

过程概述

安装 TruTools 化学计量学软件包的 Thermo Scientific TruScan RM 分析仪



Thermo Scientific™ TruScan™ RM 分析仪使用经试验证明的拉曼光谱方法在需要时进行快速物料鉴别。分析仪的无损及对准即测的采样原理便于穿透密封包装快速鉴别多种化合物。

于这种本机算法，TruScan RM 是全球制药行业所用的领先手持式拉曼光谱仪。增加 TruTools 化学计量学软件包后，TruScan RM 成为一款功能更加强大的光谱仪。除了进行本机通过 / 失败结果分析外，用户还可创建自定义的定性和定量方法并部署在分析仪上。

TruScan RM 分析仪专利的多变量残差分析能够提供可靠的通过 / 失败结果。基

TruTools 支持下列定性模型：

主成分分析 (PCA)	PCA 是一种备选鉴别方法。其用于测试样品是否与所选方法一致。TruTools PCA 方法将产生通过或失败结果屏幕，类似于经典 TruScan RM 通过或失败结果屏幕。当部署到仪器时，各类物料均需要一个独立的 PCA 模型（例如：化学品 A 有一种 TruTools 方法，而化学品 B 有另一种方法）。用户可先将多种化合物创建到单个 PCA 以用于测试（以确认预处理 / 区域选择能否将其分出），后用预处理为单个类别构建 PCA 模型。
偏最小二乘法半定量分析 (PLSSQ)	PLSSQ 模型将产生通过或失败结果屏幕。其为偏最小二乘法 (PLS) 定量模型附加了定量结果阈值（多达 10 种成分）。
偏最小二乘法判别分析 (PLSDA)	PLSDA 模型将产生识别结果屏幕。其采用功能远超 PCA 的分类数学算法，但不适用于完全分离的类别。其可用于一组化合物的分类或适于从一组化合物（多达 10 种）中识别出一种化合物。

TruTools 支持下列定量模型：

偏最小二乘法 (PLS)	PLS 模型能提供最佳定量分析结果，可支持多达 10 种化合物。
主成分回归 (PCR)	PCR 模型的功能一般比 PLS 弱，可支持多达 10 种化合物。其为 PLS 的备选定量方法，可避免过度拟合。
古典最小二乘法 (CLS)	CLS 模型的功能一般比 PLS 弱，可支持多达 10 种化合物。当仅提供纯化合物的参考光谱时，其可用作 PLS 和 PCR 的备选定量方法。

北美洲 美国波士顿	中美洲和南美洲 巴西圣保罗	欧洲、中东、非洲 德国慕尼黑	亚洲太平洋 印度孟买 中国上海 日本东京
--------------	------------------	-------------------	-------------------------------



赛默飞
官方微信



赛默飞世尔
化学分析

热线 800 810 5118
电话 400 650 5118
www.thermofisher.com

ThermoFisher
SCIENTIFIC