

последующим усреднением спектров.

Полиморфизм. Разница в кристаллической структуре (полиморфизм) оказывает влияние на спектр, что позволяет отличать друг от друга кристаллические или аморфные формы на основании их БИК-спектров. При проведении анализа необходимо учитывать кристаллическую структуру (модификацию) эталонного спектра, используемого в методе анализа.

Возраст образцов. Свойства образцов могут изменяться во времени, и эти изменения могут обуславливать спектральные различия для одних и тех же образцов. Данные изменения должны быть учтены при построении калибровочных моделей, как для целей идентификации, так и для целей количественного анализа.

КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ

Качественный анализ (квалификация и идентификация) в БИК-спектрометрии основан на схожести спектров одного и того же вещества.

Для проведения качественного анализа первоначально создают библиотеку стандартных спектров, подбирают оптимальную математическую модель для обработки спектров и реализации алгоритмов их сравнения. Далее проводят валидацию библиотеки в совокупности с выбранной математической моделью (см. раздел «Валидация качественных методов»). Качественный анализ проводят путем сравнения спектра испытуемого образца со спектрами в библиотеке (см. раздел «Анализ данных»).

Создание библиотеки спектров. Библиотека представляет совокупности спектров, содержащих характеристическую информацию о каждом объекте анализа. Для каждой совокупности спектров при помощи соответствующих методов и алгоритмов определяют оптимальные параметры идентификации. Заданные установки действительны для всей библиотеки. Для близких объектов, неразличимых при заданных установках, создаются подбиблиотеки, в которых могут быть использованы другие методы предварительной обработки спектров и алгоритмы анализа. Количество спектров в библиотеке не ограничивается.