

COMUNICACION CORTA

CREACION DE BIBLIOTECAS DE ESPECTROS IR PARA LA IDENTIFICACION AUTOMATICA DE SUSTANCIAS

H. García, R. Baluja, M.T. Abrantes, R. Rodríguez y R. Molina*

*Departamento de Química Analítica, Centro Nacional de Investigaciones Científicas, Avenida 25 y 158, Playa, Apartado Postal 6880, Habana 10600, Ciudad de La Habana, *Departamento de Síntesis Orgánica, Centro de Bioactivos Químicos, Universidad Central de las Villas, Santa Clara, Cuba.*

Recibido: 5 de mayo de 1997.

En el campo de la Espectroscopia IR y Raman existen varias firmas que comercializan los equipos y los programas para su manipulación. Una de ellas, la Bruker (Alemania), comercializa el paquete de programas OPUS (Optical User Software) que trae consigo el SEARCH-1 con funciones muy valiosas para la creación y ampliación de las bibliotecas espectrales. La Mattson-Unicam (UK) oferta el paquete de programas WinFirst que presenta características similares al anterior.

Para la creación de las Bibliotecas de Espectros se puede tener en cuenta la agrupación de las sustancias atendiendo a sus características o aplicaciones. De esta forma, se pueden encontrar bibliotecas de medicamentos, sustancias inorgánicas, solventes entre otras, lo que permite la realización de búsquedas y comparaciones de una forma más eficiente.

La estructuración de un gran número de espectros en bibliotecas facilita las funciones de búsqueda (con varios algoritmos de trabajo) a través del empleo de técnicas de reconocimiento de patrones, las cuales determinan señales comunes entre la muestra y los espectros almacenados.

Mediante el aprovechamiento de espectros registrados en los ya viejos equipos dispersivos (después de un adecuado tratamiento de conversión al formato JCAMP-DX, eliminación de ruido, mejoramiento de la línea base, interpolación

para el ajuste del número de puntos necesarios, etc.) y también de los registrados en equipos FTIR, se lograron convertir a formato estándar varios cientos de espectros de diferentes tipos de sustancias los que posteriormente se clasificaron y utilizaron en la creación de bibliotecas de espectros.

En total se convirtieron casi 2 000 espectros que fueron utilizados en la creación de bibliotecas de espectros para la identificación automática de sustancias.

Las bibliotecas creadas fueron:

	Espectros
Compuestos inorgánicos	140
Medicamentos I	500
Medicamentos II	471
Componentes de litiasis renales	175

Identificación de muestras desconocidas con el empleo de las Bibliotecas de Espectros

A continuación se ofrecen tres ejemplos de búsquedas automáticas, así como los coeficientes de correlación (similitud) entre el espectro de la sustancia desconocida y los de las sustancias reportadas por la biblioteca espectral. Los dos primeros correspondieron a sustancias orgánicas desconocidas y el tercero a una posible sustancia inorgánica.

Ejemplo 1.

Data file: Unknown1.abs

Search method: Metric

Metric algorithm: Correlation coefficient

Search libraries: FARMAC-1; FARMAC-2; GENERAL; ORGANIC

Search Regions: 400.00 to 4 000.00 cm⁻¹

Hit	Correlation coefficient	Library index	Name
[1]	0.991	FARMAC-2.426	PARACETAMOL <i>p</i> -acetamido fenol
[2]	0.783	GENERAL.481	Metallic fiber Metlon Corporation
[3]	0.751	GENERAL.362	<i>p</i> -Hydroxyacetophenone
[4]	0.748	FARMAC-1.126	BUFORMIN HCl
[5]	0.744	FARMAC-2-.145	PAROXYPROPIONE
[6]	0.738	FARMAC-1.57	AMIPHENAZOLE
[7]	0.731	GENERAL.292	Acetamide
[8]	0.730	FARMAC-1.265	DEMTCLORTET HCl
[9]	0.730	FARMAC-1.326	DIMINAZENE ACTRT

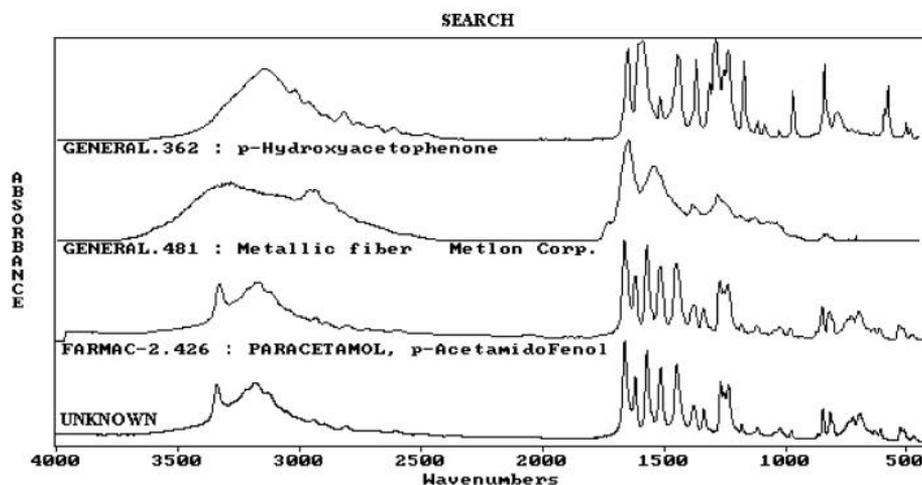


Fig. 1. Resultado de la búsqueda del ejemplo 1.

Ejemplo 2.

Data file: Unknown2.abs

Search libraries: FARMAC-1; FARMAC-2; GENERAL;
ORGANIC

Search method: Metric

Metric algorithm: Correlation coefficient

Search regions: 400.00 to 4 000.00 cm^{-1}

Hit	Correlation coefficient	Library index	Name
[1]	0.971	FARMAC-2.295	SALICYLIC ACID
[2]	0.952	GENERAL.313-2	2-Hydroxybenzoic acid
[3]	0.756	FARMAC-1.302	DIFLUNISAL
[4]	0.696	FARMAC-1.281	DIAMPROMIDE
[5]	0.683	GENERAL.289	<i>p</i> -Hydroxybenzaldehyde
[6]	0.670	FARMAC-2.27-7	PYRANTEL PAMOATE
[7]	0.664	FARMAC-2.179	PHENPROCUMON
[8]	0.653	GENERAL.444	Waxes and waxsubstances
[9]	0.652	GENERAL.125	Isobutyl salicylate
[10]	0.650	GENERAL.351	Benzoic acid, 2-hydroxy, ethyl ester

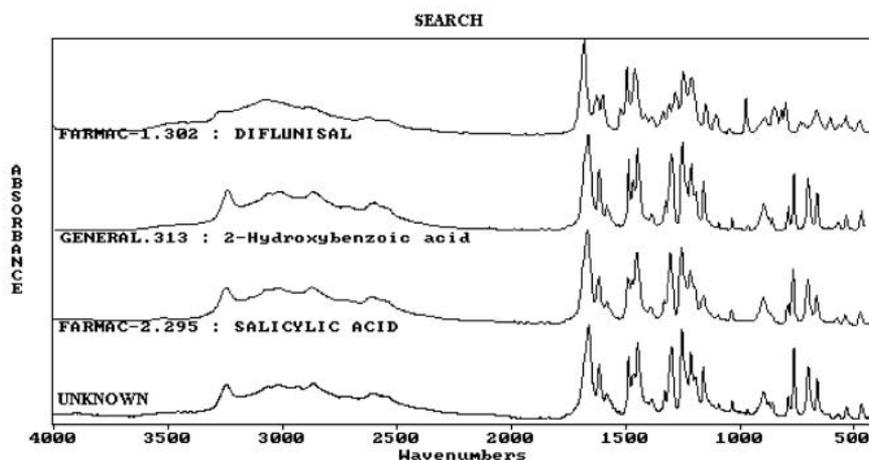


Fig. 2. Resultado de la búsqueda del ejemplo 2.

Los resultados de la búsqueda (Figuras 1 y 2) permitieron concluir que en el primer caso se trataba del pa-

racetamol ($r = 0,991$) y en el segundo, del ácido salicílico ($r = 0,971$).

Ejemplo 3.

Data file: Unknown3.abs
Search method: Pattern
Metric algorithm: Correlation coefficient

Search libraries: INORGAN
Search Regions: 400.00 to 4 000.00 cm^{-1}

Hit	Correlation coefficient	Library index	Name
[1]	0.749	INORGAN.23	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
[2]	0.685	INORGAN.22	CaCO_3
[3]	0.676	INORGAN.14	BaCO_3
[4]	0.610	INORGAN.28	CoCO_3
[5]	0.590	INORGAN.18	Na_2CO_3
[6]	0.580	INORGAN.19	NaKCO_3
[7]	0.561	INORGAN.86	$\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
[8]	0.561	INORGAN.107	$\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
[9]	0.543	INORGAN.7	$\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$

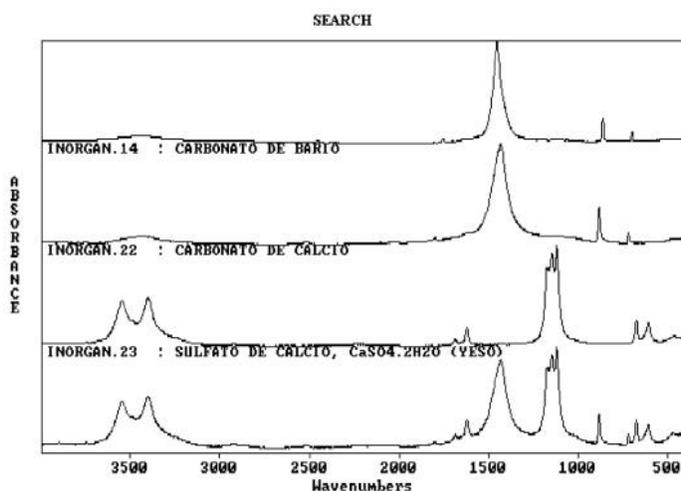


Fig. 3. Resultado de la búsqueda del ejemplo 3.

En el ejemplo 3 los resultados de la búsqueda (Fig. 3) permitieron concluir que se trataba de una mezcla de sulfato de calcio dihidratado y carbonato de calcio.

CONCLUSIONES

Se crearon bibliotecas especializadas de espectros mediante el empleo del formato JCAMP-DX para varias clases de compuestos, a partir de la recuperación y utilización de espectros IR registrados y almacenados durante años, las cuales permiten evaluar y analizar los espectros con potentes programas de procesamiento de espectros FT-IR y paralela-

mente se desarrolló una metodología de trabajo para continuar actualizando las bibliotecas creadas.

BIBLIOGRAFIA

1. Bruker Analytische Messtechnik GMBH. OPUS SEARCH Spectroscopic Software Reference Manual, Version 2.1, Karlsruhe, Germany, 2-56, 1996.
2. Mattson Instruments. A FIRST Utility: MattLib User's Manual, Chapters III, IV, V, Madison, USA, 1991.
3. Sadtler Select IR Database, Bio-Rad Laboratories Ltd., Philadelphia, USA, 1996.
4. McDonald R. S. and Wilks P. A. JCAMP-DX: A Standard Form for Exchange of Infrared Spectra in Computer Readable Form. **Applied Spectroscopy**, **42**, 151, 1988.