където е буфер в. Използвайте менютата <View>/<Peak Table> и <View>/<Structure> или бързите клавиши <F7>

и <F8>. Ако буфер в „изчезне“ от екрана използвайте бързия бутон . Забележете, че този бутон алтернативно скрива и показва буфера.

**Задача C10.5.** С менюто <View> покажете и скрийте алтернативно четирите буфера A, B, C и D. Буфер D е само за резултати от търсене в библиотеката и в него не може да се зарежда спектър.

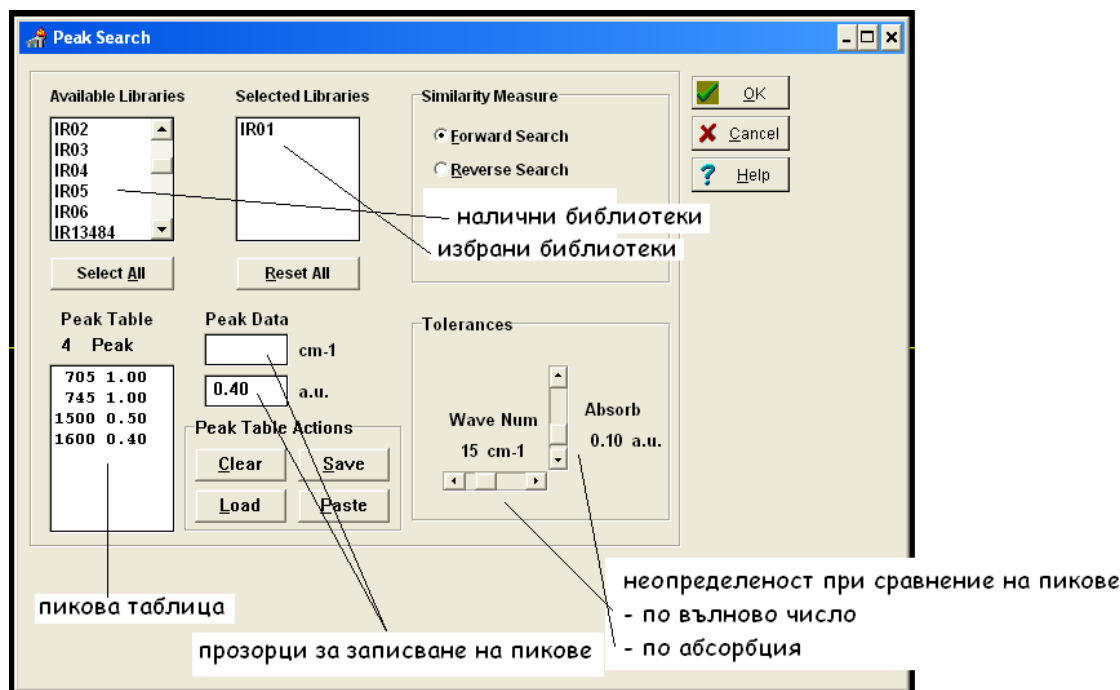
Спектрите в една библиотека могат да се разглеждат с клавишите за следващ спектър и предишен спектър в библиотеката, стрелките на числовата клавиатура <→> и <←>. Същият ефект имат и бързите бутони  и .

**Търсене по пикове.** Спектър на едно непознато съединение, зареден в един от трите буфера A, B и C, може да бъде обработен с менюто <Tools>/<Peak Picking> и да се създаде пикова таблица, която да бъде потърсена<sup>1</sup> по пикове в една или няколко спектрални библиотеки. Пиковите таблици на библиотечните спектри директно може да се използват за търсене по пикове (с командата Paste), но при практическите приложения такъв вид операция е лишена от смисъл – тя има само учебен и теоретичен ефект. Допълнително, потребителят може да въведе ръчно пикова таблица в диалоговия прозорец на търсенето по пикове, която той да използва при търсене. Тази таблица може да се съхрани във файл и зареди от файл – вижте фигура 10-I.

Резултатите, както и при търсенето по спектрална крива, се представят в буфера D. При зареден в един от работните буфери спектър и избор на менюто <Search>/<Peak Search> се отваря прозорецът, показан на фигура 10-I. Потребителят може да избере спектрални библиотеки, в които ще се потърси непознатия спектър, може да премахне своя избор – и двете операции се извършват с двойно кликуване на мишката върху името на

<sup>1</sup> Пиковата таблица на спектъра, зареден в буфер D, също може да бъде потърсена в библиотеките, но практически това е задача, която не се използва при рутинното библиотечно търсене.

библиотеката. Важни параметри при търсенето са т.н. неопределености при сравнението по абсцисата и ординатата,  $\Delta\nu$  и  $\Delta A$ . Те могат да бъдат променявани от потребителя. Алгоритъмът за сравнението на пикове се избира с групата радиобутони в дясно - на фигурата е показано, че е избрано спектрите да се сравняват с мярка за подобие, наречена "обратно търсене" (reverse search).



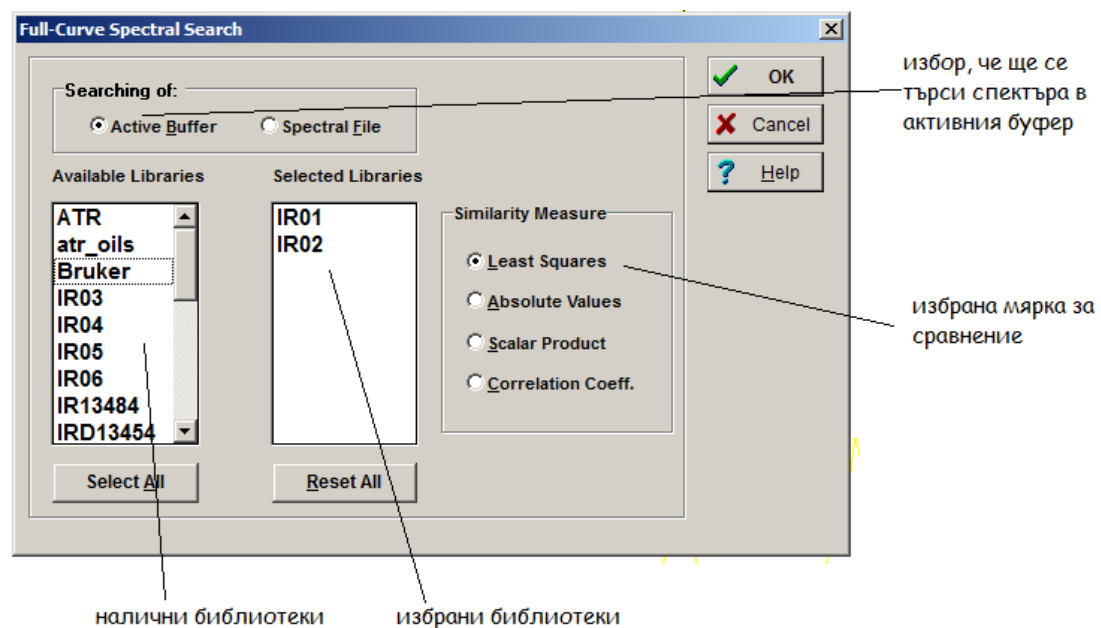
Фигура 10-I. Диалогов прозорец за параметрите на търсене по пикове.

**Задача C10.6.** Заредете спектър 34 от спектралната библиотека IR01 в буфер A с менюто на програмата. Вкарайте пиковата таблица на този спектър с бутона Paste. Потърсете тази пикова таблица в спектралните библиотеки IR02 и IR03 с  $\Delta\nu = 8 \text{ cm}^{-1}$  и  $\Delta A = 0.15 \text{ a.u.}$  с право и обратно търсене. Разгледайте първите хитове. Сравнете първия спектър в двата списъка с хитове.

**Спектрално търсене.** Спектърът, зареден в един от трите буфера A, B и C може да бъде потърсен<sup>2</sup> в една или няколко спектрални библиотеки.

<sup>2</sup> Спектърът, зареден в буфер D също може да бъде потърсен в библиотеките, но практически това е задача, която не се използва при рутинното библиотечно търсене.

Резултатите от търсенето се представят в буфера D. При зареден в един от работните буфери спектър и избор на менюто <Search>/<Spectral Search> се отваря прозорецът, показан на фигура 10-II. Потребителят може да избере спектрални библиотеки, в която ще се потърси непознатия спектър, може да премахне своя избор - и двете операции се извършват с двойно кликуване на мишката върху името на библиотеката. В настоящето упражнение ще търсим само спектри, заредени в активния буфер и затова радиобутонът над прозорците за библиотеки е избран така, както е показано на фигура 10-II. Една от четирите мерки за спектрално сравнение се избира с групата радиобутони в дясно - на фигурата е показано, че е избрано спектрите да се сравняват със средно квадратичното отклонение между спектрите.



Фигура 10-II. Диалогов прозорец за параметрите на спектралното търсене.

**Задача C10.7.** Потърсете заредения в буфер A спектър 34 от спектралната библиотека IR01 в спектралните библиотеки IR02 и IR03 със средно квадратично отклонение между спектрите. Вижте номерът и библиотеката на първия хит - това трябва да е спектър 73 от библиотека IR02: заредете този

спектър в буфер в. Потърсете отново спектър 34 от спектралната библиотека IR01 в спектралните библиотеки IR02 и IR03 с  $\Delta\nu = 15 \text{ cm}^{-1}$  и  $\Delta A = 0.15$  а.и. с право търсене. Еднакъв ли е първият хит с предишния първи хит, който заредихте в буфер в?

**Задача C10.8.** Потърсете следния стринг по име в библиотеката IR01.

`benz and nitro`

Прегледайте хитовете и особено техните имена. Колко хита има?

**Упътване:** Използва се менюто <Search>/<Name Search>.

**Задача C10.9.** Потърсете следния стринг по име в библиотеката IR01.

`benz or nitro`

Прегледайте първите няколко хита и особено техните имена. С командата <Show Hitlist Ident> на локалното меню<sup>3</sup> на хит-списъка вижте броя хитове. Защо те са повече от тези, получени при търсенето в задача C10.8?

**Задача C10.10.** Потърсете следните стрингове по име в библиотеката IR01.

`benz or not nitro`

`not benz or nitro`

За всяко от двете търсения прегледайте първите няколко хита и особено техните имена. С командата <Show Hitlist Ident> на локалното меню на хит-списъка вижте броя хитове. Намирате ли някаква връзка между броя хитове при четирите търсения в задачи C10.8, C10.9 и C10.10?

---

<sup>3</sup> Локалните менюта се избират с кликане на десния бутон на мишката върху съответния прозорец. В случая отидете с мишката върху химическите данни на съединение от списъка с хитове и натиснете десния бутон на мишката. Съответното меню се избира с левия бутон.