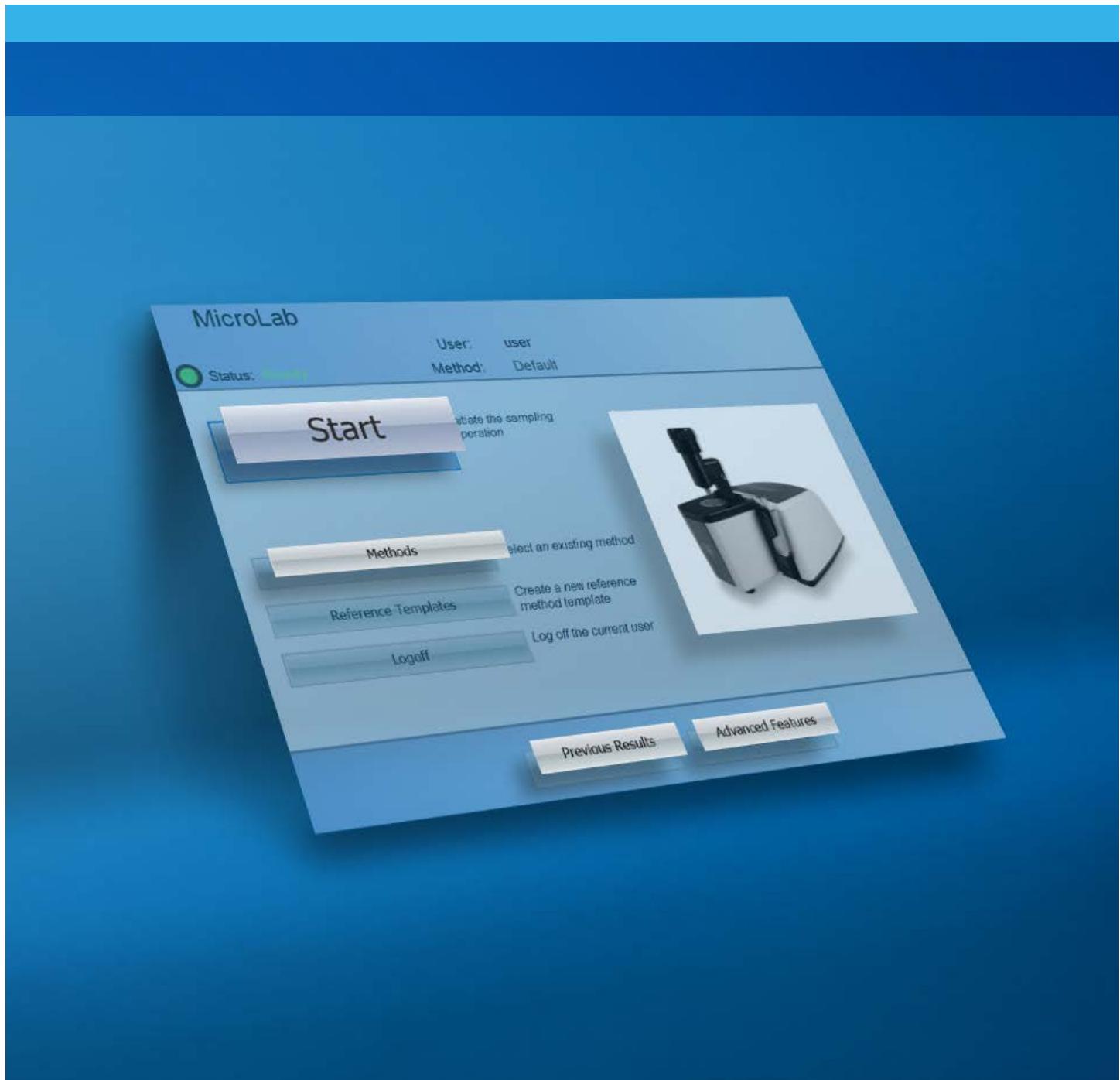


Simplificación del análisis por FTIR

Software Agilent MicroLab



Software MicroLab

La espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) es una técnica rápida, sencilla y fiable para la identificación de materiales y para la cuantificación de los componentes de una muestra.



Agilent ofrece una amplia gama de instrumentos de FTIR, desde los flexibles espectrómetros FTIR manuales y los robustos analizadores FTIR portátiles para aplicaciones de campo hasta los fiables instrumentos FTIR de sobremesa para las pruebas de rutina y la investigación de vanguardia. En parte, lo que hace único al espectrómetro FTIR de Agilent es el paquete de software o la interfaz que lo acompaña. El software Agilent MicroLab permite a usuarios de todos los niveles usarlo para aplicaciones rutinarias, desde la identificación y caracterización de materiales desconocidos hasta el análisis cuantitativo detallado.



FTIR Cary 630



FTIR 4500 portable



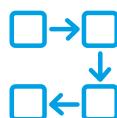
FTIR 5500 compacto



FTIR manual 4300

FTIR móvil

Características del software MicroLab



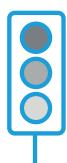
Las guías paso a paso mediante imágenes con instrucciones y un intuitivo diseño del software facilitan el recorrido por todo el flujo de trabajo, para precisar menos formación y conseguir que los usuarios cometan menos errores.



MicroLab identifica automáticamente el instrumento conectado y reconoce el módulo de muestreo acoplado.



El software aplica directamente los parámetros correctos y muestra las imágenes relevantes. En cada método se pueden definir los módulos permitidos.



Elimine las dudas que provoca la interpretación de los datos en los flujos de trabajo de rutina: después de la recogida de datos, el software proporciona directamente resultados útiles y codificados por colores, facilitando la interpretación.



Amplíe la experiencia de un software rápido y sencillo al desarrollo de modelos para aplicaciones cuantitativas: El software MicroLab Quant ayuda a usuarios tanto expertos como noveles en cada paso de la creación de un modelo cuantitativo y proporciona información al instante mientras se optimiza el modelo.



Incluya todos los resultados relevantes en el informe: MicroLab incorpora plantillas de informes predefinidas y personalizables. Los resultados se pueden incluir automáticamente en el informe y un formato uniforme permite la rápida revisión de los detalles relevantes.

Paquete de software MicroLab

Para facilitar el uso del software MicroLab al máximo, el paquete de software MicroLab incluye cuatro aplicaciones individuales diseñadas específicamente para la tarea deseada:



MicroLab PC
es un software controlado por el método para recopilar y analizar datos mediante métodos predefinidos.

MicroLab Lite
este software puede servir para la revisión y el análisis sin conexión de los datos de FTIR.

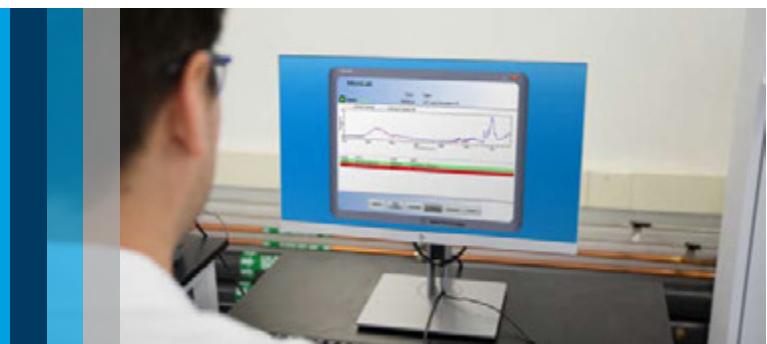
MicroLab Quant
sirve para facilitar el desarrollo y la verificación de los modelos de cuantificación.

MicroLab OQ
un software de cualificación operacional (OQ) automatizada que se puede emplear en la verificación rutinaria del rendimiento del instrumento.

El software **Agilent MicroLab Expert** opcional es ideal cuando se precisan herramientas más sofisticadas para el procesamiento, la validación y el análisis de los datos.

El software **Agilent MicroLab Pharma** es una solución de software adicional que permite a los usuarios administrar sus privilegios y gestionar el almacenamiento seguro de registros electrónicos. También facilita la conformidad según se define en la Parte 11 del Título 21 del Código de Reglamentos Federales (CFR) de la FDA estadounidense, en el anexo 11 de la UE y en normativas nacionales similares sobre registros electrónicos.

Búsqueda de respuestas con MicroLab PC y MicroLab Lite

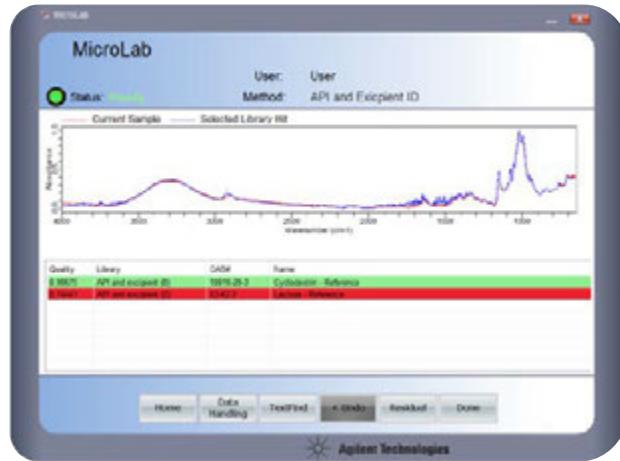


Tipos de métodos de software

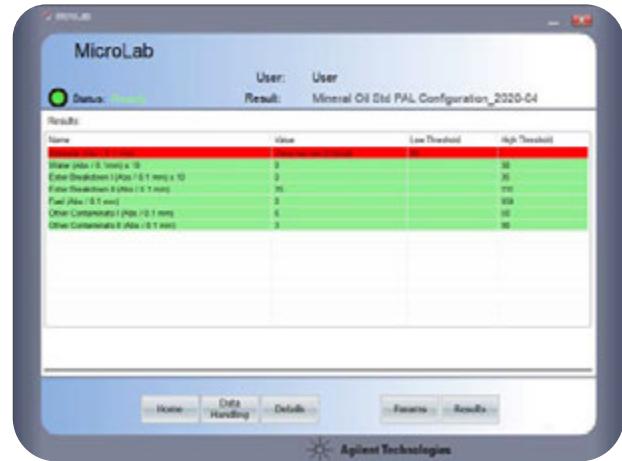
El software MicroLab sigue un planteamiento basado en métodos. Después de la configuración de un método, el sistema se convierte en una solución llave en mano.

Tres tipos de métodos diferentes abarcan las cuestiones analíticas más importantes:

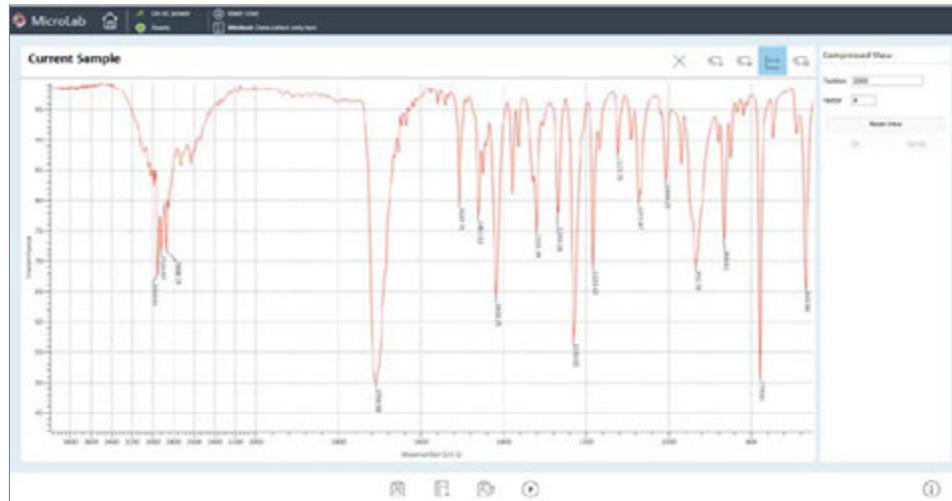
Identificación



Cuantificación



Análisis de espectros



MicroLab PC y MicroLab Lite

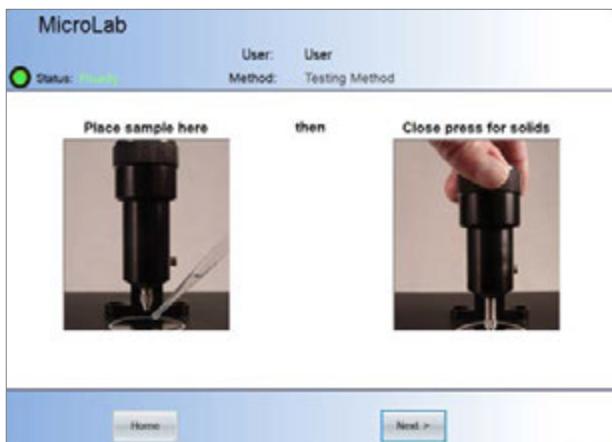
1 Inicie el análisis



Con solo hacer clic se inicia un flujo de trabajo guiado por imágenes que acompaña al usuario por todos los pasos del análisis. El software identifica el instrumento y la interfaz de muestreo en uso y muestra las imágenes relevantes.

Después de la recogida de datos, MicroLab lleva a cabo todos los cálculos y presenta resultados que son fáciles de comprender, incluso para usuarios noveles. El software MicroLab proporciona resultados codificados por colores, que se notifican directamente tras la adquisición de datos, en línea con la configuración de umbrales críticos y marginales del método, como se muestra en la Figura 1.

2 Siga las indicaciones de las imágenes del software



3 Obtenga al instante resultados útiles y codificados por colores



Figura 1. Tres sencillos pasos con el software Agilent MicroLab y los espectrómetros FTIR de Agilent que facilitan el análisis, reduciendo las necesidades de formación.

Aplicaciones de identificación

MicroLab compara automáticamente el espectro recogido con una biblioteca espectral y encuentra la mejor correspondencia espectral. Para facilitar la interpretación, se puede aplicar la codificación por colores basándose en los niveles de confianza (Figura 2).

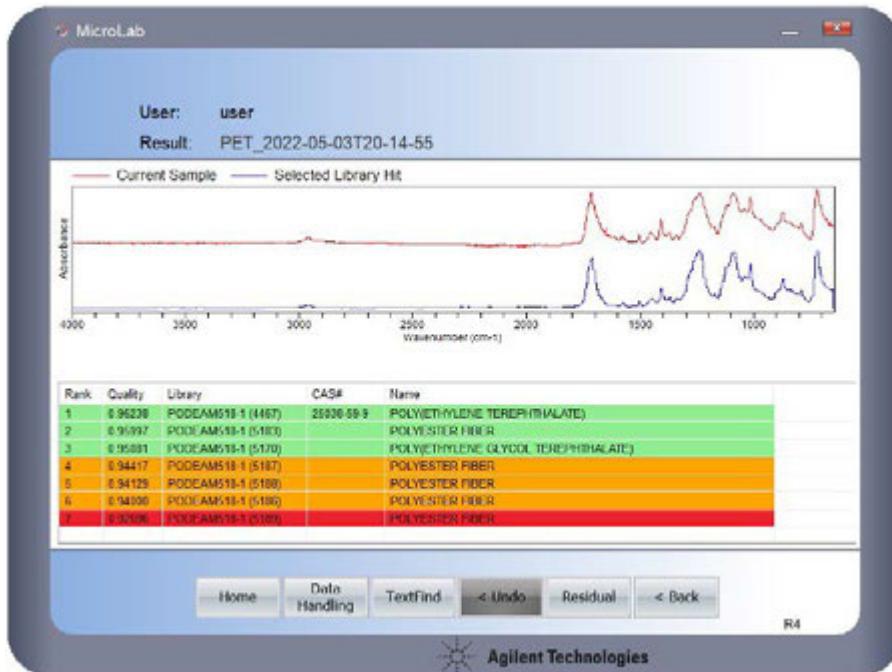


Figura 2. Confirme la identidad de la muestra visualizando coincidencias de alta calidad con respecto a los espectros de referencia.

En el software MicroLab se emplean con facilidad las bibliotecas.

- Agilent proporciona bibliotecas listas para usar y específicas de las aplicaciones.
- Los usuarios pueden crear sus propias bibliotecas en cuestión de segundos.

Las búsquedas en biblioteca se pueden adaptar a la aplicación de identificación.

- Se puede buscar simultáneamente en varias bibliotecas, por ejemplo, en una con patrones de referencia para identificar la muestra y en otra con muestras que se encuentran fuera de las especificaciones para identificar problemas recurrentes.
- Está disponible una amplia selección de algoritmos de búsqueda.
- Se pueden excluir rangos espectrales del análisis.
- La configuración de un índice de calidad mínima de coincidencia (HQI) y de un número máximo de coincidencias garantiza que solo se presenten las coincidencias de biblioteca relevantes.
- Se puede usar la codificación por colores de los resultados en función del HQI para definir niveles de coincidencia.

La identificación es sencilla, con una visualización de los resultados fácil de comprender.

Algunos ejemplos de aplicaciones:

- Confirmar rápidamente la pureza de los productos químicos entrantes y de los productos finales.
- Utilizar una biblioteca de espectros para autentificar rápidamente disolventes, tensioactivos, aminas especiales o productos químicos orgánicos industriales.
- Identificar análogos de narcóticos en muestras desconocidas incautadas.

MicroLab PC y MicroLab Lite

Para aplicaciones de detección, se muestra claramente información relevante de seguridad y riesgos en todas las ventanas de resultados (Figura 3). Se puede acceder a información detallada, como la sección de Información del cliente, que puede editar el usuario (Figura 4).

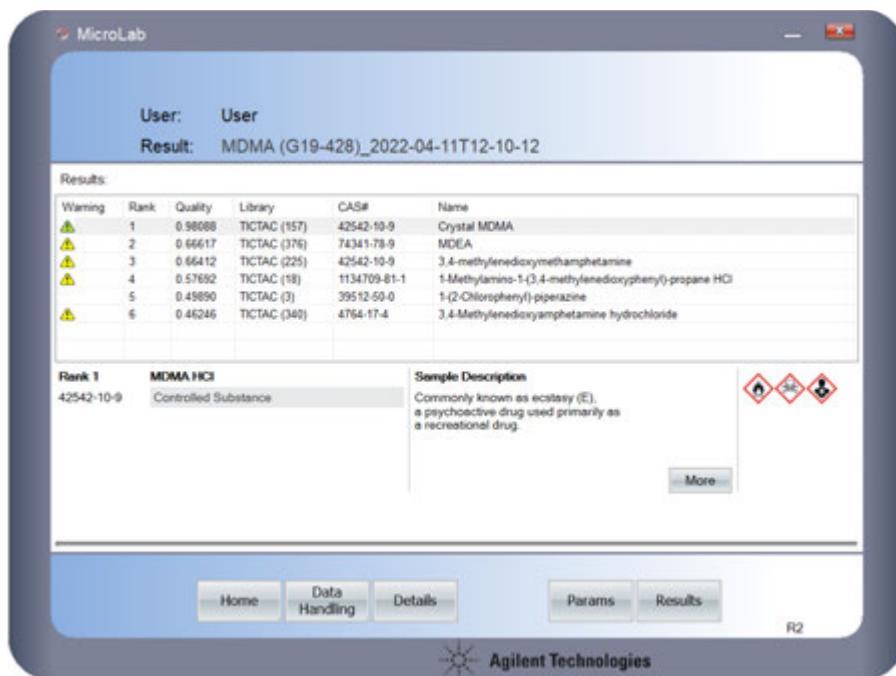


Figura 3. Información de seguridad y riesgos clara y útil sobre la coincidencia con la biblioteca seleccionada, como un número CAS, símbolos GHS, un indicador de advertencia (para sustancias controladas) y una breve descripción de la muestra.

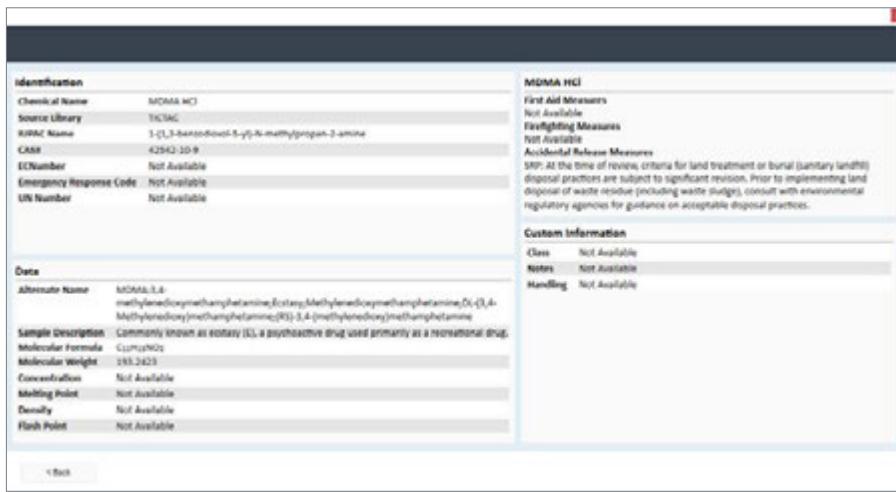
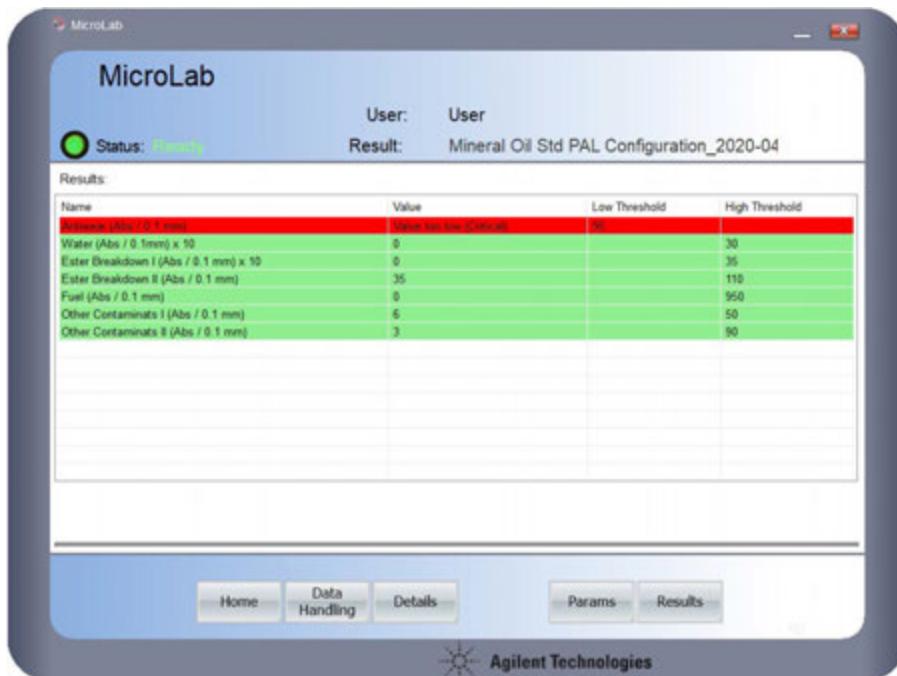


Figura 4. Información química y de primera respuesta adicional. La sección Información personalizada, que se puede modificar, aporta más directrices específicas del usuario.

Aplicaciones de cuantificación

MicroLab permite a los usuarios cuantificar varios componentes en una muestra con una sola medida de FTIR. En MicroLab Quant se pueden crear fácilmente modelos de cuantificación básicos. Para unos modelos quimiométricos más completos, MicroLab también es compatible con los modelos de predicción desarrollados en MicroLab Expert.

- **Gracias a las exclusivas capacidades de configuración de la lógica, solo se muestran los resultados relevantes.**
- **Los criterios definidos por el usuario para los resultados codificados por colores (rojo, amarillo, verde) proporcionan mayor flexibilidad.**
- **MicroLab lleva a cabo todos los cálculos y proporciona al instante resultados útiles y codificados por colores e instrucciones de seguimiento.**



– **Algunos ejemplos de aplicaciones:**

- Garantizar que se cumplen las especificaciones del fabricante midiendo de forma exacta los niveles de aditivos conocidos.
- Garantizar que las combinaciones y mezclas de productos químicos puros se han formulado correctamente.
- Obtener medidas rápidas, sencillas y fiables de muestras líquidas mediante FTIR de transmisión.

Figura 5. El software MicroLab lleva a cabo automáticamente todos los cálculos y muestra el resultado final codificado por colores para facilitar la revisión.

Recopilar y revisar espectros infrarrojos

También se puede usar MicroLab para recopilar y revisar un espectro infrarrojo (IR) de una muestra. Un espectro IR puede proporcionar una valiosa información, como la presencia de grupos funcionales.

- MicroLab permite a los usuarios cambiar el factor de escala del número de onda para un análisis más detallado del rango de interés de los espectros.
- Las bandas se pueden etiquetar para elaborar los informes o en la comparación con los valores de la literatura (Figura 6)



Figura 6. El software MicroLab permite a los operadores recoger los espectros infrarrojos de las muestras, revisarlos y volver a analizarlos, junto con una función de elaboración de informes.

MicroLab PC y MicroLab Lite

Incluya todos los resultados en el informe

MicroLab PC y Lite incorporan plantillas de informes predefinidas y personalizables.

Los resultados se pueden incluir automáticamente en el informe y un formato uniforme permite la rápida revisión de los detalles relevantes (Figura 7).

Las plantillas de informes se pueden editar en Microsoft Word.

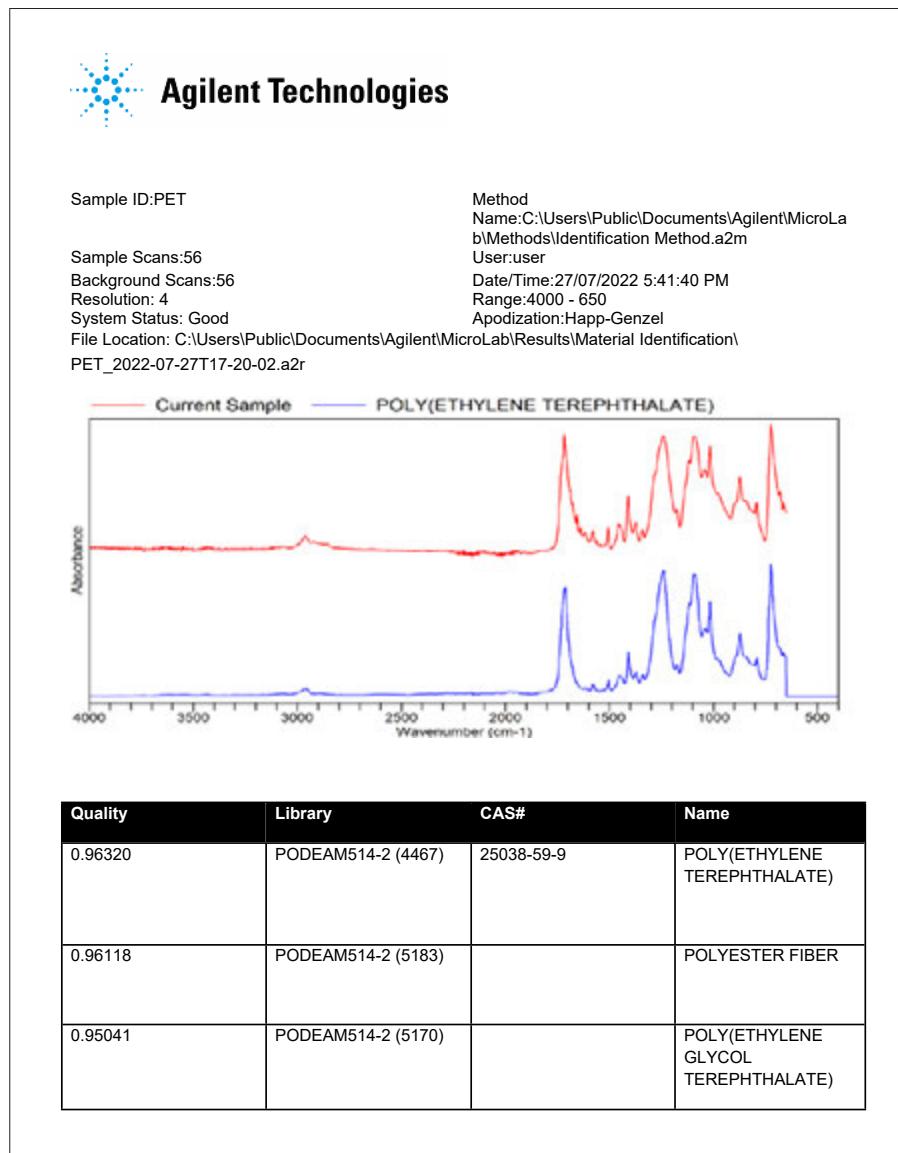
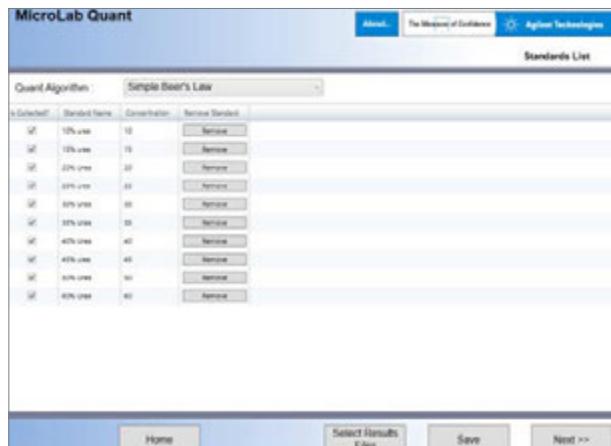


Figura 7. Informe de resultados generados con el software MicroLab. Todos los detalles relevantes de la muestra analizada se pueden capturar en el informe generado para la conservación de registros.

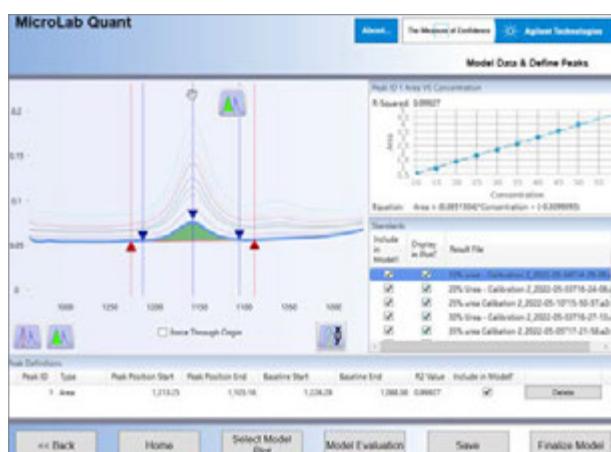
MicroLab Quant

MicroLab Quant cuenta con la misma guía paso a paso que el resto del paquete de software MicroLab y amplía la experiencia de un software rápido y sencillo al desarrollo de modelos para aplicaciones cuantitativas (Figura 8). La integración de datos sin problemas permite el uso sencillo de los espectros IR y los modelos de cuantificación en MicroLab PC, MicroLab Lite y MicroLab Quant.

1 Seleccione patrones e introduzca concentraciones



2 Defina picos y optimice la calibración



3 Finalice el modelo y utilícelo en MicroLab



Figura 8. Sencillos pasos del software MicroLab Quant para desarrollar los modelos cuantitativos.

MicroLab Quant

- La interfaz gráfica interactiva del software permite la creación y optimización rápidas y sencillas de los modelos cuantitativos (Figura 9).
- La retroalimentación directa muestra la influencia de cualquier cambio en el gráfico de correlación.
- Los modelos de cuantificación se pueden evaluar con la validación cruzada o independiente de las muestras (Figura 10).



Figura 9. Evaluación de la linealidad del módulo de muestreo DialPath con MicroLab Quant. Los cálculos de la curva de calibración y del coeficiente de correlación se realizaron automáticamente en el software.

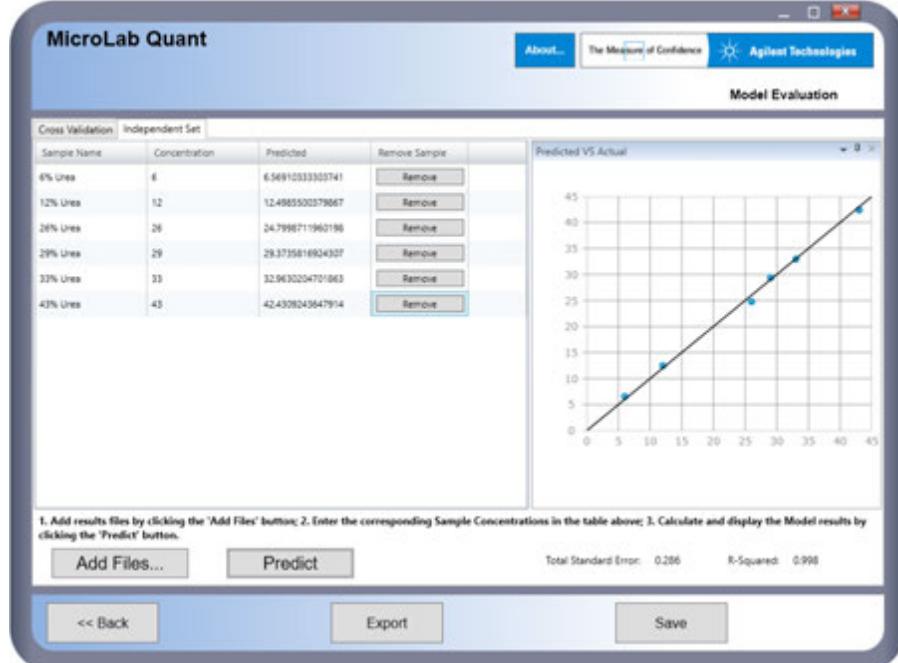


Figura 10. La aplicación MicroLab Quant también permite a los usuarios evaluar los modelos de cuantificación desarrollados, bien a través de la validación cruzada o bien frente a un conjunto de muestras diferente.

MicroLab OQ

El control del rendimiento del instrumento es un aspecto esencial en la cualificación de la idoneidad de un instrumento para el análisis que se quiere llevar a cabo.

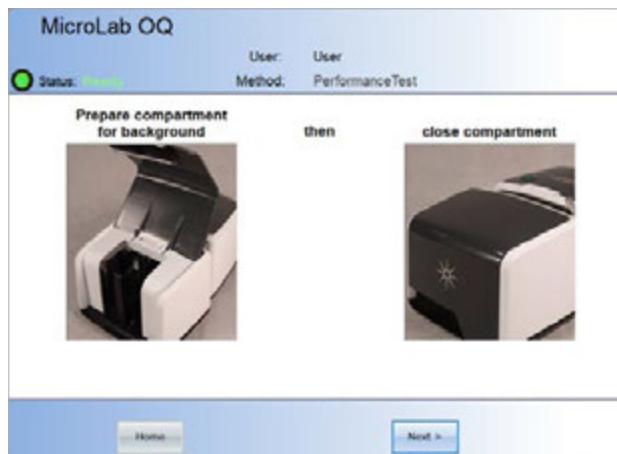
MicroLab OQ permite a los usuarios llevar a cabo con facilidad comprobaciones del rendimiento del instrumento para asegurarse de que un instrumento se encuentre en buenas condiciones.

MicroLab OQ dispone de una interfaz gráfica intuitiva que guía a los usuarios durante todo el proceso de cualificación.

- 1 Seleccione las pruebas de rendimiento del instrumento



- 2 MicroLab OQ guía durante cada prueba



- 3 Revise el resumen de la prueba de rendimiento

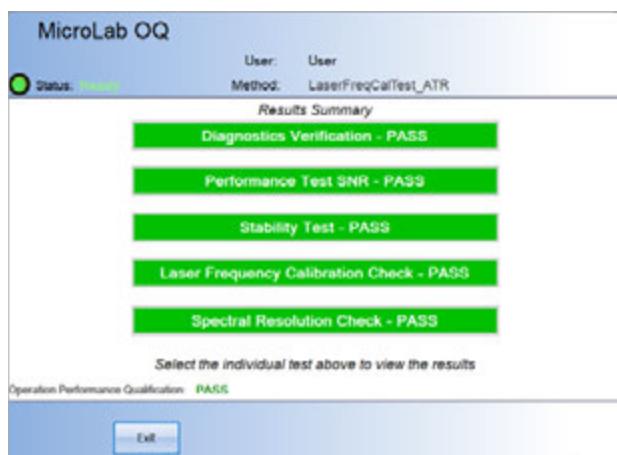


Figura 11. MicroLab OQ guía a los usuarios para que realicen la cualificación del instrumento siguiendo unos pasos simples y fáciles.

MicroLab OQ

En el último paso, MicroLab OQ genera un informe en PDF que muestra los valores del diagnóstico, los resultados de la prueba y las especificaciones para las pruebas y los criterios de aceptación y rechazo como futura referencia (Figura 12).

Cary 630 OQ Operational Qualification
This Report was generated under a 21 CFR 11 Environment

System Information

PCWorkstation ID: DESKTOP-ENM90U7
Software Version: MicroLab PC(21CFR11): 5.7.
Build: 06-05-2022
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

UserName: New group\New project\user
E�ine Optics: ZnSe
Sampling Module: Transmission Cell
Quartz Dwell Time: 1000
Filename of Report: C:\Users\Public\Documents\Agilent\MicroLab\OQ\2022-07-07T09-05-07.pdf
Filename of Data: DESKTOP-ENM90U7\SOLEXPRESS\VAIMDB_Public\000\OQQ\2022-07-07T21-05-07.zck

Accessories

Accessory: Transmission Cell (Primary)
SerialNumber: 14410003
Sampling Module: Transmission Cell
Color: Green
Energy Level: 27577

Signal To Noise Test

Number of Tests: 16
Specification @ 1142-1042: >25000
Measured Value: 38037

Stability Test

Number of Minutes: 30
Specification: <1%
Measured Deviation: 0.068%

Wavenumber Accuracy Test

Number of Runs: 5

| Spec. Wavenumber: | 906.6 | 1028.3 | 1154.5 | 1583.0 |
|-------------------------|-------|--------|--------|--------|
| Measured: | 906.7 | 1028.4 | 1154.6 | 1583.1 |
| Spec. Accuracy: | ±1.0 | ±1.0 | ±1.0 | ±1.0 |
| Measured Accuracy: | 0.1 | 0.1 | 0.1 | 0.1 |
| Spec. Repeatability: | ±0.05 | ±0.05 | ±0.05 | ±0.05 |
| Measured Repeatability: | 0.00 | 0.01 | 0.01 | 0.01 |

Spec. Wavenumber: 1601.2
Measured: 1601.1
Spec. Accuracy: ±1.0
Measured Accuracy: 0.1
Spec. Repeatability: ±0.05
Measured Repeatability: 0.01

Spectral Resolution Test

Number of Runs: 5

| Absorption maximum at: | 2846.60 cm-1 | Absorption minimum at: | 2870.00 cm-1 |
|----------------------------|--------------|-----------------------------|--------------|
| Measured Difference (Abs): | 0.43 | Specified Difference (Abs): | > 0.33 |

| Absorption maximum at: | 1583.00 cm-1 | Absorption minimum at: | 1589.00 cm-1 |
|----------------------------|--------------|-----------------------------|--------------|
| Measured Difference (Abs): | 0.10 | Specified Difference (Abs): | > 0.08 |

E-Signature

«Validated comment»

Authority: Sign
Authorization ID = [CB92826F-B684-4BC3-809DB852A71F]
Local Date & Time: 7/7/2022 11:22:37 PM
GMT Date & Time: 7/8/2022 6:22:37 AM
Application: MicroLab OQ
Workstation Name: DESKTOP-ENM90U7
User: New group\New project\user
User Name: user
User Description:
Instrument Serial Number: MY2109CU05
«Validated comment»

Figura 12. Informe de cualificación operacional (OQ) generado con MicroLab OQ. En el informe, de fácil lectura, se incluyen todos los parámetros de las pruebas y los resultados de aceptación y rechazo.

Más información:

www.agilent.com/chem/MicroLab

Tienda en línea:

www.agilent.com/chem/store

Obtenga respuestas a sus preguntas técnicas
y acceda a recursos en la Comunidad Agilent:

community.agilent.com

España

901 - 11 68 90

customercare_spain@agilent.com

Europa

info_agilent@agilent.com

Asia-Pacífico

inquiry_lsca@agilent.com

RA44713.4331018518

Esta información está sujeta a cambios sin previo aviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2022
Publicado en EE. UU., el 1 de agosto de 2022
5994-5139ES

