



## ИК-фурье спектрометр IRAffinity-1S

Инфракрасный спектрофотометр с преобразованием Фурье IRAffinity-1S идеально подходит для высокоточного анализа с целью выявления инородных тел и загрязняющих веществ в сырье, медицинских продуктах, косметике, упаковке и покрытиях.

**Области применения** включают анализ сырья, судебную экспертизу, экологию, продукты питания, фармацевтику, косметику, упаковку и покрытия.



Это идеальная рабочая лошадка, подходящая для обучения, рутинного анализа качества / контроля качества и исследований.

ИК-Фурье спектрометр IRAffinity-1S предлагает полную функциональность для всех методов FTIR, включая передачу, диффузное отражение и ослабленное полное отражение (ATR), чтобы соответствовать разнообразным требованиям приложений.

IRAffinity-1S - прибор среднего размера обеспечивает идеальный баланс производительности и удобства использования для всех типов лабораторий.

Измерения и идентификация выполняются в течение нескольких секунд с использованием встроенной спектральной библиотеки, содержащей более 12000 спектров (дополнительные библиотеки доступны в виде надстроек).

## Особенности ИК-фурье спектрометра IRAffinity-1S

Благодаря включению высокоэнергетического керамического источника света, терморегулируемого высокочувствительного детектора DLATGS, высокопроизводительного оптического элемента, а также оптимизации электрической системы и оптической системы, IRAffinity-1S достигает наивысшего отношения SN в своем классе. Самое высокое в своем классе - высокое спектральное качество обеспечивает надежную химическую идентификацию

Система **Advanced Dynamic Alignment** обеспечивает оптимальное и стабильное качество спектров.

Электронный осушитель воздуха гарантирует, что интерферометр всегда свободен от влаги, даже когда устройство не включено. Это дает высококачественные данные и продлевает срок службы прибора.

Система плавного перемещения зеркала, контролируемая системой динамического выравнивания, позволяет IRAffinity-1S выдавать спектры оптимального и стабильного качества уже после короткого времени прогрева. Скорость выборки более 5000 раз в секунду, функция динамического выравнивания поддерживает IRAffinity-1S в оптимальном рабочем состоянии.

Программа самодиагностики контролирует работу системы при инициализации и постоянно во время работы. Кроме того, для оценки предоставляются стандартные программы проверки EP / CHP / JP / USP / ASTM. производительность FTIR.

Отсек для образцов стандартного размера IRAffinity-1S позволяет использовать широкий спектр аксессуаров, как от Shimadzu, так и сторонних производителей, включая различные аксессуары для ATR и микроскопы FTIR, для удовлетворения любых аналитических потребностей. Многие аксессуары доступны с системой микросхем автоматического распознавания, позволяющей автоматизировать FTIR-тестирование и настройку параметров. Это расширяет возможности безопасности для регулируемых сред, уменьшая при этом ошибки, связанные с пользователями и средой.



**Доступен широкий спектр аксессуаров** - аттенуированное полное отражение (ATR), ИК-Фурье-микроскоп, измерение отражения (диффузное и зеркальное), комплект для отбора твердых проб, комплект для отбора проб жидкости, комплект для измерения газа и многое другое, включая специальные аксессуары (Руководство по выбору аксессуаров)

- ATR аксессуар значительно сокращает время анализа по сравнению с традиционным способом формирования таблеток из KBr.

- ИК - Фурье микроскопы ( AIM-9000 микроскоп, SurveyIR микроскоп ) позволяют проводить измерения образцов микронного размера. Эти образцы включают микропластик, загрязняющие вещества в печатных платах и отложения в трещинах оборудования, и это лишь некоторые из них.

**Включена библиотека FTIR, содержащая 12 000 спектров** обычных полимеров, химических соединений и загрязняющих веществ. Дополнительные библиотеки доступны как опции.

Входящее в комплект поставки **ПО LabSolutions IR** предлагает передовые функции, такие как измерение толщины пленки, функция проверки, преобразование крамерсов-Кронига, спектральный пик поиск, выбор, расширенный анализ PLS и многие другие.

Кроме того, с помощью прилагаемого усовершенствованного программного обеспечения для управления инфракрасным излучением LabSolutions пользователи могут получить максимальную отдачу от прибора с точки зрения сбора данных, анализа, целостности данных и администрирования пользователей.

При наличии соответствующего пакета программного обеспечения IRAffinity-1S и настройка программного обеспечения могут обеспечить полную целостность данных, администрирование пользователей и журналы аудита, чтобы полностью соответствовать требованиям FDA 21 CFR Part 11.

### Расширенное соответствие нормативным требованиям

- GLP / GMP, FDA 21 CFR Part 11 и другие правила с соответствующим пакетом программного обеспечения

- Полная поддержка Фармакопеи (JP, USP и EP). Программы проверки включены для пользователей, чтобы периодически измерять и записывать целостность измерений.

**Расширенные функции безопасности** для обеспечения контрольных журналов и различных уровней полномочий пользователей («Администратор», «Разработчик» и «Оператор»).

### Технические характеристики

Интерферометр	Интерферометр Майкельсона (угол падения 30 °) Оборудован системой динамического выравнивания Герметичный интерферометр с автоматическим осушителем
Светоделитель	KBr с германиевым покрытием
Источник света	Керамический источник света высокой энергии
Детектор	Детектор DLATGS с контролем температуры
Диапазон волновых чисел	7800-350 см <sup>-1</sup>
разрешение	0,5, 1, 2, 4, 8, 16 см <sup>-1</sup>
Габаритные размеры	514 (Ш) x 606 (Г) x 273 (В) мм
Масса	35 кг
Соотношение сигнал / шум	30 000: 1



## Программа валидации

**IRAffinity-1S** оснащён программой проверки (валидации) в соответствии с Японской, Европейской Фармакопеями и ASTM (Американское общество по испытанию материалов). Эта программа проверяет основные рабочие характеристики прибора при помощи полистирольной пленки и создаёт отчёт.

Процедура самодиагностики IRAffinity-1S выполняется при инициализации прибора, в процессе которой происходит проверка электрической, сигнальной и оптической систем. Если интерференция неудовлетворительная, то условия интерференции оптимизируются при помощи динамической цифровой юстировки интерферометра.

Для повышения надёжности прибора, предусмотрена не только самодиагностика IRAffinity-1S при запуске, но также контроль состояния прибора на протяжении всей работы. Кроме того, можно проверить основные параметры прибора с помощью программы проверки, которая входит в стандартный комплект программного обеспечения.

В процессе работы контролируется состояние источника излучения, гелий-неонового лазера, влажность, вспомогательное оборудование и системы автоматической смены образца. Наличие дополнительного оборудования определяется автоматически, и также автоматически устанавливаются оптимальные условия измерения.\* (Только при установке аксессуаров с функцией QuickStart). Эти диагностические и контрольные результаты записываются в лог-файлах.

В соответствии с требованиями Фармакопей контролируются: форма и интенсивность энергетического спектра; разрешение, точность установки длины волны, воспроизводимость волновых чисел, воспроизводимость пропускания (поглощения). В соответствии с требованиями ASTM производится: Испытание энергетического спектра, измерение уровня шума на основе измерения линии ста процентов пропускания.

## ПО LabSolutions IR

**ПО LabSolutions IR** использует расширенные функции управления, чтобы обеспечить безопасное и высоконадёжное системное решение позволяя управлять всеми своими данными с одного компьютера. ПО не требует подключения к сети и рекомендуется для клиентов, которым требуется соответствие ER / ES в автономном формате. LabSolutions IR также может быть подключен к существующим системам **CLASS-Agent** и поэтому рекомендуется для клиентов, которые хотят использовать свои установленные методы, или для систем, которые видят низкую частоту использования.

- Как часть семейства управляющих программ **LabSolutions, LabSolutions IR** предоставляет расширенные функции безопасности и администрирования пользователей.
- Соответствует нормам ER / ES, включая FDA 21 CFR Part 11 и PIC / S.
- Централизованное управление ценными данными FTIR, а также данными LC и GC на сетевом сервере позволяет легко контролировать безопасность и резервное копирование.
- Службы терминалов можно использовать для управления LabSolutions IR из удаленного места, даже если LabSolutions IR не установлен на клиентском ПК.

Управляйте своими ценными данными с централизованного сетевого сервера. Серия LabSolutions IR обеспечивает сетевое управление FTIR, а также данными LC и GC. Кроме того, он может управлять широким спектром аналитических инструментов в сети.



## Богатые библиотеки и высокопроизводительная функция поиска

- В стандартную комплектацию входит библиотека из примерно 12000 спектров.
- Широкий спектр библиотек, включая уникальные библиотеки SHIMADZU, реагенты, полимеры и многое другое, включены в стандартную комплектацию.
- Поиск с использованием стандартных библиотек обеспечивает высококачественные результаты без покупки дополнительных библиотек.
- Библиотека пищевых добавок SHIMADZU
- Библиотека загрязнителей SHIMADZU: Реагенты, Полимеры, Фармацевтические продукты, агрохимикаты, Неорганические соединения и т. д.

## Высокопроизводительные функции поиска

- ПО LabSolutions IR обеспечивает высокое качество результатов поиска с помощью 4 высокопроизводительных методов поиска (спектральный поиск, поиск пиков, текстовый поиск и комбинированный поиск) и библиотек, содержащих около 12 000 спектров. Также можно использовать библиотеки, созданные в IRsolution и HYPER-IR, а также коммерческие библиотеки, такие как **Sadtler** и **ST Japan**. Просто перетащите спектры в библиотеку, чтобы создать пользовательскую библиотеку. Редактировать информацию о спектре или удалить спектр из библиотеки также очень просто.

## Макропрограммы для автоматизации работы и экономии трудозатрат

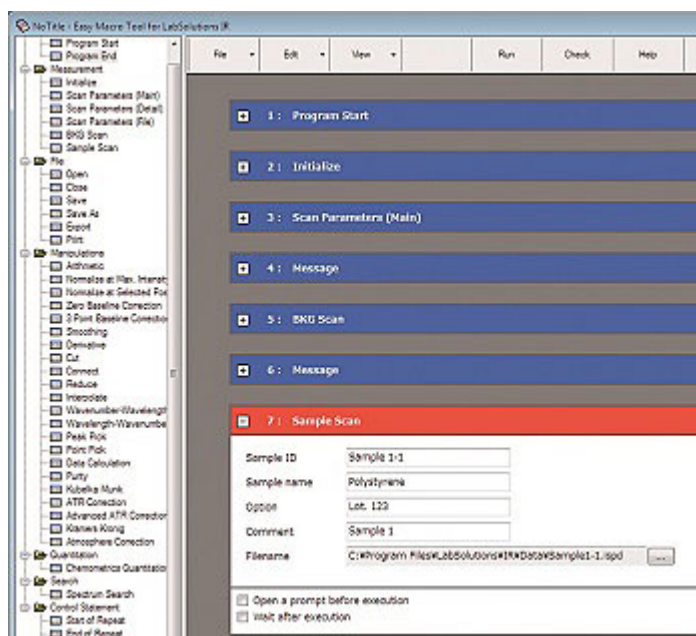
ПО LabSolutions IR позволяет автоматизировать рутинную работу, связанную со сканированием спектра, печатью отчета, анализом примесей и идентификацией веществ. Программы запускаются посредством панели управления LabSolutions IR или через рабочий стол Windows.

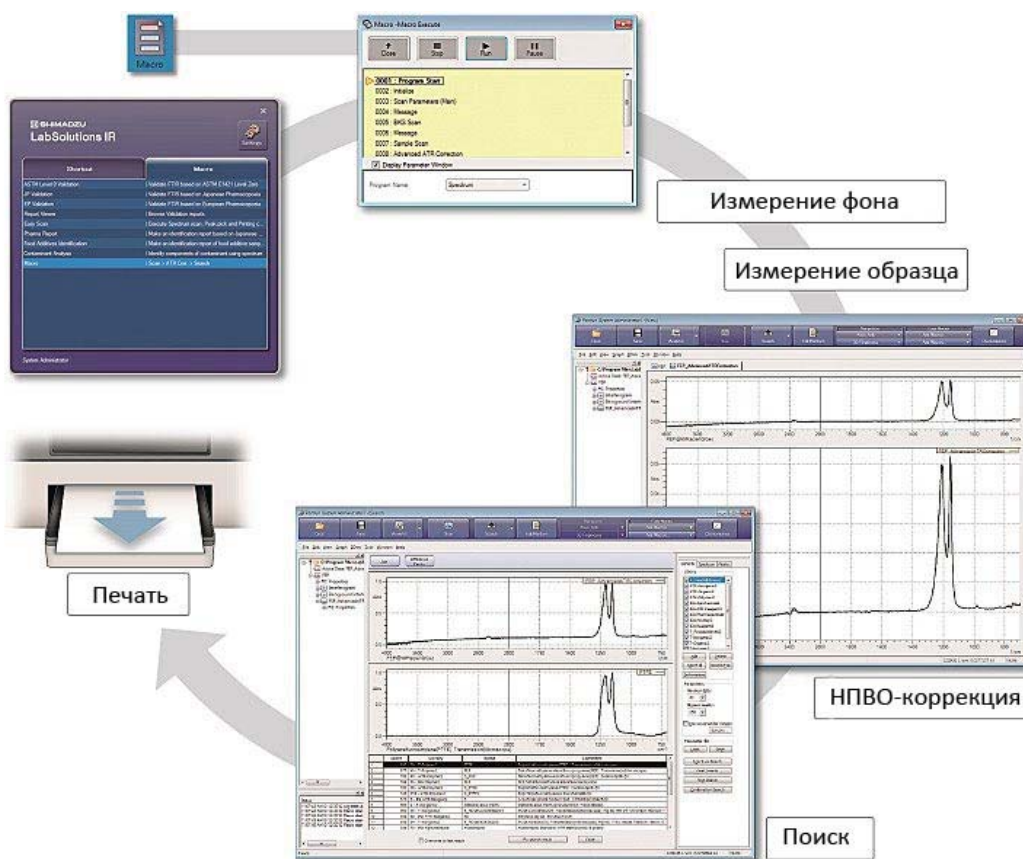
### Функция «Easy Macro» — запуск рутинного анализа всего одним кликом мыши.

Функция «Easy Macro» позволяет создавать макропрограммы, которые подходят для рутинной работы, особенно в случае применения повторяющихся операций. Макрос легко создается простым выбором необходимых операций из списка. Полученная прикладная программа легко регистрируется в панели управления LabSolutions IR и на рабочем столе. Благодаря своей простоте, эти макропрограммы будут полезны, в частности, и для операторов, которые не знакомы с методом ИК-спектроскопии.

### Операции «Easy Macro»

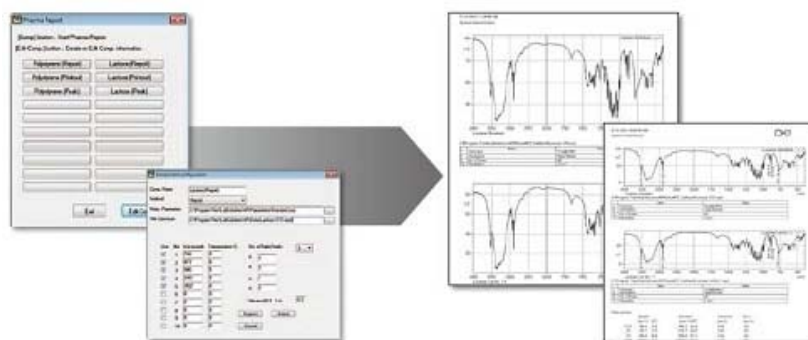
- Инициализация ИК-Фурье спектрометра, настройка параметров сканирования, измерение спектра
- Обработка данных, поиск, количественное определение, печать
- Повторное измерение, отображение сообщений, звуковые сигналы, выполнение внешней программы





**ПО LabSolutions IR** включает две основные прикладные программы - программу анализа загрязняющих веществ / идентификационных тестов - для анализа загрязняющих веществ и идентификационных тестов.

### Программа идентификационного тестирования



Эта программа выносит решения по тестовым образцам «годен / не годен» на основе методов проверки, описанных в Фармакопее, и стандартов, установленных в каждой стране, таких как «Инфракрасная спектрофотометрия» в Фармакопее Японии и Спецификации и стандарты Японии на пищевые добавки. В дополнение к идентификационным тестам для идентификационных испытаний фармацевтических и пищевых продуктов, программа также может использоваться для приемочных и предпозгрузочных инспекций. Программа вычисляет разницу между волновыми числами для стандартных и тестовых образцов и разницу между отношениями интенсивности пиков, а затем распечатывает отчет о результатах оценки «годен / не годен». Он включает спектры 57 веществ, указанных в Японских спецификациях и стандартах на пищевые добавки.



#### 4 особенности программы идентификационного тестирования

- Распечатывает спектры стандартов и образцов для облегчения сравнения.
- Вычисление различий между волновыми числами пиков для стандартов и образцов, различий в соотношении интенсивностей между пиками, оценки «годен / не годен» и распечатка отчетов.
- Обнаружение и печать только пиков, указанных для оценки годен / не годен.
- Спектры 57 образцов по японским стандартам пищевых добавок хранятся в ПО LabSolutions IR.

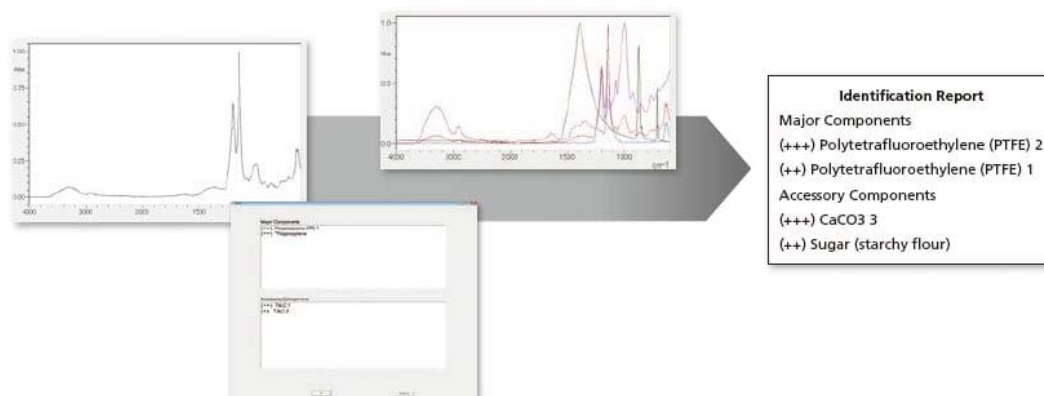
#### Программа анализа загрязняющих веществ

Программа анализа загрязняющих веществ идентифицирует измеряемые загрязнители с использованием запатентованного алгоритма идентификации Shimadzu (патент Японии № 5205918) в сочетании со спектральной библиотекой, содержащей более 550 спектров для веществ, обычно обнаруживаемых как загрязнители. После анализа данных ПО автоматически выносит решение «годен / не годен» и создает отчет. Даже если загрязнитель представляет собой смесь, ПО ищет основные и второстепенные компоненты и отображает их ранги. Поскольку количество компонентов в смеси указывать не требуется, даже операторы с минимальным опытом инфракрасного анализа могут легко анализировать образцы.

Комбинируя собственные алгоритмы SHIMADZU с алгоритмами библиотеки спектров для общих загрязнителей, эта программа идентифицирует загрязнители с высокой степенью точности. Отчеты создаются автоматически после анализа, что сокращает время постобработки до нескольких секунд. Благодаря автоматической отчетности эта простая в использовании программа позволяет операторам даже с небольшими знаниями легко выполнять анализ.

#### 4 особенности программы анализа загрязняющих веществ

- Содержит спектры более 500 тщательно отобранных неорганических веществ, органических веществ и полимеров, которые часто обнаруживаются как загрязнители в отделе аналитических приложений SHIMADZU.
- Позволяет автоматизировать процесс, включая поиск, оценку суждений и создание отчетов.
- Включает алгоритмы, которые фокусируются на спектральных характеристиках, а не на простом поиске спектра.
- Находит основные и второстепенные компоненты и отображаются их ранги.



Здесь показан анализ загрязнения, прикрепленного к поверхности таблетки, с использованием программы анализа загрязняющих веществ. Результаты показали, что политетрафторэтилен (ПТФЭ) был основным компонентом, а сахар и карбонат кальция были дополнительными компонентами. Поскольку два вспомогательных компонента часто используются в качестве компонентов таблеток, предполагается, что компоненты соскребались одновременно при соскабливании загрязнителя.



## Расширенное соответствие нормативным требованиям фармакопеи

- GLP / GMP, FDA 21 CFR Часть 11 и другие нормативные документы с соответствующим пакетом программного обеспечения
- Полная поддержка Фармакопеи (JP, USP и EP). Программы проверки включены для пользователей, чтобы периодически измерять и записывать целостность измерений.
- Расширенные функции безопасности для обеспечения контрольных журналов и различных уровней полномочий пользователей («Администратор», «Разработчик» и «Оператор»).
- С помощью прилагаемого передового программного обеспечения **LabSolutions** пользователи могут получить максимальную отдачу от прибора с точки зрения сбора данных, анализа, целостности данных и администрирования пользователей. При наличии соответствующего пакета программного обеспечения **IRSpirit** и настройка программного обеспечения могут обеспечить полную целостность данных, администрирование пользователей и журналы аудита, чтобы полностью соответствовать требованиям FDA 21 CFR Part 11.

ПО	LabSolutions IR	LabSolutions DB IR	LabSolutions CS
Метод управления данными	Файлы с данными измерений сохраняются и управляются в папках на ПК.	Файлы с данными измерений сохраняются и управляются в базе данных LabSolutions.	
Ссылки на данные	Программа ссылается на файлы на дисках или в папках на ПК.	Программа ссылается на файлы в базе данных.	
База данных LabSolutions	Недоступен	Доступен (база данных находится на локальном ПК)	Доступен (база данных находится на сервере)
База данных КЛАСС-Агент	Доступно (опция)	Недоступно (содержимое базы данных CLASS-Agent может быть перенесено в базу данных LabSolutions.)	
Администрирование пользователей	Доступный		
Администрирование группы прав	Доступный		
Администрация проекта	Недоступен	Доступный	
Автономный / сетевой	Либо можно использовать.	Можно использовать только автономную конфигурацию .	Можно использовать только базы данных в сети. Данные LabSolutions IR можно просматривать с помощью менеджера баз данных на ПК, настроенном для просмотра. Обратите внимание, что LabSolutions IR должен быть установлен на ПК, который используется для просмотра.
Резервное копирование данных	Выполняется для каждого файла с помощью проводника Windows.	Выполняется для каждой базы данных.	



**ПО LabSolutions DB IR** сочетает в себе функции управления аналитическими данными с LabSolutions IR и способна обеспечить безопасное управление данными с одного компьютера. LabSolutions DB IR соответствует требованиям FDA 21 CFR Part 11 и PIC / S и является оптимальной установкой для клиентов.

**ПО LabSolutions CS** При подключении к аналитической сети без ограничений ПО LabSolutions CS управляет всеми аналитическими данными в центральной базе данных на сервере, облегчая доступ к аналитическим данным с любого компьютера, подключенного к этой сети. Службы терминалов (RemoteApp) также можно использовать для управления ПО LabSolutions IR из удаленного места, даже если LabSolutions IR не установлен на клиентском ПК. ПО LabSolutions CS идеально подходит для клиентов, которые хотят соблюдать правила ER / ES и хотят управлять данными LC / GC вместе с данными FTIR на одном сервере, на котором размещается большое количество пользователей.

### **Библиотека загрязнителей для LabSolutions IR**

Это эффективный инструмент для анализа загрязнителей в водопроводной воде и пищевых продуктах. Библиотека включает профили рентгеновской флуоресценции (файлы PDF) для значительного повышения точности поиска загрязняющих веществ. В отличие от существующих библиотек, она содержит данные о смешанных соединениях.

### **Библиотека термически поврежденных пластиков \***

Эта библиотека содержит данные о деградированных пластиках, которые были окислены при нагревании. Библиотека демонстрирует свою эффективность, когда загрязняющие вещества включают разложившиеся вещества.

## **Совместимое с LabSolution IR дополнительное ПО**

### **ПО для измерения кинетики Time Course (P/N 206-74558-91)**

Программа Time Course используется для сбора спектров через равные промежутки времени и создает набор данных, используемый для отслеживания реакций как функции времени. Изменения высоты пика и площади пика можно использовать для расчета значений, связанных с кинетикой реакции. Информация сохраняется и отображается в 3D или на контурной диаграмме. Данные можно пересчитать, изменив параметры. Интервал сканирования зависит от спектрального разрешения, числа сканирований и скорости перемещения зеркала. Максимальное время измерения составляет 48 часов, но зависит от параметров сканирования.

Самая высокая скорость сканирования составляет 7 секунд (1 сканирование) при разрешении  $16 \text{ см}^{-1}$  и скорости зеркала 9 мм/с. Программное обеспечение Time Course включает в себя программу 3D-обработки.

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

Функциональные возможности этого программного обеспечения: Изменение метода отображения данных • Измеренные данные могут быть отображены в трехмерном виде или путем наложения спектров друг на друга, или с возможностью поворота изображения под нужным углом. Трехмерная обработка данных • Может быть выделено изменение при конкретной длине волны • Функции обработки данных включают в себя извлечение данных, сглаживание, выбор нулевой базовой линии, коррекцию фона, производные первого или второго порядка, НПВО-коррекцию. Создание трехмерного изображения по спектрам • Спектры измерены через определенные промежутки времени, могут быть собраны для создания 3D-изображения. \* С помощью программного обеспечения для представления результатов в 3D-изображении невозможно контролировать картирование поверхности или работу ИК-микроскопа AIM-8800.





### **ПО Картирование 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 себя функцию презентаций в 3D.

### **ПО Комплект для подключения CLASS-Agent (P/N 206-74557-91)**

Это программа необходима для подключения LabSolutions IR к системе Class-Agent. Спектры, измеренные с помощью LabSolutions IR, управляются через существующую базу данных Class-Agent. База данных позволяет управлять всем «жизненным циклом» данных, что включает в себя создание (измерение спектра), проверку, хранение, просмотр, резервное копирование и удаление данных анализа.

\* Только спектры, сохранённые в базе данных CLASS-Agent. Данные картирования поверхности, кинетические данные, калибровочная кривая и таблицы количественных результатов не сохраняются.

### **ПО для количественного анализа PLS (P/N 206-74560-91)**

Метод PLS (метод частных наименьших квадратов) широко используется для одновременного количественного определения нескольких компонентов. ПО PLS позволяет анализировать данные по уравнению регрессии, определяемому методом наименьших квадратов (частичные наименьшие квадраты). Программа количественного анализа PLS предлагает методы PLS1 и PLS2 и может отображать входные значения в сравнении с расчетными значениями, значения PRESS в сравнении с факторами PLS, векторы загрузки, значения баллов и многое другое.

\* Метод количественного определения PLS широко используется в хемометрии для одновременного количественного определения нескольких компонентов аналогично полилинейному регрессионному анализу.

### **ПО для разделения пиков (P/N 206-74561-91)**

Как правило, полосы поглощения в ИК-спектрах состоят из перекрывающихся полос. Программное обеспечение для разделения пиков зачастую используется для выделения отдельных полос, соответствующих колебанию функциональных групп или межмолекулярным взаимодействиям. Тот или иной тип кривой выбирается в соответствии с формой пиков в интересующем участке ИК-спектра. Выделенные полосы, полученные в результате разделения, отображаются вместе с результирующей огибающей, что позволяет оценить точность разделения.

### **ПО Макроплатформа (P/N 206-74562-91)**

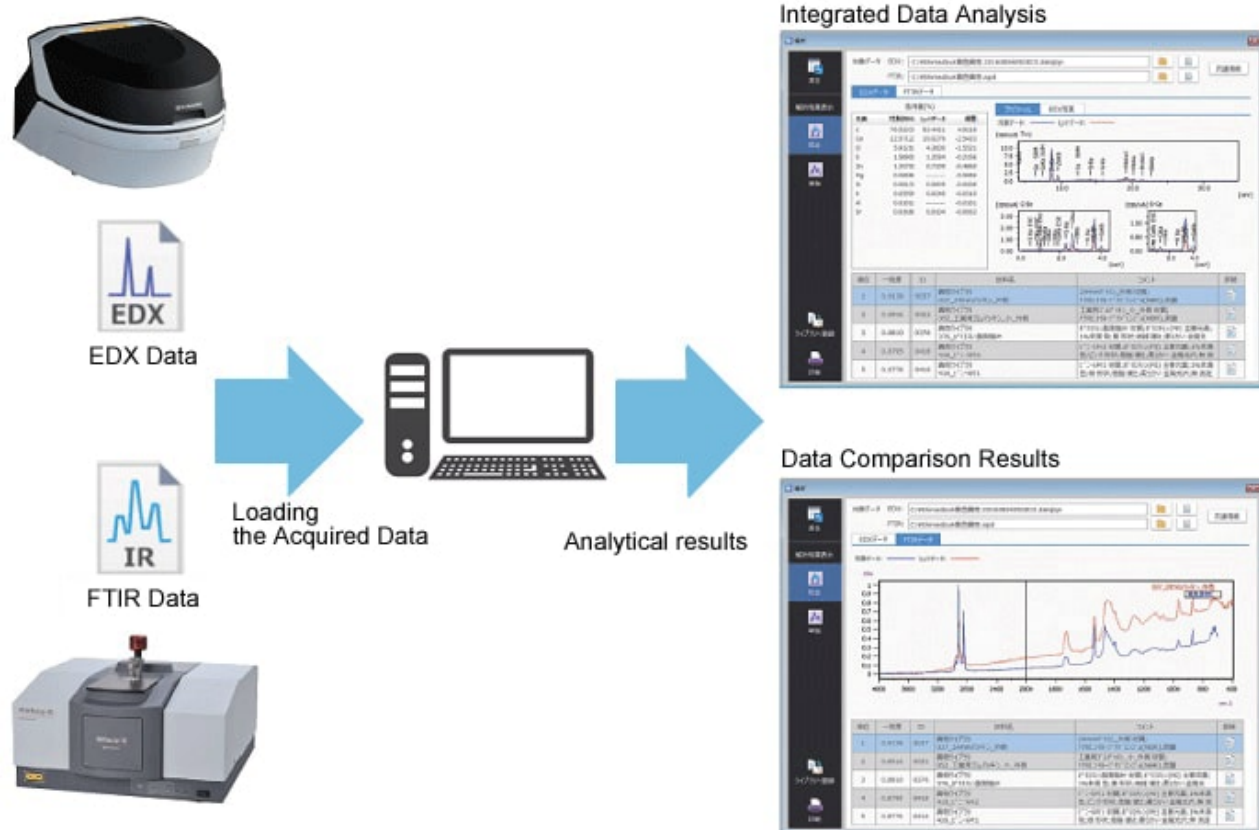
Макро платформа требуется для запуска специально созданных по заказу пользователя макро программ. Если, например, вы хотите выполнять рутинную работу, для которой некоторые функции используются в заранее определенном порядке, или вы хотите запустить автоматическую систему измерения в сочетании с автоматической сменой образцов, то обратитесь к представителю Shimadzu за разработкой необходимых макропрограмм.



## Программное обеспечение EDXIR-Analysis

Программное обеспечение EDXIR-Analysis специально разработано для выполнения качественного анализа с совместным использованием данных, полученных с помощью флуоресцентного спектрометра с энергодисперсионным рентгеновским излучением (EDX) и инфракрасного спектрофотометра с преобразованием Фурье (FTIR). Это ПО используется для выполнения комплексного анализа данных FTIR, который отлично подходит для идентификации и квалификации органических соединений, и EDX, который подходит для элементарного анализа металлов, неорганических соединений и другого содержимого. Затем ПО отслеживает результаты идентификации и степень соответствия. Его также можно использовать для самостоятельного анализа данных EDX или FTIR.

Библиотека, используемая для анализа данных (содержащая 485 файлов данных), является оригинальной для Shimadzu и была создана в сотрудничестве с агентствами водоснабжения и производителями продуктов питания. В библиотеке можно зарегистрировать дополнительные данные, а также файлы изображений и файлы документов в формате PDF. Она также эффективна для связанного хранения различных типов данных в виде электронных файлов.



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»). С помощью функции сравнения данных возможно вычислить степень соответствия между фактически измеренными данными и данными, зарегистрированными в библиотеке. При нажатии кнопки «Печать» результаты печатаются в фиксированном формате, а также сохраняются в формате Word.



\*1: Результаты, полученные на EDX, позволяют разделить компоненты на неорганические, органические и смешанные. Объединенный анализ данных выполняется путем назначения приоритетов для каждого типа соединений.

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

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 (Pb) и акрилов, которые, в свою очередь, отсутствуют в стандартном изделии. Соответственно, сделано предположение, что объект исследования содержит компоненты, отличающиеся от компонентов в стандартном изделии.

### Просмотр данных, регистрация, редактирование, удаление данных, изображения и файлы 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.

The image displays a software interface for data management and analysis. At the top, a table lists sample information with columns for ID, Sample Name, Comment, ADI Status, and FTIR Data. Below this, several windows are shown: a graph window for EDX spectra, a window for FTIR spectra and comments, a window for document files, and a photo viewer window. A text box on the right indicates that the software supports photos, files, documents, comments, and other information.

ID	Sample Name	Comment	ADI Status	FTIR Data
0001	Sample, material	Sample 1 (Sample Name)	✓	✓
0002	Sample, material	Sample 2 (Sample Name)	✓	✓
0003	Sample, material	Sample 3 (Sample Name)	✓	✓
0004	Sample, material	Sample 4 (Sample Name)	✓	✓
0005	Sample, material	Sample 5 (Sample Name)	✓	✓
0006	Sample, material	Sample 6 (Sample Name)	✓	✓
0007	Sample, material	Sample 7 (Sample Name)	✓	✓

Спектры EDX, результаты количественного анализа, фотографии EDX, комментарии и прочая информация

Спектры и комментарии к FTIR

Просмотр файлов документов

Просмотр зарегистрированных фотографий

Фотографии, файлы документов, комментарии и другая информация



## Дополнительное оборудование

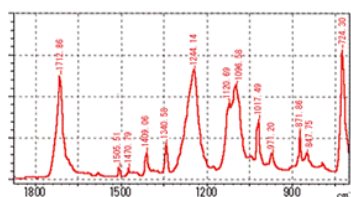
При установке дополнительного оборудования в кюветное отделение, ИК-фурье спектрометра, ПО LabSolutions IR отображает его идентификационный номер и записывает этот номер в соответствующий лог-файл. При этом все оптимальные параметры измерения устанавливаются автоматически.

Ниже описана серия приставок НПВО, которые устанавливаются в кюветное отделение. Все они легко продуваются, что предотвращает попадание пыли в кюветное отделение.

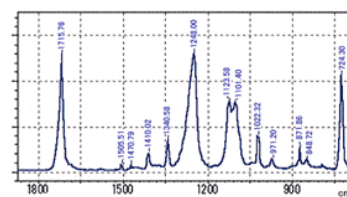
Аттенюированное полное отражение (НПВО) - это метод, который позволяет напрямую измерять образцы для НПВО. Метод НПВО включает прижатие образца к призме с высоким показателем преломления и измерение инфракрасного спектра с использованием инфракрасного света, который полностью отражается внутри призмы. В приставке НПВО используется призма из алмаза, селенида цинка (ZnSe) или германия (Ge). Большинство аксессуаров ATR используют конструкцию с одним отражением, когда ИК-излучение взаимодействует с образцом только один раз. Горизонтальные ATR (НАТР) будут взаимодействовать с выборкой до 45 раз, увеличивая сигнал, но используют большее количество выборки.

Принадлежности ATR можно использовать для измерения самых разных образцов; однако спектры могут изменяться в зависимости от величины давления или иметь небольшой сдвиг в зависимости от материала кристалла. Программное обеспечение Shimadzu **LabSolutions IR** предлагает коррекцию ATR для коррекции взаимодействий с кристаллическим материалом.

При количественных измерениях с использованием ATR необходимо принять дополнительные меры предосторожности. Из-за незначительного смещения пиков с помощью аксессуара ATR, интенсивность одного пика не может использоваться для количественного определения.



**PET MIRacle ZnSe**



**PET MIRacle Ge**

### MIRacle 10 (P/N 206-74127-xx)

Совместимые модели: IRTracer-100, IRAffinity-1S

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.

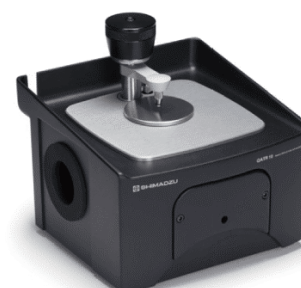
- Порошки, Молдинги, Тонкие плёнки, Плёнки, Жидкости, Пластики

### QATR-10

Совместимые модели: IRTracer-100, IRAffinity-1S

Доступные кристаллические материалы: алмаз (расширенный диапазон), алмаз (высокая пропускная способность), германий, селенид цинка.

- порошки, твердые тела, пленки, жидкости.





### GladiATR 10

(P/N 206-74128-91) (С датчиком давления P/N 206-74128-93)

Приставка однократного нарушенного полного внутреннего отражения. Так как призма изготовлена исключительно из алмаза, можно проводить измерения в диапазоне до  $400\text{ см}^{-1}$ . 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  $45^\circ$ . Кроме того, можно выбрать приставку, оснащенную датчиком давления. Приставки с Ge призмой идеально подходят для анализа образцов с высоким показателем преломления.

- Порошки, Молдинги, Тонкие плёнки, Плёнки, Жидкости, Пластики



### HATR 10 (P/N 206-74126-91)

Совместимые модели: IRTracer-100, IRAffinity-1S

Приставка нарушенного полного внутреннего отражения горизонтального типа, включает в себя призму для анализа жидких и твердых образцов. 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  $45^\circ$ , 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.

- Плёнки, Жидкости, Пластики



### Golden Gate

Совместимые модели: IRTracer-100, IRAffinity-1S, IRSpirit

Доступные кристаллические материалы: алмаз, алмаз с селенидом цинка, германий с селенидом цинка.

- порошки, твердые тела, пленки, жидкости.



### Gateway Horizontal ATR Accessory

Совместимые модели: IRTracer-100, IRAffinity-1S, IRSpirit

Доступные кристаллические материалы: ZnSe

Типы измеряемых образцов: требуются различные держатели образцов для жидкостей и твердых веществ





### DRS-8000A (P/N 206-62301-58)

Несмотря на то, что образцы смешиваются с KBr, нет необходимости в прессовании таблеток. Для пластиковых молдингов часть поверхности счищают наждачной бумагой, прикрепленной к пробоотборнику SiC-sampler (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 в программном обеспечении LabSolutions IR. Распознавание аксессуара происходит автоматически.

- Порошки, Формованные детали (Молдинги)



### SRM-8000A (P/N 206-62304-91)

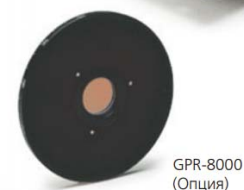
Приставка зеркального отражения с углом падения  $10^\circ$  используется для анализа тонких пленок толщиной порядка миллиметра на металлической пластине. В случае зеркальных образцов, измеряется свет, зеркально отраженный от поверхности образца. Спектры зеркального отражения, которые в свою очередь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

- Тонкие плёнки

### RAS-8000A (P/N 206-62302-91)

Приставка зеркального отражения с углом падения  $70^\circ$  и  $75^\circ$  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) позволяет выполнять измерения с еще более высоким уровнем чувствительности.

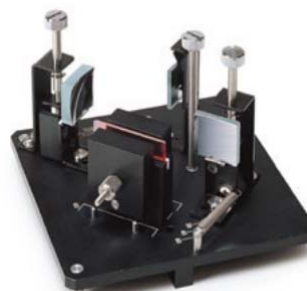
- Тонкие плёнки



### ATR-8000A (P/N 206-62303-91)

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

- Плёнки, Пластики





**5-см газовая кювета (P/N 202-32006-XX)**

**10-см газовая кювета (P/N 202-32007-XX)**

**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.

- Газы



5-см газовая кювета



Газовая кювета с увеличенной длиной оптического пути

## Принадлежности для автоматизированного анализа

**ASC-8000T (P/N 206-63900)**

Система автоматической смены образцов позволяет выполнять автоматические измерения до 18 таблеток с KBr (диаметр держателя 13 мм). Держатели пленок и ячейки для суспензии с вазелиновым маслом доступны в качестве опций.

- Порошки, Плёнки, Жидкости



**DRS-8010ASC (P/N 206-62308)**

Автоматическая приставка диффузного отражения позволяет анализировать до 24 порошкообразных проб.

- Порошки



**Система смены образцов 21 (P/N 206-63663-92)**

Система переключения в режиме пропускания между исследуемым образцом и образцом сравнения.

- Порошки, Плёнки, Жидкости



### Аксессуары для анализа микрообразцов

Приставки однократного НПВО, такие как **MIRacle** и **DuraSampleIR**, предназначены для анализа образцов размером несколько миллиметров. Отобранный образец помещается на призму и надежно фиксируется за счет прижимного устройства. ИК-микроскоп используется для анализа образцов размерами от нескольких миллиметров до порядка 10 мкм. Помимо измерений в режиме пропускания и отражения, возможно проведение измерений спектров НПВО, что позволяет провести анализ образца различной формы практически за минуту.

**ИК-микроскоп AIM-9000 (P/N 206-73700-92/96/38/39)**

ИК-микроскоп AIM-9000 обеспечивает полную автоматизацию на всех этапах измерения: наблюдение, выделение области для проведения анализа, измерение спектра, а также идентификация. Программное обеспечение **AIMsolution** может использовать как встроенную библиотеку





спектров ПО LabSolutionsIR, так и коммерчески доступные библиотеки спектров Sadtler и S.T.Japan, библиотеку примесей в водопроводной воде, библиотеку полимеров, подвергшихся термической деструкции.

ИК-микроскоп AIM-9000 оптимизирован для анализа чрезвычайно малых областей образца, благодаря высокой чувствительности прибора (соотношение сигнал/шум 30000:1).

### Характеристики AIM-9000

Оптическая схема: 15× объектив Кассегрейна • МСТ-детектор: охлаждаемый жидким азотом, с термоконтролем Спектральный диапазон: 5000–720 см<sup>-1</sup> (узкий диапазон) 5000–650 см<sup>-1</sup> (широкий диапазон) • TGS-детектор: Спектральный диапазон: 4600–400 см<sup>-1</sup>, автоматическое переключение между детекторами (опционально) • Наблюдение и измерение: Автоматическая фокусировка Наблюдение образцов при проведении измерений Автоматическое измерение в режиме НПВО.

### НПВО-объектив (P/N 206-70450-91)

Объектив нарушенного полного внутреннего отражения с 15-кратным увеличением и углом падения 45°. Конструкция объектива позволяет легко переключаться между режимом наблюдения и измерения спектра. Использование НПВО-объектива особенно эффективно в случае таких образцов, как бумага, пластмасса или очень тонкие пленки.



\* Спектры НПВО, которые в свою очередь схожи со спектрами пропускания, получают путем НПВО-преобразования

## Руководство по выбору принадлежностей для FTIR

Образец		Аналитическая форма и аналитическое состояние	Аксессуар
Твердые тела	Каучуки	Метод полного отражения	Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
			Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR
		Метод жидкой пленки	Съемная ячейка
	Порошки	Метод полного отражения	Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR			





Образец		Аналитическая форма и аналитическое состояние		Аксессуар
		КВг гранулированный метод		Пресс-форма КВг + гидравлический пресс + вакуумный насос
		Метод нуйоля		Съемная ячейка
		Метод диффузного отражения		DRS-8000A (смесь с порошком КВг)
	Бумага, ткань, пряжа	Метод полного отражения		Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
				Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR
		Способ передачи		Держатель пленки (используйте сеточный поляризатор для изучения ориентации молекул)
	Пленка, пластмасса	Метод полного отражения		Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
				Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR
		Способ передачи		Держатель пленки (используйте сеточный поляризатор для изучения ориентации молекул)
Пленочный метод		Разборная ячейка (выпаривайте растворитель, чтобы получить пленку)		
Молоть		Пробоотборник SiC		
Покрытие пленок на металлах	Толщина более 1 мкм	Метод полного отражения	Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10	
			Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR	



Образец		Аналитическая форма и аналитическое состояние		Аксессуар
				Измерение на глубине 1/5 длины волны с помощью призмы Diamond, ZnSe или KRS-5 и до 1/10 с помощью призмы Ge.
			Метод зеркального отражения	SRM-8000A
		Менее 1 мкм	Спектрометрия отраженного поглощения	RAS-8000A (использование сеточного поляризатора увеличивает чувствительность примерно в два раза)
		Метод диффузного отражения		DRS-8000A
	Покрытие пленок на смолах	Метод полного отражения		Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
				Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR
				Измерение на глубине 1/5 длины волны с помощью призмы Diamond, ZnSe или KRS-5 и до 1/10 с помощью призмы Ge.
		Метод зеркального отражения		SRM-8000A (преобразование спектра отражения в спектр поглощения методом Крамерса-Кронига)
	Полупроводники	Прямое измерение		Держатель пленки
	Жидкости	Измерение содержания масла	Измеряет только минеральные масла	Кварцевая ячейка
Также измеряет масла животного / растительного происхождения.			CaF 2 ячейка	
Нелетучие органические растворители		Метод жидкой пленки	Съемная ячейка	
		Метод полного отражения	Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10	



Образец		Аналитическая форма и аналитическое состояние		Аксессуар
				Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR
Летучие органические растворители	Метод решения			Ячейка фиксированной толщины, герметичная ячейка для жидкости
	Быстрое измерение	Метод жидкой пленки		Съемная ячейка
	Метод полного отражения			Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
Водные растворы	Метод полного отражения			Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR
	Концентрация более 10%	Метод жидкой пленки		Съемная ячейка с KPC-5
	Концентрация ниже 10%	Метод ATR		Приставка ATR горизонтального типа или цилиндрического типа с внутренним отражением
Экстракты	Метод полного отражения			Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
	Разностная спектрометрия	Метод решения		Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR
	Выпарить растворитель	Метод диффузного отражения		Ячейка фиксированной толщины
	Метод полного отражения			DRS-8000A (раствор образца подается по каплям на порошке KBr и измеряется после испарения растворителя)
	Метод полного отражения			Многосвязный ATR, такой как ATR-8000A, ATR-8200HA, HATR10
	Метод полного отражения			Односторонний ATR, такой как серия QATR, серия MIRacle, Quest, серия MicromATR



Образец	Аналитическая форма и аналитическое состояние	Аксессуар
Газы	% уровень	Газовая ячейка 5 см / 10 см
	уровень ppm	Газовая ячейка с длинным оптическим путем (предел обнаружения составляет от 0,1 до 1 ppm при оптическом пути 10 м)
Микро / следовые образцы	Жидкости (уровень мкл)	Микроячейка
	Твердые частицы (уровень в мкм)	AIM-9000 (применимо к методам передачи, отражения и ATR)