

SOFTWAREVÉ NÁSTROJE PRO ŘÍZENÍ ANALYTICKÝCH PŘÍSTROJŮ SHIMADZU

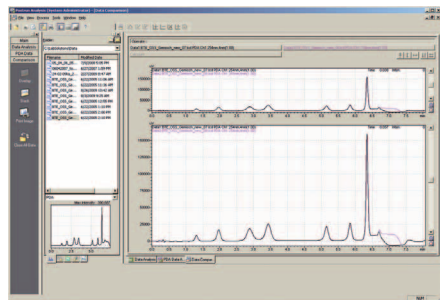
LabSolutions

Software LabSolutions slouží jako pracovní stanice pro řízení systémů kapalinové a plynové chromatografie včetně jejich hmotnostních detektorů. Sjednocené grafické rozhraní nyní výrazně usnadňuje práci s LC/GC přístroji firmy Shimadzu a umožňuje jejich řízení a správu prostřednictvím PC. Současně vykonává úkoly, jako je akvizice chromatografických dat, jejich analýza a správa a vytváření reportů.

Software operuje se čtyřmi základními dialogovými okny. Nabídka „Instruments“ otvírá reálné okno analýzy, které umožňuje nastavení parametrů přístroje, sběr dat a aktuální stav zařízení. Nabídka „Postrun Analysis“ slouží k vyhodnocení dat. V nabídce „Administration“ lze využít širokou škálu správy funkcí, obecného nastavení systému a procesu validace. V nabídce „Manuals“ pak uživatel nalezne všechny dostupné softwarové manuály k aktuálně navolenému přístroji.

LabSolutions vytváří prvotně typy souborů, jako je metoda, data, report, batch, UV spektrum a některé další. Všechny typy souborů jsou rozlišeny příponou. Pro usnadnění práce je dostupná funkce „Data explorer“, která slouží jako klasický vyhledávač souborů s tím, že je zásadně orientována na vyhledávání souborů, které software vytváří.

Obr. 1 – LabSolution – Postrun Analysis



Funkce „Wizard“ umožňuje, v podobě jednoduchého grafického průvodce uživatelsky nastavit požadované parametry instrumentální metodiky, sestavit batch tabulku či nastavit jak kvalitativní či kvantitativní parametry pro vyhodnocování naměřených dat.

V případě zpracování HPLC dat je v softwaru nově zařazena možnost překrytí dat v podobě jednotlivých chromatogramů získaných z PDA detektoru či LCMS v jednom rozhraní.

Nově se také v LabSolutions vyskytuje pro GC zařízení možnost používat funkci AART – Automatic Adjustment of Retention Time. AART funkce automaticky přepočítává retenční časy sledovaných analytů v případě, že dojde k nějaké hardwarové změně v systému, jako je např. zkrácení analytické

kolony, změna stacionární fáze na koloně nebo změna parametrů metody.

GCMSsolution

Shimadzu uvolnilo nový upgrade softwaru GCMSsolution, který je plně orientován na řízení nového kvadrupólového hmotnostního spektrometru firmy Shimadzu QP2010 Ultra. Tento přístroj dosahuje na současném trhu největší citlivosti ve své třídě. Kvadrupól je navržen tak, aby dosahoval vysoké rychlosti skenování (ASSP – Advanced Scanning Speed Protocol) až 20 000 amu/sec.

GCMSsolution nabízí nově i možnost výběru ze tří typů „tunningů“, a to v závislosti na předpokládaném typu aplikaci.

Kromě měření ve Scan a SIM módu nabízí i měření v kombinačním módu Scan/SIM (FASST funkce). Měření v tomto módu je nyní založeno na novém algoritmu, kdy měření v SIM módu probíhá v opačném pořadí, a to směrem od vyšších k nižším hodnotám m/z.

Software také nově nabízí použití tzv. „Eko“ módu přístroje. Eko mód byl navržen ke snížení nákladů na provoz přístroje v laboratoři. Tento mód může být automaticky aktivován po skončení analýzy a šetrným způsobem snižuje příkon elektrické energie a spotřebu nosného plynu.

MDGCSolution

Multidimenzionální GC systém (MDGC) kombinuje dva typy analytických kolon s rozdílnou charakteristikou umožňující detailní separaci. Píky, které nemohou být rozděleny pomocí první analytické kolony, jsou převedeny na kolonu druhou pomocí tzv. „switching elementu“ funkce nazývané „heart cut“.

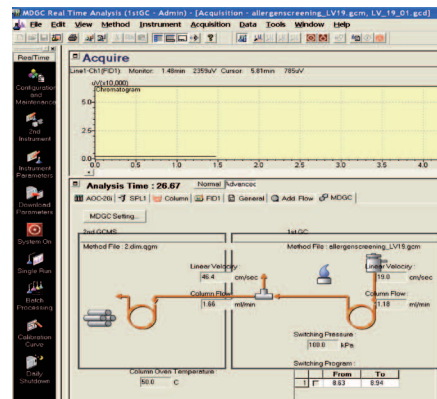
MDGC systém sestávající nově z chromatografického systému GC2010Plus a případně hmotnostního detektoru QP2010 Ultra pak zahrnuje tzv. „multi Dean switching“, jednotku vyvinutou firmou Shimadzu.

Software, který řídí MDGC systém, se nazývá MDGCSolution. Vychází ze stávajícího GCSolution/GCMSsolution a zahrnuje rozšířenou možnost kompletně ovládat obě jednotky. Aplikace pro prováděnou analýzu na prvním i druhém instrumentu operují synchronizovaně a poskytují odstartování analýzy a sběr dat společně. Nastavení pro „switching“ je pak součástí instrumentální metody. Kvalitativní i kvantitativní vyhodnocení dat se děje pomocí GC/GCMS Postrunu.

S velkým úspěchem uplatňuje firma Shimadzu vysoký potenciál MDGC techniky zejména při tzv. „Flavour a Fragrance“

aplikacích. Shimadzu vyvinulo na základě požadavků zákazníků systém MDGC, kdy se z jednoho nástřiku získává jak frakce pro FID detektor (1. dimenze) z GC jednotky, tak i TIC záznam z frakce druhé měřené GCMS systémem (2. dimenze), a to zejména pro potřeby identifikace látek. Toto zařízení s výhodou plně využívá MDGC switching systém v tandemu s instrumentací „Detektor Splitting“ a instrumentací nazývanou „Backflush“.

Obr. 2 – MDGCSolution – Real Time Analysis



Obr. 3 – MDGCSolution – Backflush



Tento speciální systém pak řídí software AFT – Advanced Flow Technology, který kromě již výše zmíněných GC technik jako „Backflush“ (zpětný tok) a „Detector Splitting“ (rozdělení nástřiku do dvou či tří detektorů) plně také ovládá techniku „Heart cut“ v případě, že obě analytické kolony jsou umístěny v jednom nebo dvou termostatech a dále také „Detektor Switching techniku“, kdy různé frakce analýzy mohou dávat odezvu v systému rozdílných detektorů.

Firma Shimadzu tak nabízí excelentní technické řešení k využití již dávno známých technik v kombinaci s velmi přátelským softwarovým rozhraním. Software AFT firma Shimadzu poskytuje bezplatně a je volně dostupný na globálních firemních web stránkách.

Obr. 4 – Integrovaná správa analytických dat v aplikaci CLASS Agent



GC Image

GC Image software je produkt firmy Zoex pro vizualizaci, zpracování, analýzu a report zobrazení dat, která jsou produkována technikou komprehensivní dvoudimenzionální plynové chromatografie.

GC Image má dvě rozhraní: GC Image pro kvalitativní analýzu individuálních GCxGC dat a GC Project pro automatické zpracování projektů s více GCxGC chromatogramy jak pro kvalitativní tak i pro kvantitativní analýzu. Součástí GC Image je také NIST/EPA/NIH knihovna spekter.

ChromSquare

ChromSquare je software firmy Shimadzu určený pro zpracování dat generovaných

metodou komprehensivní dvoudimenzionální chromatografie.

Je určen ke zpracování dat generovaných zejména přístrojem GCMS-QP2010 Ultra, který je plnohodnotně řízen, a současně je umožněno vyhledávání v knihovnách spekter i podle lineárních retenčních indexů.

ChromSquare umožňuje použití různých komerčních knihoven spekter s jednoduchým uživatelským přístupem a poskytuje jak kvalitativní tak i kvantitativní vyhodnocení naměřených dat.

CLASS Agent

Komplexní nabídku Shimadzu doplňuje integrovaný management naměřených analytických dat v podobě softwaru CLASS

Agent, který je plnohodnotným konceptem pro plnění podmínek požadavků FDA 21 CFR Part 11.

Software CLASS Agent spravuje data z běžně používaných Shimadzu softwarů pro techniky, jako je HPLC, GC, LCMS, GCMS, UV-VIS a FTIR spektroskopie, TOC systémů, AAS, ICP atd. Použitím speciálního rozhraní Public Agent může být do základní databáze rovněž importována a implementována data i z jiného softwaru.

Databáze, jako jsou SQL nebo Oracle, vytvářejí spojení mezi naměřenými daty, jejich softwarem používaným k procesování a databází samotnou. Data mohou být automaticky ukládána a mohou být sortována podle vzorku, uživatele či přístroje.

CLASS Agent umožňuje provádět analýzy bez rozhodnutí kam uložit data či výsledky analýz nebo specifikace názvu vzorku. Uživatel může také analyzovat data uložená přímo v databázi, sumarizovat výsledky analýz a připravit detailní reporty včetně těch sumárních či rutinních denních.

Iva CHVÍLÍČKOVÁ,
Shimadzu GmbH, org. složka Praha,
Iva.Chvilickova@shimadzu.eu.com