

# Certificat d'analyse

**CNRC-NRC**

Matériau de référence certifié

## ABET-1

Matériau de référence certifié – bromure d'arsénobétaïne naturel

Les tableaux suivants présentent les constituants pour lesquels des valeurs certifiées ou de référence ont été établies pour la pureté de ce matériau de référence certifié (MRC), soit l'arsénobétaïne.

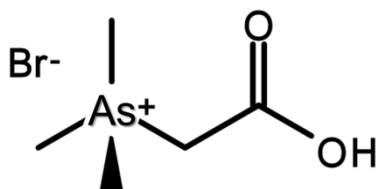
La valeur certifiée indique la pureté du bromure d'arsénobétaïne. Les valeurs certifiées sont basées sur des résultats établis à partir de données générées au CNRC par spectroscopie de résonance magnétique nucléaire quantitative du proton ( $^1\text{H}$ -qNMR) et par spécifications chimiques. L'incertitude élargie ( $U_{\text{MRC}}$ ) de la valeur certifiée est égale à  $U = ku_c$ ,  $u_c$  étant l'écart-type combiné calculé selon le guide du Comité commun pour les guides en métrologie [1] et  $k$  le facteur de couverture. Un facteur de couverture de deux (2) a été utilisé. L'incertitude  $U_{\text{MRC}}$  tient compte de tous les aspects qui contribuent raisonnablement à l'incertitude de la quantité mesurée.

**Tableau 1 : Valeurs certifiées pour le ABET-1**

| Composé                     | Formule moléculaire                            | Fraction massique, g/g |
|-----------------------------|------------------------------------------------|------------------------|
| bromure d'arsénobétaïne (a) | $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{AsO}_2\text{Br}$ | $0,9930 \pm 0,0050$    |
| arsénobétaïne (cation) (a)  | $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{AsO}_2^+$        | $0,6866 \pm 0,0034$    |

**Tableau 2 : Valeur de référence pour les impuretés pour le ABET-1**

| Composé     | Formule moléculaire            | Fraction massique, g/g |
|-------------|--------------------------------|------------------------|
| éthanol (a) | $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ | $0,0012 \pm 0,0012$    |



### bromure d'arsénobétaïne

Numéro d'enregistrement : CAS 71642-15-4

Formule moléculaire :  $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{AsO}_2\text{Br}$

Masse molaire :  $258,974 \pm 0,008$  g/mol



Conseil national de  
recherches Canada

National Research  
Council Canada

Canada

## Codage

Les codes font référence à la méthode expérimentale utilisée pour doser l'analyte.

### a Spectroscopie de résonance magnétique nucléaire du proton ( $^1\text{H}$ -qNMR)

## Valeurs certifiées

Les valeurs certifiées sont considérées comme celles auxquelles le CNRC accorde la plus grande confiance sur le plan de l'exactitude et pour lesquelles toutes les sources connues et présumées d'erreur systématique ont été prises en compte et sont reflétées dans les incertitudes élargies présentées au tableau 1. Les valeurs certifiées sont la meilleure estimation de l'incertitude et de la moyenne.

## Valeurs de référence

Les valeurs de référence sont celles pour lesquelles les données disponibles sont insuffisantes pour fournir une estimation exhaustive de l'incertitude (tableau 2). Lorsqu'il y a convolution mathématique avec le reste de l'AsBet, on obtient les abondances isotopiques suivantes dans le cas de l'ion moléculaire ( $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{AsO}_2$ ) à utiliser en spectrométrie de masse :

$$x_{179} = 0,9419 \pm 0,0060, x_{180} = 0,0528 \pm 0,0056, x_{181} = 0,0051 \pm 0,0004$$

avec le ratio  $x_{179}/x_{180} = 17,9 \pm 2,0$  ( $k = 2$ ).

## Utilisation prévue

Le présent matériau de référence doit servir principalement pour l'étalonnage de procédures et la mise au point de méthodes de dosage de l'arsénobétaïne. Un échantillon d'au moins 20 mg est recommandé.

## Entreposage et échantillonnage

Il est recommandé de stocker le matériau dans un endroit frais et propre. Les ampoules peuvent être conservées à la température ambiante pendant une courte période seulement. Pour le stockage à long terme, on recommande une température de +4 °C.

## Préparation du matériau

L'arsénobétaïne a été synthétisée au CNRC à partir de substrats commerciaux. On a effectué, dans un seul récipient, une synthèse macroscopique du bromure d'arsénobétaïne en utilisant du triméthylarsane et de l'acide 2-bromoacétique et en suivant le procédé de Minhas et coll. [2,3].

## Stabilité

Contrairement à l'hydroxyde, le bromure d'arsénobétaïne est non hygroscopique. La pureté du bromure d'arsénobétaïne n'a pas changé au cours de la période de cinq ans à une température de +4 °C et le matériau est jugé stable [3].

## Homogénéité

Le matériau est censé être homogène. Il a fait l'objet d'un essai d'homogénéité par  $^1\text{H}$ -qNMR au CNRC. Les résultats obtenus avec des sous-échantillons (20 mg) ont été évalués au moyen du modèle d'effets aléatoires DerSimonian-Laird et inclus dans le calcul des valeurs certifiées [4].



## Incertitude

L'estimation de l'incertitude combinée ( $u_c$ ) couvre les incertitudes dues à la caractérisation du lot ( $u_{car}$ ), à la variation possible d'une bouteille à l'autre ( $u_{hom}$ ) et aux divergences entre les différentes méthodes d'analyse utilisées ( $u_{méthode}$ ). Le tableau 3 présente ces incertitudes sous forme d'incertitudes types [3].

**Tableau 3 : Éléments d'incertitude pour le ABET-1**

| Composé                 | $u_c$ ,<br>g/g | $u_{car}$ ,<br>g/g | $u_{hom}$ ,<br>g/g | $u_{méthode}$ ,<br>g/g |
|-------------------------|----------------|--------------------|--------------------|------------------------|
| bromure d'arsénobétaine | 0,0025         | 0,0012             | 0,0020             | 0,0009                 |
| arsénobétaine (cation)  | 0,0017         | 0,0009             | 0,0014             | 0,0006                 |
| éthanol                 | 0,0006         | 0,0000             | 0,0004             | 0,0004                 |

## Traçabilité métrologique

Les résultats présentés dans le présent certificat sont traçables au SI au moyen d'étalons de pureté établie préparés par gravimétrie (acide benzoïque de haute pureté, SRM 350 b, obtenu auprès du NIST) et de comparaisons internationales de mesures. Ils servent donc de matériaux de référence pour des programmes d'assurance de la qualité de laboratoire, tel que souligné dans la norme ISO/IEC 17025.

## Gestion de la qualité (ISO/IEC 17025, Guide 34 ISO)

Le présent matériau a été produit en conformité avec le système de qualité documenté SME du CNRC, qui est conforme aux exigences de la norme ISO/IEC 17025 et du Guide 34 de l'ISO.

Le système de qualité SME des capacités de mesure et d'étalonnage du CNRC, comme mentionné dans la base de données de comparaison clés du Bureau international des poids et mesures (BIPM) ([kcdb.bipm.org/default\\_fr.asp](http://kcdb.bipm.org/default_fr.asp)), a été revu et approuvé avec l'autorisation du Système interaméricain de métrologie (SIM); il a été jugé conforme aux attentes de l'Entente de reconnaissance mutuelle du Comité international des poids et mesures (CIPM). Le certificat d'approbation du SIM est disponible.

## Mises à jour

L'utilisateur doit s'assurer que le certificat qu'il possède est à jour. Notre site Web, [www.cnrc.gc.ca/mrc](http://www.cnrc.gc.ca/mrc), présentera toute nouvelle information.

## Références

1. Évaluation de données, Guide pour l'expression de l'incertitude de mesure, JCGM100:2008.
2. R. Minhas, D.S. Forsyth, B. Dawson (1998) Synthesis and characterization of arsenobetaine and arsenocholine derivatives. Appl Organometal Chem, 12: 635-641
3. P.-M. Le, J. Ding, D.M. Leek, Z. Mester, G. Robertson, A. Windust, J. Meija (2016) Determination of chemical purity and isotopic composition of natural and carbon-13-labeled arsenobetaine bromide standards by quantitative  $^1\text{H}$ -NMR. Anal Bioanal Chem, 408: 7413-7421
4. R. DerSimonian, N. Laird (1986). Meta-analysis in clinical trials. Controlled Clinical Trials, 7: 177-188



## Auteurs

Les membres suivants du personnel du portefeuille Science des mesures et étalons du CNRC ont contribué à la production et à la certification du ABET-1 : Phuong Mai Le, Donald M. Leek, Zoltan Mester, Anthony Windust et Juris Meija.

Les contributions de Scott Willie, Lu Yang, Jeremy Melanson, Jianfu Ding et Gilles Robertson (CNRC) sont reconnues.

Le texte anglais est la version définitive de ce document.

## ABET-1

*Date de publication : Mars 2016*

*Date d'expiration : Mars 2026*

Approuvé par:



Zoltan Mester, Ph. D.  
Chef de discipline, Métrologie chimique  
Science des mesures et étalons

**Ce certificat est valide uniquement si le produit correspondant a été obtenu directement du CNRC ou de l'un de ses fournisseurs qualifiés.**

### Adresser tout commentaire, information ou requête au :

Conseil national de recherches du Canada  
Science des mesures et étalons  
1200, chemin de Montréal, Édifice M12  
Ottawa (Ontario) K1A 0R6

**Téléphone :** 613-993-2359

**Télécopieur :** 613-993-2451

**Courriel :** [CRM-MRCOrganic-Organiques@nrc-cnrc.gc.ca](mailto:CRM-MRCOrganic-Organiques@nrc-cnrc.gc.ca)



*Also available in English on request.*

