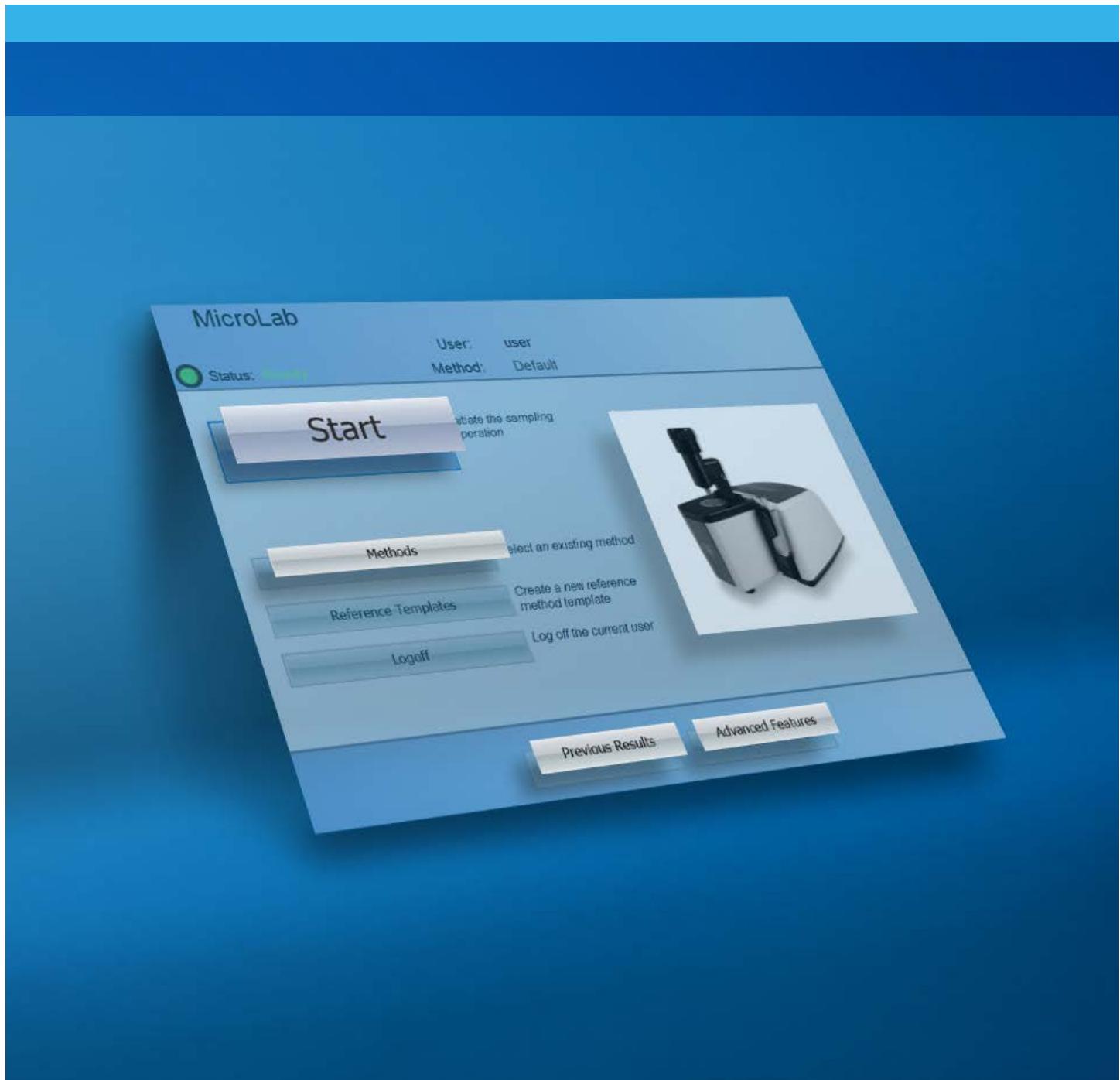


간편한 FTIR 분석

Agilent MicroLab 소프트웨어



MicroLab 소프트웨어

푸리에 변환 적외선 분광법 (FTIR)은 시료 내 물질 식별 및 성분 정량을 위한 빠르고 간편하며 신뢰할 수 있는 기술입니다.



애질런트는 유연한 핸드헬드 FTIR 분광기와 현장 응용을 위한 견고한 핸드헬드 FTIR 분석기부터 일상적인 테스트 및 첨단 연구를 위한 신뢰할 수 있는 벤치탑 FTIR 기기에 이르기까지 다양한 FTIR 기기를 제공합니다. 한편으로 Agilent FTIR 분광기의 독특한 점은 분광기와 함께 제공되는 소프트웨어 패키지 또는 인터페이스입니다. Agilent MicroLab 소프트웨어를 사용하면 미지 재료 식별 및 특성 규명에서 자세한 정량 분석에 이르기까지 모든 수준의 사용자가 일상적인 응용 분석에 사용할 수 있습니다.



Cary 630 FTIR



4500 Portable FTIR



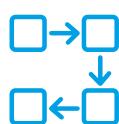
5500 Compact FTIR



4300 핸드헬드 FTIR

모바일 FTIR

MicroLab 소프트웨어 특징



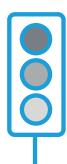
직관적인 그림을 이용한 단계별 안내, 직관적인 소프트웨어 설계를 통해 전체 워크플로를 쉽게 둘러보고 많은 교육이 필요치 않으며 사용자 실수를 감소합니다.



MicroLab은 연결된 기기를 자동으로 식별하고 부착된 샘플링 모듈을 인식합니다.



이 소프트웨어는 올바른 파라미터를 직접 적용하고 관련 있는 그림을 표시합니다. 허용된 모듈은 각 분석법에 맞게 정의될 수 있습니다.



일반 워크플로에서 데이터 분석에 대한 의구심 제거: 데이터 수집 후, 소프트웨어가 직접 색상으로 구분된 실행 가능한 결과를 제공하여 해석을 보다 간소화합니다.



빠르고 간단한 소프트웨어 경험을 정량 응용을 위한 모델 개발로 확장합니다. MicroLab Quant 소프트웨어는 정량적 모델을 구축하는 각 단계를 통해 전문가와 비전문가를 지원하고 모델을 최적화할 때 즉각적인 피드백을 제공합니다.



모든 관련 결과 보고: MicroLab에는 사전 정의되고 사용자 지정 가능한 보고서 템플릿이 통합되어 있습니다. 결과는 자동으로 보고될 수 있으며, 일관된 포맷으로 관련 상세 정보를 빠르게 검토할 수 있습니다.

MicroLab 소프트웨어 패키지

MicroLab 소프트웨어를 최대한 쉽게 사용할 수 있도록 MicroLab 소프트웨어 제품군에는 수행 중인 작업을 위해 특별히 설계된 4개의 개별 애플리케이션이 포함되어 있습니다.



MicroLab PC

는 사전 정의된 분석법을 사용하여 데이터를 수집하고 분석하는 분석법 기반 소프트웨어입니다.

MicroLab Lite

소프트웨어는 FTIR 데이터의 오프라인 리뷰 및 분석에 사용할 수 있습니다.

MicroLab Quant

쉽고 간단한 정량 모델의 개발 및 검증에 사용됩니다.

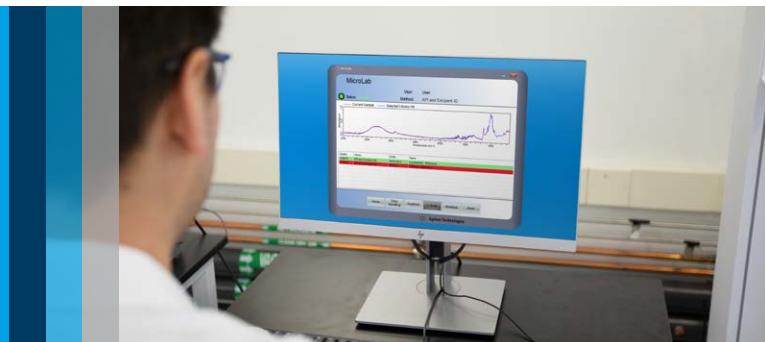
MicroLab OQ

자동 운영 적격성 평가 (OQ) 소프트웨어를 사용하여 기기 성능을 일상적으로 검증할 수 있습니다.

Agilent MicroLab Expert 소프트웨어 옵션은 보다 정교한 데이터 처리, 시각화 및 분석 도구가 필요할 때 이상적입니다.

Agilent MicroLab Pharma 소프트웨어는 사용자 권한을 관리하고 전자 기록의 안전한 저장을 관리할 수 있는 추가적인 소프트웨어 솔루션입니다. 또한 미국 FDA 21 CFR Part 11, EU Annex 11과 같은 국가 전자 기록 규정을 보다 수월하게 준수할 수 있습니다.

MicroLab PC 및 MicroLab Lite를 통해 해답 찾기

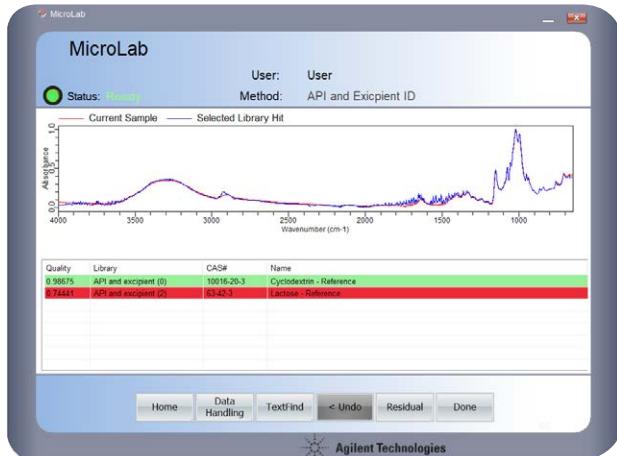


소프트웨어 분석법 유형

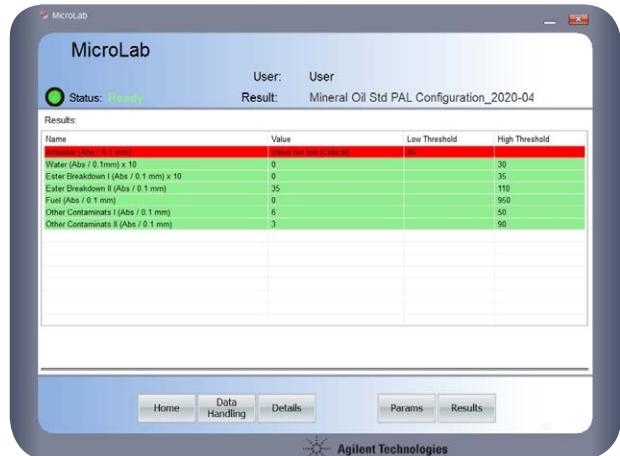
MicroLab 소프트웨어는 분석법 기반 접근 방식을 따릅니다. 분석법이 설정되면 시스템은 터키 솔루션이 됩니다.

세 가지 분석법 유형이 가장 중요한 분석적 문제를 다룹니다.

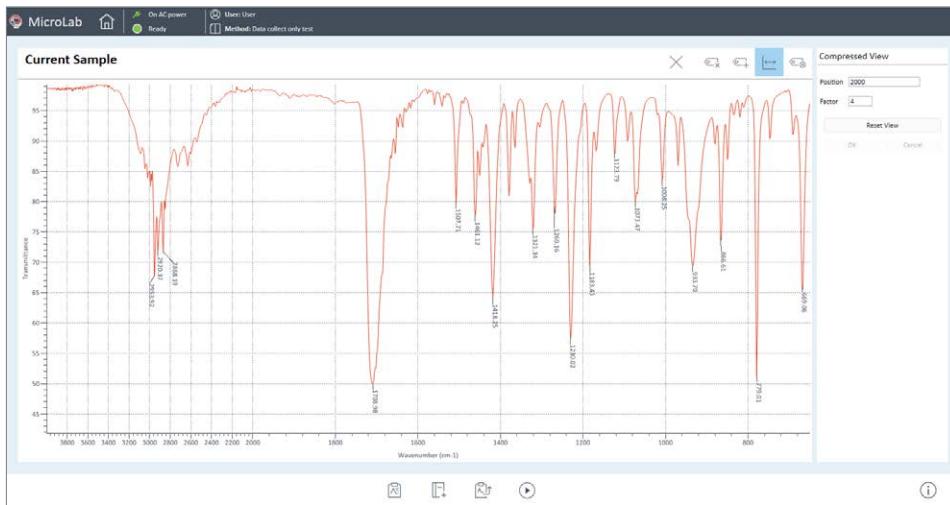
식별



정량

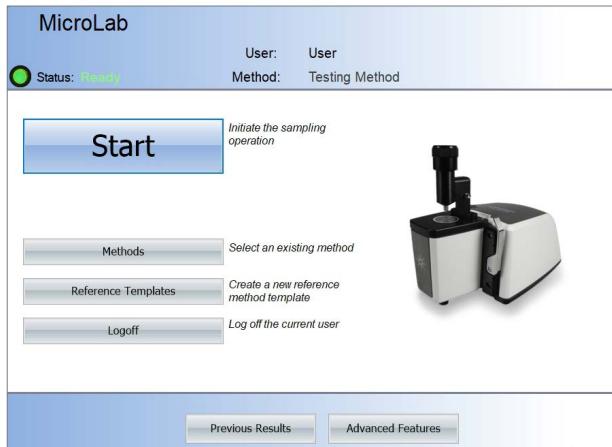


스펙트럼 분석



MicroLab PC 및 MicroLab Lite

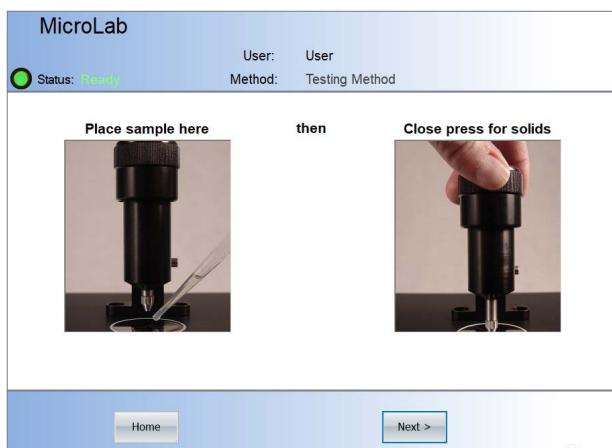
1 분석 시작



한 번의 클릭으로 사용자가 분석의 모든 단계를 탐색할 수 있는 그림을 통한 워크플로가 시작됩니다. 소프트웨어는 사용 중인 기기와 샘플링 인터페이스를 식별하고 관련 이미지를 표시합니다.

데이터 수집 후 MicroLab은 모든 계산을 수행하고 초보 사용자라도 이해하기 쉬운 결과를 나타냅니다. MicroLab 소프트웨어는 그림 1과 같이 분석법의 임계 및 한계 임계값 설정에 따라 데이터 수집 후 바로 보고되는 색상으로 구분된 결과를 제공합니다.

2 그림 기반의 소프트웨어 지침을 따름



3 색상으로 구분된 실용적 결과 즉시 수신

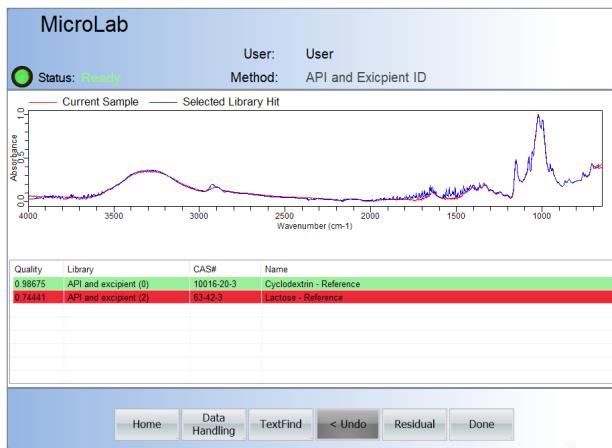


그림 1. Agilent MicroLab 소프트웨어와 Agilent FTIR 분광기를 사용하여 간단하게 분석을 수행하고 교육의 필요성을 줄이는 세 가지 간단한 단계.

식별 응용

MicroLab은 수집된 스펙트럼을 스펙트럼 라이브러리와 자동으로 비교하고 최적의 스펙트럼 매치를 찾습니다. 쉽게 해석할 수 있도록 신뢰 수준에 따라 색상 코드를 적용할 수 있습니다(그림 2).

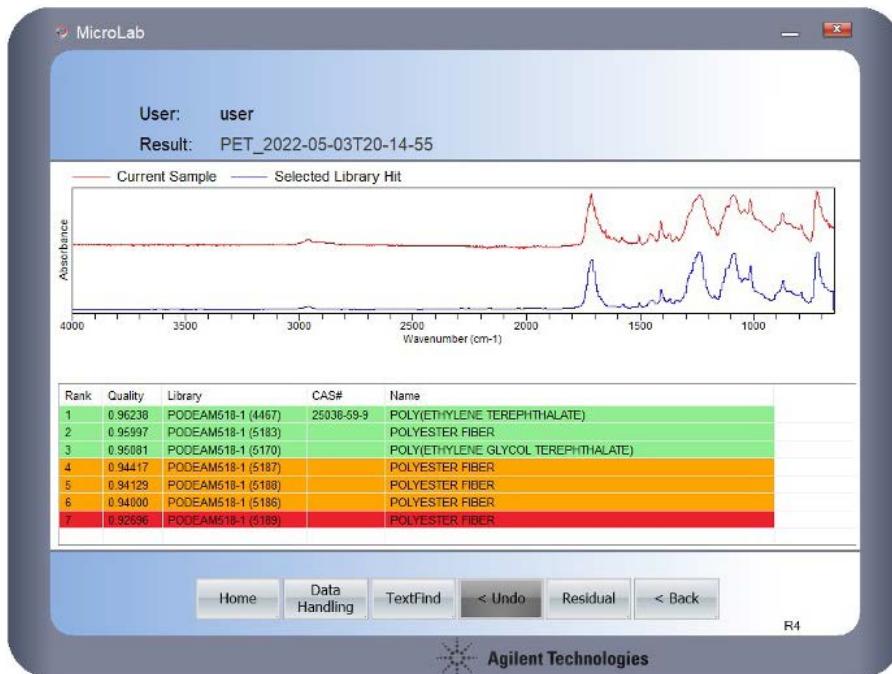


그림 2. 참조 스펙트럼에 대한 고품질 매치를 표시함으로써 시료의 정체를 확인.

라이브러리를 MicroLab 소프트웨어에서 쉽게 사용 가능합니다.

- 애질런트는 즉시 사용할 수 있는 응용 분야별 라이브러리 제공합니다
- 사용자는 몇 초 만에 자신의 라이브러리를 생성할 수 있습니다

라이브러리 검색을 식별 응용 분야에 맞게 조정할 수 있습니다.

- 참조 표준을 통해 시료를 식별하는 라이브러리, 사양을 벗어난 시료를 사용하여 다시 발생하는 문제를 식별하는 라이브러리와 같은 여러 라이브러리를 동시에 검색할 수 있습니다
- 다양한 검색 알고리즘을 사용할 수 있습니다
- 스펙트럼 범위는 분석에서 제외할 수 있습니다
- 최소한의 고품질 인덱스(HQI)와 최대 검색 수 설정을 통해 관련 라이브러리 검색만 표시됩니다
- HQI에 기반한 결과의 색상 코드를 사용하여 신뢰 수준을 정의할 수 있습니다

응용의 예는 다음과 같습니다.

- 반입 화학 물질과 완제품의 순도를 신속하게 확인
- 스펙트럼 라이브러리를 사용하여 용매, 계면 활성제, 특수 아민 또는 산업용 유기 화학 물질을 신속하게 확인
- 미지의 압수된 시료에서 마약 유사체를 식별

이해하기 쉽게 결과를 표시하여 식별이 간단합니다.

MicroLab PC 및 MicroLab Lite

검출 응용의 경우 모든 결과 창에 관련 안전 및 위험 정보가 명확하게 표시됩니다 (그림 3). 사용자가 편집할 수 있는 사용자 정보 섹션을 포함하여 자세한 정보에 액세스할 수 있습니다(그림 4).

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

Results:

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

그림 3. CAS 번호, GHS 기호, 경고 플래그(규제 물질의 경우) 및 간단한 시료 설명을 포함하여 선택한 라이브러리 검색 결과에 대한 명확하고 조치 가능한 안전 및 위험 정보.

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

Data

Alternate Name: MDMA;3,4-methylenedioxymethamphetamine;Ecstasy;Methylenedioxymethamphetamine;DL-(3,4-Methylenedioxyl)methamphetamine;(RS)-3,4-(methyleneoxy)methamphetamine
Sample Description: Commonly known as ecstasy (E), a psychoactive drug used primarily as a recreational drug.
Molecular Formula: C₁₁H₁₅N₂O₂
Molecular Weight: 193.2423
Concentration: Not Available
Melting Point: Not Available
Density: Not Available
Flash Point: 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.

Custom Information

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

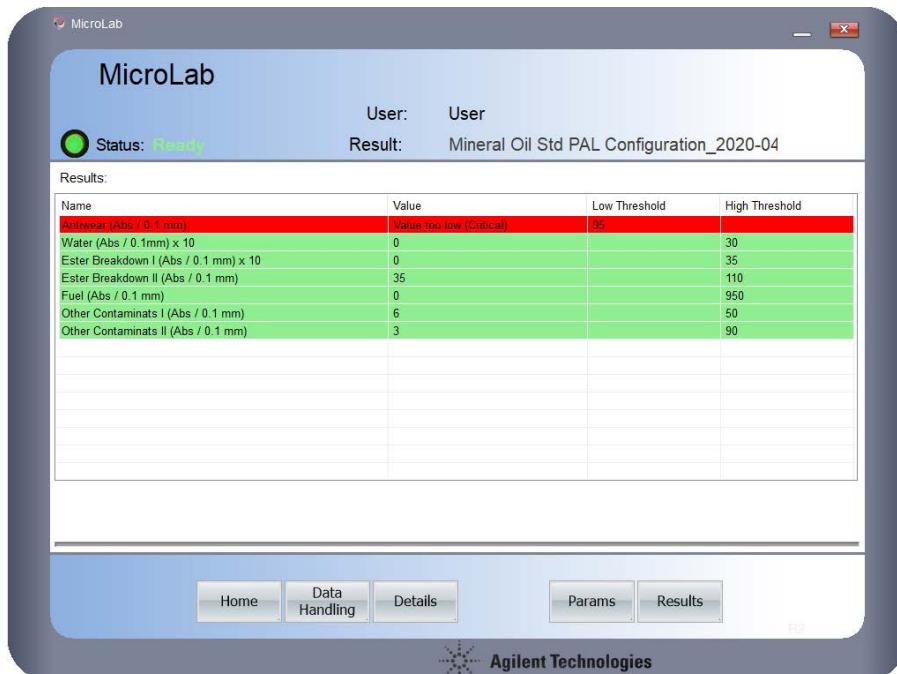
< Back

그림 4. 추가 화학 물질 및 초기 대응 정보. 편집 가능한 사용자 지정 정보 섹션은 사용자별 추가 지침을 제공합니다.

정량 응용

MicroLab을 통해 사용자는 단일 FTIR 측정으로 시료의 여러 성분을 정량할 수 있습니다. MicroLab Quant에서 기본 정량 모델을 쉽게 생성할 수 있습니다. 보다 종합적인 화학 측정 모델을 위해 MicroLab은 MicroLab Expert에서 개발한 예측 모델도 지원합니다.

- **MicroLab의 고유한 논리적 설정 기능으로 관련 결과만 표시됩니다**
- **색상으로 구분된 결과(빨간색, 노란색, 초록색)에 대한 사용자 정의 기준은 뛰어난 유연성을 제공합니다**
- **MicroLab이 모든 계산을 수행하고, 색상으로 구분된 실용적 결과와 이후 지침을 즉시 제공합니다**



- 응용의 예는 다음과 같습니다

- 알려진 첨가제 농도를 정확하게 측정하여 제조업체의 사양 준수 여부 보증
- 적절히 배합된 정제 화학 물질의 혼합 상태 및 혼합물 확인
- 투과 FTIR을 사용한 빠르고 간편하며 신뢰할 수 있는 액체 시료 측정 값 획득

그림 5. MicroLab 소프트웨어는 모든 계산을 자동으로 수행하고 쉽게 검토할 수 있도록 색상으로 구분된 최종 결과를 표시합니다.

적외선 스펙트럼 수집 및 검토

또한 MicroLab을 사용하여 시료의 적외선(IR) 스펙트럼을 수집하고 검토할 수 있습니다.

IR 스펙트럼은 작용기의 존재와 같은 귀중한 정보를 제공할 수 있습니다.

- MicroLab을 통해 사용자는 관심 스펙트럼 범위의 보다 자세한 분석을 위해 파수 스케일 인수를 변경할 수 있습니다
- 밴드는 보고 또는 기존 연구 결과값과의 비교를 위해 라벨 처리될 수 있습니다.(그림 6)



그림 6. MicroLab 소프트웨어를 사용하면 작업자는 보고 기능과 함께 시료의 적외선 스펙트럼을 수집, 검토 및 재분석할 수 있습니다.

MicroLab PC 및 MicroLab Lite

모든 결과 보고

MicroLab PC 및 Lite에는 사전 정의되고 사용자 지정 가능한 보고서 템플릿이 통합되어 있습니다. 결과는 자동으로 보고될 수 있으며, 일관된 포맷으로 관련 상세 정보를 빠르게 검토할 수 있습니다(그림 7). 보고서 템플릿은 Microsoft Word에서 편집할 수 있습니다.

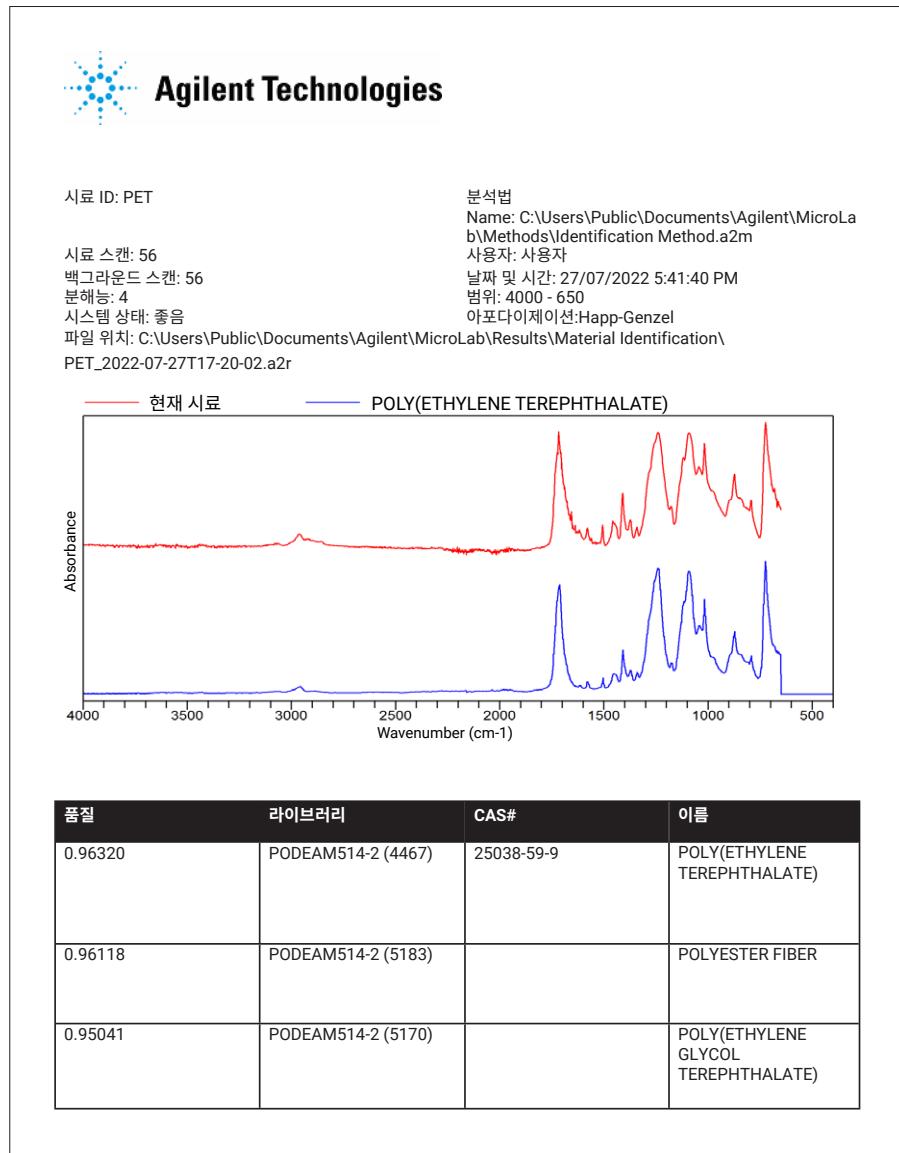
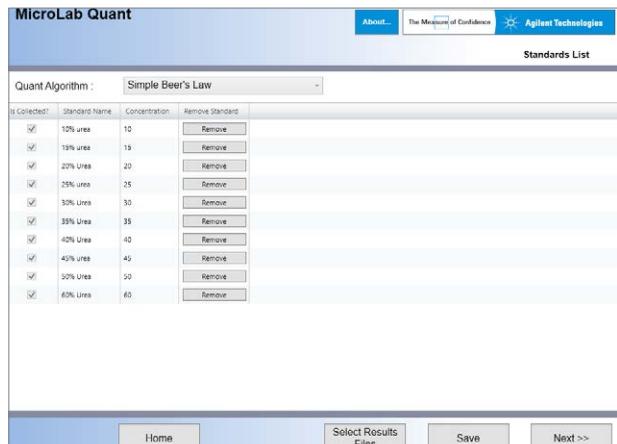


그림 7. MicroLab 소프트웨어를 사용하여 생성된 결과 보고서. 분석된 시료의 모든 관련 내용을 생성된 보고서에서 기록 보관용으로 캡처할 수 있습니다.

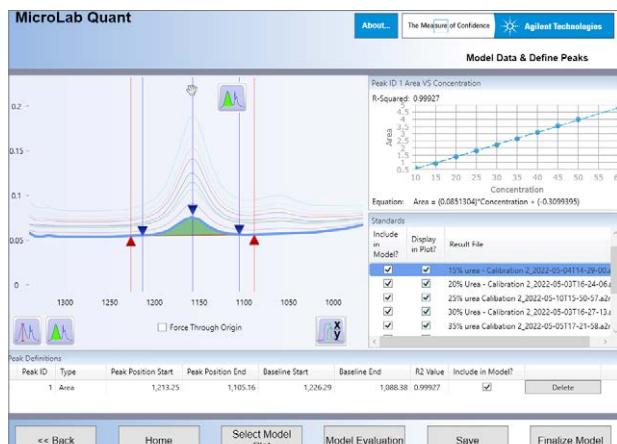
MicroLab Quant

MicroLab Quant는 다른 MicroLab 소프트웨어 제품군과 동일한 단계별 지침을 제공하며 빠르고 간단한 소프트웨어 경험을 정량 응용을 위한 모델 개발로 확장합니다(그림 8). 원활한 데이터 통합을 통해 MicroLab PC, MicroLab Lite 및 MicroLab Quant에서 IR 스펙트럼 및 정량 모델을 쉽게 사용할 수 있습니다.

1 표준물질 선택 및 농도 입력



2 피크 정의 및 검량 최적화



3 모델을 완성하여 MicroLab에서 사용



그림 8. 정량 모델 개발을 위한 MicroLab Quant 소프트웨어의 쉬운 단계.

MicroLab Quant

- 대화형 소프트웨어 인터페이스를 통해 빠르고 쉽게 Quant 모델을 생성하고 최적화할 수 있습니다 (그림 9)
- 직접적인 피드백은 상관 관계 그래프에 대한 변경의 영향을 보여줍니다
- 정량 모델은 교차 또는 독립적인 시료 검증을 통해 평가할 수 있습니다(그림 10)



그림 9. MicroLab Quant를 사용한 DialPath 샘플링 모듈의 선형성 평가. 검량선 및 상관 계수 계산은 소프트웨어에서 자동으로 수행됩니다.

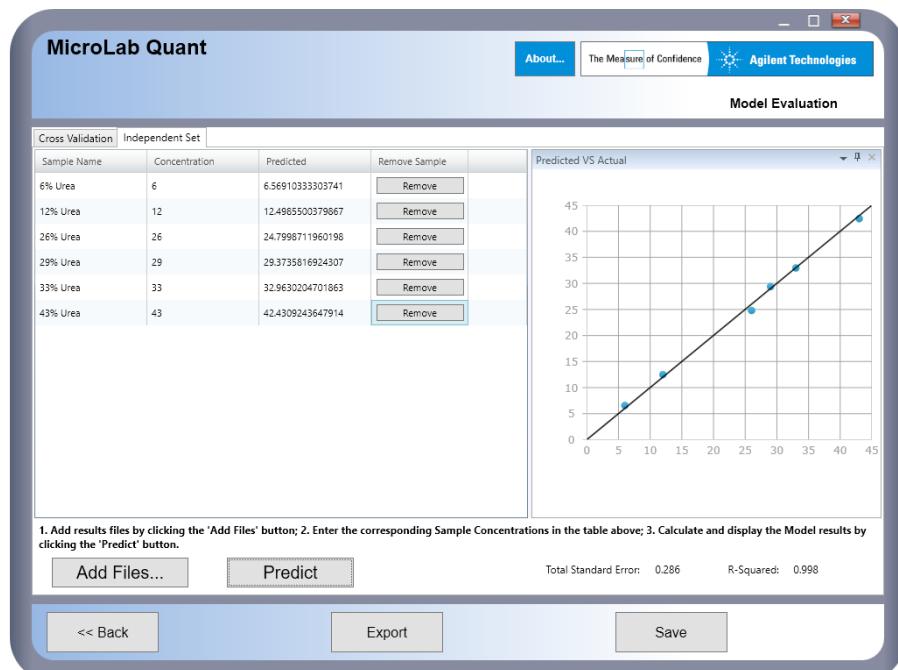


그림 10. 또한 MicroLab Quant 응용을 사용하여 사용자가 교차 검증을 통해 또는 별도의 시료 세트와 비교하여 개발된 정량 모듈을 평가할 수 있습니다.

MicroLab OQ

기기 성능 제어는 의도한 분석에 기기가 적합하는지 검증하는 데 중요한 요인입니다. MicroLab OQ를 사용하면 사용자는 기기 성능 검사를 쉽게 수행하여 기기 상태가 양호한지 확인할 수 있습니다.

MicroLab OQ에는 적격성 평가 프로세스를 안내하는 직관적인 그림 인터페이스가 있습니다.

1 기기 성능 테스트 선택

MicroLab OQ *Operational Qualification of System Performance*

User: User
Status: Ready Method: LaserFreqCalTest_ATR

Performance (Signal-to-noise)
Number of Tests: 15

Stability Test
Number of Minutes: 30

Laser Frequency Calibration Check
This test is performed using: Polystyrene
Number of Runs: 5

Spectral Resolution Check
This test is performed using: Polystyrene
Number of Runs: 5

Please press the Next button to initiate testing

Home < Back Next >

2 각 테스트를 통한 MicroLab OQ 안내

MicroLab OQ

User: User
Status: Ready Method: PerformanceTest

Prepare compartment for background then close compartment



Home Next >

3 성능 테스트 요약 검토

MicroLab OQ

User: User
Status: Ready Method: LaserFreqCalTest_ATR

Results Summary

Diagnostics Verification - PASS

Performance Test SNR - PASS

Stability Test - PASS

Laser Frequency Calibration Check - PASS

Spectral Resolution Check - PASS

Select the individual test above to view the results

Operation Performance Qualification: PASS

Exit

그림 11. MicroLab OQ는 단순하고 쉬운 단계를 거쳐 기기의 적격성을 평가하도록 안내합니다.

마지막 단계에서 MicroLab OQ가 진단 값, 테스트 결과, 그리고 향후 참조를 위한 테스트 사양과 합격/불합격 기준을 보여주는 PDF 보고서를 생성합니다(그림 12).

Agilent Technologies

Cary 630 OQ
운영 적격성 평가

이 보고서는 21 CFR 11 환경에서 생성되었습니다

시스템 정보

PC/워크스테이션 이름: DESKTOP-ENM90U7
소프트웨어 버전: MicroLab PC(21CFR11): 5.7.
설정값: 1.96.00.0
사리번 번호: MY2109CU05

보고서 정보

작성자: 새 그룹내 프로젝트 사용자
생성 일자: 7/7/2022 9:05 PM
생성 GMT 일자: 7/7/2022 5:05 AM

사용자 이름: 새 그룹내 프로젝트 사용자
연락 정보 장치: ZnSe
생물학적 모듈: 무과 셀
Qual 날짜/시간: 7/7/2022 9:05 PM
보고서 파일 이름: C:\Users\Public\Documents\Agilent\Microl_ab\OQ\2022-07-07T09-05-07.pdf
데이터 파일 이름: DESKTOP-ENM90U7\SOLEXPRESSIVAMDB_Public000\OQ\2022-07-07T21-05-07.xls

액세서리

액세서리: 무과 셀(Primary)
사람: 144 1000#
설문형 모듈: 무과 셀
Gain: 205#
에너지 레벨: 27577#

Agilent Technologies

신호 대 잡음비 테스트

테스트 횟수: 15
시간 @ 1142-1042: 25000 이상
측정값: 38037

안정성 테스트

시간(분): 30
시간: <1%
측정 편차: 0.068%

파수 정확도 테스트

분석 횟수: 5

Spec. 편차:	906.6	1028.3	1154.5	1583.0
측정값:	906.7	1028.4	1154.6	1583.1
Spec. 정확도:	±1.0	±1.0	±1.0	±1.0
측정 정확도:	0.1	0.1	0.1	0.1
Spec. 번복성:	±0.05	±0.05	±0.05	±0.05
측정 번복성:	0.00	0.00	0.01	0.01

Spec. 편차:	1601.2	2849.5	3060.0
측정값:	1601.1	2849.9	3059.9
Spec. 정확도:	±1.0	±1.0	±1.0
측정 정확도:	0.1	0.4	0.1
Spec. 번복성:	±0.05	±0.05	±0.05
측정 번복성:	0.01	0.01	0.01

Agilent Technologies

스펙트럼 분해능 테스트

분석 횟수: 5

최대 흡수점:	2849.50 cm ⁻¹	최소 흡수점:	2870.00 cm ⁻¹
측정 차(Abs):	0.43	측정 차(Abs):	> 0.33
최대 흡수점:	1593.00 cm ⁻¹	최소 흡수점:	1589.00 cm ⁻¹
측정 차(Abs):	0.10	측정 차(Abs):	> 0.08

Agilent Technologies

E-Signature

** 확인된 주석 **

권한: 서명
자동화 ID: (CBP2826F-6864-4BC3-808B-B852A71F)

한자 날짜 및 시간: 7/7/2022 1:22:37 PM
GMT 날짜 및 시간: 7/8/2022 6:22:37 AM
유형: MicroLab OQ
워크스테이션 이름: DESKTOP-ENM90U7
사용자: 새 그룹내 프로젝트 사용자
사용자 이름: 사용자
사용자 설명:
기기 사리번 번호: MY2109CU05
** 확인된 주석 **

그림 12. MicroLab OQ를 사용하여 생성된 OQ(Operational Qualification) 보고서. 이해하기 쉬운 합격/불합격 결과와 함께 모든 테스트 파라미터가 포함된 결과가 보고됩니다.

추가 정보:

www.agilent.com/chem/MicroLab

온라인 구매:

www.agilent.com/chem/store

Agilent Community에서 기술적 질문에
대한 해답을 얻고 리소스에 액세스하세요.

community.agilent.com

미국 및 캐나다

1-800-227-9770

agilent_inquiries@agilent.com

유럽

info_agilent@agilent.com

아시아 태평양

inquiry_lsca@agilent.com

RA44713.4331018518

이 정보는 사진 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2022

2022년 8월 1일, 한국에서 발행

5994-5139KO

한국애질런트테크놀로지스(주)
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 에셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com

