



Spectrum软件的 掺杂物筛查

前言

在产品的掺假检测中, 从来没有像PerkinElmer中红外与近红外光谱仪中采用的Spectrum10软件掺杂物筛查功能这样容易。掺杂物筛查是基于强大的算法提供简单方法开发来保证对意外引入产品中材料的检测、识别与定量分析。

在日后的确证分析中, 通过扫描纯品掺杂物光谱图并将其添加到已有掺杂物列表中, 可将新的掺杂物轻松添加至分析系统。没有繁琐的校准是必需的。掺杂物筛查在被需求时作为数据处理命令在Spectrum10软件中执行。它亦可较为容易地引入到Spectrum10的宏命令与Spectrum Touch方法以提供一个可以与PerkinElmer中红外和近红外简单的交钥匙分析操作。如果产品通过了掺杂物筛查, 这些方法可额外包含Spectrum Quant方法来量化产品中的材料含量。

便捷简单的掺杂物探查

掺杂物筛查是实验室为证明正确产品(并未被污染或掺杂)的理想方法, 无需用集中的软件培训或方法开发。Spectrum10软件用于采集您产品代表性“优秀样本”的红外或近红外光谱数据。这是由多个光谱代表您产品的不同来源, 例如不同的批次、来源与等级的材料等。以上光谱用于确定产品可接受的边界条件。接下来, 您收集所有已知纯品掺杂物材料的光谱。这些光谱定义为掺杂物光谱。

掺杂物筛查几乎不需要额外的培训即可运行起来(如图1)。方法开发可以被快速跟踪归因于例程被即时嵌入Spectrum10软件,而非作为一个单独的软件包。

例如,一旦材料的光谱图与掺杂物的光谱图通过Spectrum10软件收集获得,引入的方法可简单地通过用一个文件选择器来选择所需的光谱实现。该方法就可通过软件自动生成。

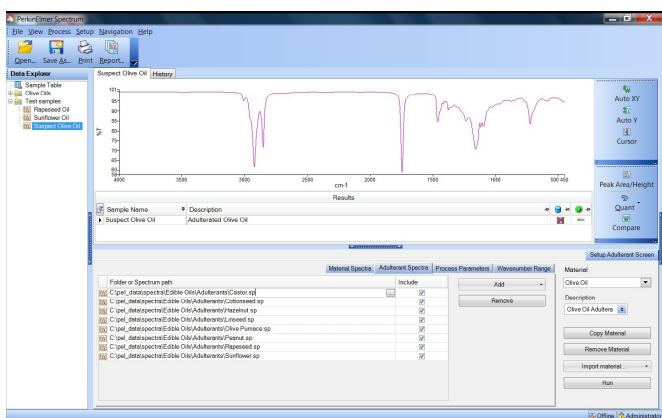


图1. Spectrum10软件内的掺杂物筛查

快速方法的优化

掺杂物筛查方法可以快速地开发检测与量化掺杂物含量水平。定量预测是以单纯掺杂物光谱图为基础的,而不需要做校准标准与方法的准备。一套预处理算法,包括协助常见抽样变异性问题并改进方法的稳定性,归因于光谱基线的影响与光谱区域内较低的信噪比。空白区域可以被纳入到排除的光谱区域,不提供有用的信息的方法。

此外,通过/失败的限制可以根据掺杂物的浓度设定。

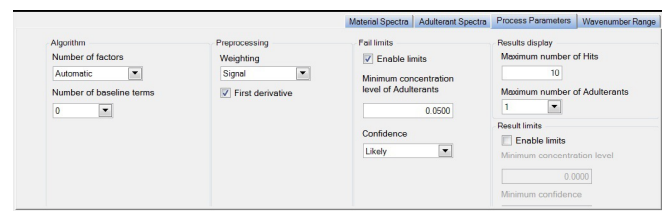


图2. 掺杂物筛查设置

掺杂物筛查的算法

当经由扫描获得样品光谱时,该算法首先将其与由参考材料产生的PCA模型进行比较,该模型与每个掺杂物的光谱相互作用并得到增强。如果在与样品光谱拟合时模型内已包含的掺杂物光谱较大程度地增强,那么很有可能该掺杂物

确实存在于样品之中。通过寻找多达三种潜掺杂物的每一个组合,此算法同样适用于多种掺杂物的污染。算法输出的是在图谱库中每种掺杂物的预估浓度、检出限和置信系数。

浓度预估是在不考虑有效光程变化的影响,以谱库内掺杂物光谱与样品光谱的相对强度为基础的,因此,这是一种半定量的预估。检出限的预估也是同样的。最终,所报告的置信系数表明掺杂物确实存在的可能性。

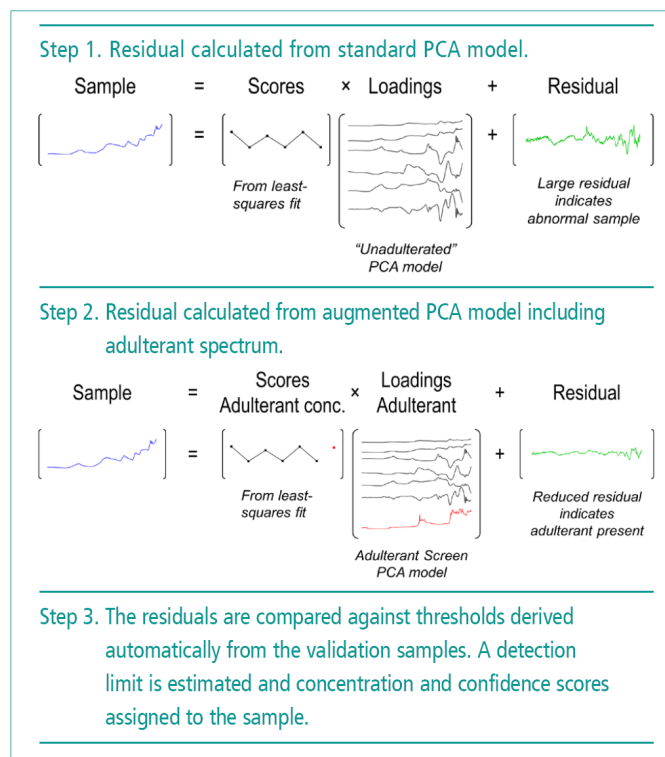


图3. 掺杂物筛查是怎样工作的

掺杂物的报告

掺杂物筛查会尝试监控您材料中已知掺杂物的存在,同时如果掺杂物在样品中的含量超出了检出限将会报告其存在。图4中展示了橄榄油中掺杂物筛查的典型结果。

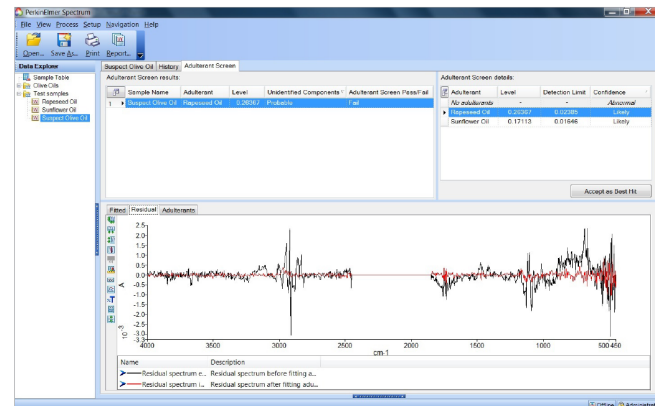


图4. 橄榄油中红外光谱的掺杂物筛查结果

添加与未添加掺杂物的剩余光谱将表明通过添加一种或几种掺杂物得到的改善。

结果将包含通过/失败的组成部分、掺杂物的指认与掺杂物浓度的预估。浓度的预估是以纯品掺杂物在被分析材料的整体光谱的光谱贡献为基础。一个额外的置信系数使结果更加明确。

将您的掺杂物筛查方法付诸行动

掺杂物筛查是存在于Spectrum 10软件中众多流程选项之一，可按照要求应用于任何单一光谱或多个光谱。若已采集到的光谱需要进行分析，只需点击屏幕的掺杂物筛查。

由于从数据收集到最终的完整报告允许完整的方法开发，它同样可被用来作为Spectrum10软件中宏的一个步骤，或是输出到LIMS，或是输出到电子实验室笔记本（ELN）。TIBCO Spotfire®数据可视化与分析软件堪称是将掺杂物筛查分析结果与其它分析技术获得数据融合的完美环境。

即时筛查允许方法开发人员自由地输入文本甚至可以使用当地语言链接SOP操作流程以保证使用者按照标准程序操作。

使用独特的Spectrum Touch界面允许简单的触摸/点击导航进行您的分析，而不是传统的指向与点击的方法，来充分探索现代触摸屏电脑的功能性（图6）。即使执行在Spectrum 10下多个光谱的掺杂物筛查，亦可通过单一的点击操作实现。

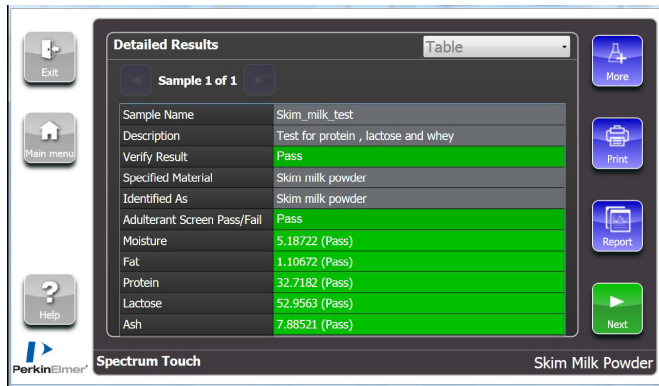


图6. Spectrum Touch下实现奶粉掺杂物筛查

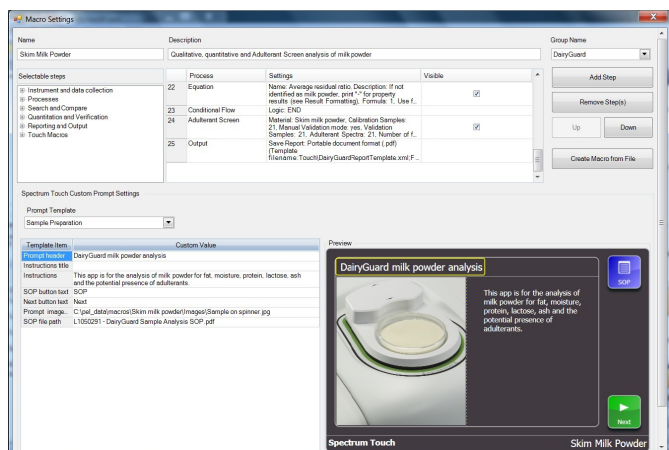


图5. 在PerkinElmer DairyGuard中将奶粉的掺杂物筛查设置于一个宏中

掺杂物筛查的订货信息

Part Number	Description
L1101026	SPECTRUM ADULTERANT SCREEN – (1 User license) Spectrum Adulterant Screen is an add-on to Spectrum 10 that allows you to develop and execute screening methods for materials of concern.
L1101034	SPECTRUM ADULTERANT SCREEN (5 User license)
L1101035	SPECTRUM ADULTERANT SCREEN (10 User license)
L1101043	SPECTRUM ADULTERANT SCREEN ES (1 User license)
L1101044	SPECTRUM ADULTERANT SCREEN ES (5 User license)
L1101045	SPECTRUM ADULTERANT SCREEN ES (10 User license)
LX108875	SPECTRUM 10 Enhanced Security (ES) (1 User license)
L1101019	SPECTRUM 10 Enhanced Security (ES) (5 User license)
L1101020	SPECTRUM 10 Enhanced Security (ES) (10 User license)

珀金埃尔默仪器（上海）有限公司
地址：上海 张江高科技园区 张衡路1670号
邮编：201203
电话：021-60645888
传真：021-60645999
www.perkinelmer.com.cn



要获取全球办事处的完整列表，请访问[http:// www.perkinelmer.com.cn/AboutUs/ContactUs/ContactUs](http://www.perkinelmer.com.cn/AboutUs/ContactUs/ContactUs)

版权所有 ©2014, PerkinElmer, Inc. 保留所有权利。PerkinElmer® 是PerkinElmer, Inc. 的注册商标。其它所有商标均为其各自所有者或所有者的财产。