



(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ

(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11)



1-0046023

(51)^{2020.01} G01J 3/28

(13) B

(21) 1-2021-04280

(22) 13/12/2019

(86) PCT/EP2019/085010 13/12/2019

(87) WO 2020/126869 25/06/2020

(30) 18212853.8 17/12/2018 EP

(45) 26/05/2025 446

(43) 27/09/2021 402A

(73) EVONIK OPERATIONS GMBH (DE)

Rellinghauser Strasse 1-11 45128 Essen, Germany

(72) REIMANN, Ingolf (DE); REISING, Joachim (DE); MÜLLER, Christoph (DE).

(74) Công ty Luật TNHH Phạm và Liên danh (PHAM & ASSOCIATES)

(54) PHƯƠNG PHÁP ĐƯỢC TRIỂN KHAI BẰNG MÁY TÍNH VÀ HỆ THỐNG ĐỂ
NHẬN DIỆN PHỔ KẾ HỒNG NGOẠI KHÔNG ĐƯỢC HIỆU CHỈNH HOẶC BỊ
HIỆU CHỈNH SAI

(21) 1-2021-04280

(57)

Sáng chế đề cập đến phương pháp được triển khai bằng máy tính để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai, bao gồm các bước a) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu có phổ kế hồng ngoại thứ nhất để tạo phổ hồng ngoại mẫu, b) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu giống như ở bước a) có phổ kế hồng ngoại thứ hai để tạo phổ hồng ngoại tham chiếu, trong đó phổ kế thứ hai nêu trên là phổ kế hồng ngoại được hiệu chỉnh đúng, hoặc b') tạo phổ tham chiếu của mẫu giống như ở bước a), trong đó phổ tham chiếu nêu trên được ghi nhận trên phổ hồng ngoại thứ hai, vốn là phổ kế được hiệu chỉnh đúng, c) xác định sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a) and bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'), và d) chỉ báo phổ kế hồng ngoại của bước a) như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh, khi ít nhất một sai lệch được xác định ở bước c).

Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai và phương pháp hiệu chuẩn phổ được ghi trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Độ chính xác khi ghi nhận phổ hồng ngoại là điểm chính để phân tích có ý nghĩa phổ hồng ngoại được ghi nhận. Độ chính xác của các phép đo phụ thuộc chủ yếu vào sự hiệu chỉnh thiết bị đo và phương pháp hiệu chỉnh được sử dụng. Cụ thể là, đó là vấn đề lớn khi việc hiệu chỉnh thang bước sóng của phổ kế là không đúng. Chẳng hạn, phương pháp hiệu chỉnh phổ kế hồng ngoại gần có thể khác với phương pháp hiệu chỉnh đầy đủ hoặc có các ảnh hưởng khác, mà ảnh hưởng đến thiết bị hồng ngoại gần và độ chính xác của nó. Kết quả là, các đỉnh của tín hiệu cụ thể hoặc tất cả các tín hiệu trong các phổ được ghi nhận sẽ không nằm ở các vị trí bước sóng đúng và do vậy, các phép tính toán bất kỳ sau đó dựa trên các phổ được ghi nhận sẽ không đúng. Các vấn đề với hiệu chỉnh thang bước sóng có thể xuất hiện ngay lúc đầu, khi phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh sai hoặc thậm chí không phải bởi nhà cung cấp hoặc người sản xuất. Một nguyên nhân căn chỉnh sai có thể là không có nhiệt độ làm việc không đổi của phổ kế hồng ngoại trong suốt thủ tục hiệu chỉnh. Trong trường hợp đó, các bộ phận riêng rẽ của phổ kế mà mỗi bộ phận có nhiệt độ khác nhau, và do vậy, các nỗ lực bất kỳ để hiệu chỉnh phổ kế nêu trên sẽ dẫn đến điều chỉnh sai thang bước sóng của nó. Kết quả là, thủ tục tiếp theo kiểm tra sự xê dịch thang bước sóng của phổ kế hồng ngoại nêu trên dựa trên việc so sánh bên trong thang bước sóng hiện tại với thang bước sóng được điều chỉnh ban đầu, tức là bị hiệu chỉnh sai sẽ dẫn đến kết quả dương sai. Điều này sẽ cho người dùng cảm giác an toàn sai. Độc lập với điều này, các vấn đề với hiệu chỉnh thang bước sóng sẽ tự động phát sinh đối với

loại và khoảng thời gian hoạt động của phổ kế hồng ngoại. Có thể cho rằng việc hiệu chỉnh phổ kế hồng ngoại có thể dễ dàng được thực hiện nhờ sử dụng mẫu tham chiếu, có phổ hồng ngoại đã được biết đến. Tuy nhiên, cách thức này không xét đến các thay đổi của mẫu nêu trên theo thời gian, cụ thể là sự giả hóa hợp chất, lại dẫn đến các sai lệch trong phổ hồng ngoại được ghi nhận. Các xê dịch bước sóng không mong muốn trong các phổ hồng ngoại đặc biệt là vấn đề đối với các phổ kế độc lập, tức là, các phổ kế, vốn không phải là một phần của loại mạng bất kỳ, mà cho phép các hiệu chuẩn trực tuyến.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Công bố đơn quốc tế số WO 2006/066581 A1 bộc lộ phương pháp chuẩn hóa phổ kế hồng ngoại dựa trên các mẫu hình phổ của các thành phần của khí quyển về bản chất xuất hiện trong phổ kế. Một cách chi tiết, phương pháp này bao gồm các bước tạo phổ quang được ghi nhận bằng phổ kế và bao gồm các mẫu hình phổ xuất phát từ các thành phần của khí quyển trong phổ kế, lựa chọn mẫu hình phổ xuất phát từ các thành phần của khí quyển trong phổ kế, xác định các giá trị vị trí phụ thuộc bước sóng được liên kết với mẫu hình phổ được chọn, và điều chỉnh thang bước sóng của phổ quang dựa trên sai lệch giữa giá trị được xác định và giá trị tham chiếu tương ứng của mẫu hình phổ được chọn. Phương pháp tập trung chủ yếu vào việc sử dụng CO₂ để chuẩn hóa phổ kế hồng ngoại, cụ thể là điều chỉnh thang bước sóng của phổ quang được ghi nhận bằng phổ kế. Như có thể thấy từ Fig.3 trong công bố đơn quốc tế số WO 2006/066581 A1, khí quyển chứa nhiều thành phần khác nhau và mỗi thành phần trong các thành phần này có các băng hấp thụ chồng lấp ít nhất một phần và đôi lúc toàn phần với các băng hấp thụ của các thành phần khác. Cụ thể là, các băng hấp thụ trội của hơi nước là vấn đề lớn do chúng rất rộng và cũng bao phủ các băng hấp thụ của các thành phần khác của khí quyển, cụ thể là metan, ô xit nitơ (N₂O), oxy, ozôn, và điôxit cacbon. Tuy nhiên, mặc dù phần lớn băng hấp thụ của chẳng hạn, điôxit cacbon được bao phủ bởi các băng hấp thụ trội của hơi nước, tuy nhiên tiêu điểm của WO 2006/066581 A1 là việc lựa chọn mẫu hình phổ của điôxit cacbon trong phổ để xác định xê dịch hấp thụ. Việc nhận diện và lựa chọn mẫu hình phổ của điôxit

cacbon, không được bao phủ bởi các băng hấp thụ trội của hơi nước, do vậy là công việc phức tạp của con người, đòi hỏi đào tạo tốt và nhiều năm kinh nghiệm. Do vậy, chỉ các chuyên gia được đào tạo mới có thể thực hiện phương pháp của công bố đơn WO 2006/066581 A1 giảm đáng kể nhóm người dùng đối với phương pháp này. Vấn đề chồng lấp các băng hấp thụ cũng dẫn đến mức độ thích hợp thực tế kém của phương pháp của công bố WO 2006/066581 A1. Chẳng hạn, công bố WO 2006/066581 A1 đề cập đến việc phổ kế cần được làm khô để loại bỏ hơi nước và do vậy loại bỏ các băng hấp thụ trội của hơi nước. Tuy nhiên, tùy chọn này chỉ hoạt động đối với phổ kế trong phòng thí nghiệm mà với phổ kế cầm tay, được sử dụng cụ thể nằm ngoài điều kiện phòng thí nghiệm. Cụ thể là, khi làm việc với phổ kế hồng ngoại cầm tay thì không thể ghi lại các phổ bất kỳ không có hơi nước.

Công bố đơn số US 2008/297796 A1 cũng đề cập đến phương pháp hiệu chỉnh bước sóng của phổ kế. Cụ thể là, phương pháp này bao gồm bước cắt khối giá trị được đo khỏi phổ hiệu chỉnh tương ứng với một trong các khối giá trị được đo xuất hiện trên phổ kế của phổ mô hình. Bước cắt khối giá trị được đo khỏi phổ hiệu chỉnh tương ứng với một trong các khối giá trị được đo hiện có trên phổ kế của phổ mô hình, đòi hỏi nhận thức về hiệu chỉnh và phổ mô hình, vốn không phải là trường hợp trên thực tế, cụ thể là khi người không được đào tạo sẽ sử dụng phương pháp. Do vậy, phương pháp của đơn yêu cầu cấp bằng độc quyền sáng chế Mỹ số US 2008/297796 A1 đòi hỏi nhân viên có đào tạo tốt với nhiều năm kinh nghiệm. Do vậy, chỉ những nhân viên được đào tạo có thể thực hiện phương pháp này mà giảm đáng kể nhóm người dùng của phương pháp này.

Do đó, cần phương pháp ít phức tạp hơn để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai và cần phương pháp hiệu chuẩn phổ hồng ngoại, được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai.

Tìm ra rằng phổ kế hồng ngoại có thể được nhận diện như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh, chẳng hạn, có thang bước sóng được xê dịch, bằng cách xác định các sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ hồng ngoại mẫu được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại thứ nhất, cần được nhận

diện như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh, và bước sóng của (các) điểm cực trị tương tự trong phổ tham chiếu được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại được hiệu chỉnh thứ hai. Khi ít nhất một sai lệch bước sóng được nhận diện trong phổ được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại thứ nhất, phổ kế được chỉ là bị hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh. Các điểm cực trị, tức là, các giá trị phản xạ hoặc hấp thụ cao nhất và thấp nhất, trong các phổ đặc biệt thích hợp đối với việc xác định các sai lệch bước sóng giữa các phổ.

Mô tả chi tiết sáng chế

Do vậy, một mục đích của sáng chế đề cập đến phương pháp được triển khai bằng máy tính để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai, bao gồm các bước

a) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu có phổ kế hồng ngoại thứ nhất để tạo phổ hồng ngoại mẫu,

b) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu giống như ở bước a) có phổ kế hồng ngoại thứ hai để tạo phổ hồng ngoại tham chiếu, trong đó phổ kế thứ hai nêu trên là phổ kế hồng ngoại được hiệu chỉnh đúng,

hoặc

b') tạo phổ tham chiếu của mẫu giống như ở bước a), trong đó phổ tham chiếu nêu trên được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại thứ hai, vốn là phổ kế được hiệu chỉnh đúng,

c) xác định sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a) và bước sóng của (các) điểm cực trị tương tự trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'), và

d) chỉ báo phổ kế hồng ngoại của bước a) như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh, khi ít nhất một sai lệch được xác định ở bước c).

Do vậy, phương pháp theo sáng chế cho phép tự động nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai, trong đó người dùng không cần hiểu biết thực tế về phổ học hồng ngoại, về hiểu biết các phổ hồng ngoại, về các phổ được ghi nhận hoặc về chất thực hiện các phép đo hồng ngoại. Cụ thể là, phương pháp theo sáng chế không bao gồm lựa chọn mẫu hình phổ cụ thể bất

kỳ từ các phổ được ghi nhận, như trong các phương pháp của các công bố WO 2006/066581 A1 và US 2008/297796 A1. Thay vào đó, phương pháp theo sáng chế xem xét phổ đến từ toàn bộ phổ kế không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai ngấm và cả toàn bộ phổ tham chiếu. Ngoài ra, ngược lại với phương pháp của công bố WO 2006/066581 A1, phương pháp theo sáng chế không yêu cầu việc phổ kế được bao gồm được sấy khô hoặc loại bỏ hơi nước.

Theo sáng chế, cụm từ phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh sai được sử dụng để ký hiệu loại bất kỳ của phổ kế hồng ngoại có thang bước sóng được dịch chuyển được so sánh với thang bước sóng của phổ kế hồng ngoại được hiệu chỉnh (đúng). Do vậy, một hoặc nhiều đỉnh không xuất hiện ở các vị trí đúng trong phổ được ghi trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh sai. Nói cách khác, các đỉnh này là bước sóng bị xê dịch so với các đỉnh tương ứng trong phổ của cùng chất được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh. Cụm từ phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh sai rõ ràng bao gồm phổ kế hồng ngoại, đã bị hiệu chỉnh mà không đúng. Ngoài ra, thang bước sóng của phổ kế nêu trên có thể đã bị ảnh hưởng bởi các tác động bất kỳ chẳng hạn sự vắng mặt của nhiệt độ làm việc không đổi của phổ kế hồng ngoại trong suốt thủ tục hiệu chỉnh, dẫn đến thang bước sóng bị xê dịch.

Theo sáng chế, cụm từ phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh được sử dụng để ký hiệu loại bất kỳ của phổ kế hồng ngoại đã không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh quá sai, không thể được xem là đã hiệu chỉnh. Điều này nghĩa là phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh có thang bước sóng được dịch chuyển so với thang bước sóng của phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh (đúng). Do vậy, một hoặc nhiều đỉnh không xuất hiện ở các vị trí đúng trong phổ được ghi trên phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh. Nói cách khác, các đỉnh này là bước sóng bị xê dịch so với các đỉnh tương ứng trong phổ của cùng chất được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh.

Bằng cách so sánh, cụm từ được hiệu chỉnh hoặc phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh được sử dụng để ký hiệu loại bất kỳ của phổ kế hồng ngoại mà không biết liệu nó đã được cân chỉnh hay chưa và có thang bước sóng, mà không bị xê dịch so với thang bước sóng của phổ kế hồng ngoại, đã được biết là đã được hiệu chỉnh. Do vậy, các đỉnh trong phổ của mẫu cụ thể, chẳng hạn hợp chất hoặc chất,

được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại mà không biết liệu nó đã được hiệu chỉnh hay chưa, ở các vị trí giống nhau, tức là, các bước sóng, dưới dạng trong phổ của mẫu tương tự, chẳng hạn, hợp chất hoặc chất được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại, đã được biết là được hiệu chỉnh.

Theo sáng chế, cụm từ xê dịch bước sóng được sử dụng để ký hiệu sai lệch giữa giá trị cụ thể đối với bước sóng của điểm cực trị trong mẫu phổ hồng ngoại và giá trị cụ thể đối với bước sóng của cùng điểm cực trị trong phổ hồng ngoại tham chiếu.

Theo sáng chế, cụm từ mẫu được sử dụng để ký hiệu loại bất kỳ của mẫu bao gồm hoặc có hợp chất hoặc chất mà cấp tín hiệu hấp thụ trong phổ học hồng ngoại. Tốt hơn là, mẫu bao gồm hoặc có hợp chất hữu cơ, chẳng hạn, mẫu nêu trên là dung dịch của hợp chất hữu cơ, hoặc nó là mẫu rắn ở dạng nghiền hoặc không nghiền. Theo cách khác, tốt hơn là mẫu là chất, chẳng hạn, thức ăn gia súc và/hoặc chất liệu thô thức ăn gia súc. Trong đó mẫu là dung dịch của hợp chất hữu cơ, dung môi được chọn với điều kiện là nó là trơ và không phản ứng với hợp chất hữu cơ, vốn không được hòa tan, và các tín hiệu hấp thụ trong phổ hồng ngoại khác với các tín hiệu hấp thụ đặc trưng hợp chất trong mẫu. Tốt hơn nữa là sử dụng mẫu rắn, chẳng hạn chất, chẳng hạn, thức ăn gia súc và/hoặc chất liệu thô thức ăn gia súc, có ưu điểm là việc nhận diện các tín hiệu hấp thụ không bị ảnh hưởng bởi các tín hiệu hấp thụ bổ sung bất kỳ của dung môi. Theo sáng chế, mẫu tương tự được sử dụng trong các bước a), b) hoặc b'), nghĩa là mẫu bao gồm hợp chất tương tự được sử dụng. Khi mẫu là dung dịch của hợp chất hữu cơ, tốt hơn nếu mẫu được sử dụng ở các bước a), b) hoặc b') cũng có cùng nồng độ và chứa cùng dung môi.

Theo sáng chế, cụm từ điểm cực trị hoặc cũng được gọi là cực trị được sử dụng để ký hiệu điểm trong phổ hồng ngoại, vốn là loại bất kỳ của điểm lớn nhất hoặc nhỏ nhất. Do vậy, xem xét rằng phổ hồng ngoại có thể được biểu diễn bằng đồ thị của hàm toán học, điểm cực trị theo sáng chế có thể là điểm cao hoặc thấp của hàm nêu trên, trong khoảng cụ thể hoặc trên toàn bộ miền của hàm nêu trên. Khi điểm cực trị là điểm cao nhất hoặc thấp nhất của hàm trong khoảng cụ thể, chẳng hạn, trong khoảng của các bước sóng, cũng được gọi là giá trị lớn nhất

hoặc nhỏ nhất cục bộ hoặc tương đối. Nói cách khác, điểm cực trị được gọi là giá trị lớn nhất hoặc nhỏ nhất tuyệt đối hoặc toàn cục khi nó là điểm cao nhất hoặc thấp nhất của hàm trên toàn bộ miền của hàm.

Theo sáng chế, phổ kế hồng ngoại thứ nhất cần được nhận diện như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh. Do vậy, không được biết từ phổ kế hồng ngoại thứ nhất nêu trên là liệu đã được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh.

Khi phổ mẫu giống hệt với phổ tham chiếu, không chỉ số lượng hoặc thứ tự xuất hiện các tín hiệu hấp thụ, tức là, của các điểm cực trị, giống hệt trong mẫu và trong phổ tham chiếu. Thay vào đó, vị trí của các điểm cực trị nêu trên trong các phổ, tức là, các bước sóng của các điểm cực trị nêu trên, cũng giống hệt. Một cách chi tiết, việc nhận diện các xê dịch bước sóng trong bước c) của phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai do vậy bao gồm bước nhận diện mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu và trong phổ tham chiếu, và việc gán các bước sóng được xác định cho mỗi điểm cực trị theo thứ tự xuất hiện trong phổ mẫu cho các bước sóng của mỗi điểm cực trị theo thứ tự xuất hiện trong phổ tham chiếu. Phép gán này tạo các cặp của các bước sóng được so khớp. Khi các bước sóng được so khớp là giống hệt, phép chia sẽ cho giá trị 1. Tuy nhiên, trong trường hợp của các tín hiệu khác nhau, các bước sóng được so khớp sẽ khác nhau và phép chia sẽ cho giá trị khác 1. Bước c) của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh do vậy cũng bao gồm bước tính toán các tỷ lệ chỉ số cho mỗi cặp bước sóng được so khớp bằng cách phân chia các bước sóng của mỗi cặp, trong đó tỷ lệ khác với 1 chỉ báo xê dịch bước sóng, tức là, sai lệch giữa các bước sóng của mỗi cặp của các bước sóng được so khớp.

Theo phương án thực hiện, phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai bước c) do vậy bao gồm các bước

c1) xác định các bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a), và trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'),

c2) gán các bước sóng được xác định ở bước c1) theo thứ tự xuất hiện trong phổ mẫu của bước a) đến các bước sóng được xác định ở bước c1) theo thứ tự

xuất hiện trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b') để tạo các cặp bước sóng được so khớp, và

c3) tính toán các tỷ lệ chỉ số cho mỗi cặp bước sóng được so khớp bằng cách phân chia các bước sóng của cặp nêu trên, trong đó tỷ lệ khác với 1 chỉ báo sai lệch giữa các bước sóng của mỗi cặp.

Theo nguyên lý, phương pháp theo sáng chế không bị giới hạn liên quan đến khoảng bước sóng của phổ hồng ngoại cần được ghi nhận hoặc phổ kế hồng ngoại, mà phổ nêu trên được ghi nhận trên đó. Do vậy, phổ hồng ngoại của bước a), b) hoặc b') có thể được ghi nhận với phổ kế hồng ngoại gần có sẵn trên thị trường hoặc thích hợp bất kỳ. Tuy nhiên, thông tin liên quan nhất của phổ hồng ngoại thường được thấy trong khoảng từ 1,100 nm đến 2,500 nm. Do vậy, tốt hơn ghi lại phổ trong các bước a) hoặc b) trong khoảng từ 1,100 nm đến 2,500 nm. Do đó, phổ tham chiếu được tạo là bước b') của phương pháp theo sáng chế chỉ cần bao phủ khoảng từ 1,100 nm đến 2,500 nm. Khi mẫu của chất liệu thô thức ăn gia súc và/hoặc thức ăn gia súc ở bước a), b) hoặc b') không mờ, sự phản xạ của ánh sáng được phát ra từ mẫu được đo và độ lệch giữa ánh sáng được phát và ánh sáng được phản xạ được xem như là hấp thụ. Do vậy, các hấp thụ thu được, tức là, các cường độ và các bước sóng của chúng được tạo trong các phổ được ghi nhận ở các bước a) và b) hoặc được nêu ở bước b'). Do đó, phổ kế hồng ngoại gần thích hợp để sử dụng trong phương pháp theo sáng chế có thể làm việc trong chế độ truyền hoặc trong chế độ phản xạ.

Theo phương án thực hiện, phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai mẫu và/hoặc phổ tham chiếu được ghi nhận trên khoảng từ 1,100 nm đến 2,500 nm.

Theo nguyên lý, phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo sáng chế không bị giới hạn liên quan đến lựa chọn mẫu cụ thể được sử dụng trong bước a), b) hoặc b'), giả thử rằng mẫu hoặc hợp chất nêu trên được chứa trong mẫu đó các tín hiệu hấp thụ rõ ràng và có thể gán trong trục phổ hồng ngoại. Do độ chính xác là chìa khóa thực hiện phân tích đáng tin cậy và ý nghĩa nhờ trục phổ hồng ngoại, có ưu điểm là các bước a), b), hoặc b') của phương pháp theo sáng chế sử dụng mẫu tương tự, cụ

thể là chứa cùng hợp chất hoặc chất, có phổ hồng ngoại cũng được ghi nhận sau khi hoàn thành phương pháp. Mẫu nêu trên tốt hơn là bao gồm hợp chất hữu cơ, chẳng hạn, nó là dung dịch của hợp chất hữu cơ. Theo cách khác, mẫu nêu trên là mẫu rắn bao gồm hoặc có hợp chất hữu cơ.

Theo phương án thực hiện khác, mẫu ở các bước a), b) hoặc b') của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai do vậy bao gồm hoặc có cùng hợp chất hoặc chất, có phổ hồng ngoại cũng được ghi nhận sau khi hoàn thành phương pháp.

Phương pháp theo sáng chế bao gồm bước nhận diện các bước sóng của các điểm cực trị trong các phổ và gán các bước sóng của các điểm cực trị trong phổ mẫu cho các bước sóng của các điểm cực trị trong phổ tham chiếu. Nhóm chức trong hợp chất của mẫu của các bước a), b) hoặc b') tạo ít nhất một tín hiệu hấp thụ đặc trưng và rõ ràng và có thể gán trong phổ hồng ngoại. Tốt hơn là, hợp chất trong mẫu của các bước a), b) hoặc b') do vậy, bao gồm ít nhất một nhóm chức.

Liên quan đến số lượng nhóm chức trong hợp chất của mẫu của các bước a), b) hoặc b'), phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai theo sáng chế không bị giới hạn. Tuy nhiên, tin rằng đó là xu hướng chung càng nhiều nhóm chức có trong hợp chất của mẫu của các bước a), b) hoặc b'), phương pháp càng chính xác hơn theo sáng chế. Càng tin rằng sự có mặt của ít nhất hai nhóm chức khác nhau trong hợp chất của mẫu của các bước a), b) hoặc b') sẽ cải thiện tiết độ chính xác của phương pháp theo sáng chế.

Theo phương án thực hiện khác, phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai mẫu của các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có hợp chất có ít nhất hai nhóm chức khác nhau.

Tốt hơn là, ít nhất hai nhóm chức khác nhau của hợp chất nêu trên được chọn từ nhóm bao gồm nhóm amino; nhóm axit cacboxylic; nhóm hiđrôxyl; nhóm ete, tốt hơn là nhóm ete ankyl, một cách tùy chọn được thay thế bằng nhóm acyl, hoặc nhóm ete acyl, một cách tùy chọn được thay thế bằng nhóm ankyl; nhóm este, tốt hơn là nhóm este ankyl, một cách tùy chọn được thay thế bằng nhóm acyl, hoặc nhóm este acyl, một cách tùy chọn được thay thế bằng nhóm ankyl; nhóm keto; nhóm aldehyd; nhóm guanidin; nhóm amit; nhóm carbamoyl; nhóm

thiol; nhóm thiol ete, tốt hơn là nhóm thiol ete ankyl, một cách tùy chọn được thay thế bằng nhóm acyl, hoặc nhóm thiol ete acyl, một cách tùy chọn được thay thế bằng nhóm ankyl; nhóm disulfua; nhóm benzyl; nhóm phenyl; nhóm benzoyl; nhóm hydroxyphenyl, tốt hơn là nhóm 4-hydroxyphenyl; nhóm heteroaryl, tốt hơn là nhóm imidazol hoặc indole; nhóm amin bậc 2, tốt hơn là nhóm pyrrolidin; và/hoặc nhóm amin bậc 3. Các nhóm chức này cấp các tín hiệu rất cụ thể và do vậy dễ nhận diện trong phổ. Một số chung thường được chứa trong các axit amino, các muối của các axit amino và dẫn xuất của chúng. Muối axit amino thông thường là kiềm, kiềm thổ hoặc muối amoniac của axit amino. Theo sáng chế, chất dẫn xuất của axit amino hoặc muối axit amino là axit amino hoặc muối của nó trong đó nhóm chức cụ thể được truyền vào nhóm khác, chẳng hạn, nhóm axit cacboxylic được truyền vào nhóm este, hoặc được thay thế bằng nhóm chức khác, chẳng hạn, nhóm amino được thay thế bằng nhóm hiđrôxyl. Chẳng hạn, trong axit 2-hydroxy-(4-methylthio)-butanoic, cũng được biết đến như là chất tương tự methionin hydroxy (MHA), nhóm amino của methionin được thay thế bằng nhóm hydroxy. Các mẫu bao gồm hoặc có các axit amino chẳng hạn là các thức ăn gia súc và/hoặc các chất liệu thô thức ăn gia súc. Do vậy, phương pháp theo sáng chế đặc biệt thích hợp để sử dụng trong nông nghiệp. Sáng chế cũng là lĩnh vực trong đó các phổ kế hồng ngoại độc lập thường được sử dụng, để có các xê dịch bước sóng.

Theo phương án thực hiện, phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai mẫu của các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có hợp chất bao gồm nhóm amino, nhóm hiđrôxyl và/hoặc nhóm axit cacboxylic. Tốt hơn là, hợp chất nêu trên bao gồm i) nhóm amino và nhóm axit cacboxylic, ii) nhóm hiđrôxyl và nhóm axit cacboxylic, iii) nhóm amino và nhóm hiđrôxyl, hoặc iv) nhóm amino, nhóm hiđrôxyl và nhóm axit cacboxylic.

Do vậy, cũng tốt hơn nếu hợp chất trong mẫu của các bước a), b) hoặc b') là axit amino, muối axit amino và/hoặc chất dẫn xuất của nó.

Theo nguyên lý, phương pháp theo sáng chế không bị giới hạn liên quan đến lựa chọn của axit amino cụ thể, muối axit amino và/hoặc chất dẫn xuất của nó. Tuy nhiên, nhận ra rằng methionin, muối methionin, chẳng hạn canxi

methionate, và/hoặc chất dẫn xuất của nó, chẳng hạn axit 2-hydroxy-(4-methylthio)-butanoic (MHA) nêu trên, là hợp chất đặc biệt thích hợp để ghi nhận mẫu và các phổ tham chiếu ở phương pháp theo sáng chế. Một trong các nguyên nhân chính là độ ổn định của methionin, các muối của nó và/hoặc các chất dẫn xuất của nó, so với các axit amino khác chẳng hạn cystein, có các nhóm sulfhydryl dễ bị ôxy hóa để tạo cystin disulfua. Nguyên nhân khác là việc methionin cũng thường được phân tích bằng trắc phổ hồng ngoại. Cụ thể là, trong lĩnh vực mẫu methionin thức ăn chăn nuôi cho động vật chứa các chất liệu thô thức ăn gia súc hoặc các thức ăn gia súc hỗn hợp thường đưa qua trắc phổ hồng ngoại. Trong trường hợp đó, các tín hiệu hấp thụ methionin, muối methionin và/hoặc chất dẫn xuất của nó trong phổ của các chất liệu thô thức ăn chăn nuôi hoặc các thức ăn chăn nuôi hỗn hợp nên giống như các tín hiệu hấp thụ trong phổ của mẫu bao gồm hoặc có methionin thuần túy, muối methionin và/hoặc chất dẫn xuất của nó. Việc sử dụng methionin, muối methionin và/hoặc chất dẫn xuất của nó để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai do vậy đề xuất phương pháp theo sáng chế có mức độ chính xác có lợi. Tốt hơn là, mẫu của các bước a), b) hoặc b') do vậy bao gồm hoặc có methionin, muối methionin và/hoặc chất dẫn xuất của nó.

Các trường hợp có thể phát sinh, trong đó không dễ nhận diện điểm cực trị trong phổ. Tuy nhiên, phổ hồng ngoại cũng có thể được biểu diễn dưới dạng đồ thị của hàm số toán học, trong đó các tín hiệu hấp thụ tương ứng với các điểm cực trị, cụ thể là các giá trị cực đại cục bộ hoặc toàn cục. Tùy thuộc vào phổ hồng ngoại riêng rẽ, có thể lấy hai hoặc nhiều hàm số toán học để mô tả phổ hồng ngoại. Bất kể như vậy, có thể dễ dàng nhận diện sự có mặt của điểm cực trị, giá trị cực đại cục bộ hoặc toàn cục, trong hàm toán học và vị trí của nó ở đó bằng cách lấy đạo hàm thứ nhất và/hoặc thứ hai của một hoặc nhiều hàm. Được truyền đến phổ hồng ngoại của các bước a), b) hoặc b'), điều này nghĩa là trước hết, một hoặc nhiều hàm mô tả phổ hồng ngoại phải thu được, điều có thể được thực hiện nhờ sử dụng các chương trình phân tích toán học, và tiếp theo, chất dẫn xuất thứ nhất và/hoặc thứ hai phải được lấy. Lấy đạo hàm thứ nhất của phổ sẽ dễ nhận diện các điểm cực trị trong phổ do nó cho điểm về không của các giá trị lớn nhất

hoặc nhỏ nhất hấp thụ. Lấy đạo hàm thứ hai cho giá trị nhỏ nhất ở chính xác vị trí đó, trong đó giá trị lớn nhất hấp thụ nằm trong phổ ban đầu và giá trị lớn nhất ở vị trí của giá trị nhỏ nhất hấp thụ trong phổ ban đầu.

Theo phương án thực hiện khác nữa, bước c1) của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai còn bao gồm bước lấy chất dẫn xuất thứ nhất và/hoặc thứ hai của phổ mẫu và của phổ tham chiếu.

Khi vị trí của điểm cực trị trong phổ mẫu, tức là, bước sóng của điểm cực trị trong phổ mẫu, đã được xác định, có thể gán bước sóng nêu trên của phổ mẫu cho bước sóng tương ứng của phổ tham chiếu. Khi phổ mẫu giống hệt với phổ tham chiếu, cả hai phổ có các điểm cực trị, cụ thể là các giá trị lớn nhất hấp thụ, ở các vị trí tương tự, tức là, ở các bước sóng tương tự. Do vậy, cả hai phổ nên có số lượng điểm cực trị tương tự và các điểm cực trị nêu trên cũng xuất hiện theo thứ tự tương tự trong các phổ và ở vị trí tương tự, tức là, các bước sóng, ở các phổ nêu trên.

Do vậy, theo phương án thực hiện được ưu tiên, phương pháp để nhận diện phổ hồng ngoại bị hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh ở bước c3) bước sóng của điểm cực trị trong phổ mẫu hoặc chất dẫn xuất của nó được gán cho bước sóng của điểm cực trị trong phổ tham chiếu hoặc chất dẫn xuất của nó khi điểm cực trị trong phổ mẫu hoặc chất dẫn xuất của nó theo thứ tự giống như điểm cực trị tương ứng trong phổ tham chiếu hoặc chất dẫn xuất của nó.

Thông tin trên các bước sóng, chẳng hạn các giá trị của chúng và giá trị của các tỷ lệ chỉ số của các bước sóng được so khớp, là dữ liệu có ích về phổ kế hồng ngoại thứ nhất được sử dụng ở bước a) của phương pháp theo sáng chế. Cụ thể là, các tỷ lệ chỉ số thu được trong bước c4) theo phương án thực hiện của phương pháp theo sáng chế và hai bước sóng tạo tỷ lệ nêu trên, thích hợp để thực hiện các hiệu chuẩn của phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh, như được giải thích chi tiết hơn dưới đây. Tốt hơn là, các dữ liệu này do vậy được lưu trữ trong cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây cùng với số nhận diện hoặc thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước a) của phương pháp theo sáng chế.

Theo phương án thực hiện được ưu tiên khác, phương pháp nhận diện phổ hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai do vậy còn bao gồm các bước

c4) tạo các mảng của các tỷ lệ cho mỗi tỷ lệ trong các tỷ lệ chỉ số của bước c3) và hai bước sóng tạo tỷ lệ nêu trên, và

c5) lưu trữ các mảng của các tỷ lệ của bước c4) trong cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây cùng với số nhận diện hoặc thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước a).

Theo nghĩa rộng nhất, sáng chế cũng đề cập đến việc sử dụng của tế bào đo hồng ngoại bao gồm axit amino, muối của axit amino và/hoặc chất dẫn xuất của nó, tốt hơn là methionin, muối methionin và/hoặc chất dẫn xuất của nó để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai.

Khi phổ kế hồng ngoại đã được nhận diện như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh do xê dịch bước sóng, cũng cần hiệu chuẩn phổ được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh sai hoặc không bị hiệu chỉnh đó.

Nhận thấy rằng mục đích này được giải quyết nhờ sử dụng các mảng của các tỷ lệ cho mỗi tỷ lệ trong các tỷ lệ chỉ số của bước c3) của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai. Các tỷ lệ chỉ số nêu trên cho phép hiệu chuẩn các xê dịch bước sóng trong phổ hồng ngoại được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh sai hoặc không bị hiệu chỉnh. Một cách chi tiết, phổ kế hồng ngoại, mà phổ hồng ngoại của mẫu được ghi nhận trên đó, được nhận diện bằng số thứ tự hoặc nhận diện của nó, và các mảng của các tỷ lệ thu được cho phổ kế hồng ngoại cụ thể này ở bước c5) của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo sáng chế được tải từ cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây. Tiếp theo, các tỷ lệ chỉ số của mỗi mảng tỷ lệ được nhân với bước sóng tương ứng của điểm cực trị trong phổ nêu trên được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại để tạo các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị nêu trên.

Theo phương án thực hiện khác, phương pháp được triển khai bằng máy tính theo sáng chế còn bao gồm các bước

i) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai để tạo phổ hồng ngoại của mẫu nêu trên, trong đó mẫu nêu trên giống hệt hoặc khác với mẫu của bước a) của phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo sáng chế,

ii) nhận diện phổ kế hồng ngoại của bước i) bằng số thứ tự hoặc nhận diện của nó,

iii) tải các mảng của các tỷ lệ thu được cho phổ kế hồng ngoại của bước i) ở bước c5) của phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo sáng chế từ cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây,

iv) nhận tỷ lệ chỉ số của mỗi mảng tỷ lệ của bước iii) với bước sóng tương ứng của điểm cực trị trong phổ của bước i) để tạo các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị, và

v) tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn với các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị của bước iv).

Theo sáng chế, phổ hồng ngoại của bước i) được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai. Điều này nghĩa là phổ hồng ngoại của bước i) có thang bước sóng bị xô dịch, tức là, ít nhất một điểm cực trị trong phổ nêu trên không phải ở vị trí được mong đợi, trong đó nên là như vậy, tức là, nó có xô dịch bước sóng.

Tốt hơn là, phổ kế hồng ngoại của bước i) là phổ kế hồng ngoại thứ nhất của bước a) của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai, đã được nhận diện như là được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh. Do vậy, tốt hơn nếu phổ kế hồng ngoại nêu trên của bước i) đã được nhận diện như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh ở phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai theo sáng chế. Do vậy, cũng tốt hơn nếu phương pháp để hiệu chuẩn phổ hồng ngoại theo sáng chế bao gồm tất cả các bước, tốt hơn là các bước từ a) đến d), cũng cụ thể là các bước từ c1) đến c5), và tất cả các phương án thực hiện của phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu

chỉnh sai theo sáng chế. Trong trường hợp đó, các bước và các phương án thực hiện của phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai đứng trước các bước và các phương án thực hiện của phương pháp để hiệu chuẩn phổ hồng ngoại theo sáng chế.

Phương pháp bao gồm các bước từ i) đến v) không bị giới hạn liên quan đến mẫu, tức là, hợp chất hoặc chất, có phổ hồng ngoại được ghi nhận ở bước i). Do vậy, mẫu nêu trên có thể là mẫu đã biết hoặc không biết, chẳng hạn, có thể giống hệt với hoặc khác với mẫu của bước a). Tuy nhiên, tốt hơn nếu mẫu của bước i) bao gồm hoặc có cùng hợp chất hoặc chất như là mẫu của bước a). Để cho phép độ chính xác tốt nhất có thể, tốt hơn nữa nếu mẫu của bước i) là mẫu tương tự như trong bước a) của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai.

Thủ tục của các bước i) đến iv) nêu trên tạo các bước sóng được hiệu chuẩn trong phổ được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai. Tuy nhiên, phổ có các bước sóng được hiệu chuẩn không còn nhất quán với phổ hồng ngoại ban đầu được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại. Để dễ xác định các điểm cực trị trong phổ cho các ứng dụng sau này, do vậy, tốt hơn nếu hiệu chuẩn toàn bộ phổ. Các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị và các cường độ hấp thụ của nó tạo cơ sở để hiệu chuẩn toàn bộ phổ: vị trí của các điểm cực trị trong phổ được di chuyển từ các bước sóng bị xê dịch đến các bước sóng được hiệu chuẩn. Ở bước tiếp theo, cần vẽ đồ thị qua các điểm cực trị của các bước sóng được hiệu chuẩn và nếu phù hợp, qua các điểm còn lại của phổ, mà các vị trí của nó không bị ảnh hưởng bởi các phép xê dịch bước sóng. Điều này có thể được thực hiện nhờ nội suy. Tuy nhiên, theo sáng chế, đã chứng tỏ có lợi khi không vẽ một đa thức qua tất cả các điểm cực trị trong phổ; thay vào đó tốt hơn nếu sử dụng vài đa thức để nối các điểm lân cận, mà kết hợp tron tru thành một đồ thị. Nội suy spline hoặc nội suy spline lập phương tốt hơn rất hữu ích cho dữ liệu nội suy cho các giá trị bước sóng mới và cũng để tạo các miền liên tục. Do vậy, nội suy spline (lập phương) tốt hơn cho nội suy giữa tất cả các bước sóng của các điểm cực trị để tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn. Có lợi hơn đối với nội suy spline mà chỉ đòi hỏi các phép tính tương đối dễ dàng.

Nội suy spline có thể được ảo hóa dưới dạng dải linh hoạt được uốn để đi qua mỗi điểm trong các điểm cực trị trong phổ cần được nội suy. Dải này có thể được mô tả nhờ chuỗi các đa thức lập phương, do vậy được gọi là nội suy spline lập phương, phải thỏa mãn yêu cầu đường spline phải đi qua tất cả các giá trị hàm, các đạo hàm thứ nhất và thứ hai của các đa thức lập phương là liên tục, và đường cong bị cưỡng bức bằng 0 ở các điểm cuối của khoảng trong phổ. Khi các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị đã được biết, các đa thức lập phương có thể dễ dàng được tính toán nhờ chương trình toán học bất kỳ.

Theo một phương án thực hiện, bước iv) phương pháp theo sáng chế do vậy còn bao gồm các bước

iv1) tính toán các đa thức đối với các bước sóng của hai điểm cực trị liền kề in phổ của bước i), trong đó các bước sóng nêu trên là các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong bước iv) và/hoặc bước sóng mà dịch chuyển bước sóng không được xác định ở bước c) của phương pháp để nhận diện phổ hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc hiệu chỉnh sai, và

iv2) nội suy giữa tất cả các bước sóng trong phổ của bước i) với các đa thức của bước iv1) để tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn.

Dựa vào phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn nêu trên, có thể đọc tất cả thông tin liên quan, cụ thể là các bước sóng của tất cả các điểm cực trị, tức là, các giá trị cực đại hấp thụ và các giá trị cực tiểu hấp thụ, từ phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn nêu trên. Trong số điều này, đặc biệt tương đương khi đọc các cực đại hấp thụ ở các bước sóng, cả được hiệu chuẩn lẫn không được hiệu chuẩn, ở phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn được nêu ở bước iv2) của phương án thực hiện nêu trên, do các cực đại hấp thụ là thông tin quan trọng nhất trong phổ hồng ngoại.

Theo phương án thực hiện được ưu tiên, phương pháp theo sáng chế còn bao gồm bước

vi) đọc các cực đại hấp thụ ở các bước sóng trong phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn của bước v).

Các bước sóng được hiệu chuẩn nêu trên cũng có thể được sử dụng để tuân theo các xu hướng trong các độ lệch của các bước sóng được ghi nhận đối với chuẩn, tức là, mẫu cụ thể trong phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại

không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai, trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai từ các bước sóng được ghi nhận đối với chuẩn tương tự trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh. Do vậy, tốt hơn nếu lưu trữ phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn của bước v) cùng với số nhận diện hoặc thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước i). Ngoài ra, các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong phương pháp theo sáng chế cũng cho phép hiệu chỉnh phổ kế hồng ngoại của bước i), khi được nhận diện dưới dạng không được hiệu chỉnh hoặc không được hiệu chỉnh đúng ở phương pháp theo sáng chế, tức là, ở bước d) của phương pháp nêu trên, nhờ sử dụng các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong bước iv).

Theo phương án thực hiện được ưu tiên khác, phương pháp theo sáng chế do vậy còn bao gồm bước

vii) lưu trữ phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn của bước v) cùng với số nhận diện hoặc thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước i).

Theo phương án thực hiện được ưu tiên khác, phương pháp theo sáng chế còn bước

viii) hiệu chỉnh phổ kế hồng ngoại của bước i) thành các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong bước iv).

Cũng tốt hơn nếu thực hiện phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai trong các khoảng chu kỳ, tốt hơn là theo tuần hoặc theo ngày. Điều này cho phép tạo độ chính xác tốt nhất có thể của phổ kế hồng ngoại, tức là, phổ kế hồng ngoại của bước a) và/hoặc phổ kế hồng ngoại của bước i). Tốt hơn nữa nếu cả hai phương pháp được thực hiện theo các khoảng chu kỳ tương tự, tốt hơn là theo tuần hoặc theo ngày.

Theo phương án thực hiện khác, các bước a) đến d) của phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai và các bước i) đến v) được thực hiện trong các khoảng chu kỳ tương tự.

Các phương pháp theo sáng chế có thể được thực hiện trong lân cận gần hoặc cách xa phổ kế hồng ngoại, vốn được nhận diện như là được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh, và phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn đã được ghi nhận

trên đó. Trong trường hợp sau, phương pháp hiệu chuẩn được xem xét như là hiệu chuẩn từ xa.

Có lợi hơn khi đề xuất hệ thống, cho phép dễ truyền thông giữa phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai (thứ nhất), phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh thứ hai và/hoặc cơ sở dữ liệu trên đó phổ tham chiếu được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh thứ hai, được lưu trữ, và máy tính, mà thực hiện xác định các xê dịch bước sóng trong số các bước, hiệu chuẩn các bước sóng bị xê dịch và hiệu chuẩn phổ kế hồng ngoại được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chuẩn sai.

Do vậy, mục đích khác của sáng chế là hệ thống thích hợp để thực hiện phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo sáng chế và/hoặc phương pháp để hiệu chuẩn phổ kế hồng ngoại theo sáng chế, trong đó hệ thống là mạng bao gồm phổ kế hồng ngoại thứ nhất và khối điều khiển ít nhất được làm thích ứng

- để xác định sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a) và bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ tham chiếu của bước b) và/hoặc b'), và để tính toán các tỷ lệ chỉ số của bước c3) cho mỗi cặp bước sóng được so khớp của bước a) và/hoặc

- để tính toán các đa thức của bước iv1) đối với các bước sóng của hai điểm cực trị liền kề trong phổ của bước i) và để nội suy giữa tất cả các bước sóng trong phổ của bước i) với các đa thức để tạo phổ kế hồng ngoại được hiệu chuẩn.

Thiết bị nêu trên có thể là mạng bao gồm phổ kế hồng ngoại thứ nhất và thứ hai và máy tính. Theo cách khác, thiết bị nêu trên có thể là mạng bao gồm phổ kế hồng ngoại không bị hiệu chỉnh thứ nhất, đám mây mà phổ tham chiếu được ghi nhận trên phổ kế hồng ngoại bị hiệu chỉnh thứ hai được lưu trữ, và máy tính.

Sáng chế còn được minh họa trong các mục sau:

1. Phương pháp được triển khai bằng máy tính để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai, bao gồm các bước:

- a) ghi nhận phổ kế hồng ngoại của mẫu có phổ kế hồng ngoại thứ nhất để tạo phổ kế hồng ngoại mẫu,

b) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu giống như ở bước a) có phổ kế hồng ngoại thứ hai để tạo phổ hồng ngoại tham chiếu, trong đó phổ kế thứ hai nêu trên là phổ kế hồng ngoại được hiệu chỉnh đúng,

hoặc

b') tạo phổ tham chiếu của mẫu giống như ở bước a), trong đó phổ tham chiếu nêu trên được ghi nhận trên phổ hồng ngoại thứ hai, vốn là phổ kế được hiệu chỉnh đúng,

c) xác định sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a) và bước sóng của cùng điểm cực trị trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'), và

d) chỉ báo phổ kế hồng ngoại của bước a) như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh, khi ít nhất một sai lệch được xác định ở bước c).

2. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo item 1, trong đó bước c) còn bao gồm các bước

c1) xác định các bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a), và trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'),

c2) gán các bước sóng được xác định ở bước c1) theo thứ tự xuất hiện trong phổ mẫu của bước a) cho các bước sóng được xác định ở bước c1) theo thứ tự xuất hiện trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b') để tạo các cặp bước sóng được so khớp, và

c3) tính toán các tỷ lệ chỉ số cho mỗi cặp bước sóng được so khớp bằng cách phân chia các bước sóng của cặp nêu trên, trong đó tỷ lệ khác với 1 chỉ báo sai lệch giữa các bước sóng của mỗi cặp.

3. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục 1 hoặc 2, trong đó mẫu trong các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có cùng hợp chất hoặc chất, có phổ hồng ngoại cũng được ghi nhận sau khi hoàn thành phương pháp.

4. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 1 đến 3, trong đó mẫu của các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có hợp chất có ít nhất hai nhóm chức khác nhau.

5. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 1 đến 4, trong đó mẫu của các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có hợp chất bao gồm nhóm amino, nhóm hiđrôxyl và/hoặc nhóm axit cacboxylic.

6. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 1 to 5, còn bao gồm bước lấy chất dẫn xuất thứ nhất và/hoặc thứ hai của phổ mẫu và của phổ tham chiếu.

7. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 2 đến 6, trong đó ở bước c3) bước sóng của điểm cực trị trong phổ mẫu hoặc chất dẫn xuất của nó được gán cho bước sóng của điểm cực trị trong phổ tham chiếu hoặc chất dẫn xuất của nó khi điểm cực trị trong phổ mẫu hoặc chất dẫn xuất của nó theo thứ tự giống như điểm cực trị tương ứng trong phổ tham chiếu hoặc chất dẫn xuất của nó.

8. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 2 đến 7, trong đó phương pháp còn bao gồm các bước

c4) tạo các mảng của các tỷ lệ cho mỗi tỷ lệ trong các tỷ lệ chỉ số của bước c3) và hai bước sóng tạo tỷ lệ nêu trên, và

c5) lưu trữ các mảng của các tỷ lệ của bước c4) trong cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây cùng với số nhận diện hoặc thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước a).

9. Phương pháp được triển khai bằng máy tính để hiệu chuẩn phổ hồng ngoại bao gồm các bước

i) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai để tạo phổ hồng ngoại của mẫu nêu trên, trong đó mẫu nêu trên giống hệt hoặc khác với mẫu của bước a) theo mục 1,

ii) nhận diện phổ kế hồng ngoại của bước i) bằng số thứ tự hoặc nhận diện của nó,

iii) tải các mảng của các tỷ lệ thu được cho phổ kế hồng ngoại của bước i) trong bước c5) của phương pháp theo item 8 từ cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây,

iv) nhận tỷ lệ chỉ số của mỗi mảng tỷ lệ của bước iii) với bước sóng tương ứng của điểm cực trị trong phổ của bước i) để tạo các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị, và

v) tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn với các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị của bước iv).

10. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 1 đến 8, trong đó phương pháp còn bao gồm các bước

i) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai để cấp phổ hồng ngoại của mẫu nêu trên, trong đó mẫu nêu trên giống hệt hoặc khác với mẫu của bước a) theo điểm 1,

ii) nhận diện phổ kế hồng ngoại của bước i) bằng số thứ tự hoặc nhận diện của nó,

iii) tải các mảng của các tỷ lệ thu được cho phổ kế hồng ngoại của bước i) ở bước c5) của phương pháp theo điểm 8 từ cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây,

iv) nhận tỷ lệ chỉ số của mỗi mảng tỷ lệ của bước iii) với bước sóng tương ứng của điểm cực trị trong phổ của bước i) để cấp các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị, và

v) tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn với các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị của bước iv).

11. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục 9 hoặc 10, trong đó bước iv) còn bao gồm các bước

iv1) tính toán các đa thức đối với các bước sóng của hai điểm cực trị liền kề trong phổ của bước i), trong đó các bước sóng nêu trên là các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong bước iv) và/hoặc các bước sóng mà dịch chuyển bước sóng không được xác định ở bước c) của phương pháp theo điểm 1, và

iv2) nội suy giữa tất cả các bước sóng trong phổ của bước i) với các đa thức của bước iv1) để tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn.

12. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 9 đến 11, trong đó phương pháp còn bao gồm bước

vi) đọc các cực đại hấp thụ ở các bước sóng trong phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn của bước v).

13. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 9 đến 12, trong đó phương pháp còn bao gồm bước

vii) lưu trữ phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn của bước v) cùng với số nhận diện hoặc thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước i)

14. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 9 đến 13, trong đó phương pháp còn bao gồm bước

viii) hiệu chỉnh phổ kế hồng ngoại của bước i) cho các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong bước iv).

15. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo mục bất kỳ trong số các mục từ 1 đến 14, trong đó phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo mục bất kỳ trong số các mục từ 1 đến 14 và phương pháp để hiệu chuẩn phổ hồng ngoại theo mục bất kỳ trong số các mục từ 9 đến 14 được thực hiện trong các khoảng chu kỳ tương tự.

14. Hệ thống thích hợp để thực hiện phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo mục bất kỳ trong số các mục từ 1 đến 14 và phương pháp để hiệu chuẩn phổ hồng ngoại theo mục bất kỳ trong số các mục từ 9 đến 14, trong đó hệ thống là mạng bao gồm phổ kế hồng ngoại thứ nhất và khối điều khiển ít nhất được làm thích ứng

- để xác định sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a) và bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'), và để tính toán các tỷ lệ chỉ số của bước c3) cho mỗi cặp bước sóng được so khớp của bước a) và/hoặc

- để tính toán các đa thức của bước iv1) đối với các bước sóng của hai điểm cực trị liền kề trong phổ của bước i) và để nội suy giữa tất cả các bước sóng trong phổ của bước i) với các đa thức để cấp phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn.

15. Việc sử dụng tế bào đo hồng ngoại bao gồm axit amino, muối của axit amino và/hoặc chất dẫn xuất của nó, ở phương pháp nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo mục bất kỳ trong số các mục

từ 1 đến 14 hoặc ở phương pháp được triển khai bằng máy tính để hiệu chuẩn phổ hồng ngoại theo mục bất kỳ trong số các mục từ 9 đến 14.

YÊU CẦU BẢO HỘ

1. Phương pháp được triển khai bằng máy tính để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai, trong đó phương pháp bao gồm các bước

a) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu có phổ kế hồng ngoại thứ nhất để tạo phổ hồng ngoại mẫu,

b) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu giống như ở bước a) có phổ kế hồng ngoại thứ hai để tạo phổ hồng ngoại tham chiếu, trong đó phổ kế thứ hai nêu trên là phổ kế hồng ngoại được hiệu chỉnh đúng,

hoặc

b') tạo phổ tham chiếu của mẫu giống như ở bước a), trong đó phổ tham chiếu nêu trên được ghi nhận trên phổ hồng ngoại thứ hai, vốn là phổ kế được hiệu chỉnh đúng,

c) việc xác định sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a) và bước sóng của (các) điểm cực trị tương tự trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'), bao gồm các bước:

c1) xác định các bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a), và trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'), trong đó bước c1) còn bao gồm bước lấy chất dẫn xuất thứ nhất và/hoặc thứ hai của phổ mẫu và của phổ tham chiếu,

c2) gán các bước sóng được xác định ở bước c1) theo thứ tự xuất hiện của chúng trong phổ mẫu của bước a) cho các bước sóng được xác định ở bước c1) theo thứ tự xuất hiện của chúng trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b') để tạo các cặp bước sóng được so khớp, và

c3) tính toán các tỷ lệ chỉ số cho mỗi cặp bước sóng được so khớp bằng cách chia các bước sóng của cặp nêu trên, trong đó tỷ lệ khác với 1 chỉ báo sai lệch giữa các bước sóng của mỗi cặp,

c4) tạo các mảng của các tỷ lệ cho mỗi tỷ lệ trong các tỷ lệ chỉ số của bước c3) và hai bước sóng tạo tỷ lệ nêu trên, và

c5) lưu trữ các mảng của các tỷ lệ của bước c4) trong cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây cùng với số nhận diện hoặc số thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước a),

d) chỉ báo phổ kế hồng ngoại của bước a) như được hiệu chỉnh sai hoặc không được hiệu chỉnh, khi ít nhất một sai lệch được xác định ở bước c),

e) ghi nhận phổ hồng ngoại của mẫu trên phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai để tạo phổ hồng ngoại của mẫu nêu trên, trong đó mẫu nêu trên giống hệt hoặc khác với mẫu của bước a),

f) nhận diện phổ kế hồng ngoại của bước e) bằng số thứ tự hoặc số nhận diện của nó,

g) tải các mảng của các tỷ lệ thu được cho phổ kế hồng ngoại của bước e) ở bước c5) từ cơ sở dữ liệu, bộ lưu trữ dữ liệu hoặc đám mây,

h) nhân tỷ lệ chỉ số của mỗi mảng tỷ lệ của bước iii) với bước sóng tương ứng của điểm cực trị trong phổ của bước e) để cấp các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị, và

i) tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn với các bước sóng được hiệu chuẩn của các điểm cực trị của bước h).

2. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm 1, trong đó mẫu ở bước a), b) hoặc b') hoặc hợp chất được chứa trong mẫu đó tạo các tín hiệu hấp thụ rõ ràng và có thể gán được trong trục phổ hồng ngoại.

3. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm 1 hoặc 2, trong đó mẫu trong các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có cùng hợp chất hoặc chất, có phổ hồng ngoại cũng được ghi nhận sau khi hoàn thành phương pháp.

4. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 3, trong đó mẫu của các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có hợp chất có ít nhất hai nhóm chức khác nhau.

5. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 4, trong đó mẫu của các bước a), b) hoặc b') bao gồm hoặc có hợp chất bao gồm nhóm amino, nhóm hiđrôxyl và/hoặc nhóm axit cacboxylic.

6. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 5, trong đó hợp chất trong mẫu của các bước a), b) hoặc b') là axit amino, muối axit amino và/hoặc chất dẫn xuất của nó.

7. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 6, trong đó ở bước c3) bước sóng của điểm cực trị trong phổ mẫu hoặc trong chất dẫn xuất của nó được gán cho bước sóng của điểm cực trị trong phổ tham chiếu hoặc chất dẫn xuất của nó khi điểm cực trị trong phổ mẫu hoặc trong chất dẫn xuất

của nó theo cùng thứ tự xuất hiện như điểm cực trị tương ứng trong phổ tham chiếu hoặc chất dẫn xuất của nó.

8. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm 1, trong đó bước h) còn bao gồm các bước

h1) tính toán các đa thức cho các bước sóng của hai điểm cực trị lân cận trong phổ của bước e), trong đó các bước sóng nêu trên là các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong bước h) và/hoặc các bước sóng mà sự dịch chuyển bước sóng không được xác định ở bước c), và

h2) nội suy giữa tất cả các bước sóng trong phổ của bước e) với các đa thức của bước h1) để tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn.

9. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm 8, trong đó phương pháp còn bao gồm bước

j) đọc các cực đại hấp thụ ở các bước sóng trong phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn của bước i).

10. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 9, trong đó phương pháp còn bao gồm bước

k) lưu trữ phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn của bước j) cùng với số nhận diện hoặc số thứ tự của phổ kế hồng ngoại của bước e).

11. Phương pháp được triển khai bằng máy tính theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 10, trong đó phương pháp còn bao gồm bước

l) hiệu chỉnh phổ kế hồng ngoại của bước e) thành các bước sóng được hiệu chuẩn thu được trong bước h).

12. Hệ thống thích hợp để thực hiện phương pháp để nhận diện phổ kế hồng ngoại không được hiệu chỉnh hoặc bị hiệu chỉnh sai theo điểm bất kỳ trong số các điểm từ 1 đến 11, trong đó hệ thống là mạng bao gồm phổ kế hồng ngoại thứ nhất và khối điều khiển ít nhất được làm thích ứng

- để xác định sai lệch giữa bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ mẫu của bước a) và bước sóng của mỗi điểm cực trị trong phổ tham chiếu của bước b) hoặc b'), và để tính toán các tỷ lệ chỉ số của bước c3) cho mỗi cặp bước sóng được so khớp của bước a).

13. Hệ thống theo điểm 12, trong đó khối điều khiển được làm thích ứng để tính toán các đa thức của bước h1) đối với các bước sóng của hai điểm cực trị liên kề trong phổ của bước e) và để nội suy giữa tất cả các bước sóng trong phổ của bước e) với các đa thức để tạo phổ hồng ngoại được hiệu chuẩn.