

ИК-Фурье спектрометр

# IRTracer-100



# Скорость, чувствительность и разрешение, которые обеспечивают отличную производительность



#### Великолепные скорость, чувствительность и разрешение

- ▶ Высококачественные данные для любого типа образца
- ▶ Быстрый анализ полученных данных с помощью программного обеспечения LabSolutions IR
- ▶ Быстрое формирование отчёта с результатами

Технологии Shimadzu обеспечивают отличную производительность ИК-анализа.

#### • СОДЕРЖАНИЕ

- Скорость, чувствительность и разрешение,
   которые обеспечивают эффективную и качественную работу
- 5 Высокая чувствительность, отличное разрешение и высокая скорость анализа
- 6 Стабильные рабочие характеристики
- 10 Программное обеспечение нового поколения
- 🕨 11 Быстрое, удобное в использовании программное обеспечение LabSolutions IR
- 12 Задачи, которые решает ПО LabSolutions IR
- 14 Обширная библиотека спектров и функция поиска
- 15 Макропрограммы для автоматизации рутинной работы
- ▶ 16 Настройка системы IRTracer-100 под свои задачи
- 18 Прикладные программы для решения различных задач
- > 20 Программное обеспечение EDXIR-Analysis™ (опция)
- 21 Держатель образца/контейнер EDXIR-Holder™ для хранения и измерений (опция)
- 22 Дополнительное оборудование
- 26 Дополнительное ПО



# IRTracer™-100

ИК-Фурье спектрометр

# Великолепные чувствительность и надёжность

Высокие чувствительность, разрешение и скорость: система оптимизации работы интерферометра в совокупности с внутренней самодиагностикой.

# Рабочая станция нового поколения

Программное обеспечение LabSolutions IR оптимизировано для работы с сетевыми приложениями и включает обширную библиотеку спектрог и эффективную функцию поиска. Возможность создания макрокоманд помогает в автоматизации рутинной работы.

# Широкий спектр исследований

Две основные прикладные программы поддерживают все виды анализа. Доступен широкий выбор опций для решения любых задач.



Прибор сертифицирован как Eco-Products Plus компании Shimadzu

\*Энергосбережение снижено на 34% по сравнению с предыдущей моделью

# Скорость, чувствительность и разрешение, которые обеспечивают эффективную и качественную работу

Достоверный результат для любых образцов: легко и быстро

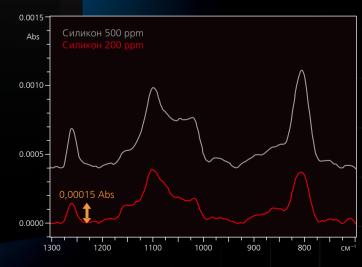


# **I** Соотношение сигнал/шум 60000:1\*1

С помощью ИК-Фурье спектрометра IRTracer-100 в комплекте с приставкой однократного НПВО измеряли следовые количества силиконового масла, содержащегося в парафиновом масле. Даже очень слабая полоса силиконового масла при 1260 см-1 с интенсивностью всего лишь 0,00015 Abs четко идентифицируется в спектре с высоким соотношением сигнал/шум.



- Спектр разницы получен путем вычитания спектра парафинового масла
- Измерение проводились с разрешением 4 см<sup>-1</sup> и с использованием детектора DLATGS

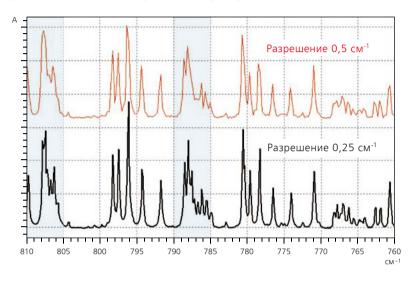


# Высокие чувствительность, разрешение и скорость

ИК-Фурье спектрометр IRTracer-100 имеет отношение сигнал/шум 60 000:1, спектральное разрешение 0,25 см<sup>-1</sup> и может регистрировать до 20 спектров в секунду.

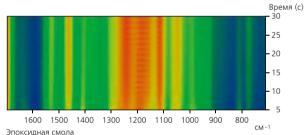
# ■ Спектры высокой точности при проведении измерений с разрешением 0,25 см<sup>-1</sup>

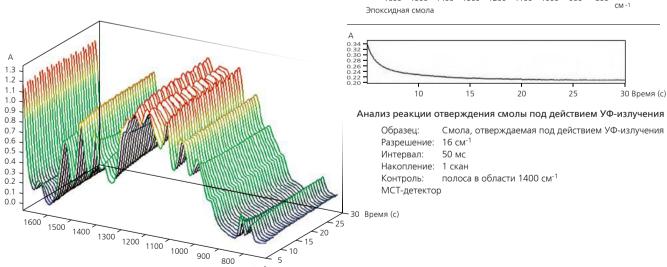
Спектральное разрешение IRTracer-100 равное 0,25 см<sup>-1</sup> обеспечивает высокую точность количественной идентификации полос в спектре, особенно в случае газообразных соединений. Например, при измерении спектра газообразного аммиака с разрешением 0,25 см<sup>-1</sup> близко расположенные полосы в диапазоне 785–790 см<sup>-1</sup> четко разделены между собой.



# ■ Режим быстрого сканирования с возможностью регистрации до 20 спектров в секунду\*2

Режим быстрого сканирования дает возможность регистрации до 20 спектров в секунду, что особенно актуально при исследовании кинетики быстрых реакций, время протекания которых может составлять несколько секунд. Быстрый, высокочувствительный анализ с соотношением сигнал/шум равным 2000:1.





<sup>\*1 4</sup>см<sup>-1</sup>, 1 мин, 2200см<sup>-1</sup>, пик к пику, накопление 1 минута \*2 разрешение 16 см<sup>-1</sup>. Режим быстрого сканирования — опциональное ПО.

# Стабильные рабочие характеристики

Встроенный автоматический осушитель и улучшенная система динамической цифровой юстировки упрощают техническое обслуживание интерферометра.

# Встроенный автоматический осушитель

Чтобы обеспечить долговременную стабильность интерферометра, необходимо защитить его от влаги, поскольку светоделители, используемые в интерферометрах FTIR, чувствительны к влажности. IRTracer-100 разработан с герметичным интерферометром, который включает уникальный внутренний автоматический осущитель.

#### Три компонента защиты оптического элемента в интерферометре

Герметичный корпус интерферометра

Электронный автоматический осушитель воздуха

Влагостойкое защитное покрытие оптического элемента

Принцип работы автоматического осушителя воздуха

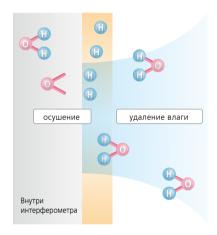
IRTracer-100 имеет встроенный автоматический осушитель, который электролитически удаляет влагу внутри интерферометра с помощью мембраны из твёрдого полимерного электролита. Расход электроэнергии при работе автоматического осушителя воздуха меньше, чем при непрерывной работе FTIR. Это позволяет сократить выбросы CO<sub>2</sub> примерно на 400 кг /год.

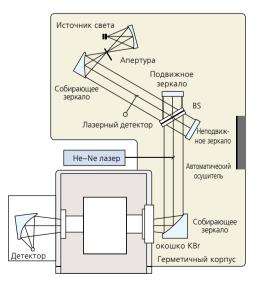
- Пористые электроды прикреплены к мембране из твердого полимерного электролита. При подаче постоянного тока вода (влага) на стороне анода (так называемая осушаемая сторона) диссоциирует на ионы водорода и кислорода.
- Все ионы водорода проходят через мембрану на сторону катода (так называемая сторона удаления влаги).
- На катоде ионы водорода реагируют с кислородом воздуха, образуя пары воды, которые удаляются из интерферометра.

Анод (с осушаемой стороны) 
$$H_2O \rightarrow 2H^+ + \frac{1}{2}\,O_2 + 2e^-$$

Катод (со стороны удаления влаги) 
$$2H^+ + \frac{1}{2}O_2 + 2e^- \to H_2O$$

Замена окошка (KBr) в отсеке для проб окошком KRS-5 (P/N 206-74211-46, опция) обеспечивает безопасную работу и исключает помутнение окошка в условиях высокой влажности.



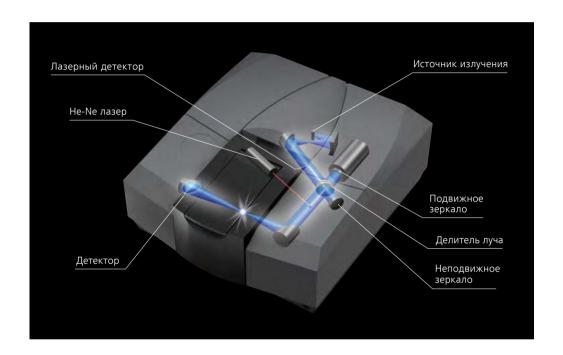


Интерферометр IRTracer-100 стабилизирован за счёт комбинации плавной работы подвижного зеркала (прецизионного механизма крепления зеркала) и улучшенной системы динамической цифровой юстировки. Оптимальное рабочее состояние прибора обеспечивает процедура самодиагностики, которая контролирует работу IRTracer-100 при запуске и на протяжении всей работы. Кроме того, можно проверить основные параметры прибора с помощью стандартных программ валидации в соответствии с Европейской, Китайской, Японской Фармакопеями, Фармакопеей США и стандартами Американского общества по испытанию материалов (EP/CHP/JP/USP/ASTM).

## Система динамической цифровой юстировки

Чтобы добиться высокой воспроизводимости оптической интерференции, требуется надежная конструкция интерферометра. Интерферометр IRTracer-100 легко удовлетворяет этому требованию. Система плавного перемещения зеркала, стабилизированная за счёт системы динамической цифровой юстировки (патент Японии № 3613171), позволяет IRTracer-100 выдавать опти-

мальное и стабильное качество спектров после короткого времени прогрева. Система динамической цифровой юстировки обеспечивает оптимальное функционирование IRTracer-100 при сборе данных со скоростью более 5000 раз в секунду. Кроме того, она автоматически юстирует интерферометр при смене светоделителя для анализа в ближней или дальней ИК-областях спектра.



#### Четыре преимущества динамической цифровой юстировки

Устраняет влияние изменений окружающей среды

Позволяет выключать ИК-Фурье спектрометр, когда он не используется \* (зокономия электроэнергии и снижение воздействия на окружающую среду)

Более короткое время прогрева и повышенная стабильность

Прибор с системой динамической цифровой юстировки не требует технического обслуживания

#### Схема динамической цифровой юстировки

Пазерный детектор обнаруживает интерференционную картину излучения гелий-неонового лазера.

Рассчитывается качество интерференции

3 Вычисленная интерференция сравнивается с сохраненными шаблонами, полученными при оптимальных рабочих условиях

Разница между этими интерференционными картинами вычисляется усовершенствованным процессором цифровых сигналов 5 Наклон неподвижного зеркала постоянно меняется, чтобы устранить любую разницу и поддерживать оптимальные рабочие условия отбора проб

<sup>\*</sup> При этом автоматический осушитель работает

# Стабильные рабочие характеристики

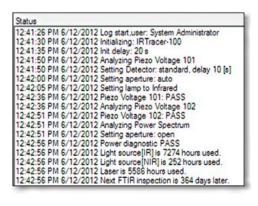
Самодиагностика при запуске и контроль состояния прибора на протяжении всего рабочего процесса обеспечивают быстрое и простое управление прибором.

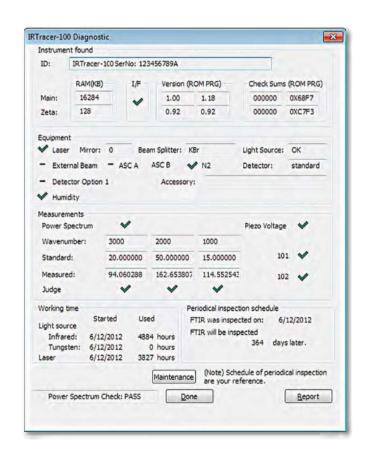
#### Пять возможностей функции самодиагностики

- Процедура самодиагностики IRTracer-100 выполняется при инициализации прибора, при этом происходит проверка электрической, сигнальной и оптической систем. Если интерференция неудовлетворительная, то условия интерференции оптимизируются при помощи динамической цифровой юстировки интерферометра.
- В процессе работы контролируется состояние источника излучения, гелий-неонового лазера, влажность, вспомогательное оборудование и системы автоматической смены образца.



- Отслеживается время работы\*1 керамического источника и Не–Nе лазера, а также время, оставшееся до следующей периодической проверки.
- При смене светоделителя для анализа в ближней или дальней ИК-области спектра, IRTracer-100 автоматически обнаруживает новый светоделитель. Также автоматически определяется наличие дополнительного оборудования и устанавливаются оптимальные условия измерения\*2.
- Диагностические и контрольные результаты записываются в лог-файлах.





<sup>\*1 3-</sup>летняя гарантия на источник света и 30-месячная гарантия на Не–Ne лазер. \*2 Только при установке аксессуаров с функцией QuickStart.

## ■ Программа валидации\*

IRTracer-100 оснащен программой валидации, которая соответствует Европейской\*\*, Японской, Китайской Фармакопеям, Фармакопее США\*\*\* и стандартам Американского общества по испытанию материалов (ASTM). Программа валидации проверяет основные

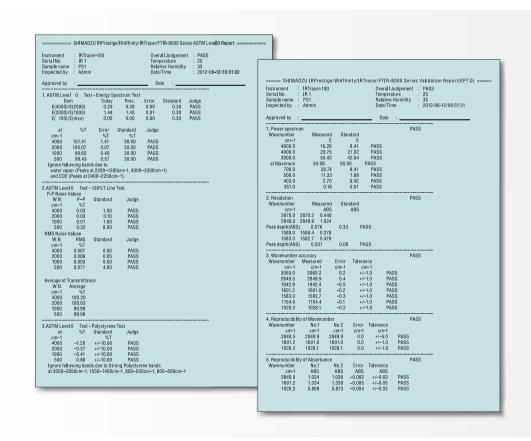
характеристики прибора с использованием полистирольной пленки и создает отчеты о результатах. Если обнаружен какой-либо сбой, просто используйте усовершенствованный механизм динамической цифровой юстировки для настройки и оптимизации IRTracer-100.

Спецификация теста в соответствии с Европейской, Японской, Китайской Фармакопеями и Фармакопеей США

- Форма и интенсивность энергетического спектра
- Проверяются следующие характеристики спектра полистирола:
  - Разрешение
  - Точность волнового числа
  - Воспроизводимость волнового числа
  - Воспроизводимость коэффициента пропускания (поглощения)

# Спецификация теста в соответствии с ASTM (ASTM E1421 Level Zero)

- Тест на энергоемкость, основанный на спектре мощности
- Контроль уровня шума, основанный на 100% спектре пропускания
- Тест на воспроизводимость на основе спектра полистирола

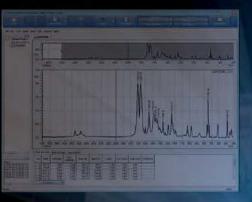


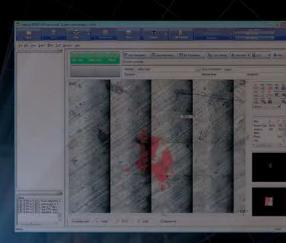
\*): Используйте актуальную версию.

<sup>\*\*):</sup> Индийская Фармакопея была унифицирована с Европейской Фармакопеяй.
\*\*\*): В Фармакопее США указано, что валидация должна проводиться в соответствии с методом, указанным производителем оборудования.

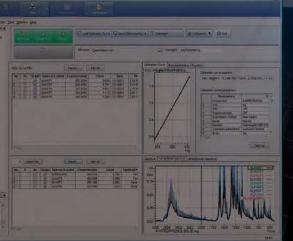
# Программное обеспечение нового поколения

ПО LabSolutions IR является частью LabSolutions и оптимизировано для работы с сетевыми приложениями, а также включает обширную библиотеку спектров и эффективную функцию поиска. Возможность создания макрокоманд помогает в автоматизации рутинной работы.









# Удобное программное обеспечение LabSolutions IR

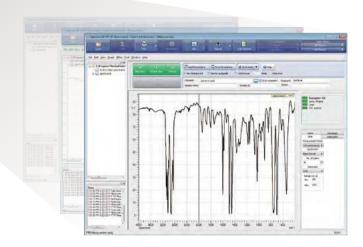
ПО LabSolutions IR автоматизирует рутинную работу, связанную со сканированием спектра, обработкой данных, печатью отчета, анализом примесей и идентификацией веществ и т.д. Функции управления и множество функций для обработки данных обеспечивают простые и удобные условия работы. Кроме того, большой выбор приложений позволяет расширить возможности прибора в соответствии со всеми потребностями современной аналитической лаборатории.



Окно LabSolutions IR для запуска программ

# Специальное приложение-лаунчер LabSolutions IR Launcher позволяет легко запускать программы LabSolutions IR или приложения Windows

ПО LabSolutions IR включает ряд специальных программ, в том числе Postrun, Spectrum и Quantitation, для запуска которых используется LabSolutions IR Launcher. Кроме того, с помощью LabSolutions IR Launcher можно легко и быстро запускать макропрограммы и приложения Windows.



#### LabSolutions IR: прекрасные возможности для работы

#### Сетевое администрирование

- ▶ Администрирование пользователей и расширенные функции безопасности.
- ▶ Соответствие нормам ER/ES, например FDA 21 CFR Part 11, PIC/S и т.д.
- ▶ Сетевое управление данными FTIR, а также данными LC и GC.

#### Библиотека спектров и функция поиска

- ▶ В стандартную комплектацию входит библиотека (около 12000 спектров).
- ▶ Высококачественный поиск с использованием стандартных библиотек.
- Высокопроизводительные методы поиска по различным параметрам: спектр, положение полос, текст и комбинированный поиск.
- Уникальные алгоритмы поиска, разработанные Shimadzu.

#### Макропрограммы для автоматизации работы

- ▶ Определите последовательность операций, чтобы создать макропрограмму.
- Автоматизированные идентификационные тесты и анализ примесей.

#### Программы

- ▶ Обработка (после измерения) (Postrun), измерение спектра (Spectrum), количественный анализ (Quantitation), фотометрирование (Photometric), измерение зависимости основных параметров от времени (опция) (Time course), картирование (опция) (Mapping).
- Все программы режимов обработки и измерения имеют общую структуру основной панели инструментов, меню, панели инструментов измерения, древовидную архитектуру и окно журнала. Работа с каждой программой схожа, что обеспечивает простоту в управлении независимо от того, какую задачу выполняет оператор.

#### Отчёты

▶ Печать с помощью функции ViewPrint и свободная компоновка отчетов.

#### Управление данными

 В качестве стандартных функций включены НПВО-коррекция, преобразование Кубелки-Мунка, функции количественного обсчета, включающие метод многоточечной калибровочной кривой и CLS метод.

# Задачи, которые решает ПО LabSolutions IR



# Надёжное программное обеспечение LabSolutions



Shimadzu предлагает ПО LabSolutions IR, которое обеспечивает базовую функциональность, а также ПО LabSolutions DB IR и ПО LabSolutions CS IR, которые обеспечивают соответствие регуляторным требованиям правил ER/ES.

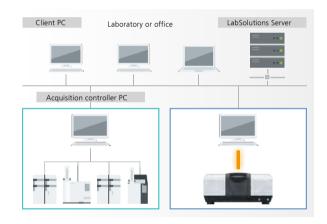
#### LabSolutions DB IR

ПО LabSolutions DB IR объединяет функции управления данными ПО LabSolutions IR и хранение данных в базе данных, что обеспечивает соответствие требованиям ER/ES. Рекомендуется для пользователей, которые не нуждаются в подключении приборов по локальной сети.



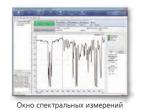
# **LabSolutions CS IR**

ПО LabSolutions CS IR объединяет приборы в локальную сеть, управляемую единым сервером. Все аналитические данные содержатся в центральной базе данных компьютера-сервера. Поскольку управление всеми данными осуществляется на сервере, нет необходимости инсталляции ПО LabSolutions IR на клиентских ПК. Пользователи также могут отслеживать состояние прибора и управлять его работой с персонального компьютера, не подключенного непосредственно к прибору. Рекомендуется для лабораторий, оборудованных множеством приборов, в т. ч. находящихся в разных помещениях или зданиях, при необходимости соответствия требованиям ER/ES.



Программное обеспечение	LabSolutions IR	LabSolutions DB IR	LabSolutions CS IR
Управление данными	Файлы с результатами измерений сохраняются в папку на компьютере	Файлы с результатами измерений сохраняются и управляются через базу данных LabSolutions	
Ссылки на данные	ПО обращается к файлам на дисках или в папках на ПК	ПО обращается к файлам базы данных	
База данных LabSolutions	Недоступна	Доступна (база данных находится на локальном ПК)	Доступна (база данных находится на сервере)
Администрирование пользователей	Доступно		
Администрирование групп пользователей	Доступно		
Администрирование проектов	Недоступно	Доступно	
Работа в автономном или сетевом режиме	Можно использовать оба режима	Работа только в автономном режиме	Работа только в сетевом режиме Для просмотра данных LabSolutions IR используется программа-администратор базы данных на ПК, используемом для просмотра. На ПК для просмотра должно быть установлено LabSolutions IR
Резервное копирование данных	Пофайловое резервирование с использованием Проводника (Windows Explorer)	Выполняется для каждой базы данных	

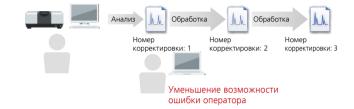
ПО LabSolutions — надежная операционная система Shimadzu для хроматографического и спектрального анализа





## Предупреждение ошибок при работе с базами данных

LabSolutions DB и LabSolutions CS используют базу данных, что обеспечивает безопасное управление аналитическими данными и позволяет избежать ошибок, характерных для работы с файлами данных, например, перезаписи или удаления данных. База данных также управляет последующей обработкой аналитических данных. Для каждого результата анализа автоматически назначаются номера версий данных, что предотвращает случайную перезапись необработанных аналитических данных.



#### Надежная система безопасности

Чтобы обеспечить достоверность данных, можно настроить контрольный журнал (audit trail) и функции передачи документов по электронной почте при возникновении любого события в системе. Учетные записи пользователей управляются с помощью паролей, длина, сложность и срок действия которых должны соответствовать опреде-

ленным требованиям. Также можно установить функции блокировки для предотвращения несанкционированного доступа, а также установить удаление и изменение зарегистрированного пользователя. Кроме того, можно выбрать флажок для предотвращения перезаписи файла данных, а также можно выполнить вывод элемента в отчет.

#### Обработка информации по конкретным проектам

ПО LabSolutions DB IR и LabSolutions CS IR имеют функцию управления проектами, что позволяет свободно работать с данными по каждой конкретной задаче и осуществлять операции в системе. Эта функция позволяет настраивать управление приборами, администрирование пользователей, политику безопасности и обработку данных для каждого проекта отдельно.



# Отображение последовательности операций

Создание комплекта отчётов\* обеспечивает прослеживаемость отдельных операций, составляющих общий аналитический процесс. В случае прозрачности аналитических операций легче выявить ошибки при работе, а это, в свою очередь, помогает

повысить эффективность и надёжность проверки.

\* Комплекты отчётов могут включать методики и результаты измерений для серии проанализированных образцов, а также соответствующий журнал операций (запись всех событий от входа в систему до выхода из неё). Эта информация извлекается автоматически и суммируется в едином отчёте.



# Обширная библиотека спектров и функция поиска

Библиотека содержит порядка 12000 спектров Высокопроизводительный поиск с использованием стандартных библиотек

## Библиотека содержит порядка 12000 спектров

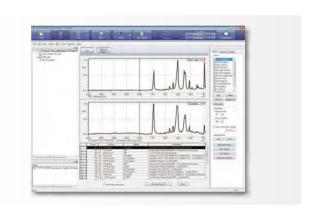
В стандартную комплектацию входит широкий набор библиотек, в том числе уникальные библиотеки Shimadzu, библиотеки реагентов, полимеров. Поиск с помощью стандартных библиотек обеспечивает высококачественные результаты без необходимости приобретения дополнительных библиотек.

# Содержание Библиотека пищевых добавок SHIMADZU Библиотека примесей SHIMADZU Полимеры Приблизительно 12000 спектров

# Эффективные функции поиска

LabSolutions IR обеспечивает высокопроизводительный поиск, основанный на собственных алгоритмах Shimadzu и на поиске по четырем параметрам (спектр, положение полос, текст и комбинированный поиск). Библиотеки создавались с использованием программного обеспечения IRsolution и HYPER-IR, а также на базе коммерчески доступных библиотек, таких как Sadtler и S.T. Japan. Для создания пользовательской библиотеки достаточно перенести в нее спектр, при этом спектр можно редактировать и удалять.





#### Дополнительные Библиотеки

- Библиотека примесей для ПО LabSolutions IR Новейшая оригинальная библиотека Shimadzu для анализа загрязняющих веществ в водопроводной воде и пищевых продуктах.
- Библиотека полимерных материалов, которые подверглись воздействию ультрафиолетового излучения Содержит данные о разложившихся пластмассах, которые окислились под воздействием УФ-излучения.
- Библиотека полимерных материалов, которые подверглись термической деструкции Содержит данные о разложившихся пластмассах, которые окислились при нагревании.

Подробнее о библиотеках спектров см. на стр. 27.

# Макропрограммы для автоматизации рутинной работы

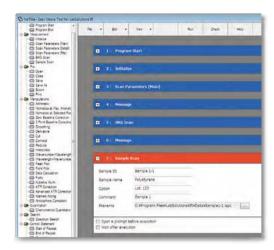
LabSolutions IR позволяет автоматизировать рутинную работу, связанную со сканированием спектра, печатью отчета, анализом примесей и идентификацией веществ. Программы запускаются посредством панели управления LabSolutions IR или через рабочий стол Windows.

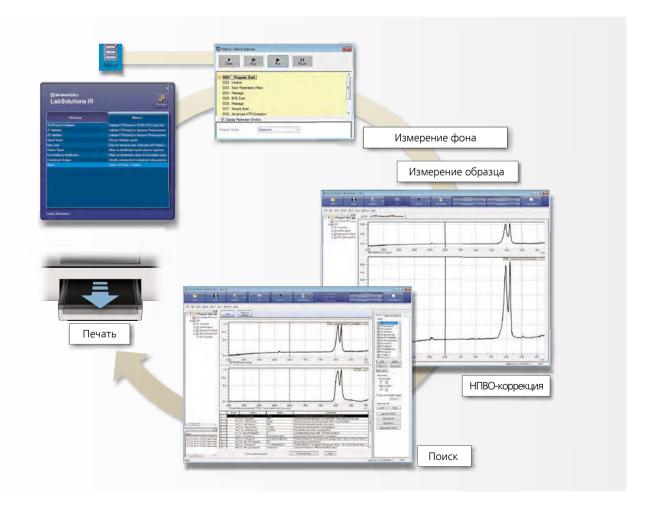
## ■ Функция «EasyMacro» — запуск рутинного анализа всего одним кликом мыши

Функция «EasyMacro» позволяет создавать макросы, которые подходят для рутинной работы, особенно в случае применения повторяющихся операций. Макрос легко создается простым выбором необходимых операций из списка. Полученный макрос легко регистрируется в панели управления LabSolutions IR и на рабочем столе. Благодаря своей простоте такие макрокоманды будут полезны, в частности и для операторов, которые не знакомы с методом ИК-спектроскопии.

#### Функционирование Easy Macro

- Инициализация прибора, настройка параметров сканирования, измерение спектра
- Работа с данными, поиск, количественный анализ, печать
- Повторные измерения, отображение системных сообщений, подача звукового сигнала тревоги, выполнение внешних программ





# Широкий спектр исследований

Доступен большой выбор программ и аксессуаров

# Настройте собственную систему IRTracer-100

С помощью множества аксессуаров и простых в использовании опций программного обеспечения можно настроить собственную систему IRTracer-100 в соответствии с конкретной задачей.

# Выполнение разнообразных задач



#### Лекарственные средства

- □ Идентификация сырья
- $\hfill \square$  Идентификация функциональных групп в синтезированных продуктах
- 🗆 Идентификация функциональных групп в натуральных продуктах
- □ Анализ примесей

#### Косметические средства

- □ Идентификация сырья
- □ Анализ примесей
- □ Анализ дефектов

#### Пищевые продукты

- □ Идентификация сырья
- □ Идентификация упаковочных материалов
- □ Анализ загрязнений

#### Объекты окружающей среды

- □ Анализ воды
- □ Анализ почвы
- □ Анализ отработанных газов
- $\ \square$  Анализ взвешенных частиц в воде и воздухе
- □ Анализ минерального сырья
- □ Определение масел в воде

#### Химикаты и полимеры

- □ Идентификация сырья
- □ Качественный анализ пластмасс и резин
- □ Идентификация функциональных групп в синтезированных продуктах
- □ Анализ ПАВ
- □ Анализ и измерение толщины тонких пленок
- □ Анализ катализаторов
- □ Анализ лакокрасочных материалов
- □ Анализ примесей
- □ Количественный анализ
- □ Вторичная переработка





#### Электротехника, электроника и полупроводники

- □ Измерение толщины эпитаксиальных пленок
- □ Количественный анализ полупроводников, легированных кислородом и углеродом
- □ Количественный анализ водорода в нитридных пленках
- □ Количественный анализ водорода в аморфном кремнии
- □ Определение бромированных антипиренов (RoHS)
- □ Анализ тонких пленок
- □ Анализ примесей
- □ Анализ дефектов
- $\hfill \square$  Анализ газов для производства полупроводников
- □ Утилизация электрического и электронного оборудования (WEEE)

#### Автомобилестроение

- □ Испытание материалов
- □ Анализ загрязняющих веществ
- □ Анализ дефектов

#### Металлы

- □ Качественный анализ тонких пленок на металлических пластинах
- □ Анализ и измерение толщины тонких пленок
- □ Анализ примесей

#### Строительство

- □ Идентификация сырья
- □ Оценка степени разрушения покрытий

#### Наука и образование

- □ Исследования и разработки
- □ Учебные лаборатории

# Прикладные программы для решения различных задач

LabSolutions IR включает две основные прикладные программы — программу для анализа примесей и программу для идентификации веществ. Даже операторы, незнакомые с ИК-анализом, могут с лёгкостью проводить измерения, используя эти программы, и создавать отчеты всего за несколько секунд.

#### Программа для анализа примесей

Объединение собственных алгоритмов, разработанных Shimadzu (заявлен патент), с библиотеками спектров общих загрязнений, позволяет определять примеси с высокой степенью точности. Отчеты создаются автоматически сразу после анализа. тем самым сокращая время пост-обработки до нескольких секунд. С автоматизированной отчетностью эта программа проста в использовании в том числе и для операторов, не знакомых с методом ИК-спектроскопии.

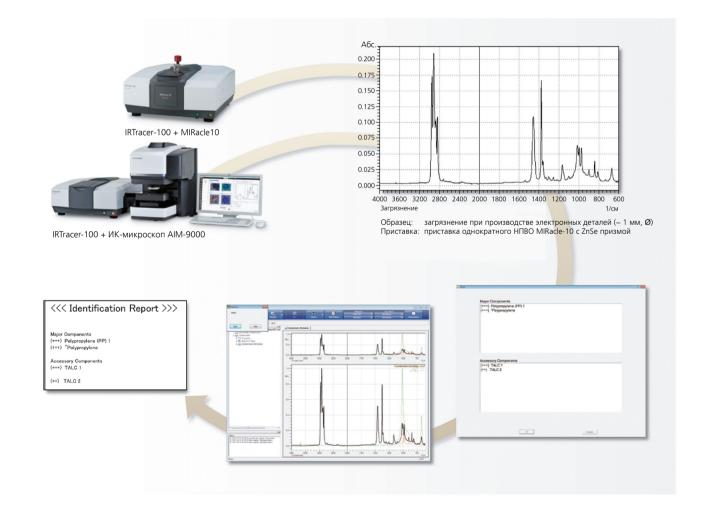
#### Четыре преимущества программы анализа примесей

Содержит спектры более чем 500 неорганических веществ, органических веществ и полимеров, которые зачастую идентифицируются как примеси.

Включает алгоритмы, сфокусированные на спектральных характеристиках, а не на простом поиске спектра.

Позволяет автоматизировать процесс, в том числе поиск, оценку и создание отчета.

Определяются основные компоненты и примеси.



# Программа для идентификации веществ

Программа даёт оценку соответствия образцов согласно испытаниям, указанным в Фармакопее. В дополнение к идентификации фармацевтической продукции, эта программа может использоваться для входного/выходного контроля.

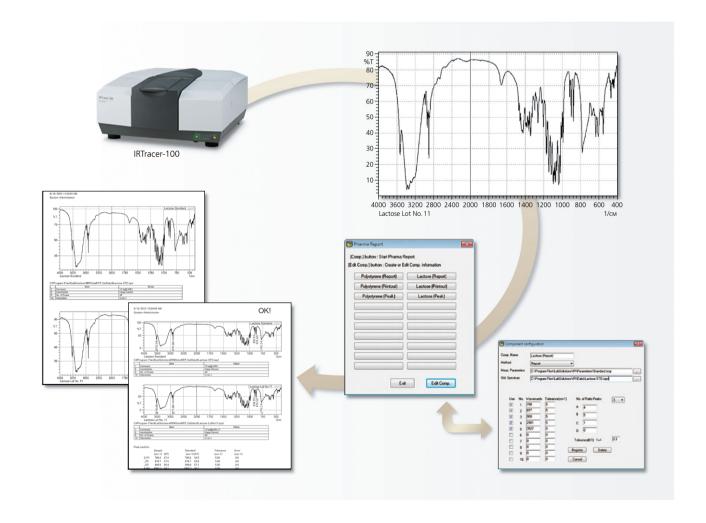
#### Четыре преимущества программы идентификации веществ

Печать спектров стандарта и исследуемого образца для удобного сравнения спектров.

Определение и печать положения всех полос, по которым делается заключение о соответствии/несоответствии вещества стандарту.

Сравнение положения полос и их интенсивностей в спектре исследуемого образца и спектре стандарта, заключение о соответствии/несоответствии соединения стандарту, вывод результатов в виде отчета.

Спектры 57 стандартных образцов пищевых добавок также хранятся в LabSolutions IR.



# Программное обеспечение EDXIR-Analysis™ (Опция)



ПО EDXIR-Analysis специально разработано для выполнения качественного анализа на основе результатов, полученных с помощью энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного спектрометра (EDX) и ИК-Фурье спектрометра (FTIR). Это ПО используется для проведения комплексного анализа данных, полученных на FTIR, который отлично подходит для идентификации органических соединений, и на EDX, который отлично подходит для элементного анализа, идентификации неорганических соединений и др. В итоге отображаются результаты идентификации веществ и степени совпадения. Помимо этого, можно проводить индивидуальный анализ данных, полученных на EDX или FTIR. Библиотека, используемая для анализа данных (содержит 485 файлов данных), — это оригинальная библиотека корпорации Shimadzu, созданная совместно



с представителями организаций водоснабжения и производителями пищевых продуктов. В библиотеке можно зарегистрировать дополнительные данные, а также изображение объектов анализа и документы в формате PDF. Библиотека также эффективна для связанного хранения различных типов данных в виде электронных файлов.

#### • Объединенный анализ полученных данных с последующим сравнением для подтверждающих тестов

Для автоматического выполнения качественного анализа достаточно просто нажать на кнопку Analyze Both Data («Проанализировать оба набора данных») и выбрать данные EDX/FTIR\*1. В результате повышается эффективность анализа данных и обеспечивается значительная помощь при анализе примесей. В дополнение к списку совпадений отображаются измеренные EDX и FTIR спектры, для которых найдены совпадения по библиотеки. Пользователь может просмотреть результаты анализа, их можно выбрать, нажав на кнопку Single («Индивидуальные»).

Кроме того, с помощью функции сравнения данных, которая вычисляет степень соответствия между фактически измеренными данными и данными, зарегистрированными в библиотеке, программное обеспечение может использоваться для противодействия «изменению без уведомления»\*<sup>2</sup> и для других подтверждающих тестов. При нажатии кнопки «Печать» результаты печатаются

в фиксированном формате, а также сохраняются в формате Word\*3. Ниже приведен пример объединенного анализа образца наполненной резины и сравнение полученных результатов для образца из поливинилхлорида (ПВХ) и стандартного изделия. Результаты объединенного анализа данных свидетельствуют о том, что примесью в образце наполненной резины является бутадиенакрилонитрильный каучук, который содержит карбонат кальция и стеарат цинка. На основе сопоставления данных также установлено, что степень совпадения между исследуемым объектом из ПВХ и стандартным изделием составляет 0,8506. По данным EDX и FTIR выявлено присутствие в анализируемом образце свинца (Рb) и акрилов, которые, в свою очередь, отсутствуют в стандартном изделии. Соответственно, сделано предположение, что объект исследования содержит компоненты, отличающиеся от компонентов в стандартном изделии.

Результаты сравнения данных для объекта

из ПВХ и стандартного изделия



<sup>\*1</sup> Результаты, полученные на EDX, позволяют разделить компоненты на неорганические, органические и смешанные. Объединенный анализ данных выполняется путем назначения приоритетов для каждого типа соединений (на основе патентов).

20

Результаты объединенного анализа данных

для примесей в образце наполненной резины

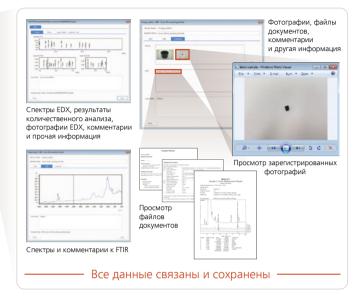
<sup>\*2:</sup> Термин, используемый в Японии для обозначения изменений в материалах, вносимых поставщиками без уведомления производителей.

<sup>\*3:</sup> Сначала требуется установить Microsoft Word

## Просмотр, регистрация, редактирование и удаление данных, изображений и файлов документов

При нажатии на кнопку Edit («Редактировать») и выборе существующей библиотеки, можно просматривать данные, изображения и документы, зарегистрированные в этой библиотеке. Данные можно редактировать и удалять. Можно регистрировать новые данные. Можно создать новую библиотеку. Если для анализа образца использовали другие приборы (не EDX и FTIR, а например, хроматограф, масс-спектрометр или прибор для анализа поверхности), то результаты анализа можно преобразовать в формат PDF и также зарегистрировать в библиотеке. Это обеспечит связанное хранение результатов анализа с данными, полученными на EDX/FTIR.





# Держатель образца/контейнер EDXIR-Holder™ для хранения и измерений (Опция)

Держатель для измерения образцов на EDX и ИК-Фурье спектрометрах, который можно использовать как контейнер для хранения образца после измерения

# Позволяет проводить более эффективный анализ

Этот складной держатель включает клеевой слой с прикрепленными образцами и полипропиленовую пленку для рентгенофлуоресцентного анализа. При измерении на EDX закройте держатель и поместите его полипропиленовой пленкой непосредственно на зону облучения (нижняя сторона). При использовании ИК-Фурье спектрометра (FTIR) откройте держатель и расположите образец на призму НПВО клеящим слоем вверх. Держатель позволяет перемещать образец между спектрометрами, сокращая трудозатраты и делая анализ более эффективным.

# Предотвращает потерю образца

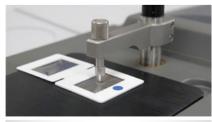
Закройте держатель после измерения, после чего он может быть использован как контейнер для хранения. Необязательно переносить образцы в другие контейнеры, так что нет никакой опасности их потерять.



Закройте держатель и поместите его полипропиленовой пленкой непосредственно на зону облучения (нижняя сторона).



Держатель EDXIR-Holder™ в открытом состоянии (вид изнутри)



Как использовать для ИК-Фурье спектрометра

Откройте держатель и расположите образец на призму клеящим слоем вверх.

# Дополнительное оборудование

При установке дополнительного оборудования в кюветное отделение, LabSolutions IR отображает его идентификационный номер и записывает этот номер в соответствующий лог-файл. При этом все оптимальные параметры измерения устанавливаются автоматически.



#### MIRacle<sup>™</sup> 10

(P/N 206-74127-9x)

Приставка однократного нарушенного полного внутреннего отражения. Для измерения спектра жидкости просто капните небольшое количество на призму. Для измерения твердых и порошкообразных образцов обеспечьте хороший контакт образца с призмой с помощью прижимного устройства. Большие образцы (с большой площадью поверхности) могут быть измерены без предварительной резки. Угол падения составляет 45°. Выберите один из трех типов материала призмы: ZnSe, Ge и алмаз / ZnSe. Кроме того, можно выбрать приставку, оснащенную датчиком давления. Приставки с германиевой призмой идеально подходят для анализа образцов с высоким показателем преломления.















Порошки

из пластмасс

Плёнки

Жидкости



(P/N 206-74128-9x)

Приставка однократного нарушенного полного внутреннего отражения. Так как призма изготовлена исключительно из алмаза, можно проводить измерения в диапазоне до 400 см⁻¹. При необходимости измерения спектра жидкости просто капните небольшое количество на призму. При необходимости измерения твердых и порошкообразных образцов обеспечьте хороший контакт образца с призмой с помощью прижимного устройства. Угол падения 45°. Кроме того, можно выбрать приставку, оснащенную датчиком давления. Приставки с Ge призмой идеально подходят для анализа образцов с высоким показателем преломления.



Порошки



из пластмасс





Жидкости



Резины





**HATR 10** 

(P/N 206-74126-91)

Приставка нарушенного полного внутреннего отражения горизонтального типа, включает призму для анализа жидких и твердых образцов. При необходимости измерения спектра жидкости просто капните небольшое количество на призму. При измерении твердых и порошкообразных образцов обеспечьте хороший контакт образца с призмой с помощью прижимного устройства. Угол падения 45°, число отражений 10. В стандартный комплект поставки входит призма из материала ZnSe. Приставки с Ge призмой идеально подходят для анализа образцов с высоким показателем преломления.











Жидкости







#### **DRS-8000A**

(P/N 206-62301-58)

Приставка для измерения диффузного отражения для анализа порошков позволяет отказаться от прессования таблеток КВг. Для анализа образцов из пластмассы часть поверхности счищают наждачной бумагой, прикрепленной к пробоотборнику SiC (P/N 200-66750), после чего анализируют порошкообразный образец, сформированный на бумаге. Спектры диффузного отражения, которые в свою очередь схожи со спектрами пропускания, получают путем преобразования Кубелки-Мунка.





из пластмасс













Пробоотборник SiC

SRM-8000A

(P/N 206-62304-58)

Приставка для измерения зеркального отражения с углом падения 10° используется для анализа тонких пленок толщиной порядка миллиметра на металлической пластине. В случае отражающих образцов измеряется свет, зеркально отраженный от поверхности образца. Спектры зеркального отражения, которые в свою очередь схожи со спектрами пропускания, получают путем преобразования Крамерса-Кронига.







плёнки











**RAS-8000A** 

(P/N 206-62302-58)

Приставка зеркального отражения с углом падения 70° и 75° используется для высокочувствительного анализа тонких пленок толщиной порядка нанометра на металлической пластине. Использование приставки в сочетании с ИК-поляризатором GPR-8000 (P/N 206-61550-58) позволяет выполнять измерения с еще более высоким уровнем чувствительности.







плёнки











### ATR-8000A

(P/N 206-62303-58)

Приставка НПВО предназначена для анализа твердых пленок, для которых можно обеспечить хорошее соприкосновение с поверхностью призмы. Углы падения можно варьировать между 30°, 45° и 60°. В стандартный комплект входит призма из материала KRS-5. Приставки с германиевой призмой идеально подходят для анализа образцов с высоким показателем преломления.









Плёнки







Резинь



<sup>\*</sup> Спектры НПВО, которые в свою очередь схожи со спектрами пропускания, получают путем НПВО-преобразования.

ИК-микроскоп AIM-9000 оснащён оптимизированной оптической системой и высокочувствительным МСТ-детектором. Система обеспечивает высокочувствительное измерение микропроб и автоматизирована для быстрого и легкого выполнения всех этапов микроанализа.

#### Характеристики АІМ-9000

- Оптимизированная оптическая система и высокочувствительный МСТ-детектор обеспечивают высокочувствительные измерения.
- Позволяет выполнять измерения в режимах отражения/НПВО образцов толщиной до 40 мм.
- Опциональная широкоформатная камера с функцией цифрового увеличения до 330× и камера микроскопа помогают эффективно определить область анализа.
- Функция автоматического распознавания загрязняющих веществ входит в стандартную комплектацию.
- Можно задать до 60 областей для измерения.
- ▶ Программа идентификации примесей входит в стандартный комплект программного обеспечения.

Примечание: для подключения ИК-микроскопа необходимы комплект вывода внешнего луча (Р/N 206-32570-42), комплект для подключения AIM (P/N 206-32607-42) и дополнительные принадлежности для AIM-9000 (P/N 206-32799-xx).





образцы

#### Объектив НПВО

(Германиевая призма: P/N 206-32600-41)

Объектив используется при проведении измерений методом НПВО с помощью ИК-микроскопа АІМ-9000. В объективе однократного НПВО используется призма конусообразного типа с 15-кратным увеличением и углом падения 45°, поддерживается переключение между режимами наблюдения и измерения.





образцы

# Программа картирования (Программное обеспечение AlMsolution)

При использовании ИК-микроскопа АІМ-9000 программа картирования поверхности позволяет визуализировать карту поглощения на поверхности образца.

При визуализации можно задать параметры картирования, такие как диапазон картирования, интервал сканирования и положения коррекции фона. Поддерживается возможность картирования по площади, линейного картирования и картирования в произвольном порядке. В дополнение к картированию в обычных режимах пропускания и отражения можно проводить микрокартирование поверхности. (Для этого потребуется дополнительный НПВО-объектив и отдельный датчик прижима). Из полученных данных картирования можно извлечь спектры и для отображения конкретных полос, соответствующих тем или иным функциональным группам.

# **5-см газовая кювета** (P/N 202-32006-xx) **10-см газовая кювета** (Р/N 202-32007-хх)

# Газовая кювета с увеличенной длиной оптического пути

Газовые кюветы используют для анализа газовых образцов и в зависимости от концентрации образца выбирают кювету с соответствующей длиной оптического пути. Существуют кюветы с длиной оптического пути 5 или 10 см и кюветы с длиной оптического пути десять и более метров. Обратитесь к представителю Shimadzu для более подробной консультации по кюветам с большой длиной оптического пути.

















5-см газовая кювета



Газовая кювета с увеличенной длиной оптического пути

Высокочувствительный детектор МСТ используют, например, для анализа мономолекулярных плёнок на отражающей подложке, отслеживания высокоскоростных реакций, анализа газов с низкой концентрацией с использованием газовой кюветы с длинным оптическим путем. Комплект позволяет установить детектор МСТ на ИК-Фурье спектрометр IRTracer-100. Переключение между стандартным детектором DLATGS и детектором MCT выполняется автоматически через ПО LabSolutions IR. Программное обеспечение имеет встроенный датчик жидкого азота для защиты детектора МСТ, который прерывает ток, когда элемент детектора не охлаждается.

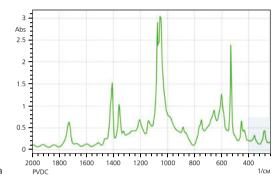
Примечание: этот установочный комплект нельзя установить вместе с комплектом для ближней ИК-области спектра (Р/N 206-74253-58). При использовании МСТ детектора необходим жидкий азот.

# Модуль для расширения спектрального диапазона в дальний ИК-диапазон

(P/N 206-30616-58)

Полосы поглощения, относящиеся к неорганическим соединениям и металлоорганическим комплексам, обычно наблюдаются в дальней инфракрасной области до 240 см<sup>-1</sup>. Для измерения спектров в этой области на IRTracer-100 устанавливается модуль для расширения спектрального диапазона в дальний ИК-диапазон, который имеет делитель луча из Csl.

Чтобы минимизировать влияние паров воды, область поглощения которой лежит в диапазоне от  $400 \text{ см}^{-1}$  до  $240 \text{ см}^{-1}$ , перед выполнением измерений прибор следует продувать осушенным воздухом. Светоделитель Csl также очень чувствителен к влаге и его следует хранить в эксикаторе, когда он не используется.



Спектр поливинилиденхлорида

# Модуль для расширения спектрального диапазона в ближний ИК-диапазон

(P/N 206-74253-58)

IRTracer-100 с данным модулем позволяет проводить измерения в ближнем инфракрасном диапазоне. ПО LabSolutions IR позволяет переключаться между средним и ближним ИК-диапазоном.

[Спецификация] ▶ Диапазон измерений: от 12 500 до 3 800 см-1

▶ Делитель луча: Si/CaF₂

▶ Источник света:галоидная лампа с вольфрамовой нитью

▶ Детектор: InGaAs

Примечание: комплект нельзя установить вместе с установочным комплектом для детектора МСТ (Р/N 206-36050-58).

# Интегрирующая сфера ближнего ИК-диапазона IntegratIR A

(P/N 208-97272-92)

- Образец (порошки, таблетки, жидкости, волокна, пластиковые гранулы, изделия из пластмассы) размещается на предметном столике (измерение отражения).
- ▶ Предварительная пробоподготовка (прессование с КВг) не требуется.
- ▶ Образцы, хранящиеся в пластиковых пакетах или стеклянных сосудах могут быть измерены вместе с упаковкой.
- Качественная идентификация продукта и количественный анализ.
- Встроенный высокочувствительный InGaAs детектор.

Примечание: для установки необходимо отдельно приобрести установочный комплект (Р/N 206-72715-93).



Другое дополнительное оборудование

Пожалуйста, свяжитесь с представителем Shimadzu по поводу другого дополнительного оборудования, которое не указано в этой брошюре. Обратите внимание, что использование аксессуаров серии FTIR-8000 может оказаться невозможным. Обратитесь к представителю Shimadzu за помощью в использовании аксессуаров серии FTIR-8000.

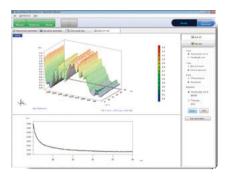
# Дополнительное ПО

Надёжное и простое в использовании программное обеспечение LabSolutions IR включает стандартные функции обработки сигнала, такие как НПВО-коррекцию и преобразование Кубелки-Мунка, дифференциальные спектры, функции количественного анализа, такие как метод многоточечной калибровочной кривой и метод множественной регрессии, а также функцию спектрального поиска. Однако добавление следующих дополнительных программных продуктов расширяет диапазон применения.

## Режим быстрого сканирования

(P/N 206-30200-91)

Режим быстрого сканирования дает возможность регистрации до 20 спектров в секунду. Особенно подходит для изучения кинетики быстрых реакций, когда реакции завершаются за несколько секунд. Спектры, полученные в результате быстрого сканирования, можно использовать для расчета высоты и площади пиков для оценки кинетики реакций. Интервал быстрого сканирования зависит от спектрального разрешения, числа сканирований и скорости перемещения зеркала. Самая высокая скорость сканирования составляет 0,05 секунды при разрешении 16 см-1 и скорости зеркала 40 мм/с (1 сканирование). Максимальное время измерения зависит от параметров сканирования. Для анализа спектров быстрого сканирования требуется программа 3D-изображения (Р/N 206-74563-91).

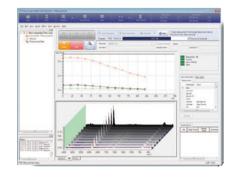


LabSolutions IR

#### ПО для измерения кинетики

(P/N 206-74558-91)

Позволяет проводить измерения спектров через равные промежутки времени. Изменение интенсивности полосы в спектре и площади соответствующего пика можно использовать для оценки кинетики реакции. Результаты измерения сохраняются и отображаются в виде трехмерного изображения (вид с высоты птичьего полета) или графика. Интервал сканирования зависит от спектрального разрешения, числа сканирований и скорости перемещения зеркала. Самая высокая скорость сканирования составляет 7 секунд (1 сканирование) при разрешении 16 см-1 и скорости зеркала 9 мм/с. Максимальное время измерения составляет 48 часов, но оно зависит от параметров сканирования. Программное обеспечение включает программу 3D-изображения.

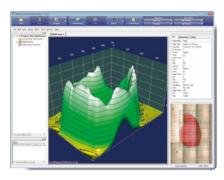


LabSolutions IR

# ПО картирования поверхности

(P/N 206-74559-91)

Картирование поверхности позволяет получать карту поглощения на поверхности образца в зависимости от выбранного положения при использовании ИК-микроскопа. Параметры картирования, такие как диапазон картирования, интервал сканирования и положения коррекции фона, могут быть установлены с использованием изображения. Поддерживается возможность картирования по площади, линейного картирования и картирования в произвольном порядке. В дополнение к картированию в обычных режимах пропускания и отражения возможно проводить микрокартирование поверхности с использованием дополнительного НПВО-объектива. Из полученных данных картирования можно извлечь спектры и для отображения конкретных полос, соответствующих тем или иным функциональным группам. Полученные данные могут быть представлены в виде 3D-изображения, графика или в спектральной режиме с помощью наложения спектров один на другой. Программное обеспечение включает функцию презентаций в 3D.



LabSolutions IR

# Макроплатформа

(P/N 206-74562-91)

Макроплатформа требуется для запуска специально создаваемых по заказу пользователя макропрограмм. Если, например, вы хотите выполнять рутинную работу, для которой некоторые функции используются в заранее определенном порядке, или запустить автоматическую систему измерения в сочетании с автоматической сменой образцов, то обратитесь к представителю Shimadzu за разработкой необходимых макропрограмм (за доп. плату).

#### LabSolutions IR

# Программа обработки количественных данных методом наименьших квадратов (Р/

(P/N 206-74560-91)

Как частный случай множественного линейного регрессионного анализа, метод наименьших квадратов (PLS) представляет собой хемометрический метод, который широко используется для одновременного количественного определения нескольких компонентов. Программа включает методы PLS I и PLS II.

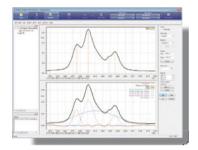


#### LabSolutions IR

## Программа разделения пиков

(P/N 206-74561-91)

Обычно полосы поглощения в инфракрасных спектрах состоят из перекрывающихся пиков. Программа аппроксимации кривой по точкам (расщепления пиков) может быть использована для разделения полос поглощения на отдельные пики, выделения пиков, на которые повлияла водородная связь, и идентификации пиков функциональных групп, скрытых полосами поглощения. Доступны шесть способов аппроксимации кривых, включая кривую Гаусса, Лоренца и Гаусса+ Лоренца. Кривая может быть выбрана в соответствии с формой пиков в полосе поглощения. Пики разделенных компонентов отображаются вместе с результирующими спектрами, что позволяет точно оценить разделение.



#### LabSolutions IR

#### Представление результатов в виде 3D-изображения (Р/N 206-74563-91)

Функциональные возможности этого программного обеспечения:

#### Изменение метода отображения данных

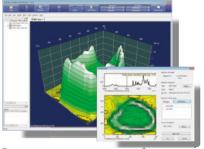
 Измеренные данные могут отображаться в трехмерном виде или путем наложения спектров друг на друга, или с возможностью поворота изображения под нужным углом.

#### Трехмерная обработка данных

- Можно выделить изменение при конкретной длине волны
- Функции обработки данных включают извлечение данных, сглаживание, выбор нулевой базовой линии, коррекцию фона, производные первого или второго порядка, НПВО-коррекцию.

#### ▶ Создание трехмерного изображения по спектрам

• Спектры, измеренные через определенные промежутки времени, можно собрать и создать 3D-изображение.



Примечание: с помощью программного обеспечения для представления результатов в виде 3D-изображения невозможно контролировать картирование поверхности или работу ИК-микроскопа.

# Библиотека примесей для LabSolutions IR

(P/N 206-33179-91)

Эта уникальная библиотека Shimadzu — эффективный инструмент для определения загрязнений в водопроводной воде и пищевых продуктах. Помимо информации о фактически отобранных образцах загрязнений и комплектующих для обслуживания систем водоснабжения, имеющихся в продаже в Японии, эта библиотека также содержит результаты рентгенофлуоресцентного анализа (файлы PDF), что позволяет значительно повысить точность поиска. В отличие от других библиотек содержит данные по смешанным составам и предлагает весь необходимый объем знаний и опыта для выполнения качественной оценки.

# Библиотека полимеров, подвергшихся воздействию УФ-излучения\* (Р/N 206-31808-41)

Библиотека включает информацию о пластмассах, которые разрушились вследствие окисления, вызванного воздействием УФ-излучения. Она особенно полезна для анализа загрязняющих веществ, которые обычно разлагаются. Библиотека также эффективна при анализе неизвестных микропластиков, которые трудно идентифицировать с помощью стандартных библиотек.

# Библиотека полимеров, подвергшихся термической деструкции\* (Р/N 206-33039-91)

В отличие от аналогичных библиотек данная библиотека содержит информацию о пластиках, подвергшихся процессу окисления при нагревании. Использование этой библиотеки будет особенно эффективным в случае, когда примеси содержат полимеры, подвергшиеся термической деструкции.

\* В состав данной библиотеки Shimadzu Corporation входят спектры образцов, измеренные Центром технической поддержки Хамаматцу Института промышленных исследований префектуры Сидзуока.

IRTracer, LabSolutions, эко-маркировка, EDXIR-Analysis и EDXIR-Holder являются товарными знаками Shimadzu Corporation или ее дочерних компаний в Японии и/или других странах. MIRacle является торговой маркой PIKE Technologies.
Містоsoft и Windows являются либо зарегистрированными товарными знаками, либо товарными знаками корпорации Microsoft в США и/или других странах.



Shimadzu Corporation www.shimadzu.com/an/

Для применения в исследовательских целях. Не использовать в диагностических целях. Настоящий документ может содержать ссылки на продукты, которые недоступны в вашей стране. Пожалуйста, свяжитесь с нами, чтобы проверить наличие указанных продуктов в вашей стране.

Названия компаний, названия продуктову/слуг и логотипы, используемые в этой публикации, являются торговыми марками и торговыми наименованиями корпорации Shimadzu, её дочерних компаний или её филиалов, независимо от того, использованы ли они или нет с символом торговой марки «ТМ» или «\*».

В настоящей публикации могут использоваться торговые марки и торговые наименования третьих лиц для обозначения либо юридических лиц, либо их продуктов/услуг, независимо от того, использованы ли они или нет с символом торговой марки «ТМ» или «\*». Shimadzu не предъявляет права собственности на какие-либо торговые марки и названия, кроме своих собственных.

Содержание настоящей публикации предоставляется в исходном виде, без каких-либо гарантий, и может изменяться без уведомления. Shimadzu не несет никакой ответственности за любой ущерб, прямой или косвенный, связанный с использованием данной публикации.