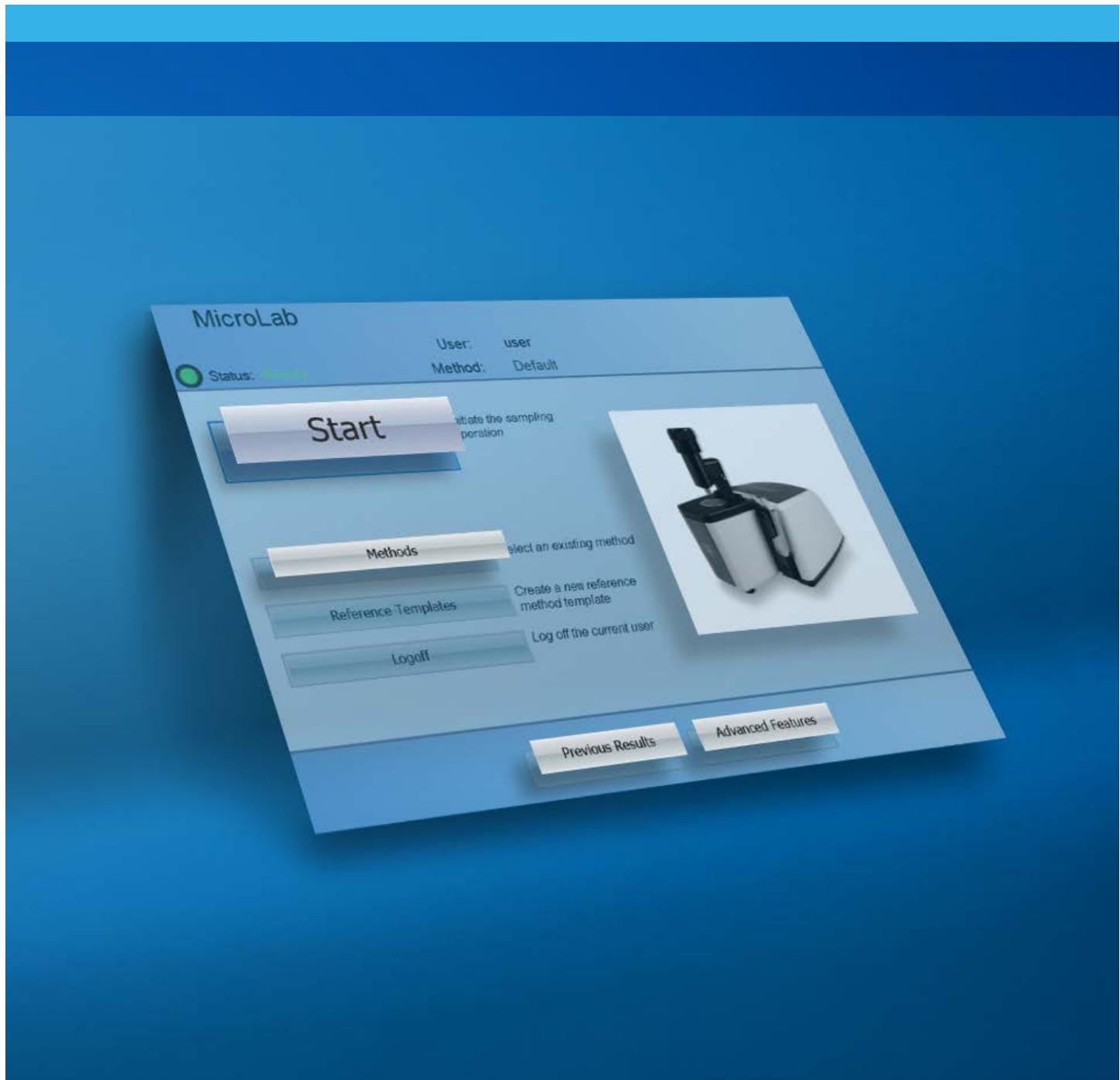


FTIR-Analytik leicht gemacht

Agilent MicroLab Software



MicroLab Software

Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR) ist eine schnelle, einfache und zuverlässige Methode zur Materialidentifikation und Quantifizierung von Komponenten in einer Probe.



Agilent bietet eine große Bandbreite an FTIR-Instrumenten, von flexiblen Hand-FTIR-Spektrometern und robusten tragbaren FTIR-Analyzern für die Anwendung außerhalb des Labors bis hin zu zuverlässigen Benchtop-FTIR-Geräten für Routineuntersuchungen und Spitzenforschung. Unter anderem das begleitende Softwarepaket bzw. die Benutzeroberfläche zeichnen das Agilent FTIR-Spektrometer aus. Die Agilent MicroLab Software ermöglicht Benutzern mit oder ohne Fachkenntnisse die Anwendung des Geräts für Routineuntersuchungen von der Identifikation und Charakterisierung unbekannter Materialien bis hin zur detaillierten quantitativen Analyse.



Cary 630 FTIR



4500 Portable FTIR



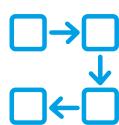
5500 Compact FTIR



4300 Hand-FTIR

Mobile FTIR

Funktionen der MicroLab Software



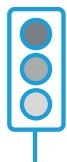
Bildgeführte Schritt-für-Schritt-Anleitung und intuitives Softwaredesign ermöglichen eine mühelose Navigation durch den gesamten Arbeitsablauf. Das bedeutet weniger Schulungsbedarf und weniger Bedienfehler.



MicroLab erkennt automatisch die verbundenen Geräte und identifiziert das verwendete Probenzubehörmodul.



Die Software nutzt sofort die richtigen Parameter und zeigt die dazugehörigen Darstellungen an. Für jede Methode können die erlaubten Module definiert werden.



Ausräumen von Zweifeln, die im Zusammenhang mit der Datenauswertung von routinemäßigen Arbeitsabläufen auftreten: Nach der Datenakquisition liefert die Software sofort farbkodierte, umsetzbare Ergebnisse, die mühelos interpretiert werden können.



Erweiterung der schnellen und unkomplizierten Softwareerfahrung auf die Entwicklung von Modellen für quantitative Anwendungen: Die MicroLab Quant Software leitet Mitarbeitende mit oder ohne Fachkenntnisse durch jeden Schritt im Aufbau eines quantitativen Modells und liefert unmittelbares Feedback zur Optimierung des Modells.



Berichterstattung aller relevanten Ergebnisse: In MicroLab gibt es vordefinierte und individuell anpassbare Berichtsvorlagen. Die Ergebnisse können automatisch als Bericht ausgegeben werden, und dank eines einheitlichen Formats kann man sich schnell einen Überblick über wichtige Details verschaffen.

MicroLab Softwarepaket

Um die Anwendung der MicroLab Software so einfach wie möglich zu gestalten, umfasst das MicroLab Softwarepaket vier individuelle Applikationen, die speziell für die jeweilige Aufgabenstellung entwickelt wurden:



MicroLab PC

ist eine methodengeführte Software zur Erfassung und Analyse von Daten mit vordefinierten Methoden.

MicroLab Lite

Software kann offline zur Durchsicht und Analyse von FTIR-Daten verwendet werden.

MicroLab Quant

dient der einfachen, mühelosen Entwicklung und Verifizierung von Quantifizierungsmodellen.

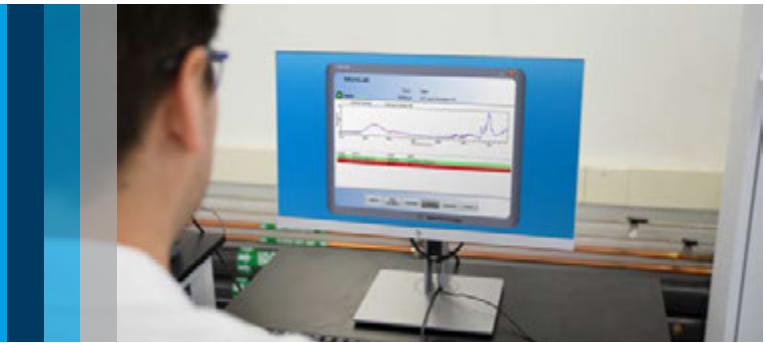
MicroLab OQ

ist eine Software für die automatisierte Funktionsqualifizierung, die zur routinemäßigen Verifizierung der Geräteleistung herangezogen werden kann.

Die optional erhältliche Software **Agilent MicroLab Expert** eignet sich ideal, wenn eine anspruchsvollere Datenverarbeitung und -visualisierung und Analysetools benötigt werden.

Die **Agilent MicroLab Pharma** Software ist eine zusätzliche Softwarelösung, die Benutzern das Management von Benutzerrechten sowie die Verwaltung sicherer Speicherorte für elektronische Aufzeichnungen ermöglicht. Sie vereinfacht außerdem die Compliance mit den Vorschriften gemäß 21 CFR Part 11, EU-Anhang 11, der US FDA und ähnlicher nationaler Richtlinien in Bezug auf elektronische Aufzeichnungen.

Mit MicroLab PC
und MicroLab Lite
Ergebnisse generieren



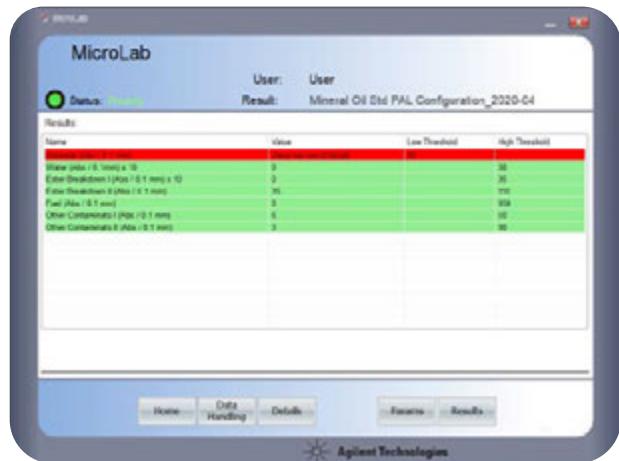
Arten von Softwaremethoden

Die MicroLab Software verfolgt einen methodenbasierten Ansatz. Nach dem Aufsetzen der Methode verwandelt sich das System in eine schlüsselfertige Lösung.

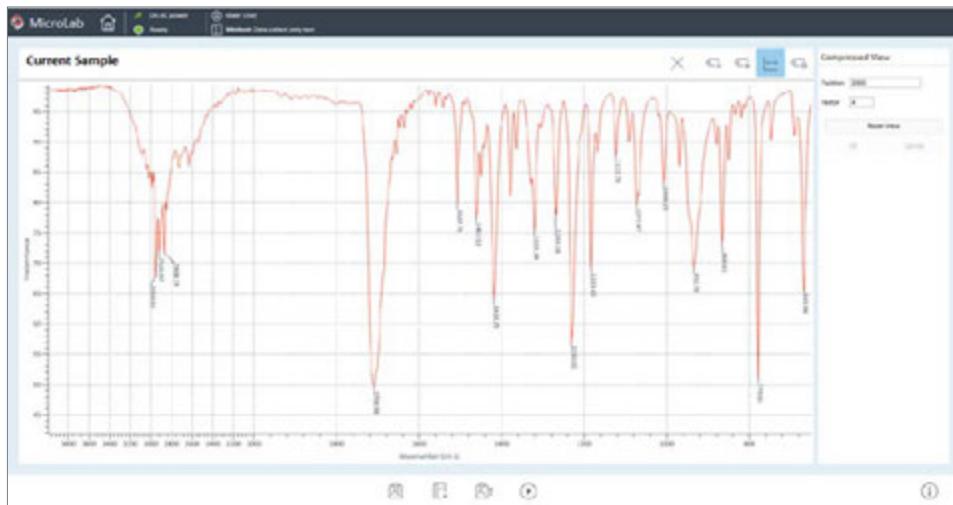
Mit drei verschiedenen Arten von Methoden werden die wichtigsten analytischen Fragestellungen abgedeckt:

Identifizierung

Quantifizierung



Spektrenanalyse



MicroLab PC und MicroLab Lite

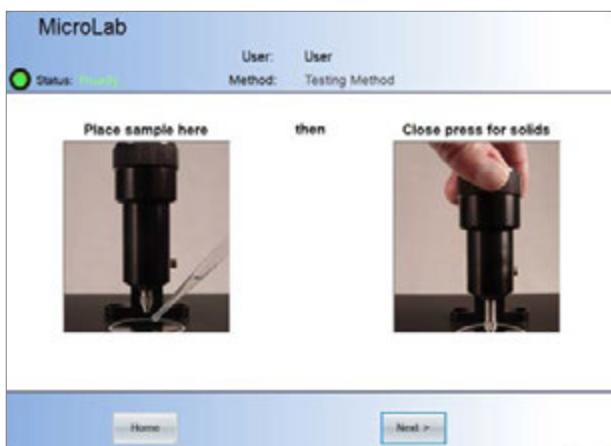
1 Analyse starten



Auf Tastendruck startet der bildgeführte Arbeitsablauf, der den Benutzer durch jeden Schritt der Analyse leitet. Die Software identifiziert das Gerät und die verwendete Probenschnittstelle und zeigt die entsprechenden Bilder an.

Nach der Datenerfassung führt MicroLab alle Berechnungen durch und liefert leicht verständliche Ergebnisse, die auch von Mitarbeitern mit wenig Erfahrung interpretiert werden können. Die MicroLab Software gibt farbkodierte Ergebnisse aus, die sofort nach der Datenakquisition als Bericht vorliegen, und zwar entsprechend den Einstellungen der Methode für kritische und marginale Schwellenwerte (siehe Abbildung 1).

2 Bildgeführte Softwareanleitung befolgen



3 Sofortige farbkodierte, umsetzbare Ergebnisse



Abbildung 1. In drei einfachen Schritten lässt sich mit der Agilent MicroLab Software und den Agilent FTIR-Spektrometern im Handumdrehen eine Analyse durchführen. Und das bei gesenkten Schulungsanforderungen.

MicroLab PC und MicroLab Lite

Identifikationsanwendungen

MicroLab vergleicht das erfasste Spektrum automatisch mit einer Spektrenbibliothek und sucht nach der höchsten Übereinstimmung. Zur Erleichterung der Interpretation kann eine Farbkodierung auf Basis von Konfidenzniveaus angewendet werden (Abbildung 2).

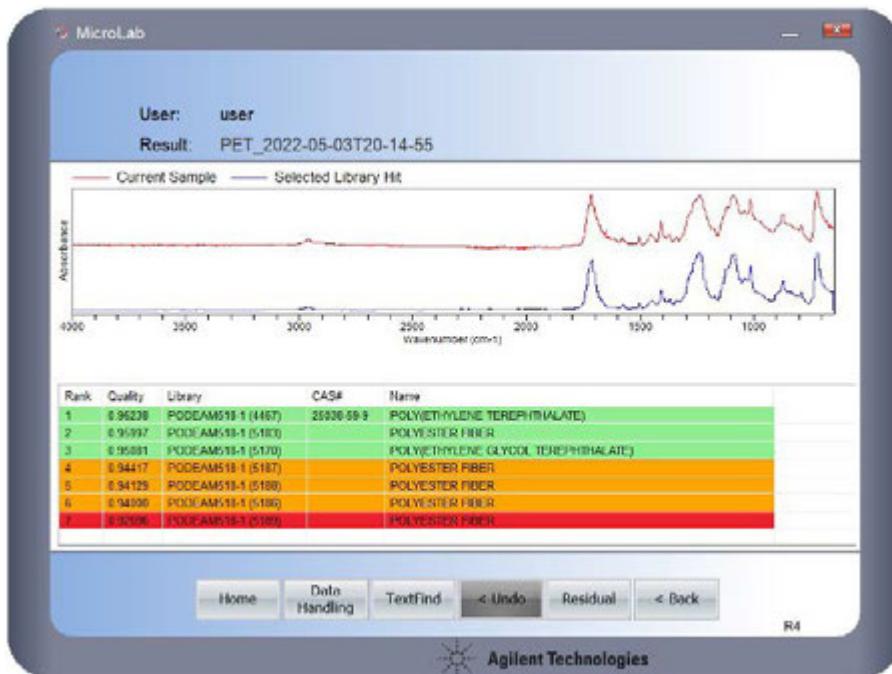


Abbildung 2. Bestätigung der Identität der Probe durch Anzeige hoher Übereinstimmungen mit Referenzspektren.

Bibliotheken lassen sich in der MicroLab Software problemlos einbinden.

- Agilent hat gebrauchsfertige, anwendungsspezifische Bibliotheken im Angebot.
- Benutzer können innerhalb von Sekunden eigene Bibliotheken erstellen.

Bibliothekssuchen können für die Identifikationsanwendung maßgeschneidert werden.

- Es besteht die Möglichkeit, mehrere Bibliotheken gleichzeitig zu durchsuchen, beispielsweise eine Bibliothek mit Referenzstandards zur Identifizierung der Probe und eine andere Bibliothek mit Proben außerhalb der Spezifikation, um wiederkehrende Probleme zu erkennen.
- Es ist eine große Auswahl an Suchalgorithmen verfügbar.
- Spektrenbereiche können von der Analyse ausgeschlossen werden.
- Es kann ein Mindestwert für den Treffer-HQI und eine maximale Anzahl an Treffern festgelegt werden, damit nur relevante Bibliothekstreffer angezeigt werden.
- Die Farbkodierung der Ergebnisse auf der Basis des HQI kann zur Definition von Konfidenzniveaus verwendet werden.

Die Identifikation ist dank einer leicht verständlichen Ergebnisanzeige unkompliziert.

Anwendungsbeispiele sind unter anderem:

- Schnelle Bestätigung der Reinheit von eingehenden Chemikalien und Endprodukten.
- Verwendung von Spektrenbibliotheken zur schnellen Authentifizierung von Lösungsmitteln, oberflächenaktiven Substanzen, Spezialaminen oder organischen Industriechemikalien.
- Identifikation von Betäubungsmittelanaloga in beschlagnahmten Proben mit unbekannten Substanzen.

MicroLab PC und MicroLab Lite

Im Fall von Detektionsanwendungen werden die relevanten Sicherheits- und Gefahreninformationen in allen Ergebnisfenstern gut sichtbar angezeigt (Abbildung 3). Auf weitere ausführliche Informationen kann zugegriffen werden, auch auf den Abschnitt „Custom Information“, der eine Bearbeitung durch den Benutzer zulässt (Abbildung 4).

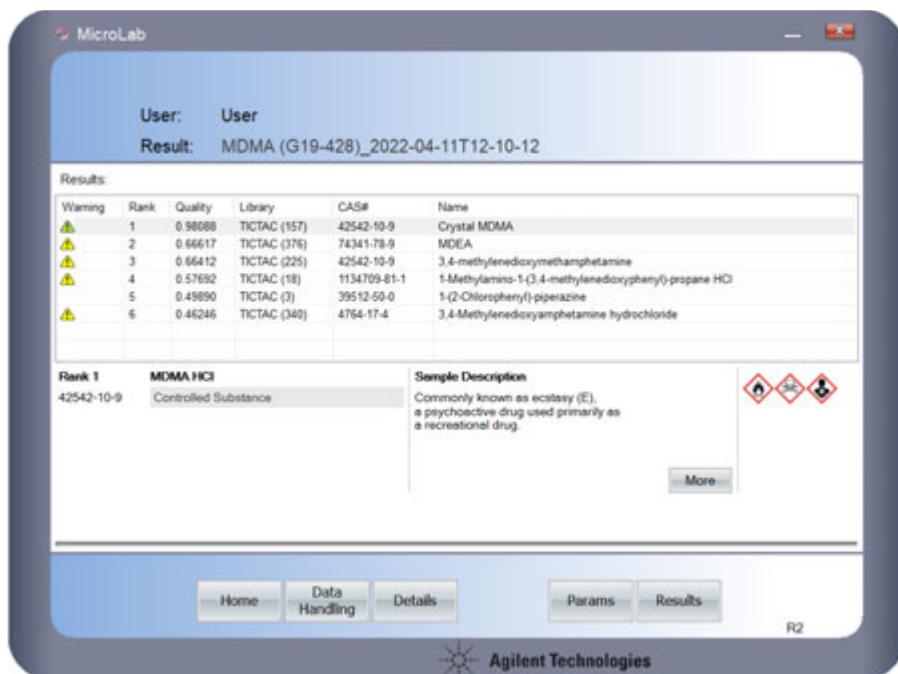


Abbildung 3. Verständliche, umsetzbare Sicherheits- und Gefahreninformationen für ausgewählte Treffer in der Bibliothek, darunter eine CAS-Nummer, GHS-Symbole, ein Warnsymbol (für Betäubungsmittel) und eine Kurzbeschreibung der Probe.

A screenshot of the MicroLab software interface showing detailed information for MDMA HCl. The left side has sections for 'Identification' (including Chemical Name, Source Library, IUPAC Name, CAS#, EC Number, Emergency Response Code, and UN Number) and 'Data' (including Alternative Name, Sample Description, Molecular Formula, Molecular Weight, Concentration, Melting Point, Density, and Flash Point). The right side has sections for 'MDMA HCl' (First Aid Measures, Firefighting Measures, Accidental Release Measures, and Disposal Instructions), 'Custom Information' (with fields for Class, Notes, and Handling), and a 'Back' button at the bottom left.

Abbildung 4. Zusätzliche chemische Informationen und Notfallmaßnahmen. Der bearbeitbare Abschnitt „Custom Information“ liefert weitere, benutzerspezifische Hinweise.

MicroLab PC und MicroLab Lite

Quantifizierungsanwendung

MicroLab erlaubt Benutzern die Quantifizierung mehrerer Komponenten in einer Probe mit einer einzigen FTIR-Messung. In MicroLab Quant können mühelos grundlegende Quantifizierungsmodelle erstellt werden. Für umfassendere chemometrische Modelle unterstützt MicroLab auch Vorhersagemodelle, die in MicroLab Expert entwickelt wurden.

- **Dank der einzigartigen Logic-Setting-Funktionen von MicroLab werden nur relevante Ergebnisse angezeigt.**
- **Benutzerdefinierte Kriterien für farbkodierte Ergebnisse (rot, gelb, grün) gewähren hohe Flexibilität.**
- **MicroLab führt sämtliche Berechnungen durch und liefert sofort farbkodierte, umsetzbare Ergebnisse sowie weiterführende Instruktionen.**

– Anwendungsbeispiele sind unter anderem:

- Sicherstellung, dass die Spezifikationen des Herstellers erfüllt werden, indem der Gehalt an bekannten Additiven genau gemessen wird.
- Sicherstellung der richtigen Formulierung von Verschnitten und Gemischen aus Feinchemikalien.
- Schnelle, einfache und zuverlässige Messungen flüssiger Proben mittels Transmissions-FTIR.

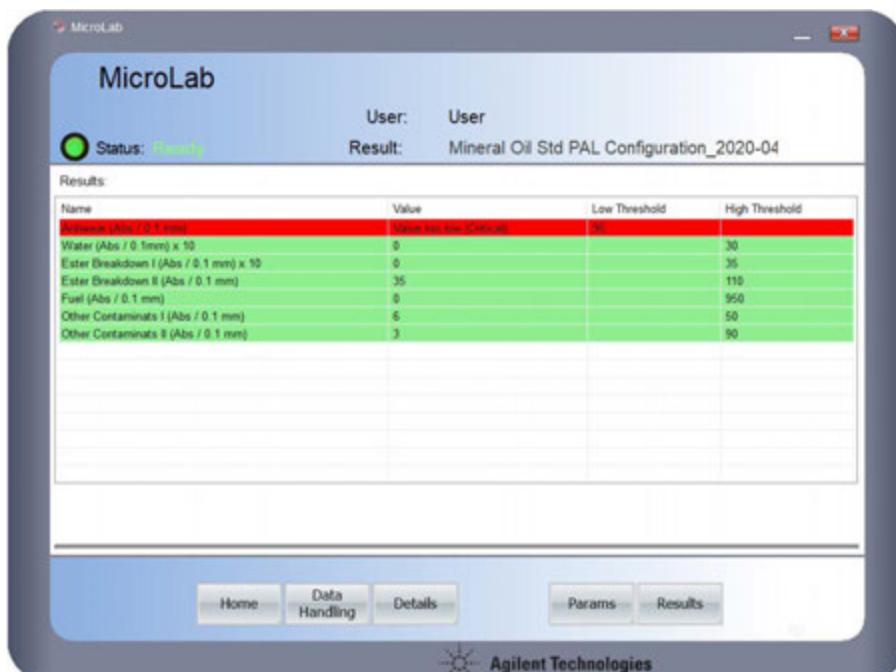


Abbildung 5. Die MicroLab Software führt automatisch alle Berechnungen durch und zeigt das leicht interpretierbare, farbkodierte Endergebnis an.

MicroLab PC und MicroLab Lite

Erfassung und Überprüfung von Infrarotspektren

MicroLab kann auch zur Erfassung und Überprüfung des Infrarotspektrums (IR) einer Probe herangezogen werden. Ein IR-Spektrum kann wertvolle Erkenntnisse wie beispielsweise das Vorhandensein funktioneller Gruppen liefern.

- MicroLab erlaubt Benutzern eine Änderung des Skalierungsfaktors für die Wellenzahl, um eine genauere Analyse des relevanten Spektrenbereichs zu ermöglichen.
- Banden können für die Berichterstellung oder einen Vergleich mit Werten in der Fachliteratur gekennzeichnet werden (Abbildung 6).



Abbildung 6. Die MicroLab Software erlaubt Bedienern die Erfassung, Prüfung und erneute Analyse von Infrarotspektren von Proben und verfügt darüber hinaus über eine Berichtsfunktion.

MicroLab PC und MicroLab Lite

Berichterstattung aller Ergebnisse

MicroLab PC und Lite verfügen über vordefinierte und individuell anpassbare Berichtsvorlagen. Die Ergebnisse können automatisch als Bericht ausgegeben werden. Das einheitliche Format ermöglicht einen schnellen Überblick über wichtige Daten (Abbildung 7). Es besteht die Möglichkeit der Bearbeitung der Berichtsvorlagen in Microsoft Word.

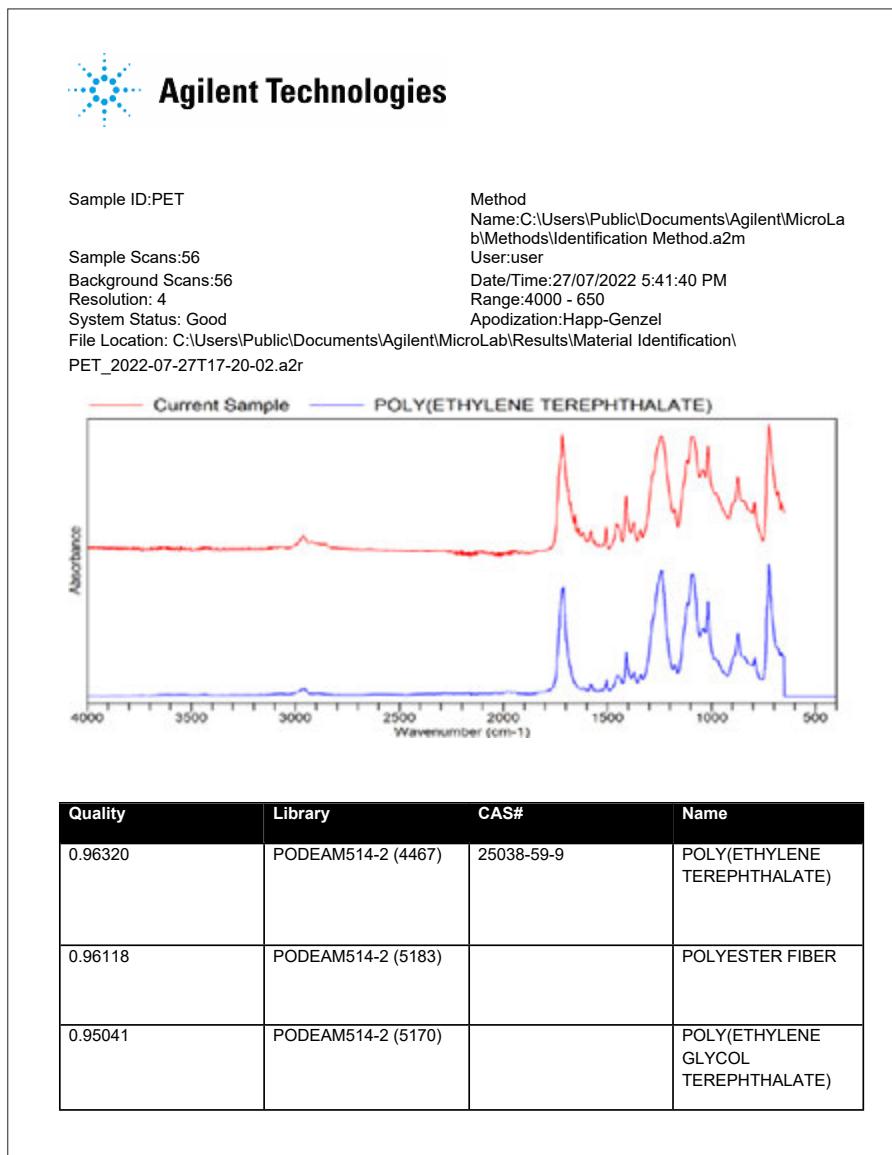
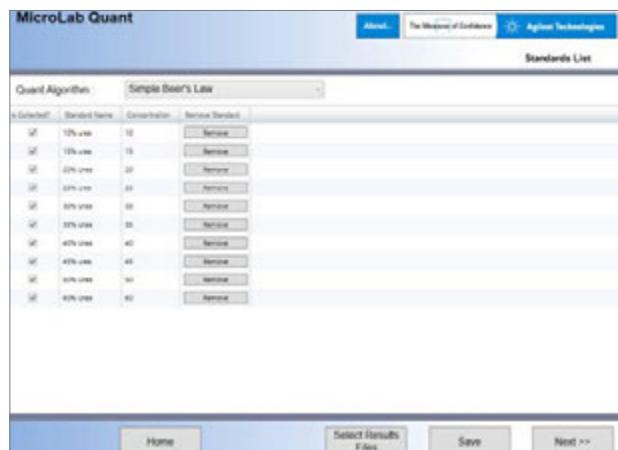


Abbildung 7. Mit der MicroLab Software erstellter Ergebnisbericht. Alle wichtige Angaben der analysierten Probe können in dem generierten Bericht zu Dokumentationszwecken erfasst werden.

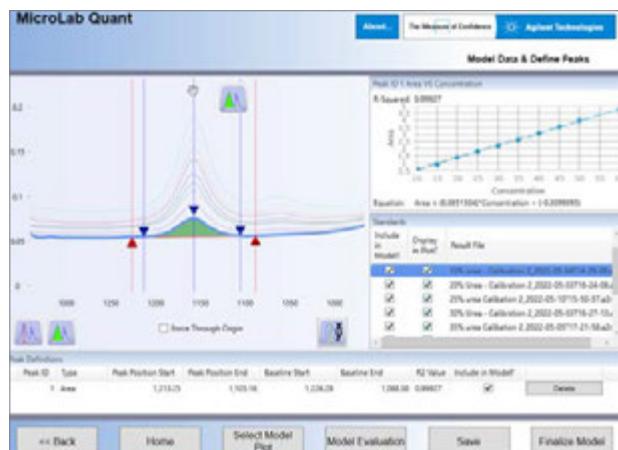
MicroLab Quant

MicroLab Quant verfügt über die gleiche Schritt-für-Schritt-Anleitung wie das übrige MicroLab Softwarepaket. Damit wird die schnelle und unkomplizierte Softwareerfahrung auf die Entwicklung von Modellen für quantitative Anwendungen erweitert (Abbildung 8). Die nahtlose Datenintegration erlaubt die einfache Verwendung von IR-Spektren und Quantifizierungsmodellen in MicroLab PC, MicroLab Lite und MicroLab Quant.

- 1 Standards auswählen und Konzentrationen eingeben



- 2 Peaks definieren und Kalibrierung optimieren



- 3 Modell finalisieren und in MicroLab verwenden



Abbildung 8. Entwicklung quantitativer Modelle in der MicroLab Quant Software in einfachen Schritten.

MicroLab Quant

- Das interaktive Softwareinterface erlaubt die rasche und unkomplizierte Erstellung und Optimierung von quantitativen Modellen (Abbildung 9).
- Das unmittelbare Feedback lässt Rückschlüsse zu, wie sich Änderungen auf das Korrelationsdiagramm auswirken.
- Quantifizierungsmodelle können mittels Kreuzvalidierung oder unabhängiger Validierung der Probe ausgewertet werden (Abbildung 10).



Abbildung 9. Lineare Evaluierung des DialPath-Probenzubehörmoduls unter Verwendung von MicroLab Quant. Die Erstellung der Kalibrierungskurve sowie die Berechnung des Korrelationskoeffizienten erfolgte automatisch mit der Software.

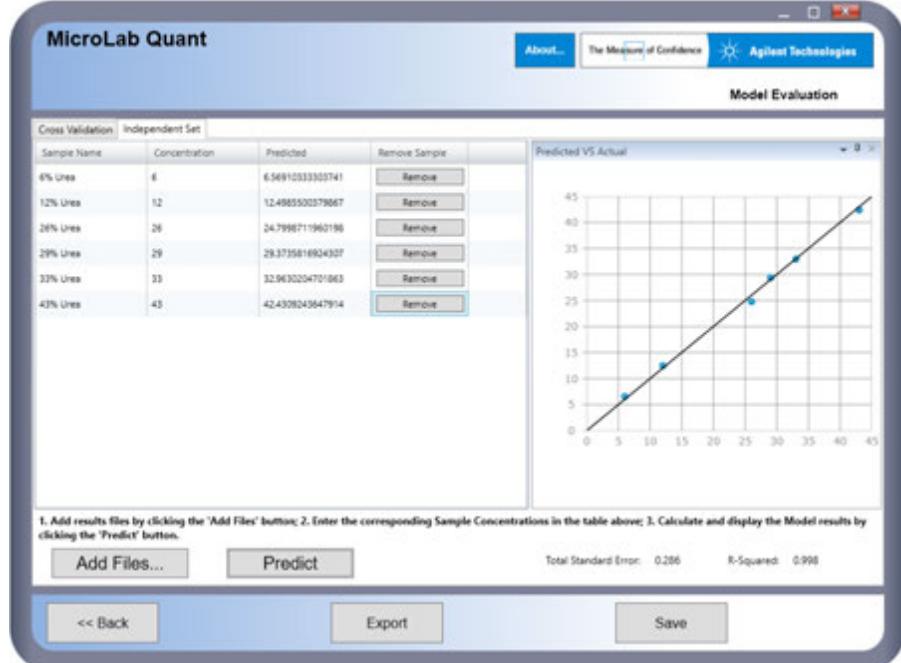


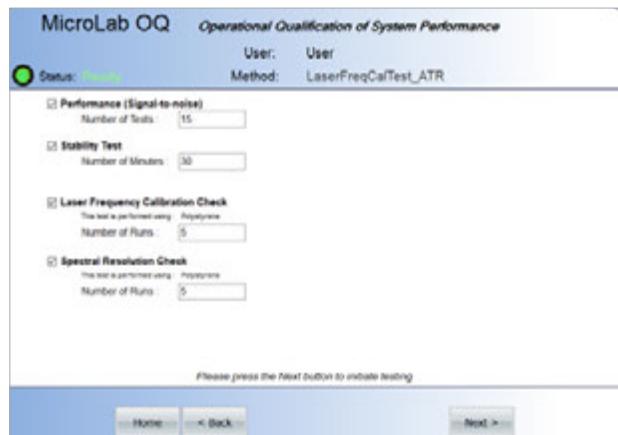
Abbildung 10. Die MicroLab Quant Anwendung ermöglicht Benutzern darüber hinaus die Evaluierung der entwickelten Quantifizierungsmodelle durch Kreuzvalidierung oder gegen ein separates Probenset.

MicroLab OQ

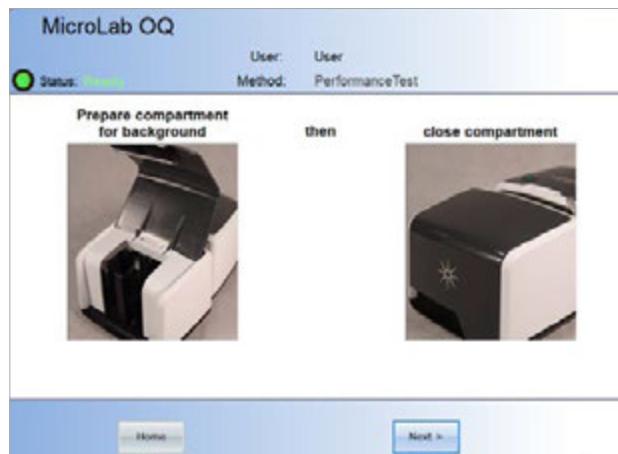
Die Kontrolle der Geräteleistung ist ein kritischer Aspekt bei der Qualifizierung der Eignung eines Geräts für eine bestimmte Analyse. MicroLab OQ versetzt Benutzer in die Lage, auf einfache Weise Kontrollen der Geräteleistung durchzuführen, um sicherzustellen, dass ein Gerät in gutem Zustand ist.

MicroLab OQ verfügt über eine intuitive, illustrierte Schnittstelle, die Benutzer durch den Qualifizierungsprozess leitet.

1 Tests der Geräteleistung auswählen



2 MicroLab OQ leitet Benutzer durch jeden Test



3 Zusammenfassung der Tests zur Geräteleistung ansehen

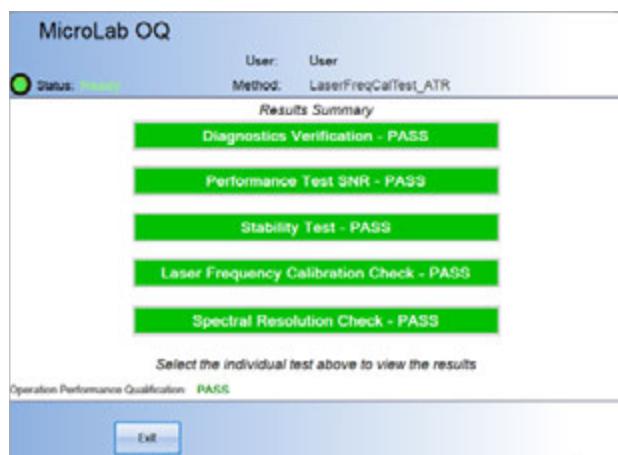


Abbildung 11. MicroLab OQ leitet Benutzer in einigen einfachen Schritten durch den Prozess der Gerätequalifizierung.

MicroLab OQ

Im letzten Schritt generiert MicroLab OQ einen Bericht im PDF-Format, in dem die Diagnosewerte, das Testergebnis und die Testspezifikationen aufgeführt sind, außerdem werden Kriterien für bestanden/nicht bestanden zur späteren Verwendung gegeben (Abbildung 12).

The figure consists of four separate screenshots of a MicroLab OQ report, each showing a different test section:

- Operational Qualification:** Shows system information (PCWorkstation ID: DESKTOP-ENM90U7, Software Version: MicroLab PC(21CFR11); 5.7, Serial Number: MY2109CU05), reporting information (Generated By: New group\New project\user, Generated Date: 7/7/2022 9:05 PM, Generated GMT Date: 7/7/2022 5:05 AM), and accessories (Accessory: Transmission Cell (Primary), SerialNumber: 14410003, Sampling Module: Transmission Cell, Gain: 0, Energy Level: 27577). A green "PASSED" button is visible.
- Signal To Noise Test:** Shows specification details (Number of Tests: 16, Specification @ 1142-1042: >25000, Measured Value: 38037) and a green "PASSED" button.
- Stability Test:** Shows specification details (Number of Minutes: 30, Specification: <1%, Measured Deviation: 0.068%) and a green "PASSED" button.
- Wavenumber Accuracy Test:** Shows a table of measured vs. specified wavenumbers and their deviations. A green "PASSED" button is visible.
- Spectral Resolution Test:** Shows absorption maximum and minimum values, measured and specified differences, and a green "PASSED" button.
- E-Signature:** Shows an electronic signature entry field with validation comments and a history of signatures. A green "PASSED" button is visible.

Abbildung 12. Mit MicroLab OQ erzeugter Bericht über die Funktionsqualifizierung. Die Ergebnisse werden zusammen mit allen Versuchsparametern aufgeführt. Außerdem werden leicht verständliche Angaben zu bestanden/nicht bestanden gemacht.

Weitere Informationen finden Sie unter:

www.agilent.com/chem/MicroLab

Online-Store:

www.agilent.com/chem/store

Antworten auf technische Fragen und Zugriff auf Ressourcen finden Sie in der Agilent Community:

community.agilent.com

Deutschland

0800-603 1000

CustomerCare_Germany@agilent.com

Europa

info_agilent@agilent.com

Asien und Pazifik

inquiry_lsca@agilent.com

RA44713.4331018518

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2022
Veröffentlicht in den USA, 1. August 2022
5994-5139DEE

