

Novinky v molekulové spektroskopii Agilent

Martina Háková

Produktový specialista pro molekulovou spektroskopii

NPI 2022



Obsah

- Vylepšený software pro Agilent FTIR
- Identifikace narkotik pomocí FTIR
- LDIR 8700 pro analýzu mikroplastů – analýza z filtru

Microlab – FTIR software

- Jediný SW pro všechny Agilent FTIR systémy
- **Microlab verze 5.7**
 - Podzim 2022



Cary 630 FTIR



5500 Compact FTIR



4300 Handheld FTIR



4500 Portable FTIR

Barevné kódování

- Barevné kódování pro porovnání s knihovnamí spekter
- Uživatel si může nastavit vlastní hranice pro jednotlivé barvy
- Přehlednější, uživatelsky příjemnější

Example 1:
Critical threshold only

Search Algorithm: Similarity

Derivative Algorithm Gap: 1

Minimum Hit Quality (0-100): 0

Maximum Hits Displayed: 8

Quality Critical Threshold 0.9

Quality Marginal Threshold 0.9



Results:

Rank	Quality	Library	CAS#	Name
1	0.98675	API and excipient (0)	10016-20-3	Cyclodextrin - Reference
2	0.74441	API and excipient (2)	63-42-3	Lactose - Reference
3	0.12835	API and excipient (3)	59-67-6	Nicotinic acid - Reference
4	0.08522	API and excipient (4)	69-72-7	Salicylic acid - Reference
5	0.00761	API and excipient (1)	15687-27-1	Ibuprofen - Reference

Hit quality index (HQI) $\geq 0.90 \rightarrow$ green
HQI $< 0.90 \rightarrow$ red

Example 2:
Critical and marginal threshold

Search Algorithm: Similarity

Derivative Algorithm Gap: 1

Minimum Hit Quality (0-100): 0

Maximum Hits Displayed: 8

Quality Critical Threshold 0.7

Quality Marginal Threshold 0.9



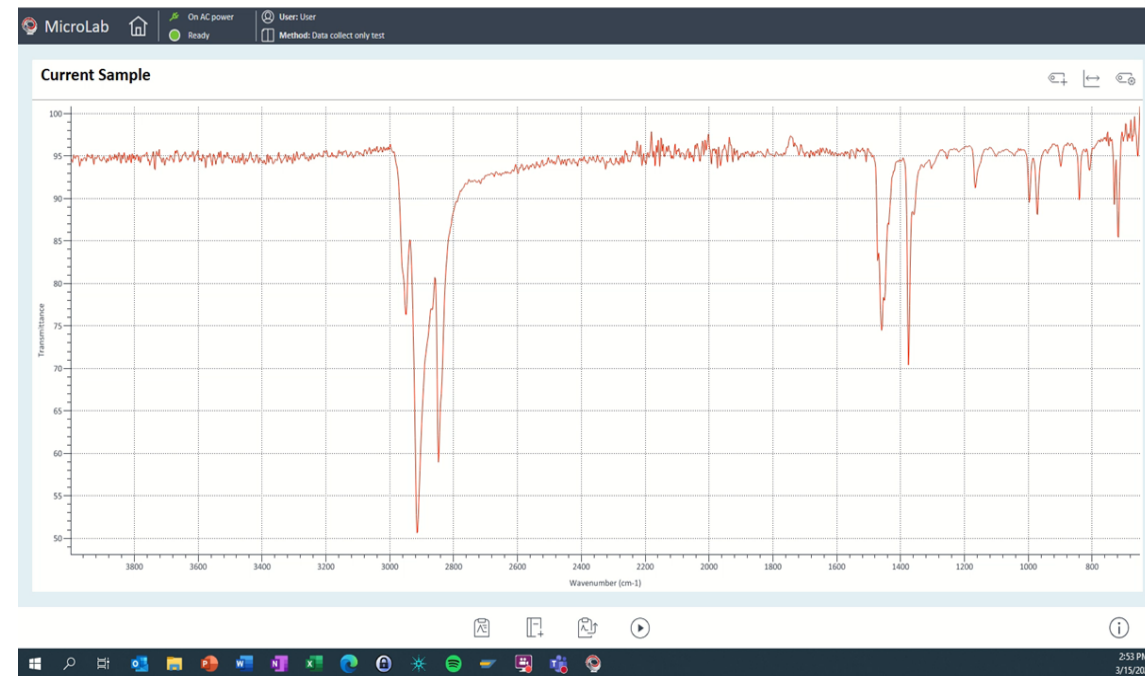
Results:

Rank	Quality	Library	CAS#	Name
1	0.98675	API and excipient (0)	10016-20-3	Cyclodextrin - Reference
2	0.74441	API and excipient (2)	63-42-3	Lactose - Reference
3	0.12835	API and excipient (3)	59-67-6	Nicotinic acid - Reference
4	0.08522	API and excipient (4)	69-72-7	Salicylic acid - Reference
5	0.00761	API and excipient (1)	15687-27-1	Ibuprofen - Reference

Hit quality index (HQI) $\geq 0.90 \rightarrow$ green
 $0.90 > \text{HQI} \geq 0.85 \rightarrow$ orange
HQI $< 0.70 \rightarrow$ red

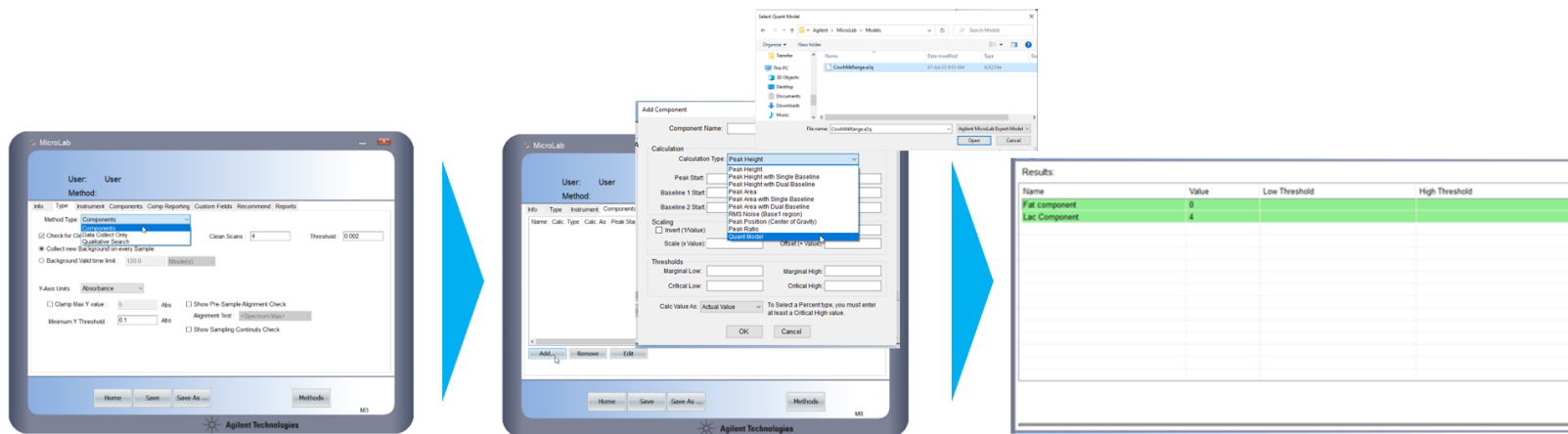
Zobrazení aktuálních dat

- Přepracované okno pro zobrazování výsledků, právě změřeného vzorku
 - Možnost „zoomování“
 - Compressed view
 - Rozdělení spektra do dvou oblastí s odlišným měřítkem na ose x
 - Snadné označení jednotlivých píků
 - Automatické vkládání značek
 - Rychlejší práce



Export metod z Microlab Expert

- Microlab expert – množnost tvorby sofistikovaných kvantitativních metod
- Nyní lze snadno přenést a použít i v základním SW Microlab



Create new
"Components"
method

Add new
component and
select "Quant
Model".
Open .a2q model

Finalize the method and run
the analyzes

Nové řešení pro ID narkotik

- Dedikované „balíčky“ pro analýzu narkotik
 - Dvě varianty pro použití v terénu či pouze v laboratoři
- Součástí standardní knihovna s více než 10 000 spekter
- Nová knihovna TICTAC
 - Nejnovější látky včetně nových psychoaktivních látek (NPS)
 - Obsažena i data o bezpečnosti a další důležité informace a charakteristiky



MicroLab

User: Operator 1 - Drug Testing
Result: Ketamine

Warning	Rank	Quality	Library	CAS#	Name
	1	0.94617	TICTAC ATR FTIR Drugs Library (333)	1987-66-9	Ketamine hydrochloride
⚠	2	0.81915	TICTAC ATR FTIR Drugs Library (430)	111982-49-1	(±)-2F-Ketamine
⚠	3	0.78301	TICTAC ATR FTIR Drugs Library (163)	8740-88-1	Ketamine
⚠	4	0.77465	STPCAN512-2 (605)	1987-66-9	KETAMINE HCL

Rank 1
1987-66-9 (±)-Ketamine HCl
Controlled Substance

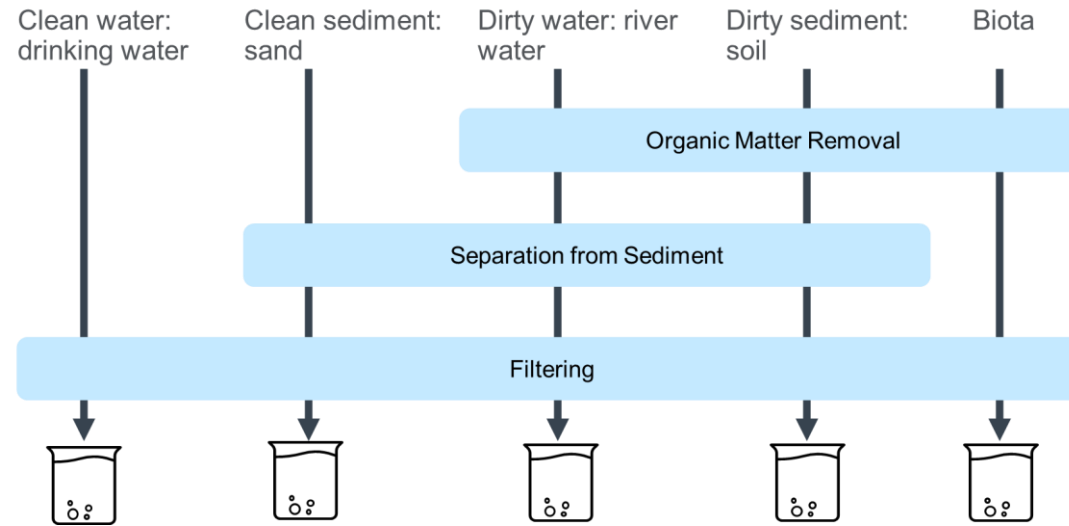
Sample Description
Medication mainly used for starting and maintaining anesthesia, also used as a recreational drug

Home Data Handling Details Params Results R2

Agilent Technologies

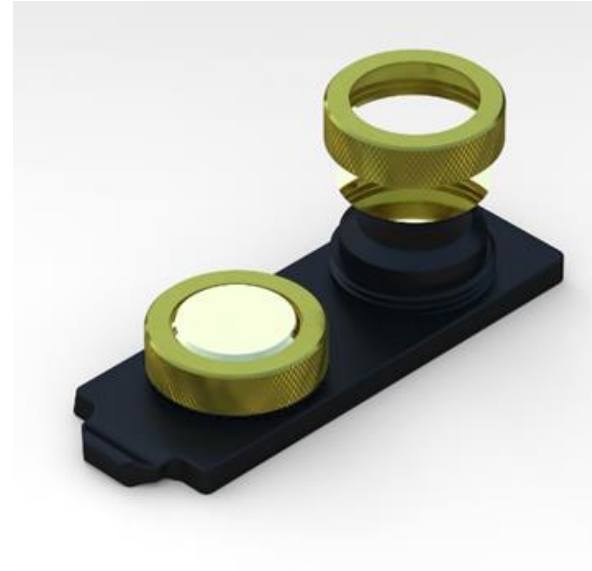
Analýza mikroplastů pomocí LDIR 8700

- NOVÉ ŘEŠENÍ PRO ANALÝZU PŘÍMO Z FILTRU
- Předúprava vzorku je kritický a podstatný krok před samotnou analýzou



Měření přímo z filtru

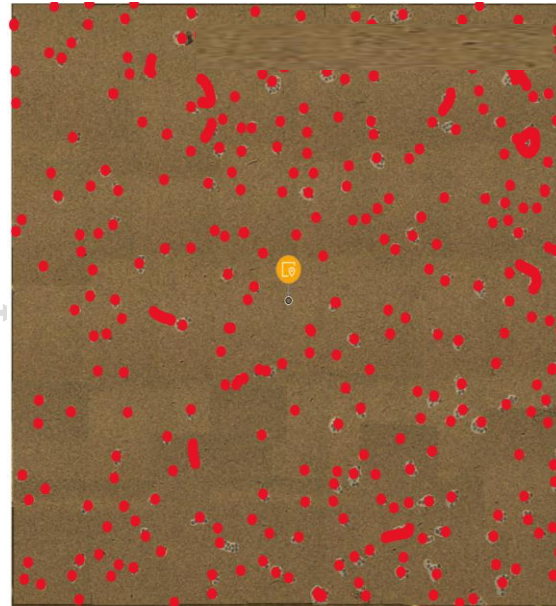
- Nový držák pro tuto variantu
- Zlaté filtry
- Méně pracné
- Menší riziko kontaminace
- Širší spektrum matric



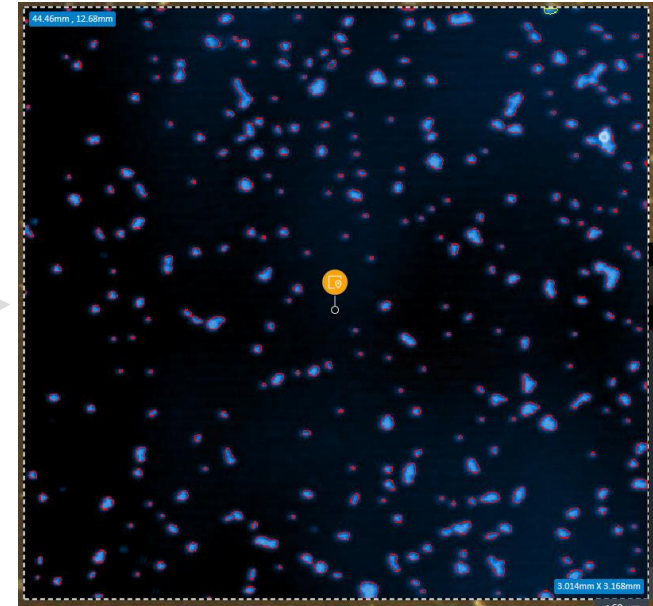
Výsledky



Viditelný záznam



Počet nalezených částic



IČ analýza
počet nalezených částic

- 28 částic, které nebyly vidět v IČ záznamu
- Manuálním způsobem zkoumání bylo zjištěno, že se jednalo o zbytkové rozpouštědlo, defekty z pozadí, a některé částice byly agregáty a byly v IČ počítány jako 1 místo 2..

Opakovatelnost

Run	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Average	Std Dev
Particle Analysis workflow count	284	284	285	283	285	287	285	287	287	287	285	1.4

Autorizovaný distributor
Agilent Technologies



DĚKUJI ZA POZORNOST



www.hpst.cz

