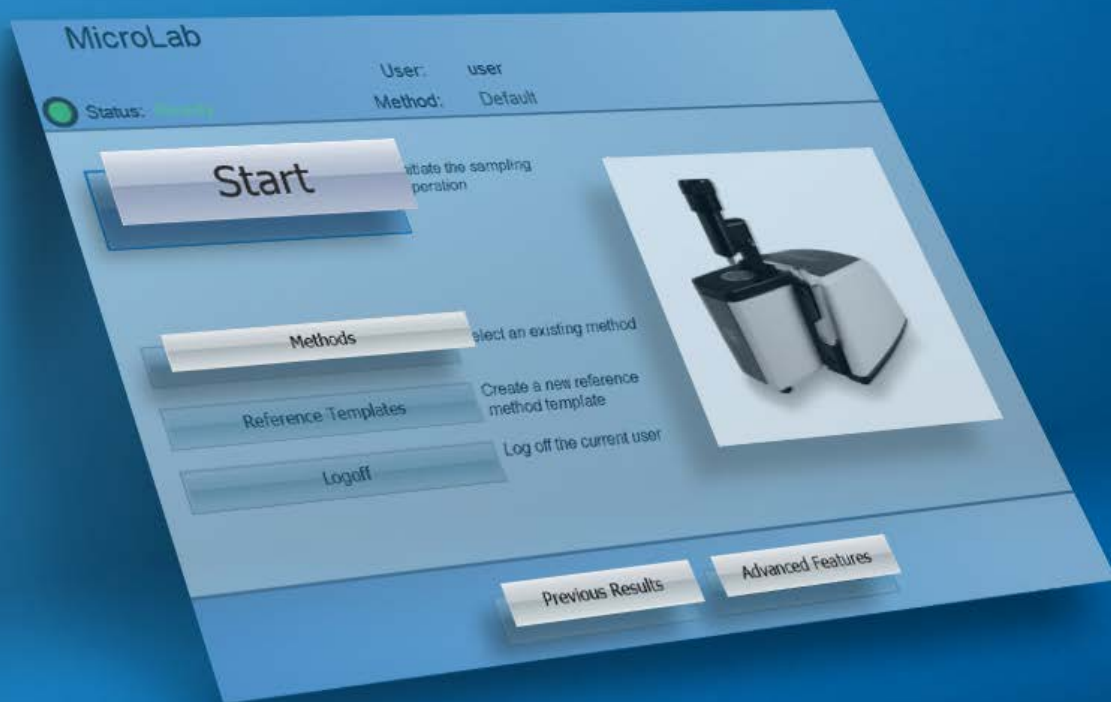


Analisi FTIR all'insegna della semplicità

Software MicroLab Agilent



Software MicroLab

La spettroscopia infrarossa in trasformata di Fourier (FTIR) è una tecnica rapida, semplice e affidabile per l'identificazione dei materiali e la quantificazione dei componenti in un campione.



La gamma di strumenti FTIR di Agilent spazia da flessibili spettrometri FTIR portatili e robusti analizzatori FTIR trasportabili per le applicazioni sul campo ad affidabili strumenti FTIR da banco per i test di routine e la ricerca avanzata. In certa misura, ciò che rende unico uno spettrometro FTIR Agilent è il pacchetto o l'interfaccia software che l'accompagna. Il software MicroLab Agilent può essere utilizzato da operatori con qualsiasi livello di competenza per applicazioni di routine che vanno dall'identificazione e caratterizzazione di materiali sconosciuti all'analisi quantitativa dettagliata.



FTIR Cary 630



FTIR trasportabile 4500



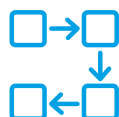
FTIR compatto 5500



FTIR portatile 4300

FTIR da campo

Funzioni del software MicroLab



Indicazioni passo a passo con immagini illustrative e un intuitivo design software che agevola la navigazione nell'intero flusso di lavoro, riducendo quindi la necessità di formazione e gli errori dell'utilizzatore.



MicroLab identifica automaticamente lo strumento connesso e riconosce il modulo di campionamento collegato.



Il software applica direttamente i parametri corretti e visualizza le illustrazioni pertinenti. È possibile definire per ciascun metodo i moduli consentiti.



Risolvi i dubbi legati all'interpretazione dei dati ottenuti dai flussi di lavoro di routine: dopo la raccolta dati il software fornisce immediatamente risultati utilizzabili codificati per colore, semplificandone l'interpretazione.



Estendi la velocità e semplicità dell'esperienza software allo sviluppo di modelli per applicazioni quantitative: il software MicroLab Quant accompagna esperti e non nelle varie fasi della creazione di un modello quantitativo, oltre a fornire riscontri immediati durante l'ottimizzazione del modello.



Crea report con tutti i risultati pertinenti: MicroLab integra modelli di report predefiniti e personalizzabili. È possibile generare report automatici dei risultati, mentre un formato coerente accelera la revisione dei dettagli rilevanti.

Pacchetto software MicroLab

Per semplificare al massimo l'uso del software MicroLab, la suite software MicroLab include quattro applicazioni distinte progettate appositamente per specifiche attività:



MicroLab PC

è un software basato su metodi per la raccolta e l'analisi di dati tramite metodi predefiniti.

MicroLab Lite

è un software utilizzabile per la revisione e l'analisi offline di dati FTIR.

MicroLab Quant

è utilizzato per semplificare lo sviluppo e la verifica di modelli di quantificazione.

MicroLab OQ

è un software di qualificazione operativa (OQ) automatizzata utilizzabile per la verifica di routine delle prestazioni dello strumento.

Il software opzionale **MicroLab Expert Agilent** è ideale quando sono necessari strumenti più sofisticati di elaborazione, visualizzazione e analisi dei dati.

Il software **MicroLab Pharma Agilent** è una soluzione software aggiuntiva che consente agli operatori di gestire i privilegi degli utenti e di amministrare l'archiviazione sicura dei record elettronici. Facilita inoltre il rispetto della conformità alle normative U.S. FDA 21 CFR Parte 11, Allegato 11 della UE e altre analoghe normative nazionali sui dati elettronici.

Le risposte giuste con MicroLab PC e MicroLab Lite

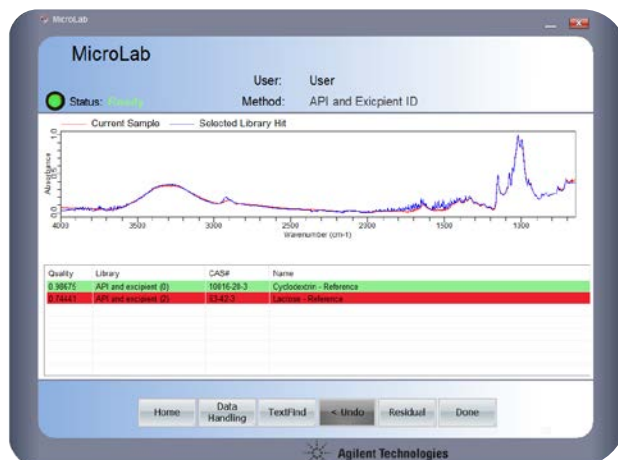


Tipi di metodi software

Il software MicroLab adotta un approccio basato su metodi. Una volta configurato il metodo, il sistema diviene una soluzione pronta all'uso.

Tre diversi tipi di metodi permettono di rispondere ai quesiti analitici più importanti:

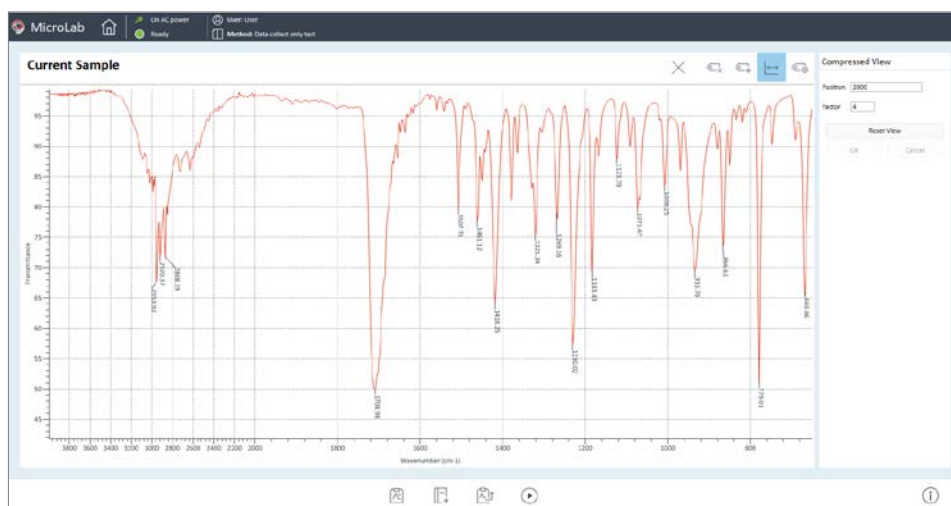
Identificazione



Quantificazione



Analisi dello spettro



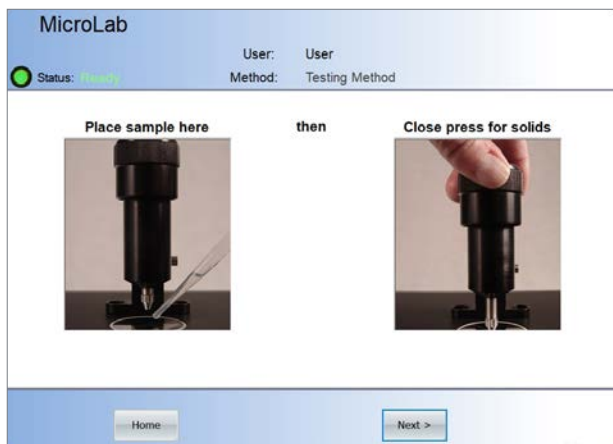
1 Avvia l'analisi



Un semplice clic avvia un flusso di lavoro guidato da immagini che accompagna l'utilizzatore in ogni fase dell'analisi. Il software identifica lo strumento e l'interfaccia di campionamento in uso e visualizza le immagini pertinenti.

Al termine della raccolta dati, MicroLab esegue tutti i calcoli e presenta risultati facilmente comprensibili anche agli utilizzatori alle prime armi. Il software MicroLab fornisce risultati codificati per colore, riportati subito dopo l'acquisizione dei dati, in linea con le impostazioni di soglia critiche e marginali del metodo, come mostrato in Figura 1.

2 Segui le indicazioni software con immagini



3 Ricevi immediatamente risultati utilizzabili codificati per colore

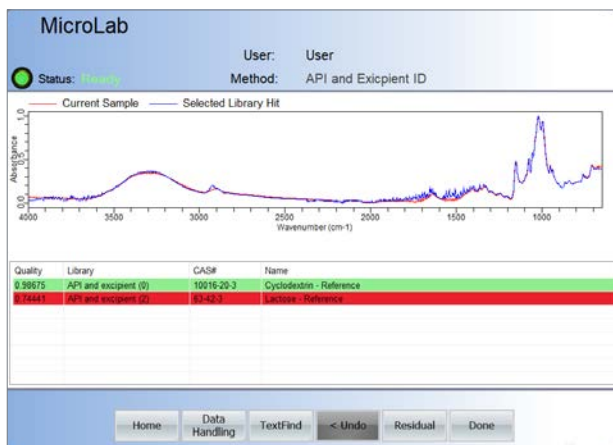


Figura 1. Tre semplici passaggi con il software MicroLab e gli spettrometri FTIR Agilent rendono immediata l'esecuzione dell'analisi, con minime esigenze di formazione.

Applicazioni di identificazione

MicroLab confronta automaticamente lo spettro acquisito con una libreria spettrale e individua la migliore corrispondenza spettrale. Per agevolare l'interpretazione è possibile applicare codici a colori in base ai livelli di affidabilità (Figura 2).

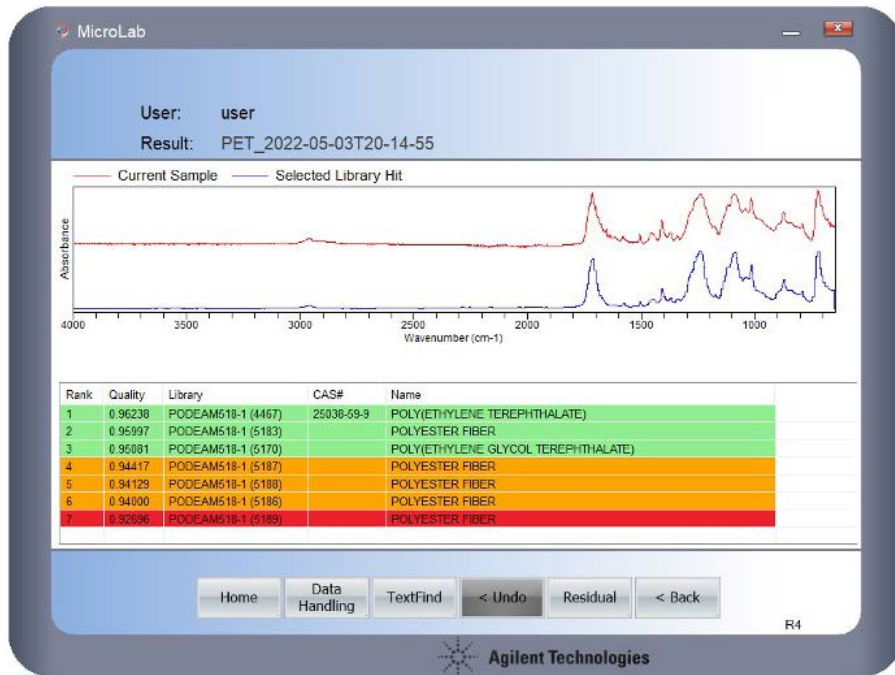


Figura 2. Conferma dell'identità del campione mediante la visualizzazione di corrispondenze di alta qualità rispetto a spettri di riferimento.

Le librerie sono facili da usare nel software MicroLab.

- Agilent fornisce librerie specifiche per applicazione e pronte all'uso.
- Gli utilizzatori possono creare librerie personalizzate in pochi secondi.

Le ricerche nella libreria possono essere adattate all'applicazione di identificazione.

- È possibile eseguire ricerche simultanee in più librerie, per esempio una libreria contenente standard di riferimento per identificare il campione e un'altra con campioni non conformi alle specifiche per individuare i problemi ricorrenti.
- È disponibile un'ampia gamma di algoritmi di ricerca.
- È possibile escludere dall'analisi determinati intervalli spettrali.
- Le impostazioni relative al valore minimo dell'indice di qualità della corrispondenza (HQI) e al numero massimo di corrispondenze fanno sì che vengano segnalate solo le corrispondenze in libreria pertinenti.
- La codifica a colori dei risultati in base al valore HQI può essere usata per definire i livelli di affidabilità.

L'identificazione è semplice grazie all'intuitiva visualizzazione dei risultati.

Alcuni esempi di applicazioni includono:

- Verifica rapida della purezza delle sostanze chimiche in ingresso e dei prodotti finiti.
- Uso di librerie spettrali per autenticare rapidamente solventi, tensioattivi, ammine di specialità o sostanze chimiche organiche industriali.
- Identificazione di analoghi di narcotici in campioni confiscati sconosciuti.

MicroLab PC e MicroLab Lite

Nel caso delle applicazioni di rivelazione, le informazioni pertinenti in materia di sicurezza e pericoli sono presentate chiaramente in tutte le finestre dei risultati (Figura 3). È possibile accedere a informazioni supplementari dettagliate, inclusa la sezione "Custom Information" modificabile dall'utilizzatore (Figura 4).

MicroLab

User: User
Result: MDMA (G19-428)_2022-04-11T12-10-12

Results:

Warning	Rank	Quality	Library	CAS#	Name
⚠	1	0.98088	TICTAC (157)	42542-10-9	Crystal MDMA
⚠	2	0.66617	TICTAC (376)	74341-78-9	MDEA
⚠	3	0.66412	TICTAC (225)	42542-10-9	3,4-methylenedioxyamphetamine
⚠	4	0.57692	TICTAC (18)	1134709-81-1	1-Methylamino-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)-propane HCl
⚠	5	0.49890	TICTAC (3)	39512-50-0	1-(2-Chlorophenyl)-piperazine
⚠	6	0.46246	TICTAC (340)	4764-17-4	3,4-Methylenedioxyamphetamine hydrochloride

Rank 1 **MDMA HCl**
42542-10-9 **Controlled Substance**

Sample Description
Commonly known as ecstasy (E), a psychoactive drug used primarily as a recreational drug.

⚠ ⚠ ⚠

More

Home Data Handling Details Params Results R2

Agilent Technologies

Figura 3. Informazioni su sicurezza e pericoli chiare e utilizzabili per la corrispondenza in libreria selezionata, inclusi numero CAS, simboli GHS, un contrassegno di avvertenza (per le sostanze controllate) e una breve descrizione del campione.

Identification

Chemical Name: MDMA HCl
Source Library: TICTAC
IUPAC Name: 1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-N-methylpropan-2-amine
CAS#: 42542-10-9
ECNumber: Not Available
Emergency Response Code: Not Available
UN Number: Not Available

MDMA HCl

First Aid Measures: Not Available
Firefighting Measures: Not Available
Accidental Release Measures: SRP: At the time of review, criteria for land treatment or burial (sanitary landfill) disposal practices are subject to significant revision. Prior to implementing land disposal of waste residue (including waste sludge), consult with environmental regulatory agencies for guidance on acceptable disposal practices.

Data

Alternate Name: MDMA;3,4-methylenedioxyamphetamine;Ecstasy;Methylenedioxyamphetamine;DL-(3,4-Methylenedioxy)amphetamine;(RS)-3,4-(methylenedioxy)amphetamine
Sample Description: Commonly known as ecstasy (E), a psychoactive drug used primarily as a recreational drug.
Molecular Formula: C₁₁H₁₅NO₂
Molecular Weight: 193.2423
Concentration: Not Available
Melting Point: Not Available
Density: Not Available
Flash Point: Not Available

Custom Information

Class: Not Available
Notes: Not Available
Handling: Not Available

< Back

Figura 4. Informazioni supplementari di natura chimica e sul primo intervento. La sezione modificabile "Custom Information" fornisce ulteriori indicazioni specifiche per utilizzatore.

Applicazioni di quantificazione

MicroLab permette agli utilizzatori di quantificare più componenti in un campione con una singola misura FTIR. In MicroLab Quant è possibile creare facilmente modelli di quantificazione di base. Per disporre di modelli chemiometrici più completi, MicroLab supporta anche i modelli di previsione sviluppati in MicroLab Expert.

- **Le esclusive funzionalità di impostazione della logica di MicroLab consentono di visualizzare esclusivamente i risultati pertinenti.**
- **I criteri definiti dall'utilizzatore per la codifica a colori (rosso, giallo, verde) dei risultati offrono un'eccezionale flessibilità.**
- **MicroLab esegue tutti i calcoli e fornisce immediatamente risultati utilizzabili codificati per colore e istruzioni di follow-up.**

- **Alcuni esempi di applicazioni includono:**
 - Garanzia del rispetto delle specifiche del produttore tramite la misura accurata dei livelli degli additivi noti.
 - Verifica della corretta formulazione delle miscele di sostanze chimiche fini.
 - Ottenimento di misure rapide, semplici e affidabili di campioni solo liquidi tramite FTIR in trasmissione.

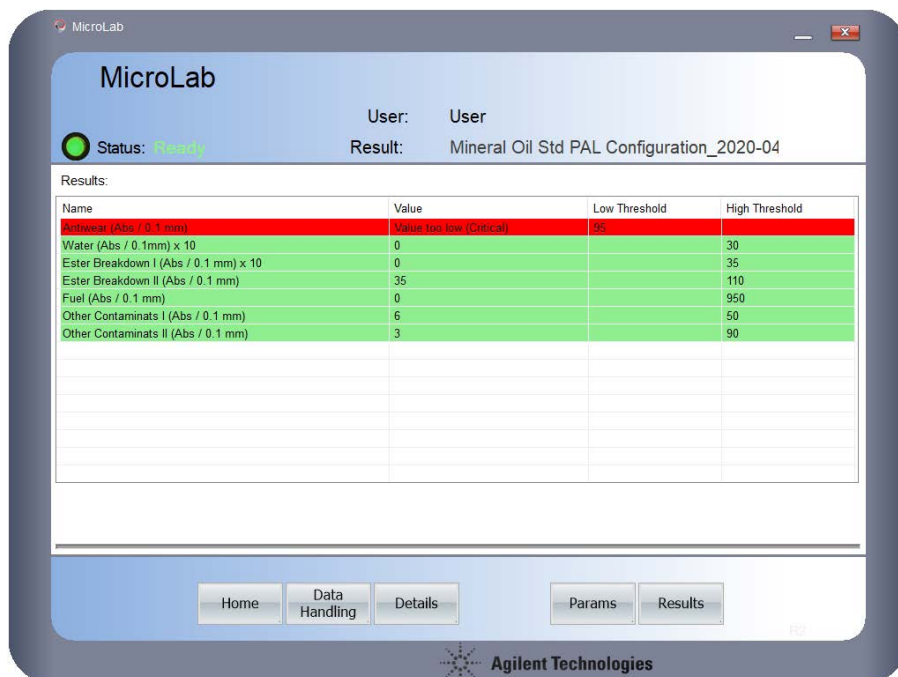


Figura 5. Il software MicroLab esegue automaticamente tutti i calcoli e visualizza il risultato finale con un codice a colori per un'agevole revisione.

Raccolta e revisione di spettri infrarossi

MicroLab può essere usato anche per la raccolta e revisione dello spettro infrarosso (IR) di un campione. Uno spettro IR può fornire informazioni preziose, per esempio la presenza di gruppi funzionali.

- MicroLab permette agli utilizzatori di modificare il fattore di scala del numero d'onda per analizzare in maggiore dettaglio l'intervallo spettrale di interesse.
- È possibile assegnare etichette alle bande a fini di reporting o confronto con i valori disponibili in letteratura (Figura 6).



Figura 6. Il software MicroLab permette agli operatori di raccogliere, revisionare e rianalizzare gli spettri infrarossi dei campioni, oltre a fornire una funzione di generazione di report.

Crea report con tutti i risultati

MicroLab PC e Lite integrano modelli di report predefiniti e personalizzabili. È possibile generare report automatici dei risultati, mentre un formato coerente accelera la revisione dei dettagli rilevanti (Figura 7). I modelli di report possono essere modificati in Microsoft Word.

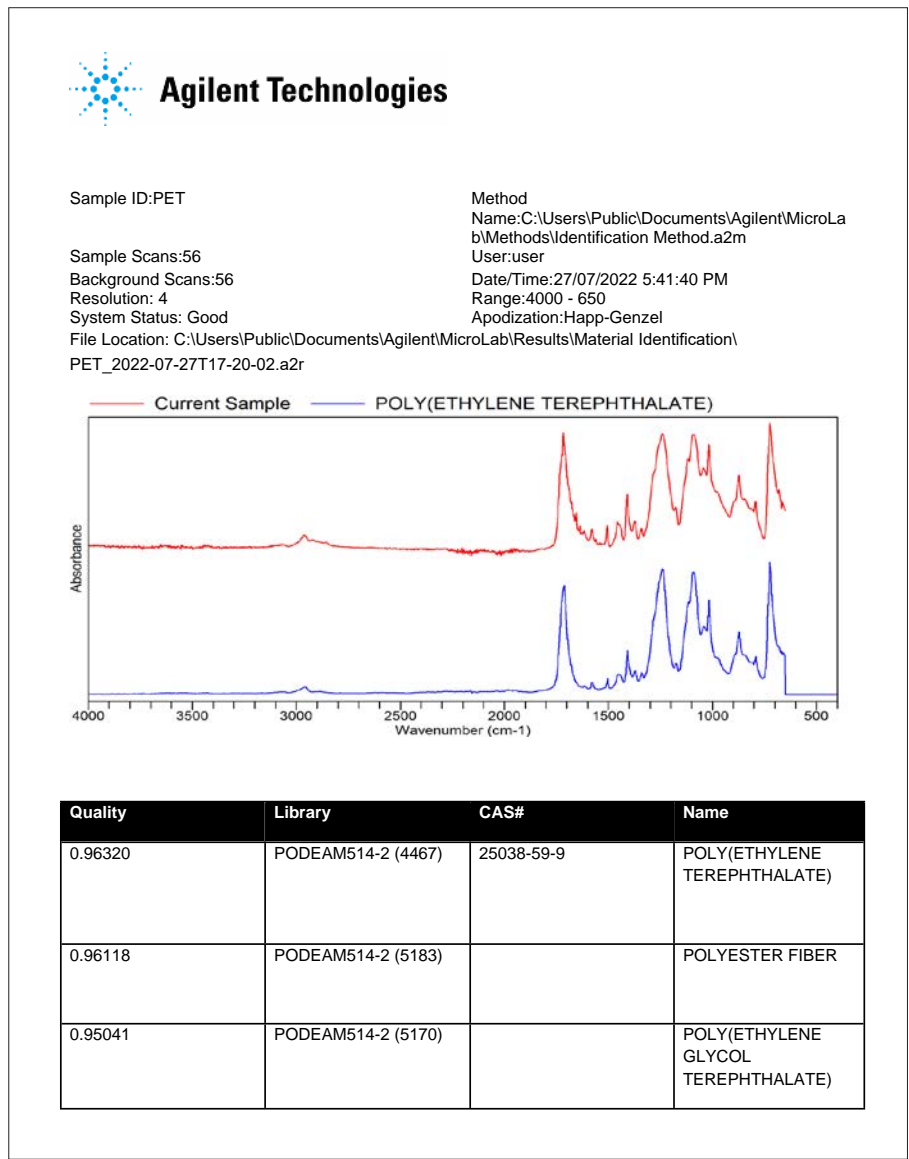
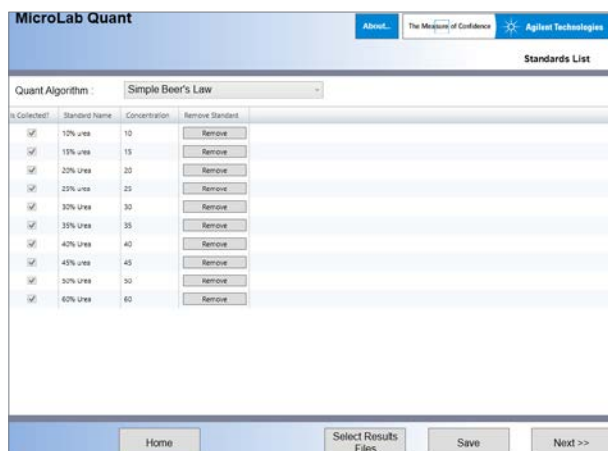


Figura 7. Report dei risultati generato con il software MicroLab. Tutti i dettagli pertinenti del campione analizzato possono essere acquisiti nel report generato ai fini della tenuta della documentazione.

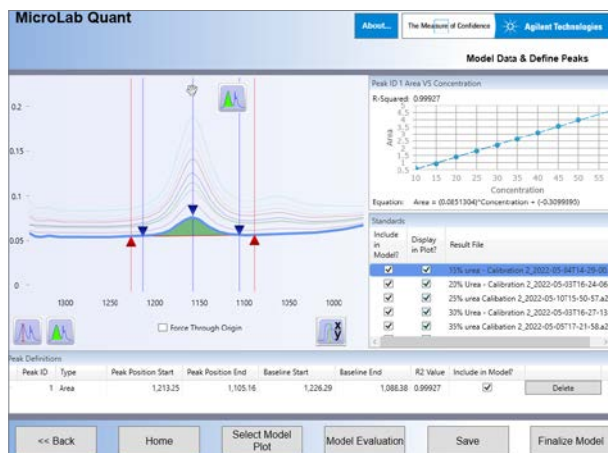
MicroLab Quant

MicroLab Quant è dotato delle stesse indicazioni passo a passo del resto della suite software MicroLab ed estende la velocità e semplicità dell'esperienza software allo sviluppo di modelli per applicazioni quantitative (Figura 8). L'integrazione omogenea dei dati facilita l'uso degli spettri IR e dei modelli di quantificazione in MicroLab PC, MicroLab Lite e MicroLab Quant.

1 Seleziona gli standard e immetti le concentrazioni



2 Definisci i picchi e ottimizza la calibrazione



3 Finalizza il modello e usalo in MicroLab

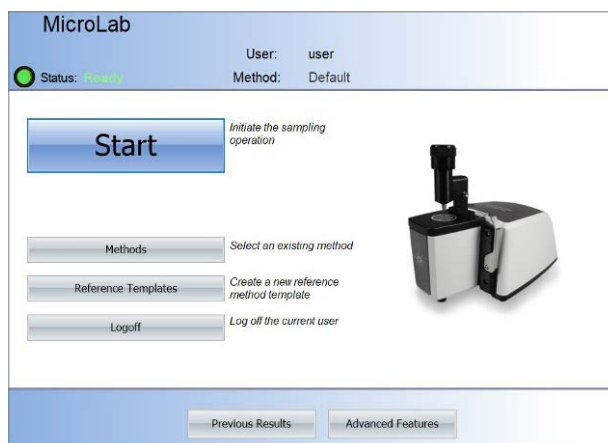


Figura 8. I semplici passaggi nel software MicroLab Quant per lo sviluppo di modelli quantitativi.

MicroLab Quant

- L'interfaccia software interattiva accelera e semplifica la creazione e l'ottimizzazione di modelli di quantificazione (Figura 9).
- Il feedback diretto mostra l'effetto che le modifiche esercitano sul grafico di correlazione.
- I modelli di quantificazione possono essere valutati tramite validazione crociata o indipendente dei campioni (Figura 10).

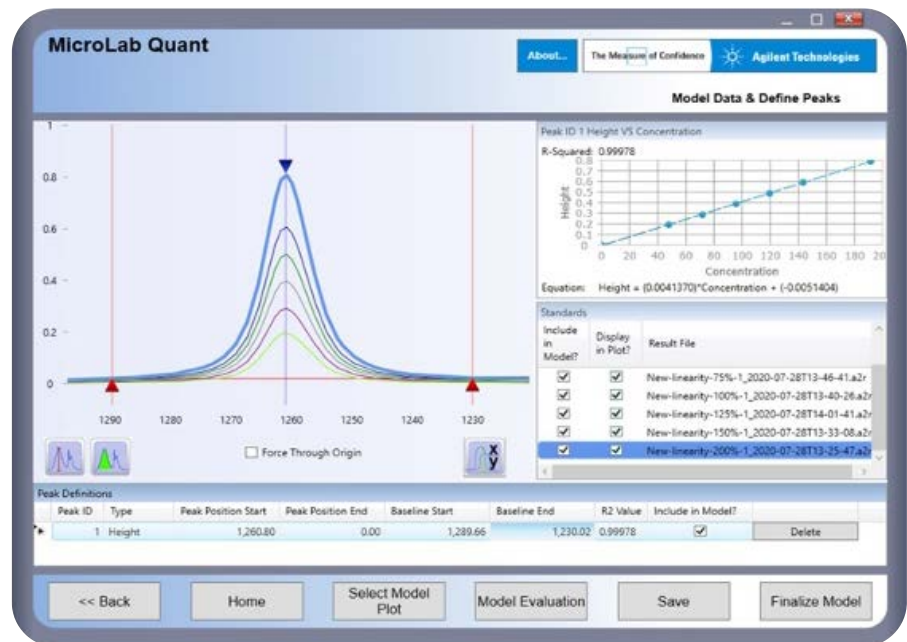


Figura 9. Valutazione della linearità del modulo di campionamento DialPath con MicroLab Quant. Il software calcola automaticamente curve di calibrazione e coefficienti di correlazione.

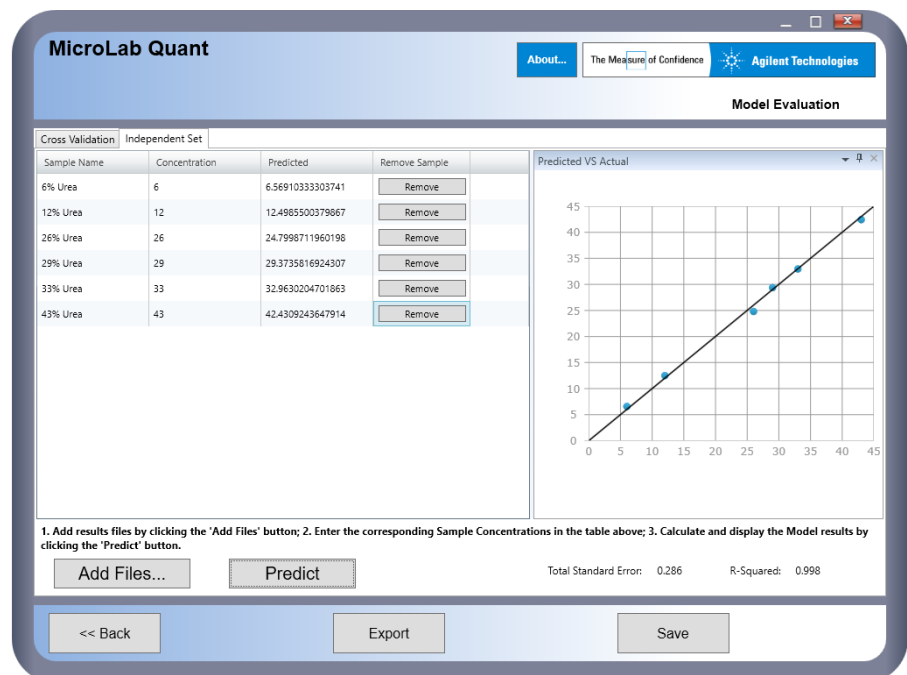


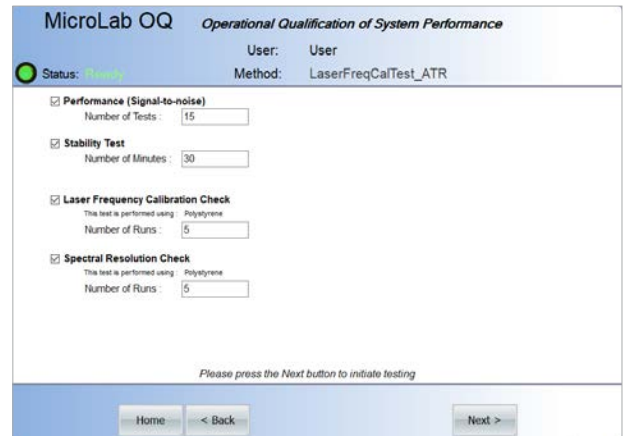
Figura 10. L'applicazione MicroLab Quant consente agli utilizzatori anche di valutare i modelli di quantificazione sviluppati tramite validazione crociata oppure rispetto a un set di campioni separato.

MicroLab OQ

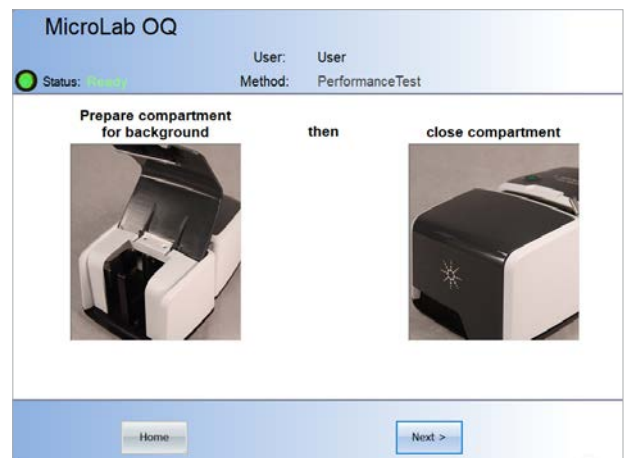
Il controllo delle prestazioni dello strumento è un aspetto cruciale per la qualifica dell'idoneità di uno strumento per l'analisi prevista. MicroLab OQ consente agli utilizzatori di eseguire facilmente verifiche delle prestazioni dello strumento per assicurarsi che si trovi in buone condizioni.

L'intuitiva interfaccia illustrata di MicroLab OQ accompagna gli utilizzatori nel corso dell'intera procedura di qualifica.

1 Seleziona i test delle prestazioni dello strumento



2 MicroLab OQ fornisce indicazioni per ogni test



3 Esamina il riepilogo dei test delle prestazioni

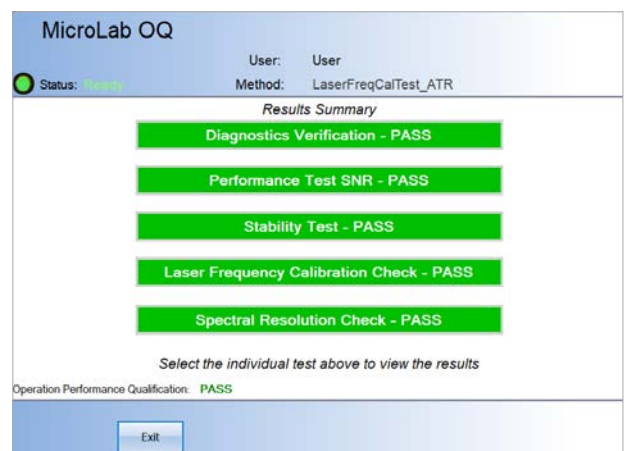


Figura 11. MicroLab OQ assiste gli utilizzatori nell'esecuzione della qualifica dello strumento tramite passaggi semplici e intuitivi.

MicroLab OQ

Nell'ultimo passaggio MicroLab OQ genera un report in formato PDF che presenta i valori diagnostici, i risultati e le specifiche dei test, oltre che i criteri di superamento/non superamento come riferimento futuro (Figura 12).

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

System Information
 PC/Workstation ID: DESKTOP-ENM90U7
 Software Version: MicroLab PC(Z1CFR11): 5.7.
 Firmware: 1.96.00.0
 Serial Number: MY2109CU05

Reporting Information
 Generated By: New group/New projectuser
 Generated Date: 7/7/2022 9:05 PM
 Generated GMT Date: 7/7/2022 5:05 AM

Accessories
 Accessory: Transmission Cell (Primary)
 SerialNumber: 14410003
 Sampling Module: Transmission Cell
 Gain: 205
 Energy Level: 27577

Signal To Noise Test
 Number of Tests: 15
 Specification @ 1142-1042: >25000
 Measured Value: **36037** **PASS**

Stability Test
 Number of Minutes: 30
 Specification: <1%
 Measured Deviation: **0.068%** **PASS**

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	0.00	0.01	0.01

Spec. Wavenumber:	1601.2	2849.5	3060.0
Measured:	1601.1	2849.9	3059.9
Spec. Accuracy:	±1.0	±1.0	±1.0
Measured Accuracy:	0.1	0.4	0.1
Spec. Repeatability:	±0.05	±0.05	±0.05
Measured Repeatability:	0.01	0.01	0.01

Spectral Resolution Test
 Number of Runs: 5 **PASS**

Absorption maximum at: 2849.53 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-8684-4BC3-808DB852A71F)

Local Date & Time: 7/7/2022 11:22:37 PM
 GMT Date & Time: 7/8/2022 6:22:37 AM
 Application: MicroLab IQ/OQ
 Workstation Name: DESKTOPENM90U7
 User: New group/New projectuser
 User Name: user
 User Description:
 Instrument Serial Number: MY2109CU05
 ** Validated comment **

Figura 12. Report di qualificazione operativa (OQ) generato con MicroLab OQ. I risultati sono riportati con i parametri di tutti i test e con risultati di superamento/non superamento di facile lettura.

Maggiori informazioni:

www.agilent.com/chem/MicroLab

Acquista online:

www.agilent.com/chem/store

Ottieni risposte alle tue domande di natura tecnica
e accedi alle risorse nell'Agilent Community:

community.agilent.com

Italia

numero verde 800 012 575

customercare_italy@agilent.com

Europa

info_agilent@agilent.com

RA44713.4331018518

Le informazioni fornite potrebbero variare senza preavviso.

© Agilent Technologies, Inc. 2022
Pubblicato negli Stati Uniti, 1 agosto 2022
5994-5139ITE

