

FTIR 分析を簡単に

Agilent MicroLab ソフトウェア



MicroLab ソフトウェア

フーリエ変換赤外分光法 (FTIR)は、サンプル中の 原材料の同定および成分の 定量向けの高速かつ簡単で 信頼性の高い手法です。 アジレントは、フィールドアプリケーション向けの柔軟性の高いハンドヘルド FTIR および堅牢 でポータブルな FTIR アナライザから、ルーチン試験や最先端の研究向けの信頼性の高い ベンチトップ FTIR 機器に至るまでの幅広い FTIR 機器を提供しています。Agilent FTIR 分光光度計の独自性の 1 つとして、付属するソフトウェアパッケージまたはインタフェース が挙げられます。Agilent MicroLab ソフトウェアを使用することにより、すべてのレベルの ユーザーが、不明な原材料の同定や特性解析から、詳細な定量分析に至るまでのルーチン アプリケーションを実行できます。





Cary 630 FTIR

4500 Portable FTIR





5500 Compact FTIR



4300 ハンドヘルド FTIR

MicroLab ソフトウェアの機能



画像付きの段階的な説明と直感的に操作できる ソフトウェア設計により、ワークフロー全体を簡 単に実行でき、トレーニングやユーザーのミスを 減らすことができます。



定量アプリケーションの開発のモデル化に役立つ 高速でシンプルなソフトウェア: MicroLab Quant ソフトウェアは、定量モデル 構築の各ステップであらゆるレベルのユーザー を支援し、モデル最適化のためのフィードバッ クを迅速に提供します。



MicroLab では、接続されている機器とサンプリ ングモジュールが自動的に認識されます。



適正なパラメータが直接適用され、関連画像 が表示されます。メソッドごとに使用可能なモ ジュールを定義できます。



ルーチンワークフローのデータ解析の疑問点を 解消:データ採取後に、実用的な結果が色付き で表示されるため、解析が容易です。



関連するすべての結果を報告:

MicroLab には、事前に定義およびカスタマイ ズされたレポートテンプレートが組み込まれて います。分析結果が一貫した形式で自動的に 報告されるため、関連する詳細情報をすぐに確 認できます。

MicroLab ソフトウェアパッケージ

MicroLab ソフトウェアをできるだけ簡単に使用する ために、MicroLab ソフトウェアスイートには、目の前 の作業専用に設計された 4 種類の個別のアプリケー ションが含まれています。



MicroLab PC

事前定義されたメソッド を使用してデータを採取 して解析するためのメソッ ド主導型ソフトウェアです。

MicroLab Lite

FTIR データのオフライン での確認および解析に使 用できます。

MicroLab Quant

定量モデルのシンプルで簡 単な開発と検証に使用で きます。

MicroLab OQ

稼動時適格性評価(OQ) の自動化ソフトウェアで あり、機器性能の定期的 な検証に使用できます。

オプションの Agilent MicroLab Expert ソフトウェアは、高度 なデータ処理、視覚化、および解析ツールが必要な場合に最適 です。 Agilent MicroLab Pharma ソフトウェアは、ユーザー権限と電子 記録の安全な保管の管理に使用できる追加のソフトウェアソリュー ションです。また、U.S FDA 21 CFR Part 11、EU Annex 11、 および国内の電子記録に関する類似の規則で定義されているコン プライアンスを促進します。



ソフトウェアのメソッドタイプ

MicroLab ソフトウェアは、メソッドベースのアプローチに従っています。メソッドを設定すると、 システムはすぐに導入して稼働できるようになります。

定量

3種類の異なるメソッドタイプにより、最も重要な分析課題に対応します。

同定

esults: ame			
ame			
	Value	Low Threshold	High Threshold
nliwear (Abs / 0.1 mm)	Value Inc. low (Critical)	95	
rater (Abs / U.1mm) x 10 star Brandward (Abs / 0.1 mm) x 10	0		30
ster Breakdown II (Abs / 0.1 mm) x 10	36		110
all (Abs (0.1 mm)	0		950
ther Contaminats I (Abs / 0.1 mm)	6		50
ther Contaminats II (Abs / 0.1 mm)	3		90

スペクトル分析

ワンクリックで画像ガイド付きのワークフローが開始でき、分析

MicroLab はデータ採取後にすべての計算を実行し、初心者ユー ザーでも簡単に理解できる形式で結果を表示します。図1に示す ように、MicroLab ソフトウェアでは、メソッドのスレッシュホールド (限界およびクリティカル)設定に従って、データ取り込み後直ち に結果が色付きで報告されます。

画像によるソフトウェアガイドに従う

色分けされた実用的な結果がすぐに表示される

図 1. Agilent MicroLab ソフトウェアおよび Agilent FTIR 分光分析計を 使用した 3 つのシンプルな手順により、トレーニングの必要性が減り、 分析が容易になります。

同定アプリケーション

MicroLab は、採取したスペクトルとスペクトルライブラリを自動的に比較して、最適に一致する スペクトルを検出します。簡単に解析できるように、信頼度に基づいてカラーコードを適用できます (図 2)。

_	- Currer	nt Sample Sel	ected Library	y Hit
Masorbance		3500 1 1 30	~ 	200 200 100 100
1000				
Rank	Quality	Library	CAS#	Wavenumber (cm-1)
Rank	Quality 0.96238	Library PODEAM518-1 (4457)	CAS# 25038-59-9	Wavenumber (cm-1) Name POLY(ETHYLENE TEREPHTHALATE) POLY(ETHYLENE TEREPHTHALATE)
Rank 1 2	Quality 0.96238 0.95997	Library PODEAM518-1 (4457) PODEAM518-1 (5183) PODEAM518-1 (5183)	CAS# 25038-59-9	Wavenumber (cm-1) Name POLY(ETHYLENE TEREPHTHALATE) POLYESTER FIBER DOLYTEXTER FIBER
4000 Rank 1 2 3	Quality 0.96238 0.95997 0.95081 0.94417	Library PODEAM518-1 (4467) PODEAM518-1 (5183) PODEAM518-1 (5187) PODEAM518-1 (5187)	CAS# 25036-59-9	Wavenumber (cm-1) Name POLY(ETHYLENE TEREPHTHALATE) POLYESTER FIBER POLY(ETHYLENE GLYCOL TEREPHTHALATE) POLYESTER FIBER
Rank 1 2 3 4 5	Quality 0.96238 0.95997 0.95081 0.94417 0.94129	Library PODEAM518-1 (4467) PODEAM518-1 (5183) PODEAM518-1 (5183) PODEAM518-1 (5187) PODEAM518-1 (5188)	CAS# 25036-59-9	Wavenumber (cm-1) Name POLY(ETHYLENE TEREPHTHALATE) POLYESTER FIBER POLY(ETHYLENE GLYCOL TEREPHTHALATE) POLYESTER FIBER POLYESTER FIBER POLYESTER FIBER
Rank 1 2 3 4 5 6	Quality 0.96238 0.95997 0.95081 0.94417 0.94129 0.94000	Library PODEAM518-1 (4467) PODEAM518-1 (5183) PODEAM518-1 (5183) PODEAM518-1 (5187) PODEAM518-1 (5188) PODEAM518-1 (5188)	CAS# 25036-59-9	Wavenumber (cm-1) Name POLV[ETHYLENE TEREPHTHALATE] POLV[ETHYLENE GLYCOL TEREPHTHALATE] POLV[ETHYLENE GLYCOL TEREPHTHALATE] POLVESTER FIBER POLVESTER FIBER POLVESTER FIBER

ライブラリは、MicroLab ソフトウェアで簡単に使用できます。

- すぐに使用可能でアプリケーションに特化したライブラリを提供。
- ユーザーによる独自のライブラリを数秒間で作成可能。

ライブラリ検索は、同定アプリケーションに合わせてカスタマイズできます。

- 複数のライブラリを同時に検索可能。例えば、参照標準が存在する1つのライブラリでサンプ ルを同定し、規格外のサンプルが存在する別のライブラリで再発する問題を特定します。
- 幅広い検索アルゴリズムを使用可能。
- 特定のスペクトル範囲を分析から除外することが可能。
- 最小限の高品質指数(HQI)および最大のヒット設定数により、関連するライブラリヒットのみを表示。
- HQI に基づいて結果をカラーコードで表示し、信頼度を定義することが可能。

同定はシンプルで、分かりやすい形式で結果を表示します。

ものを表示することにより、サンプルの同定を 確認します。

図2.参照スペクトルに対して高品質で一致する

アプリケーションの例:

- 原材料や最終製品の純度を迅速に確認。
- スペクトルライブラリを用いて、溶媒、
 界面活性剤などの化合物を迅速に同定。
- 不明な押収サンプル中の麻薬類似物質 を同定。

検出アプリケーションでは、安全および危険に関する情報がすべての結果ウィンドウにわかりやす く表示されます (図 3)。ユーザーが編集できる [カスタム情報 (Custom Information)] セク ションなど、より詳しい情報にアクセスできます (図 4)。

Populto:	Re	sult: 1	MDMA (G19	-428)_2022	-04-11T12-10-12			
Manian	Deals	Quality	1 Shares	040#	No			
warning	Rank	Quality	LIDIARY	42542.40.0	Name Counter MDMA			
	2	0.90008	TICTAC (157)	42042-10-9				
	2	0.66412	TICTAC (376)	42642 10.9	MDEA 3.4 methological methomological			
	4	0.67692	TICTAC (18)	1134709-81-1	1.Methylamino.1.(3.4-methylanedioxynhenyl).propane HCI			
	5	0.49890	TICTAC (3)	39512-50-0	1-(2-Chlorophenyl)-piperazine			
Δ	6	0.46246	TICTAC (340)	4764-17-4	3,4-Methylenedioxyamphetamine hydrochloride			
Rank 1 42542-10-8	MI C	DMA HCI ontrolled Su	ibstance		Sample Description Commonly known as ecstasy (E), a psychoactive drug used primarily as a recreational drug.	& &		
					- Mi	ore		

図3.選択したライブラリヒットに対する、対処 に役立つ明確な安全および危険情報。これに は、CAS番号、GHS記号、警告フラグ(規制 対象物質用)、サンプルの簡単な説明などがあり ます。

Identification			MDMA	нс	1
Chemical Name Source Library IUPAC Name CAS# ECNumber Emergency Response UN Number	MDMA HC TICTAC 1-(1,3-ben 42542-10- Not Availa Code Not Availa	MDMAHCI TICTAC 11(3-benzodioxol-5-yl)-N-methylpropan-2-amine 42542-01-9 Not Available Not Available Not Available		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 water seidue (including waste sludge), consult with neuronmental regulatory agencies for guidance on acceptable disposal practices.	
			Custom	n Inf	formation
			Class		Not Available
Data			Notes		Not Available
Alternate Name	MDMA;3,4- methylenedioxym Methylenedioxy)n	ethamphetamine;Ecstasy;Methylenedioxymethamphetami nethamphetamine;(RS)-3,4-(methylenedioxy)methampheta	Handlin ne;DL-(3,4- imine	g	Not Available
Sample Description	Commonly known	as ecstasy (E), a psychoactive drug used primarily as a recr	eational drug.		
Molecular Formula	C11H15NO2				
Molecular Weight	193.2423				
Concentration	Not Available				
Melting Point	Not Available				
Density	Not Available				
Flash Point	Not Available				

図 4. 化学および初動対応に関する補足情報。編集可能な [カスタム情報 (Custom Information)] セクションには、詳細なユーザー固有の説明が表示されます。

定量アプリケーション

MicroLab を使用することにより、サンプル中の複数の成分を 1 回の FTIR 測定で定量できます。 MicroLab Quant では、基本的な定量モデルを簡単に作成できます。包括的なケモメトリックス モデルに対応するために、MicroLab では MicroLab Expert で開発された予測モデルもサポー トしています。

- MicroLab の独自のロジック設定機能により、関連する結果のみを表示。
- 色付き結果(赤色、黄色、緑色)のユーザー定義基準により、高い柔軟性を実現。
- MicroLab ではすべての計算を実行して、即座に実用的な結果を色付きで表示し、 フォローアップ手順を提供。

Status: Riskdy	Result: Mineral	Oil Std PAL Configuratio	on_2020-04
Results:			
Jame	Value	Low Threshold	High Threshold
Antiwear (Abs / 0.1 mm)	Value too low (Critical)	95	
Nater (Abs / 0.1mm) x 10	0		30
Ester Breakdown I (Abs / 0.1 mm) x 10	0		35
ster Breakdown II (Abs / 0.1 mm)	35		110
-uel (Abs / 0.1 mm)	0		950
Other Contaminats I (Abs / 0.1 mm)	0		00
Strier Contaminats II (Abs / 0.1 min)	5		30

- アプリケーションの例:

- 既知添加物の濃度を測定し、メー カー仕様の適合性を確認。
- ファインケミカルが適切に混合されているかを確認。
- 透過型 FTIR による液体サンプルの 高速かつ簡単で信頼性の高い測定 を実施。

図 5. MicroLab ソフトウェアが、自動的にすべての 計算を実行し、簡単に確認できるように最終結果 を色付きで表示します。

赤外線スペクトルの採取と確認

MicroLab では、サンプルの赤外線(IR)スペクトルを採取して確認することもできます。IR スペクトルから、官能基の存在など、価値のある情報を得られます。

- MicroLab では波数スケーリングファクタを変更して、対象のスペクトル範囲の詳細な分析を 実施することが可能。
- バンドをラベル化して、レポート作成または文献値と比較することが可能(図6)。

図 6. MicroLab ソフトウェアを使用することにより、レポート作成だけではなく、サンプルの赤外線 スペクトルの採取、確認、再分析が可能です。

すべての結果を報告

MicroLab PC および Lite には、事前に定義およびカスタマイズされたレポートテンプレートが組 み込まれています。分析結果が一貫した形式で自動的に報告されるため、 関連する詳細情報を すぐに確認できます (図 7)。レポートテンプレートは Microsoft Word で編集できます。

図7. MicroLab ソフトウェアにより生成された結果 のレポート。生成されたレポートには分析対象サン プルに関連する詳細情報がすべて取り込まれており、 記録は維持されます。 MicroLab Quant は、その他の MicroLab ソフト ウェアスイートと同様の段階的な説明を備えて おり、定量アプリケーションの開発のモデル化 に役立つ高速でシンプルなソフトウェア機能を 提供します (図 8)。シームレスなデータ統合 機能により、MicroLab PC、MicroLab Lite、 および MicroLab Quant で IR スペクトルや定 量モデルを簡単に使用できます。

1)標準を選択して濃度を入力する

Quant A	lgorithm :	Simple Be	er's Law	~	
is Collected?	Standard Name	Concentration	Remove Standard		
\$	10% urea	10	Remove		
\checkmark	15% urea	15	Remove		
\checkmark	20% Urea	20	Remove		
\checkmark	25% urea	25	Remove		
\checkmark	30% Urea	30	Remove		
\checkmark	35% Urea	35	Remove		
\$	40% Urea	40	Remove		
\checkmark	45% urea	45	Remove		
4	50% Urea	50	Remove		
~	60% Urea	60	Remove		
V	60% Urea	60	Remove		

ピークを定義してキャリブレーションを最適化する

MicroLab Quant The Measure of Confidence Model Data & Define Peaks AL R-Squared: 0.99927 4,5 4,5 3,5 3 2,5 30 35 40 45 50 1.5 0.5 15 20 25 Area = (0.0851304)*Concentration + (+0.309 Include Display in Display Result File × × × × × 15% urea - Calibration 2,2022-05-04T14-20% Urea - Calibration 2,2022-05-03T16-25% urea Calibration 2,2022-05-10T15-50 30% Urea - Calibration 2,2022-05-03T16-35% urea Calibration 2,2022-05-03T17-21 < < < < <</p> Mr. Ar E Force Through Origin Ĵ Peak ID Type Peak Position Start Peak Position End Baseline Start Baseline End R2 Value Include in Mo 1,213.25 1,105.16 1,226.29 1,088.38 0.99927 Image: Compare Start S Delete Select Model Plot << Back Home Model Evaluation Save Finalize Model

)モデルを完成して MicroLab で使用する

図8.定量モデルを開発するための MicroLab Quant ソフトウェアの簡単 な手順です。

3

- インタラクティブなソフトウェアインタ フェースにより、定量モデルを短時間で 簡単に作成して最適化することが可能 (図 9)。
- 直接的なフィードバックには、相関グラ フへの変更の影響を表示。
- サンプルのクロス検証または単独検証に より、定量モデルを評価することが可能 (図 10)。

図 9. MicroLab Quant を使用した DialPath サンプリングモジュールの直線性評価。検量線と相関係数の計算は、ソフトウェアで自動的に実行されます。

			_			- L 🏊
MicroLa	b Quant			About	The Measure of Confidence	Agilent Technologies
						Model Evaluation
ross Validation	ndependent Set					
ample Name	Concentration	Predicted	Remove Sample	Predicted	d VS Actual	- ¹
16 Urea	6	6.56910333303741	Remove			
!% Urea	12	12.4985500379867	Remove	45		
% Urea	26	24.7998711960198	Remove	40)	
96 Urea	29	29.3735816924307	Remove	35	;	
1% Urea	33	32.9630204701863	Remove	30)	
% Urea	43	42.4309243647914	Remove	25	;	
Add results files cking the 'Predi	by clicking the 'Add F ct' button.	illes' button; 2. Enter the Dradiat	corresponding Sample Co	ncentrations in the	a table above; 3. Calculate .	20 25 30 35 40
<< Back			Export		Save	1

図 10. MicroLab Quant アプリケーションでは、開発した定量モジュールを、クロス検証または別のサンプル セットを使用して評価することが可能です。

MicroLab OQ

機器性能を管理することは、目的の分析に対して機器が適合していることを示すための重要な側面です。MicroLab OQ では、機器の性能確認を簡単に実行でき、機器が正常な状態であることを確認できます。

MicroLab OQ には直感的な画像インタフェース が備えられており、適格性評価プロセスを通じ てガイドに従って操作することができます。

機器性能試験を選択する

1

MicroLab OQ	Operational Qu	alification of System Perform	nance
	User:	User	
Status: Ready	Method:	LaserFreqCalTest_ATR	
Performance (Signal-to-noi	se)		
Number of Tests : 1	5		
Stability Test			
Number of Minutes : 3	0		
Laser Frequency Calibratio	n Check		
This test is performed using : P	lystyrene		
Number of Runs : 5			
Spectral Resolution Check			
This test is performed using : P	lystyrene		
Number of Runs : 5			
	Please press the Ne	xt button to initiate testing	
Home	< Back		Next >

2) MicroLab OQ が各試験を通じてガイドを提供

性能試験の概要を確認する

3

図 11. MicroLab OQ では、シンプル で簡単な手順で機器の適格性評価を 行えます。 最後のステップでは、診断値、試験結果、試験の仕様、および将来の参考になる合格/不合格基準を記載した PDF 形式のレポートを MicroLab OQ が生成します(図 12)。

図 12. MicroLab OQ を使用して生成した稼動時適格性評価(OQ)レポート。すべての試験パラメータおよび 見やすい合格/不合格結果とともに、結果が報告されます。

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カストマコンタクトセンタ

0120-477-111 email_japan@agilent.com

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、 医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。 本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに 変更されることがあります。

RA44713.4331018518

アジレント・テクノロジー株式会社 © Agilent Technologies, Inc. 2022 Printed in Japan, August 1, 2022 5994-5139JAJP

