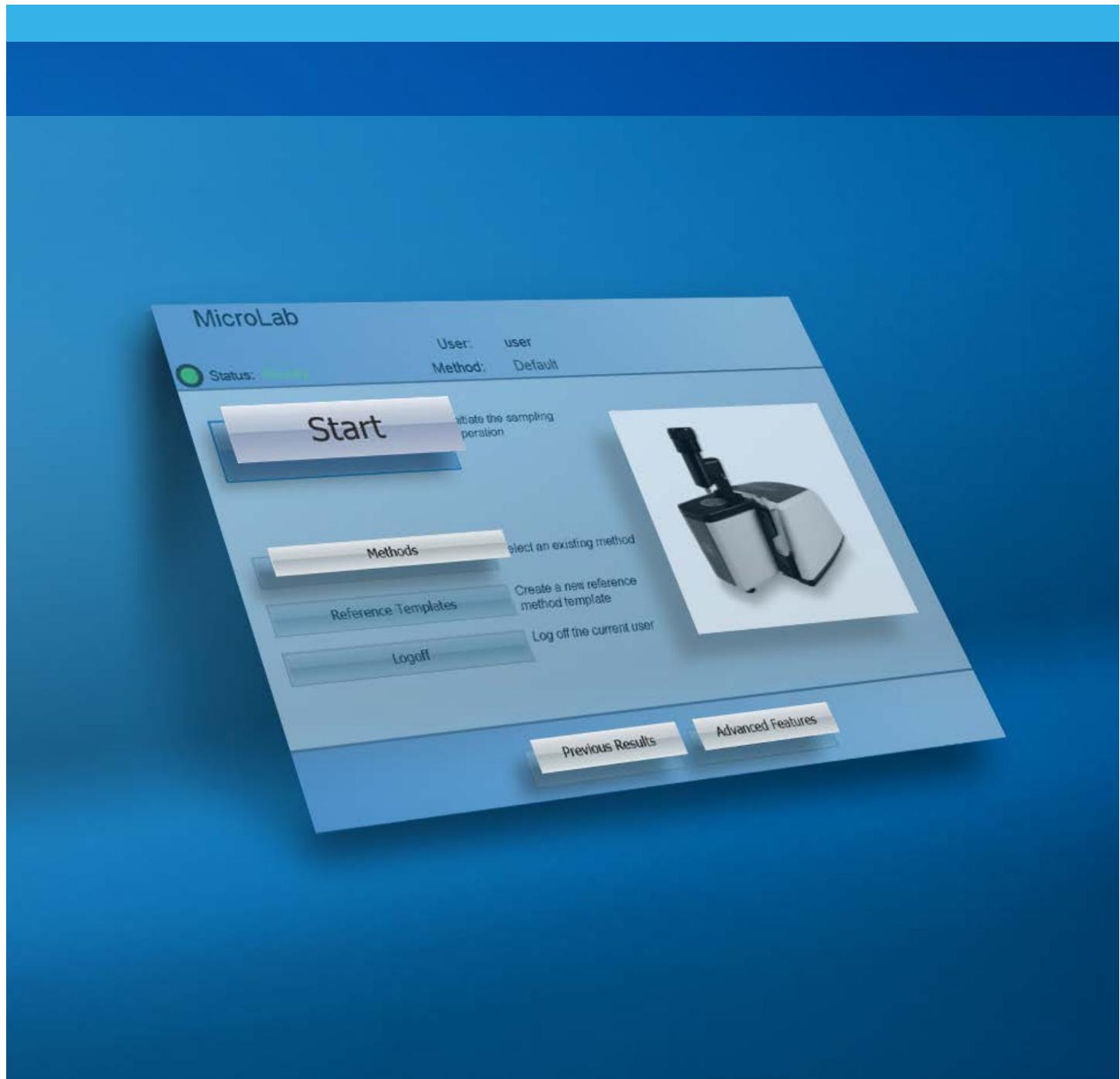


# FTIR 分析化繁为简

Agilent MicroLab 软件



# MicroLab 软件

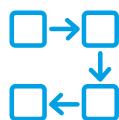
傅立叶变换红外光谱  
(FTIR) 是一种用于样品材  
料鉴定和组分定量的快  
速、简单且可靠的技术。



安捷伦提供一系列的 FTIR 仪器，从用于现场应用的灵活手持式 FTIR 光谱仪和耐用的便携式 FTIR 分析仪，到用于常规测试和前沿研究的可靠台式 FTIR 仪器。安捷伦 FTIR 光谱仪之所以独特，在一定程度上是因为随附的软件包或操作界面。任何技术水平的用户都可以将 Agilent MicroLab 软件用于常规应用，从未知材料鉴定和表征到详细的定量分析。



## MicroLab 软件功能



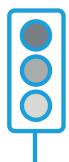
通过指导性图片和直观的软件设计逐步引导用户轻松完成整个工作流程，缩短培训时间，减少用户错误。



MicroLab 会自动识别连接的仪器以及所安装的采样附件。



软件会直接采用正确的参数并显示相关图片。可为每种方法定义可用模块。



消除常规工作流程数据解析的困扰：采集数据后，软件会直接提供彩色标记的有指导意义的结果，从而简化数据解析。



快速、简单的软件体验加速定量应用的模型开发：MicroLab Quant 软件可分为专家和非专家建立定量模型提供逐步式引导，并在优化模型时提供即时反馈。



报告所有相关结果：MicroLab 包含预定义和可自定义的报告模板。结果可自动生成报告，一致的格式有助于快速查看相关细节。

## MicroLab 软件包

为了打造尽可能简单的 MicroLab 软件使用体验，  
MicroLab 软件套装包括四个单独的应用程序，  
专为方便具体任务而设计：



### MicroLab PC

是由方法驱动的软件，  
使用预定义方法采集  
和分析数据。

### MicroLab Lite

软件用于离线审查  
和分析 FTIR 数据。

### MicroLab Quant

用于轻松开发和验证  
定量模型。

### MicroLab OQ

自动操作确认 (OQ)  
软件，可用于仪器  
性能的常规验证。

当需要更复杂的数据处理、可视化和分析工具时，  
可选的 **Agilent MicroLab Expert** 软件是理想之选。

作为额外的软件解决方案，**Agilent MicroLab Pharma** 软件支持用户管理用户权限，同时管理电子记录的安全存储。该软件还可帮助您遵循 US FDA 21 CFR Part 11、欧盟附录 11 及类似的国家电子记录法规的要求。

# 使用 MicroLab PC 和 MicroLab Lite 寻找答案

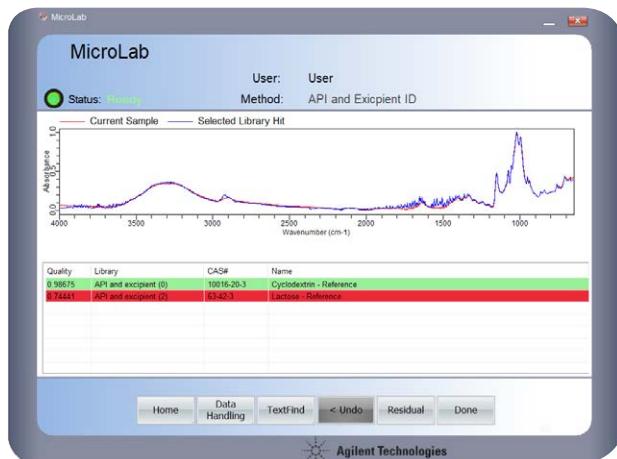


## 软件方法类型

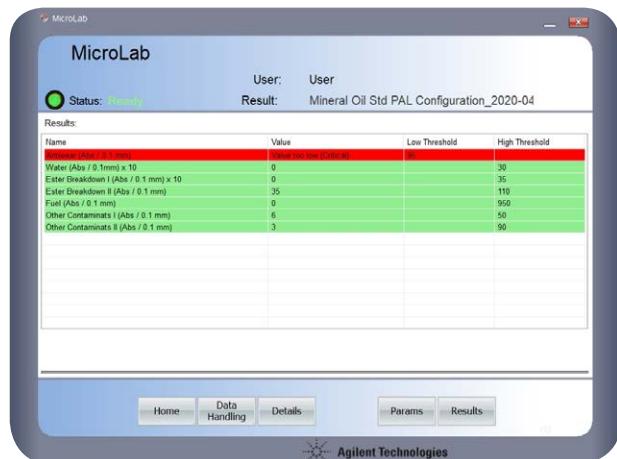
MicroLab 软件采用的是基于方法的方案。方法设置完成后，系统将转变为一站式解决方案。

三种不同方法类型涵盖了最重要的分析问题：

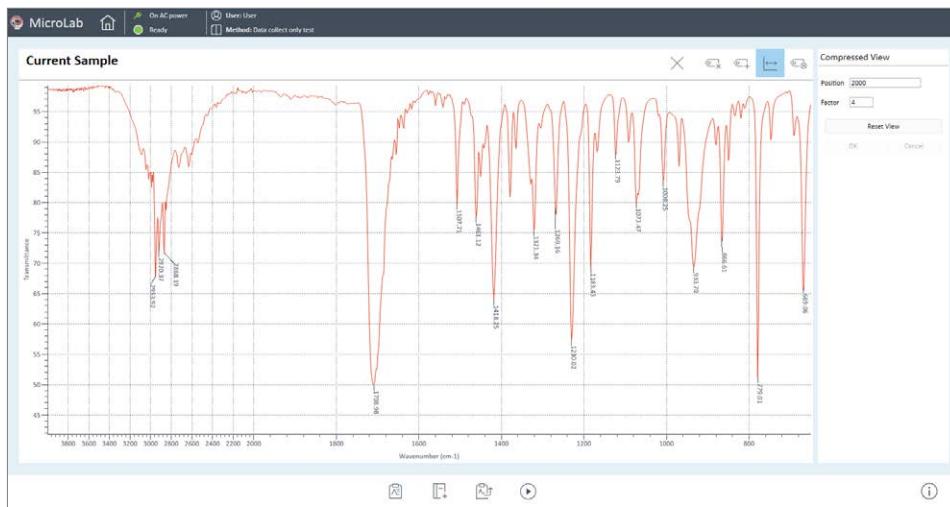
### 鉴定



### 定量分析



### 谱图分析



## MicroLab PC 和 MicroLab Lite

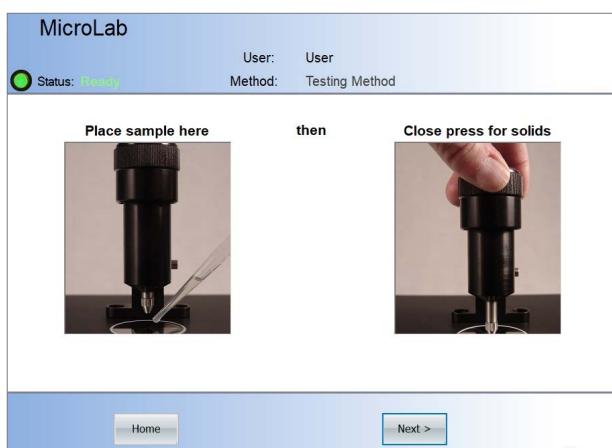
### 1 开始分析



只需单击即可启动图片引导式工作流程，引导用户完成每一步分析。该软件可以识别使用的仪器和采样接口，并显示相关图像。

采集数据后，MicroLab 可进行所有计算并显示简单明了的结果，即使是新手用户也能理解。MicroLab 软件根据方法的临界阈值和边际阈值设置提供颜色标记的结果，在数据采集后直接报告，如图 1 所示。

### 2 按照图片式向导软件的指导进行操作



### 3 即刻获得彩色标记的有指导意义的结果

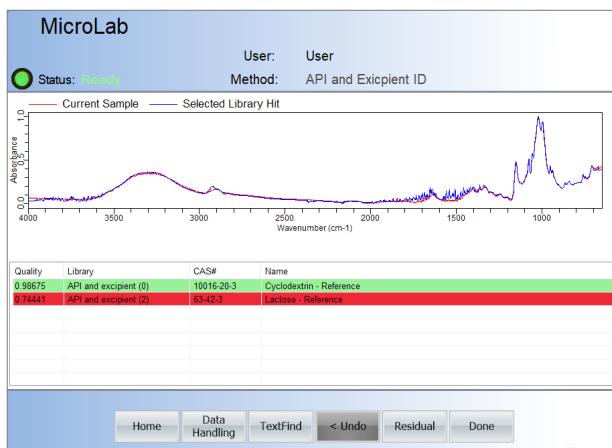


图 1. 使用 Agilent MicroLab 软件和安捷伦 FTIR 光谱仪，通过三个简单的步骤简化分析，并减少培训需求

### 鉴定应用

MicroLab 会自动将采集到的光谱与光谱库进行比较，并找到最佳的谱图匹配。为了便于解析，可以根据置信水平应用颜色标记（图 2）。

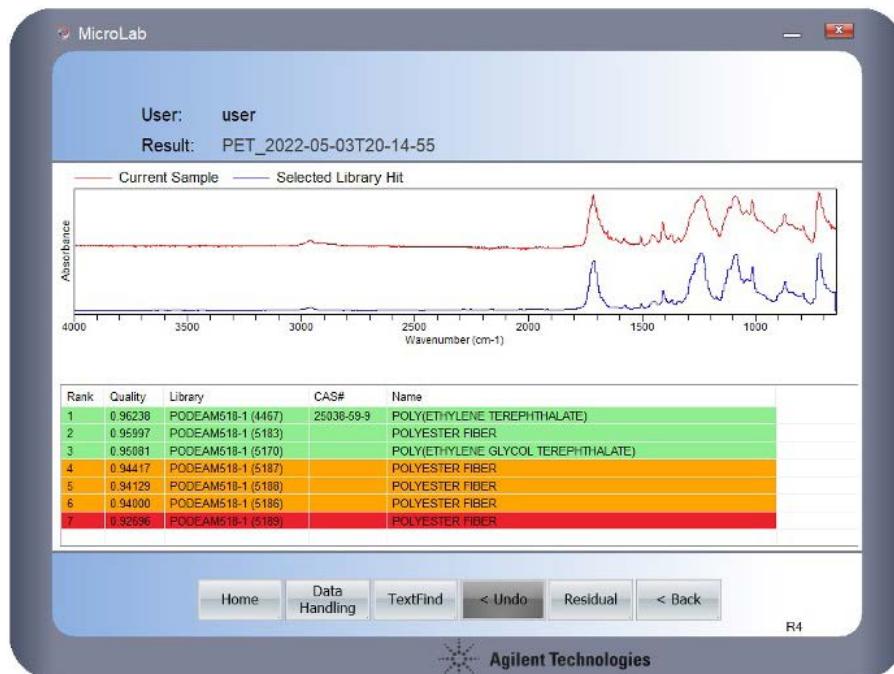


图 2. 通过显示与参比谱图的高质量匹配，对样品进行定性确认

在 MicroLab 软件中可以轻松使用谱库。

- 安捷伦可为特定应用提供现成谱库
- 用户可以在数秒内创建自定义谱库

可以根据具体的鉴定应用定制谱库搜索。

- 可以同时检索多个谱库，如一个含有参比标样的谱库，用于鉴定样品；另一个含有超标样品的谱库，用于鉴定重复出现的问题
- 有多种检索算法可供选择
- 特定光谱范围可以不纳入分析
- 最小匹配质量指标 (HQI) 以及最大匹配结果数设置确保只呈现相关谱库匹配结果
- 基于 HQI 的颜色标记结果可用于定义置信水平

应用示例包括：

- 快速确认原材料和成品的纯度
- 使用谱库快速鉴别溶剂、表面活性剂、特种胺类或工业有机化学品
- 鉴定查获的未知样品中的麻醉剂类似物

采用易于理解的方式展示结果，让鉴定变得简单。

## MicroLab PC 和 MicroLab Lite

用于检测时，所有结果窗口将清晰显示相关的安全和危害信息（图 3）。可以访问更多详细信息，包括用户可编辑的定制信息部分（图 4）。

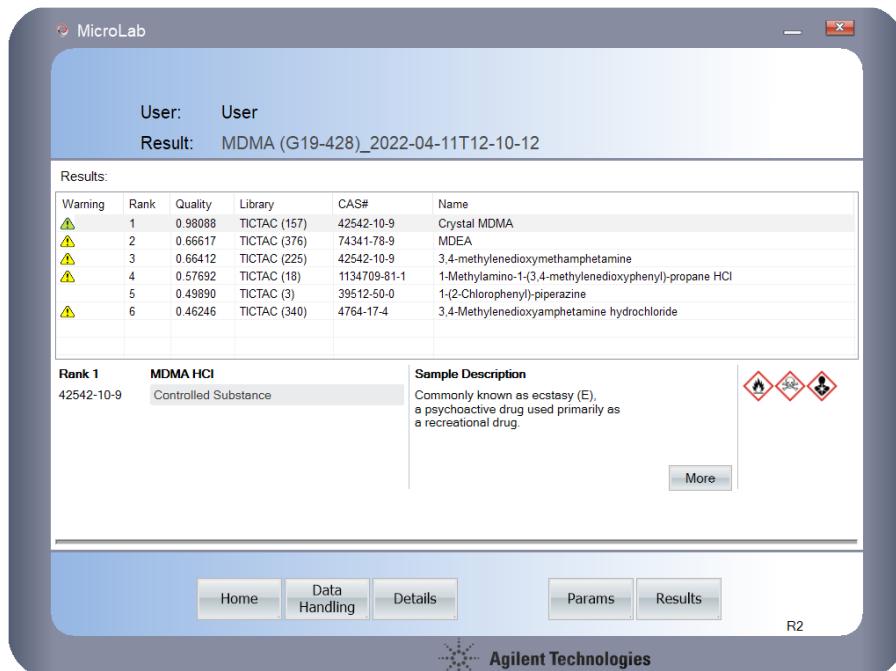


图 3. 选定谱库匹配结果的安全和危害信息，包括 CAS 号、GHS 符号、警告标志（适用于管制药物）和简短的样品描述

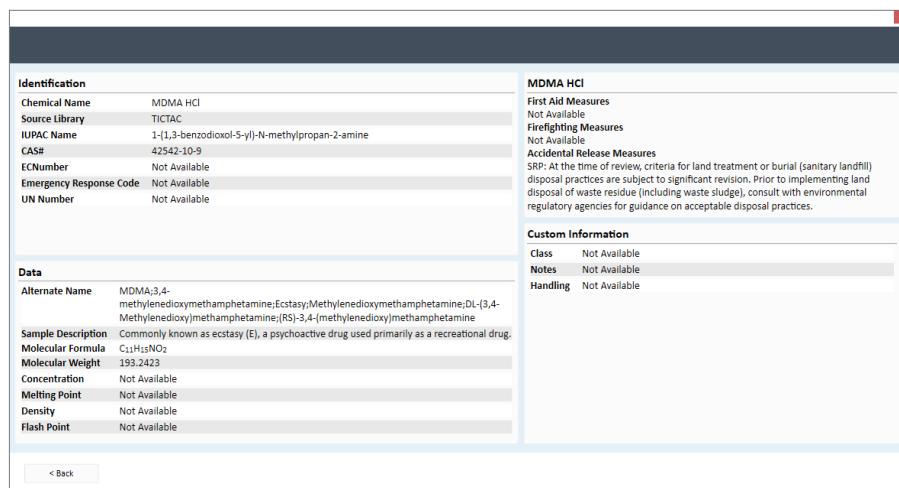


图 4. 其他化学和应急响应信息。可编辑的定制信息部分提供了进一步的具体用户指导

### 定量应用

MicroLab 支持用户通过一次 FTIR 测量来定量样品中的多种组分。使用 MicroLab Quant 可轻松创建基础定量模型。如需采用更全面的化学计量学模型，MicroLab 也支持使用在 MicroLab Expert 中开发的预测模型。

- 借助 MicroLab 独特的逻辑设置功能，仅相关结果才会显示
- 根据用户定义的标准对结果进行颜色标记（红色、黄色、绿色），具有出色的灵活性
- MicroLab 可进行所有计算并立即提供经颜色标记的实用结果和后续指导

### - 应用示例包括：

- 准确测量已知添加剂的含量，以确保符合制造商的规格要求
- 确保配方中的精细化学品以恰当比例混合
- 使用透射 FTIR 快速、简单、可靠地测量液体样品

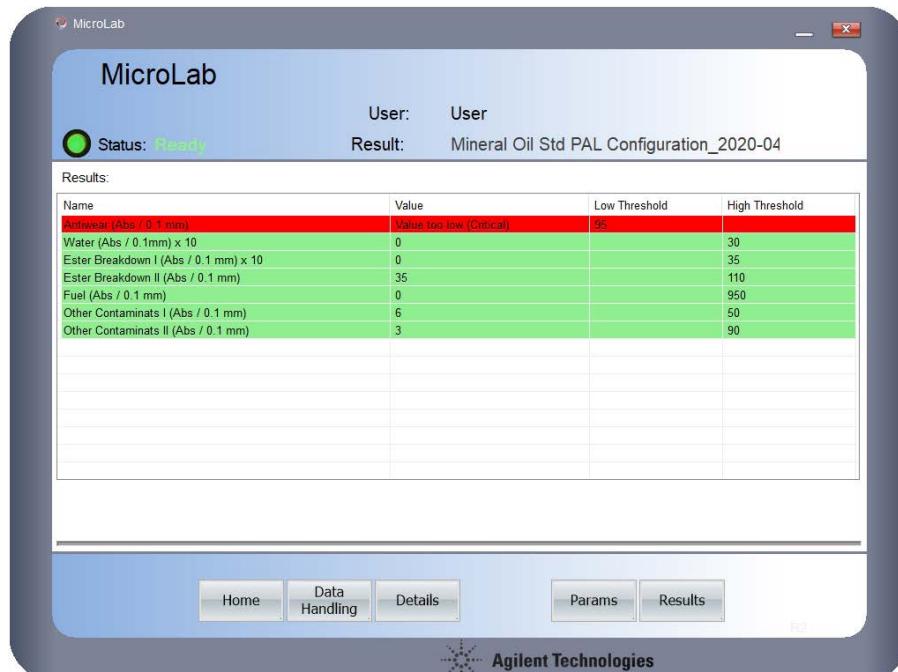


图 5. MicroLab 软件自动执行所有计算，并显示颜色标记的最终结果，便于查看

### 采集和查看红外光谱

MicroLab 还可以用来采集和查看样品的红外 (IR) 光谱。IR 光谱可以提供有价值的信息，例如官能团的存在。

- MicroLab 支持用户更改波数比例因子，以便更详细地分析目标光谱范围
- 可以标记谱带以进行报告，或与文献值进行比较（图 6）



图 6. MicroLab 软件支持操作人员采集、查看和重新分析样品的红外光谱，并具备报告功能

### 报告所有结果

MicroLab PC 和 Lite 包含预定义和可自定义的报告模板。结果可自动生成报告，一致的格式有助于快速查看相关细节（图 7）。可以使用 Microsoft Word 编辑报告模板。

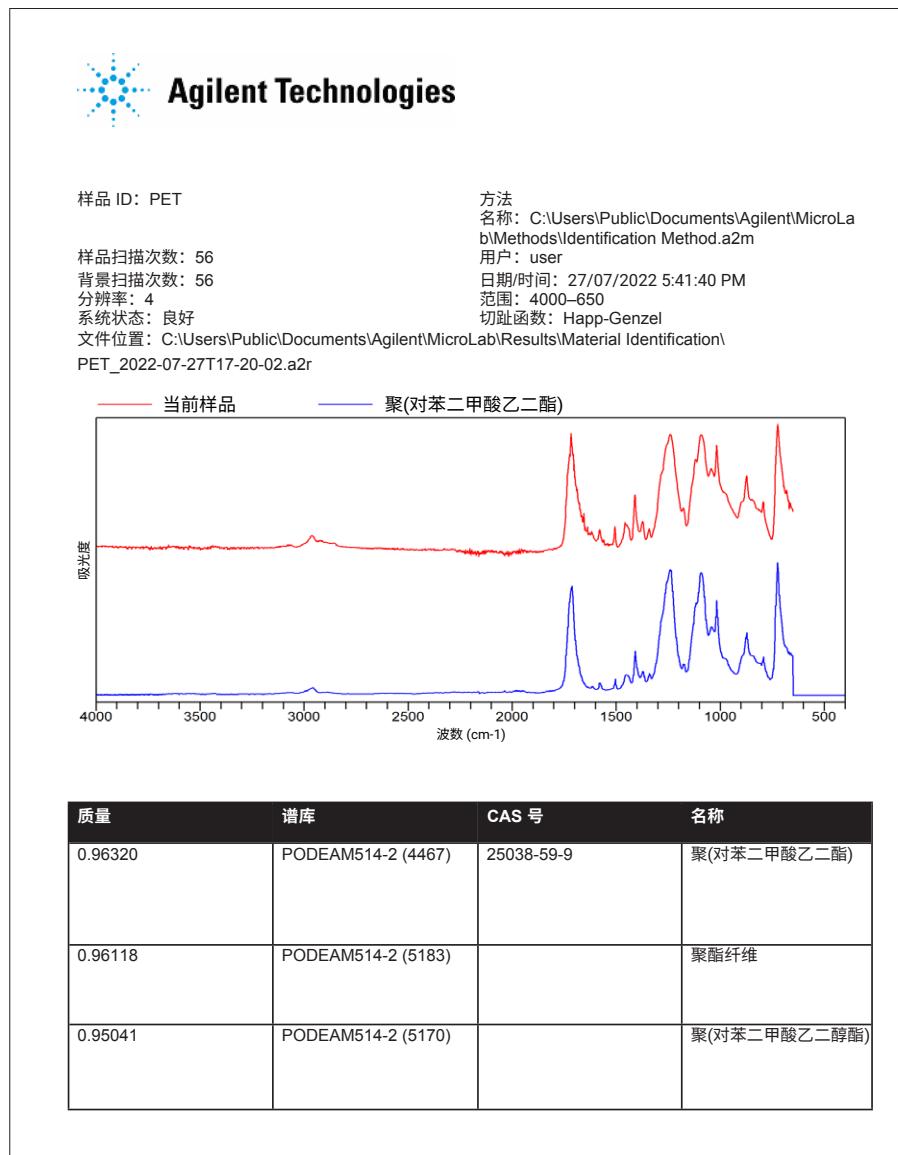
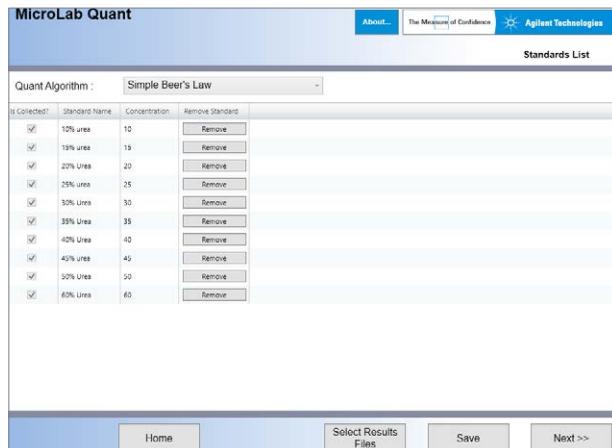


图 7. 使用 MicroLab 软件生成的结果报告。生成的报告可以汇集所分析样品的所有相关信息，以便保存记录。

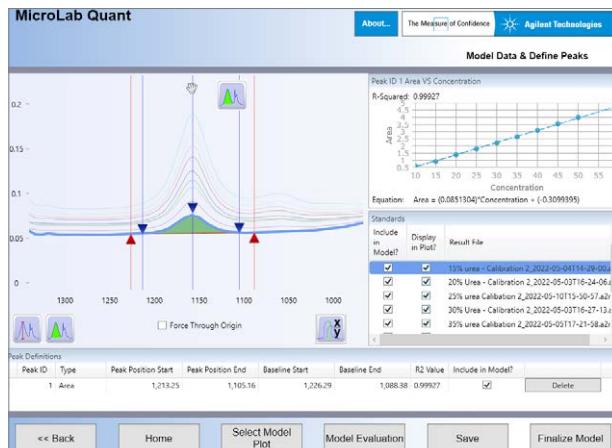
# MicroLab Quant

与其他 MicroLab 系列软件一样，MicroLab Quant 也具备逐步引导功能，可将快速、简单的软件体验扩展到定量应用的模型开发（图 8）。无缝数据整合支持在 MicroLab PC、MicroLab Lite 和 MicroLab Quant 中轻松使用 IR 光谱和定量模型。

## 1 选择标准品，然后输入浓度



## 2 定义峰并优化校准



## 3 最终确定模型并用于 MicroLab



图 8. MicroLab Quant 软件只需轻松几步即可开发定量模型

## MicroLab Quant

- 交互式软件界面支持快速轻松地创建和优化定量模型 (图 9)
- 直接反馈可显示任何变化对关联图表的影响
- 通过交叉或独立样品验证，可以评估定量模型 (图 10)



图 9. 使用 MicroLab Quant 对 DialPath 采样附件进行线性评估。在软件中自动执行校准曲线和相关系数计算

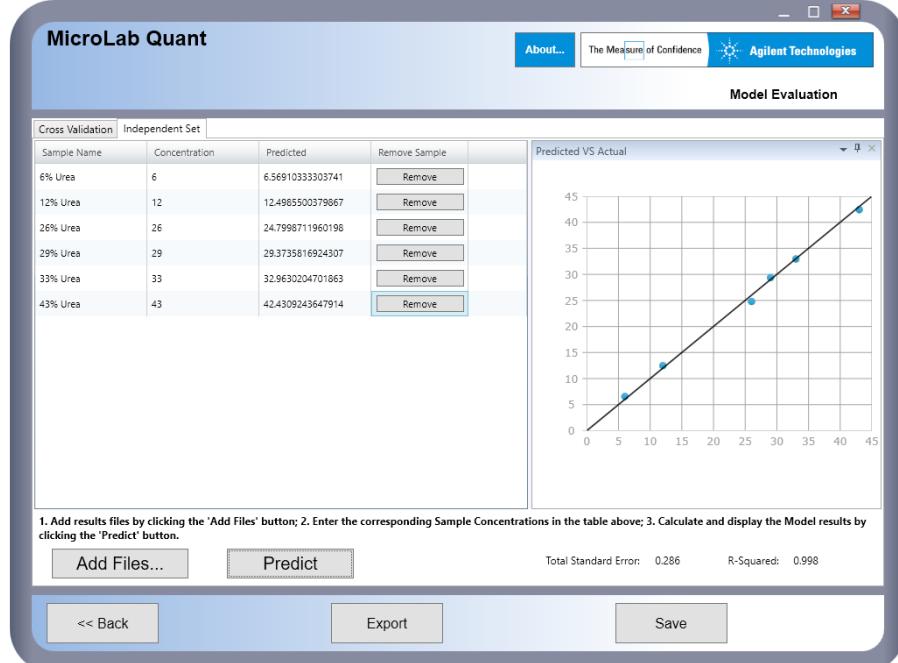


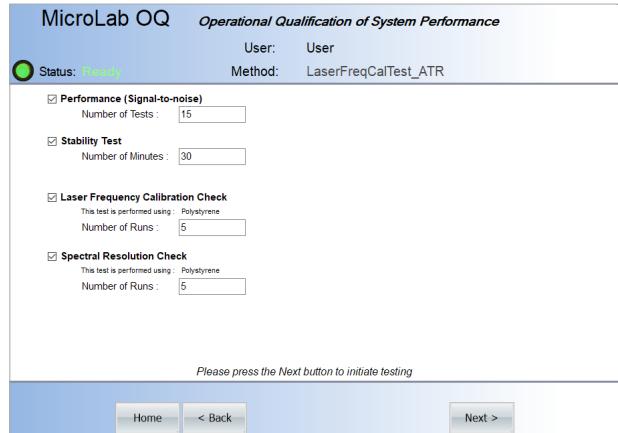
图 10. MicroLab Quant 应用程序也支持用户通过交叉验证或单独样品组对比，对开发的定量模型进行评估

# MicroLab OQ

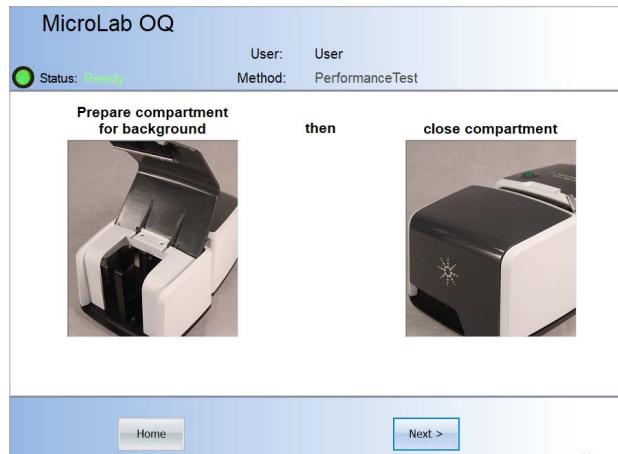
仪器性能的控制是确认仪器是否适用于预期分析的关键考虑因素。MicroLab OQ 支持用户轻松执行仪器性能检查，确保仪器处于良好状态。

MicroLab OQ 具有直观的图形化界面，可引导用户完成确认流程。

## 1 选择仪器性能测试



## 2 MicroLab OQ 引导开展各项测试



## 3 查看性能测试汇总

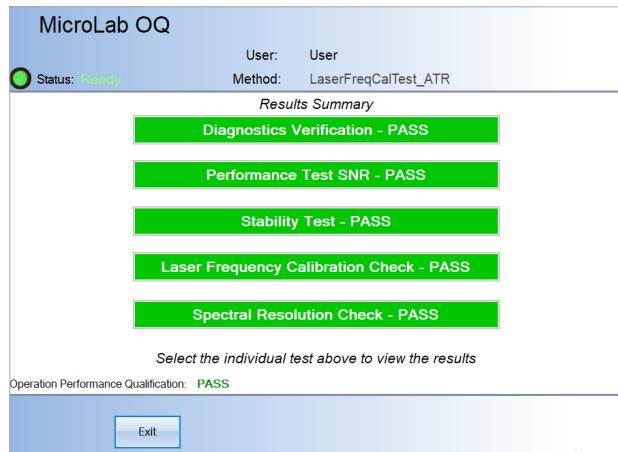


图 11. MicroLab OQ 引导用户通过简单易行的步骤进行仪器确认

最后一步，MicroLab OQ 生成 PDF 报告，其中显示诊断值、测试结果、测试指标以及合格/不合格标准，以备将来参考（图 12）。

**Cary 630 OQ**

**操作确认**

本报告根据 21 CFR 11 环境法规的要求生成

**系统信息**

PC/工作站 ID: DESKTOP-ENNM90U7  
软件版本: MicroLab PC (21CFR11):5.7.  
序列号: MY2109C005

**报告信息**

生成者: New group\New project\user  
生成日期: 7/7/2022 9:05 PM  
生成日期 (GMT): 7/7/2022 5:05 AM

用户名: New group\New project\user  
主机名: ZnSe  
采样附件: 透射池  
确认日期/时间: 7/7/2022 9:05 PM  
报告文件名: C:\Program Files\Agilent\Agilent MicroLab\Public\Documents\Agilent\MicroLab\IQOQ\2022-07-07T09-05-07.pdf  
数据文件名: DESKTOP-ENNM90U7\SQLEXPRESS\AIMDB\_Public\000\IQOQ\2022-07T21-05-07.azk

**附件**

附件: 透射池 (初始)  
序号: 14410003  
采样附件: 透射池  
报告: 透射池  
施加: 27577

**Agilent Technologies**

**信噪比测试**

测试次数: 15  
1142-1042 下的的规定值: > 25000  
测定值: 38037

**稳定性测试**

分钟数: 30  
规定值: < 1%  
偏差测定值: 0.068%

**波数准确度测试**

运行次数: 5

| 波数规定值:  | 906.6 | 1028.3 | 1154.5 | 1583.0 |
|---------|-------|--------|--------|--------|
| 测定值:    | 906.7 | 1028.4 | 1154.6 | 1583.1 |
| 准确度规定值: | ±1.0  | ±1.0   | ±1.0   | ±1.0   |
| 准确度测定值: | 0.1   | 0.1    | 0.1    | 0.1    |
| 重现性规定值: | ±0.05 | ±0.05  | ±0.05  | ±0.05  |
| 重现性测定值: | 0.00  | 0.00   | 0.01   | 0.01   |

| 波数规定值:  | 1601.2 | 2849.5 | 3060.0 |
|---------|--------|--------|--------|
| 测定值:    | 1601.1 | 2849.9 | 3059.9 |
| 准确度规定值: | ±1.0   | ±1.0   | ±1.0   |
| 准确度测定值: | 0.1    | 0.4    | 0.1    |
| 重现性规定值: | ±0.05  | ±0.05  | ±0.05  |
| 重现性测定值: | 0.01   | 0.01   | 0.01   |

**光谱分辨率测试**

运行次数: 5

**合格**

最大吸光度对应波长: 2849.50 cm<sup>-1</sup>  
最小吸光度对应波长: 2870.00 cm<sup>-1</sup>  
差值规定值 (Abs): 0.43  
差值测定值 (Abs): > 0.34

最大吸光度对应波长: 1533.00 cm<sup>-1</sup>  
最小吸光度对应波长: 1589.00 cm<sup>-1</sup>  
差值规定值 (Abs): 0.10  
差值测定值 (Abs): > 0.08

**Agilent Technologies**

**电子电子签名**

\*\*经验的标注\*\*

权限: 签名  
授权 ID: C992826F-B684-4BC3-808D8852A71F

本地日期和时间: 7/7/2022 11:22:37 PM  
GMT 日期和时间: 7/8/2022 6:22:37 AM  
应用软件: MicroLab IQ/OQ  
工作站名称: DESKTOP-ENNM90U7  
用户: New group\New project\user  
用户名: user  
用户名: user  
仪器序列号: MY2109C005  
\*\*经验的标注\*\*

图 12. 使用 MicroLab OQ 生成的操作确认 (OQ) 报告。报告所有测试参数的结果以及易读的合格/不合格结果

了解更多信息：

[www.agilent.com/chem/MicroLab](http://www.agilent.com/chem/MicroLab)

如需获取技术问题的答案和安捷伦社区的资源，

请访问：

[community.agilent.com](http://community.agilent.com)

安捷伦客户服务中心：

免费专线：**800-820-3278**

**400-820-3278** (手机用户)

联系我们：

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价：

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

RA44713.4331018518

本文中的信息、说明和指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司, 2022

2022年8月1日, 中国出版

5994-5139ZHCN

