

用于原辅料鉴定的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪

使用用于 FTIR 的 Agilent MicroLab 软件对不同样品类型的分析执行快速、简单、可靠的工作流程



作者

Wesam Alwan 和
Fabian Zieschang
安捷伦科技有限公司

简介

原辅料鉴定是一项重要的质量保证或安全控制分析措施，广泛用于多种应用和行业中。确认收到的原料身份，有助于避免将受污染、假冒及标签错误的原辅料用于生产流程。分析可确保最终产品符合预期用途所需的质量和纯度。确认最终产品的身份也同样重要，以避免产品出现包装和标签错误。因此，许多行业标准（如世界上多数药典）中都规定了原辅料鉴定这一要求。

傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 广泛用于原辅料鉴定研究，且大多数药典指定采用该方法进行原辅料鉴定。通过这项功能强大的技术，用户可以快速轻松地完成可靠实验，从而快速鉴定化合物身份。

Cary 635 FTIR
同样适用

同样的方法
同等或更好的结果



采用合适的分析技术鉴定未知化合物的身份，有助于调查污染或生产问题。该分析方法也可用于鉴定危险或违禁物质（如毒素、爆炸物或街头毒品），并将其告知急救人员和执法人员。

鉴于数据的有用性，许多非专业用户也会对多种样品常规采用原辅料鉴定工作流程。因此，重要的是这一分析手段快速、简便且可靠，分析结果易于理解，没有误解风险。

Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪是一款性能出色、体积小巧的多用途台式仪器（图 1）。其模块化设计支持实验室对分析进行配置，可用于多种样品类型和 FTIR 应用。Cary 630 FTIR 的可更换采样接口包括透射、DialPath、Tumbler、钻石晶体全反射 (ATR)、锗晶体 ATR、硒化锌 ATR、反射硒化锌 ATR、镜面反射和漫反射接口。

Cary 630 FTIR 光谱仪采用 Agilent MicroLab 软件控制，该软件通过可视化界面，指导用户开展从样品引入到报告生成的各个分析步骤。这款软件可自动检测安装的采样附件、应用所需设置并加载相应采样附件的指示图。最终结果采用颜色标识，帮助用户解析数据并采取适当行动。



图 1. 配备钻石晶体 ATR 采样附件的 Agilent Cary 630 FTIR 用于鉴定不同粉末的身份

本技术概述总结了采用 FTIR 进行原辅料鉴定的不同方法。提供的示例展示了 Cary 630 FTIR 与 MicroLab 软件如何用于对不同样品类型实施快速、简便、可靠的原辅料鉴定工作流程。



图 2. 直观的 Agilent MicroLab 软件工作流程使 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪可轻松找到答案。图片式向导软件减少了培训需求，同时尽可能降低用户引起错误的风险

鉴定未知物质或确认样品身份的方法

谱库搜索

每种物质都有独特的红外光谱（光学异构体及长链烷烃同系物等化合物除外），可以作为该物质的指纹图谱。将未知样品的红外光谱与已知化合物的谱库进行对比，可以鉴定未知样品（如果未知样品在该谱库中），如图 3 所示。通过“指纹图谱”匹配谱库中的化合物光谱进行未知物质鉴定的方法，称为阳性鉴定。

谱库中包含了数十、上百甚至上千张光谱。通过手动比较这些光谱来找到最佳匹配，并不可行。因此，相关人员开发了检索算法来自动鉴定最佳匹配。确认原辅料身份，并不一定需要包括大量光谱的大型谱库。仅包括可能原辅料光谱的小型谱库通常足以用于预期应用。无论谱库大小如何，谱库检索算法通过使用“匹配”身份简化原辅料确认。

针对每个谱库项目，都会自动计算匹配质量指标 (HQI)。HQI 值表示所测光谱与谱库谱图的匹配程度。在原辅料鉴定和确认工作流程中，HQI 通常用作合格/不合格标准。

使用 Agilent MicroLab 软件进行谱库检索

Cary 630 FTIR 光谱仪以及安捷伦移动式 and 手持式 FTIR 系统随附的 MicroLab 软件采用基于方法的方案。如下节所述，在设置好方法后，软件将 FTIR 系统转变为一站式解决方案，可以实现快速决策。

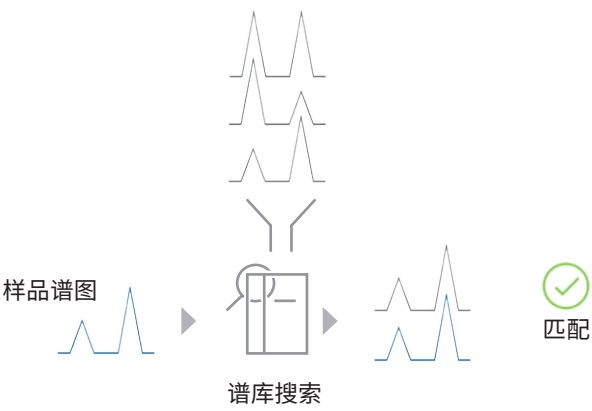


图 3. 将未知样品的 FTIR 光谱与已知化合物的光谱进行对比，即可鉴定未知化合物。该工作流程称为“谱库检索”，可以使用 Agilent MicroLab 软件自动执行

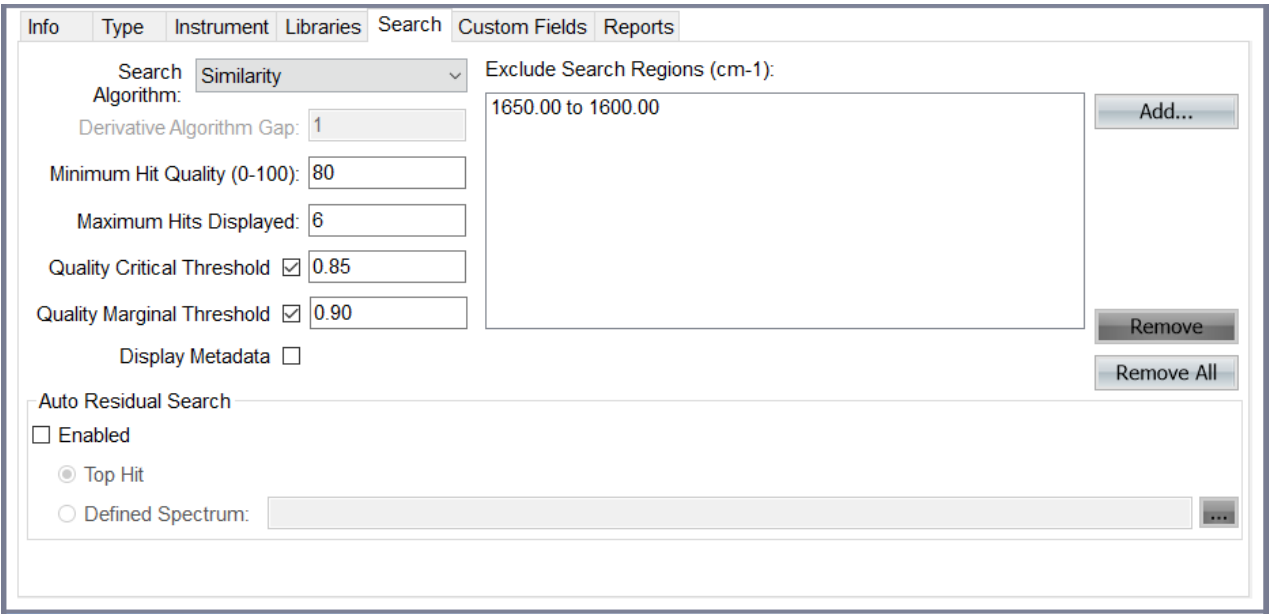


图 4. 在 Agilent MicroLab 软件中，可以根据具体的鉴定应用对谱库检索方法和检索参数进行定制。结果显示设置也可定制，以便轻松解析并报告结果

方法设置

在方法设置期间，谱库检索方法可根据鉴定应用进行定制：

- 可以同时检索多个谱库，如包括参比标样的谱库，用于鉴定样品；另一个包括超标样品的谱库，用于鉴定重复出现的问题
- 可用的检索算法有很多，包括欧氏距离、绝对值、导数绝对值、最小二乘、导数最小二乘、相关性、导数相关性、相似度、导数相似性、扩展相关性等
- 光谱范围可以不纳入分析
- 设定最小 HQI 以及最大匹配数量，确保仅呈现相关谱库匹配

- 基于 HQI 的结果颜色标记可用于定义置信水平，帮助用户解析结果，减少疏忽导致的错误
- 可以提供其他化合物特征信息（如危险信息）

执行分析

MicroLab 通过图片引导用户完成分析的各个步骤，包括采样（如固体样品如何使用 ATR 压头）和清洁流程（图 5）。点击软件主界面的**开始**按钮，开始分析。

完成数据采集后，软件将自动执行谱库检索，并以易于理解的结果呈现形式向用户提供最佳谱库匹配列表，如图 6 所示。



图 5. Agilent MicroLab 软件的图片指导界面简化了使用 Agilent Cary 630 FTIR 的分析，减少了培训需求。软件复制了操作人员使用仪器时看到的内容。完成数据采集后，会采用易于理解的形式直接显示结果，如图 6 和图 10 所示。用户检查完结果后，软件将开始下一个分析，确保分析工作流程的连续性



图 6. 在 Agilent MicroLab 软件中，可以采用易于理解的方式显示谱库检索结果，让非专业用户也能查看并解析结果。左图：谱库匹配数据仅以列表形式显示或以列表+谱图的形式显示。右图：此外，可以选择是否显示化学元数据，如危险信息和急救信息

谱库和谱库管理

谱库检索的质量主要取决于谱库的质量。安捷伦提供多种可与 MicroLab 软件配套使用的即用型特定应用谱库。

此外，使用 MicroLab 软件也可以轻松创建、维护并管理谱库（图 7）。只需几秒即可创建新谱库。可以在创建时或其他任意时间点，直接从结果界面向谱库中添加谱图。

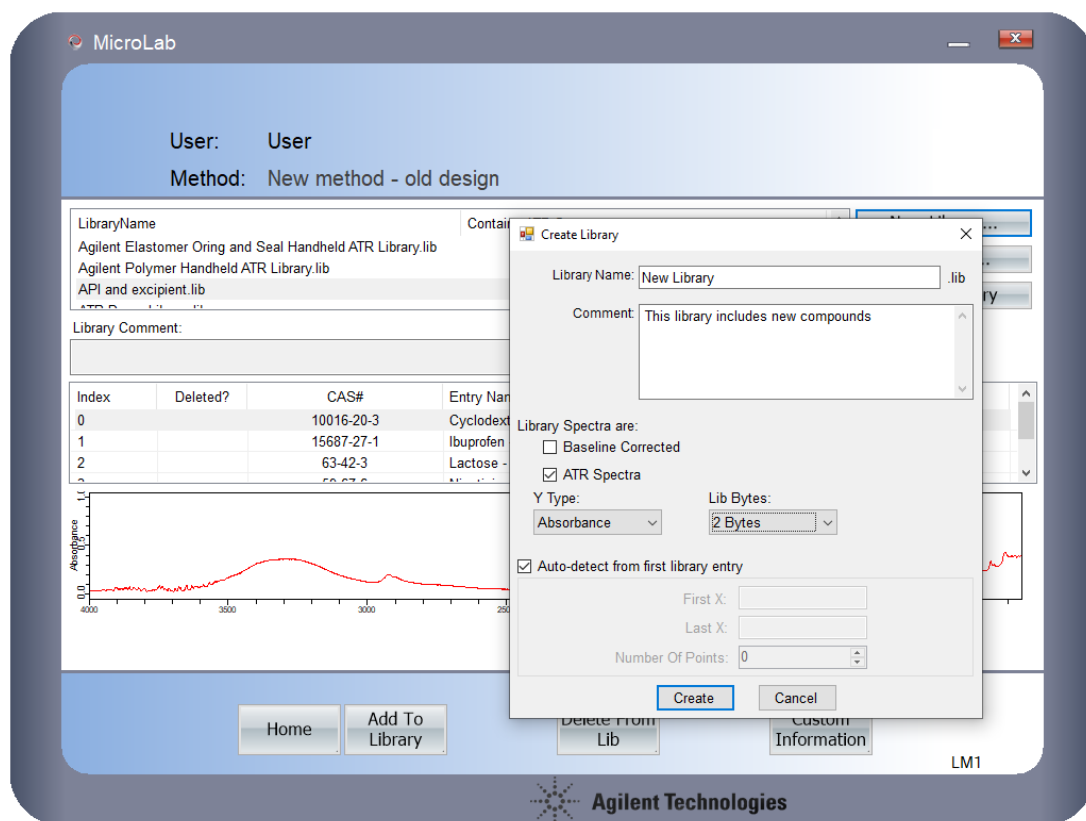


图 7. 使用 Agilent MicroLab 软件可以快速轻松地进行谱库管理。只需几秒即可创建新谱库。谱库内容可以根据需要进行更新

应用示例

应用示例 1：药物原辅料身份确认

使用配备钻石晶体 ATR 采样附件的 Cary 630 FTIR 采集水杨酸、布洛芬和烟酸三种常用活性药物成分 (APIs) 以及标准物质赋形剂 (α -环糊精) 的红外光谱。采用 MicroLab 软件创建了新谱库，并将采集的参比光谱添加至该谱库。采用了图 8 所用的参数，对该谱库进行谱库搜索。

然后，采用身份确认方法分析了不同批次的水杨酸、烟酸、布洛芬和 α -环糊精。MicroLab 软件成功确认了所有测试原辅料的身份。HQI 分别为 0.99238 (水杨酸)、0.99775 (烟酸)、0.98641 (布洛芬) 及 0.98675 (α -环糊精)，其中采用相似度检索算法得到的最高理论值为 1 (图 9)。

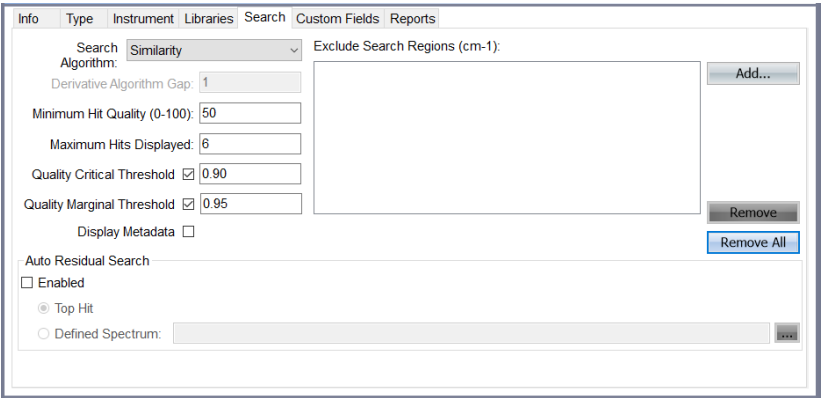


图 8. 用于确认药物 APIs 身份的谱库检索参数。质量临界阈值和质量边际阈值设置规定结果显示的颜色标记



图 9. Agilent MicroLab 软件对谱库检索结果进行颜色标记。颜色标记简化了结果解析，可减少疏忽导致的错误。此截图中，绿色的为 α -环糊精的结果，与谱库光谱匹配度较高

应用示例 2：聚合物样品的鉴定

使用带有钻石晶体 ATR 采样附件的 Cary 630 FTIR 分析了五种不同的塑料原辅料，包括聚丙烯、聚碳酸酯、氯化聚乙烯、聚对苯二甲酸乙二醇酯、聚氯乙烯。

Agilent MicroLab 软件选择了安捷伦 FTIR 谱库：ATR 聚合物和聚合物添加剂（部件号 G8045AA，选件 106）。该谱库包含所选聚合物、塑料、聚合物添加剂、增塑剂和包装材料的 7974 个光谱。

采样相似度算法检索该谱库，根据 HQI 结果，成功地鉴定了五种聚合物样品。HQI 值分别为 0.98315（聚丙烯）、0.97298（聚碳酸酯）、0.97212（氯化聚乙烯）、0.96238（聚对苯二甲酸乙二醇酯）、0.98360（聚氯乙烯），其中采用相似度算法得到的最高理论值为 1（图 10）。



图 10. 配备钻石晶体 ATR 采样附件的 Agilent Cary 630 FTIR 获得的匹配结果采用颜色标记，可以快速清晰地显示。常规的定性原辅料鉴定方法可以自动鉴定聚合物的类型，置信水平较高

谱图的手动对比

此外，可以通过手动对比红外光谱，对已知原辅料进行定性确认。可以将样品的光谱与标准物质的光谱进行直观比较；或标记观察到的峰并与文献值比较。

通常，大多数光谱信息位于红外光谱的指纹区域（约 400–1500 cm⁻¹）。MicroLab 软件可以放大该指纹区域的波数范围，同时压缩光谱的高能量区域（图 11）。放大光谱可以对更多相关指纹区域开展更深入和轻松的研究。

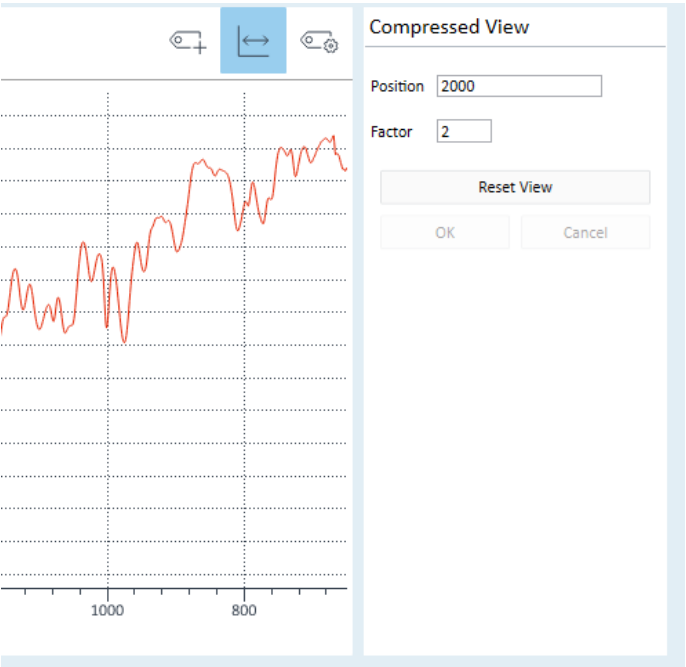


图 11. 物质的红外光谱可以提供很有价值的信息，让人们了解原辅料的构成，如官能团的存在。通常，大多数相关谱带位于红外光谱的指纹区域（约 400–1500 cm⁻¹）。使用 Agilent MicroLab 软件，可以应用波数缩放比例因子，对目标光谱范围进行更详细的分析

应用示例 3：采用手动光谱对比对 API 进行原辅料身份确认

使用 Cary 630 FTIR，通过透射采集模块采集了含利福平（一种抗生素 API）溴化钾 (KBr) 压片的红外光谱。4000–2000 cm^{-1} 的范围内几乎没有获得光谱信息，多数谱带位于 2000–600 cm^{-1} 的范围。在 MicroLab 软件的图形结果界面，对更重要的指纹区域进行了放大（放大了两倍），同时压缩了位于更高波数区域的光谱（图 12）。

通过放大光谱，可以轻松地将样品光谱与中国药典委员会发布的药物红外光谱图谱中的标准光谱进行比较。对相应谱带进行标记，同时该软件可自动生成 PDF 版本的报告，报告中提供了光谱以及所有标记峰的汇总表（图 13）。

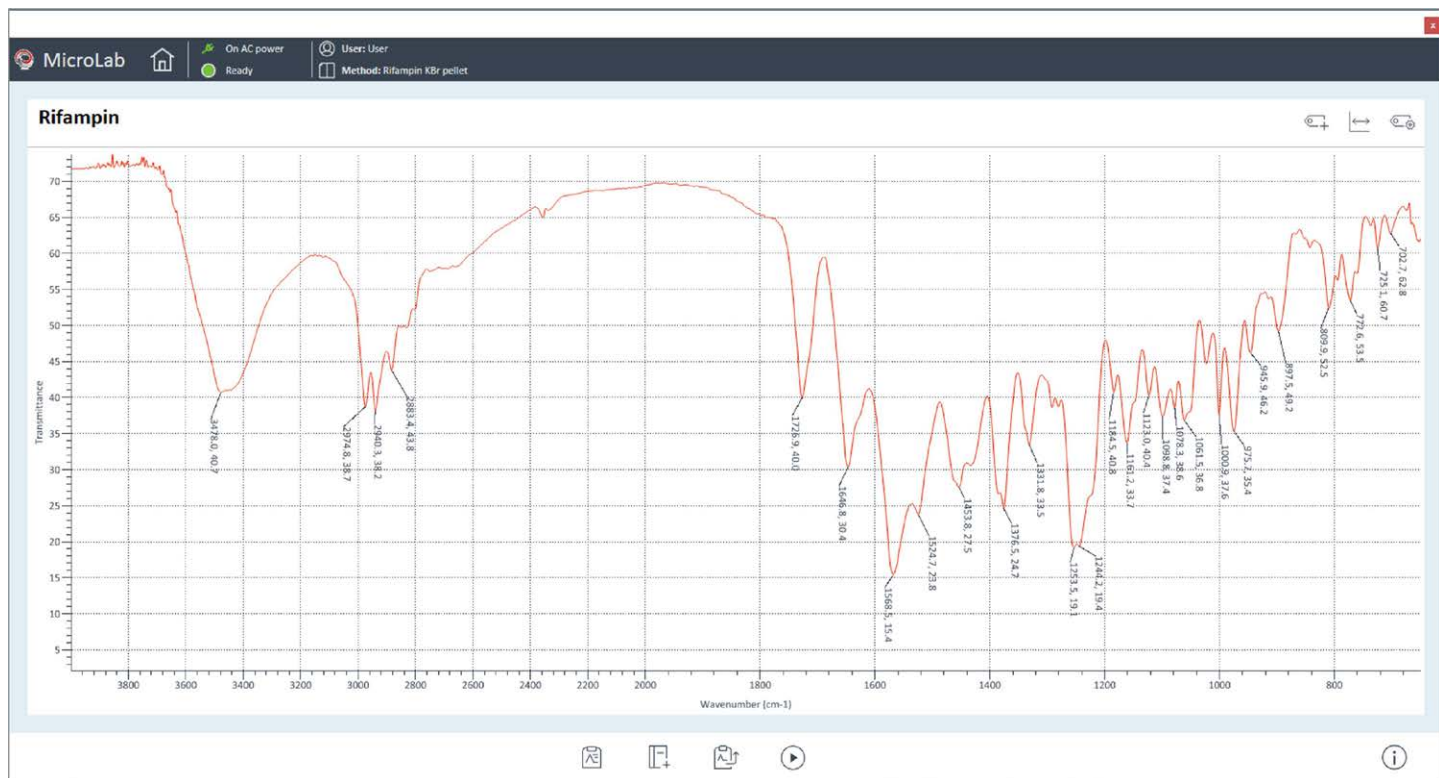


图 12. 利福平的红外光谱。为便于查看光谱，与高波数区域相比，将指纹区域放大了两倍，同时对相关谱带进行了标记

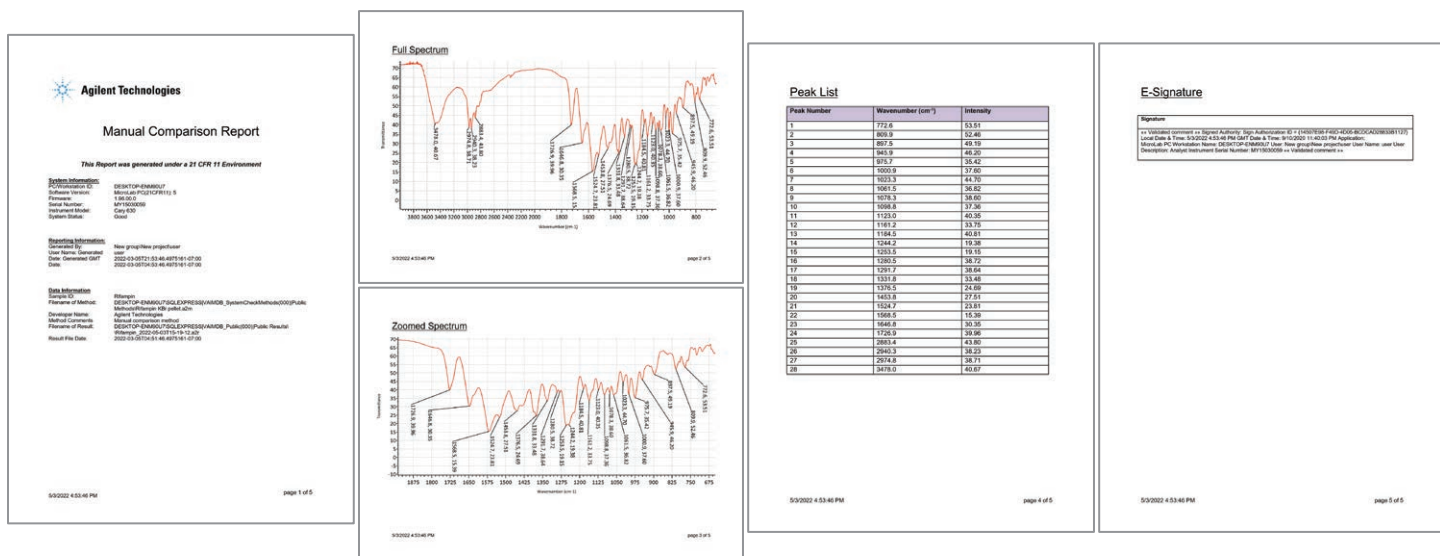


图 13. Agilent MicroLab 软件的结果窗口可直接生成 PDF 版本的报告。该报告完全可定制，能够涵盖相关信息，如样品名称、操作人员身份以及分析详细信息（包括放大谱图、完整谱图以及峰列表）

结论

对许多行业而言，采用 FTIR 鉴定原辅料是一项重要的分析方法。本概述展示了 Agilent Cary 630 FTIR 在对不同样品类型进行原辅料鉴定方面的灵活性，可以根据应用定制采样附件和方法。Agilent MicroLab 软件在整个工作流程中提供逐步指导，可简化所有方法开发。本概述提供的应用示例说明了该软件可通过谱库检索或谱图的手动对比简化原辅料鉴定。

直观的图片引导式 MicroLab 软件可快速学习掌握，减少了培训需求，降低操作人员错误和报告次数，有助于提高原辅料质量控制检测的效率。

查找当地的安捷伦客户中心：

www.agilent.com/chem/contactus-cn

免费专线：

800-820-3278, 400-820-3278（手机用户）

联系我们：

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价：

www.agilent.com/chem/erfq-cn

www.agilent.com

DE22553965

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，2022，2026

2026 年 9 月 1 日，中国出版

5994-4992ZHCN