

## Портативні раманівські аналізатори TruScan RM і нове покоління TruScan G3

### Перенесення методів

Портативний раманівський аналізатор Thermo Scientific™ TruScan™ G3 є наступним поколінням в лінійці приладів TruScan від Thermo Fisher Scientific, розроблених спеціально для фармацевтичного ринку. Основні можливості включають відповідність 21 CFR 11 з міткою часу і збереженням даних користувача, а також зручна ручна ідентифікація в точці отримання завдяки запатентованому алгоритму p-value від Thermo Fisher.

Портативний раманівський аналізатор TruScan G3 був розроблений з додатковими ергономічними і функціональними можливостями. Знімний зонд дозволяє користувачеві зручно сканувати хімічні речовини безпосередньо в мішках або пляшках, без попереднього відбору зразків перед аналізом. Ємнісний сенсорний екран забезпечує зручну навігацію по інтерфейсу в рукавичках або без них. Передача даних може здійснюватися бездротовим способом або через мережевий адаптер USB-C.

Користувачі застарілих приладів TruScan RM зможуть перенести методи ідентифікації безпосередньо в новий портативний раманівський аналізатор TruScan G3. Це забезпечує швидкий і безперешкодний спосіб уникнути необхідності відтворювати або розробляти нові методи для хімічних речовин, що цікавлять, на приладі нового покоління.



Рис 1. Портативна система перевірки ідентичності матеріалів TruScan G3 на основі технології раманівської спектроскопії - показана з аксесуарами на верхньому зображенні.

Перенесення методу було протестовано на різних хімічних речовинах з різним рівнем комбінаційного розсіювання. (Див. Таблицю 1.) Оскільки це тестування охоплює багато хімічних речовин, користувачі можуть бути впевнені, що методи хімічної ідентифікації забезпечать точну ідентифікацію для їхніх випадків використання, незалежно від того, яке покоління приладів застосовується.

ID номер	Тестові речовини
1	Acetaminophen
2	Acetic acid
3	Acetylsalicylic acid
4	Calcium carbonate
5	Calcium stearate
6	Cellulose
7	Ciprofloxacin
8	D-Mannitol
9	Dibutyl sebacate
10	Diethylene glycol
11	Dimethyl succinate
12	EDTA
13	Ethylene glycol
14	Glycerol
15	L-Ascorbic acid
16	L-Glutamine
17	L-Histidine HCl monohydrate
18	L-Serine
19	Methanol
20	Mineral oil
21	Polydimethylsiloxane
22	Polysorbate 20
23	Polyvinylpyrrolidone
24	Potassium phosphate monobasic
25	Sodium bicarbonate
26	Sodium salicylate
27	Sulfathiazole sodium salt
28	Titanium (IV) oxide (anatase)
29	Alpha_Lactose monohydrate

Таблиця 1. Хімічні речовини, використані для тестування можливості перенесення методу між портативними раманівськими аналізаторами TruScan RM і TruScan G3. Ці 29 хімічних речовин були обрані тому, що вони охоплюють діапазон від слабого до сильного раманівського розсіювання.

## Перенесення методу тестування між TruScan RM і TruScan G3

Для перенесення методів використовували три застарілі прилади TruScan RM, кожен з яких має 29 методів хімічної ідентифікації, створених на приладі, для речовин, перелічених у Таблиці 1. Серійні номери цих приладів - TM1758, TM3038 і TM6594, позначені на рисунках нижче як "A", "B" і "C" відповідно.

Для отримання набору з 29 методів з кожного з цих трьох приладів TruScan RM було використано три портативні аналізатори TruScan G3. Серійні номери цих приладів - G3-401, G3-402 і G3-403.

Використовуючи три аналізатори TruScan RM і три аналізатори TruScan G3, було створено дев'ять комбінацій наборів даних для перенесення методів, як показано нижче в Таблиці 2. Таким чином, кожен портативний аналізатор TruScan G3 використовував 29 методів з кожного з трьох приладів TruScan RM, загалом отримавши 261 точку даних хімічної ідентифікації.

Дев'ять комбінацій для тестування перенесення методів			
	TruScan G3-401	TruScan G3-402	TruScan G3-403
TruScan RM-A	G3-401/A	G3-402/A	G3-403/A
TruScan RM-B	G3-401/B	G3-402/B	G3-403/B
TruScan RM-C	G3-401/C	G3-402/C	G3-403/C

Таблиця 2. Дев'ять комбінацій наборів даних було створено для тестування перенесення методу з TruScan RM на аналізатори TruScan G3. Кожна з дев'яти комбінацій, показаних в цій таблиці, представляє тестування 29 хімічних речовин, перерахованих в Таблиці 1, надаючи 261 точку даних, отриманих в результаті перенесення методу з TruScan RM на аналізатори TruScan G3.

Умовні позначення, що використовуються для ідентифікації наборів даних, наведених в Таблиці 2 (G3-401/A):

- Цей приклад стосується методів, створених на TruScan RM-A, з аналізом зразків на TruScan G3-401
  - 29 методів, створених на TruScan RM-A, були перенесені на TruScan G3-401
  - Потім 29 тестових хімічних речовин були проаналізовані на TruScan G3-401 з використанням переданих методів

Алгоритм прийняття рішення про хімічну ідентифікацію TruScan використовує запатентовану методологію  $p$ -value, яка статистично підтверджує або спростовує спектральну відповідність спектра зразка до спектру методу в межах заданої похибки. Будь-яке значення  $p < 0.05$  призводить до FAIL (невідповідність) між спектрами зразка і методу, тоді як значення  $p \geq 0.05$  призводить до PASS (збіг), що підтверджує ідентичність хімічної речовини зразка хімічній речовині методу. Дані, наведені на рисунку 2, стосуються аналізу першої похідної.

Ранчення  $p$ -value  $> 0.05$  для всіх випадків, що вказує на 100% PASS для кожної ідентифікації в 261 хімічному аналізі. Червона лінія на рівні 0.05 на Рисунку 2 вказує на поріг проходження/непроходження для позитивної хімічної ідентифікації для статистичного методу  $p$ -value.

## Висновок

Портативний раманівський аналізатор TruScan G3 був розроблений для того, щоб надати користувачеві можливість перенесення методів із застарілого приладу TruScan RM, заощаджуючи час і зусилля, усуваючи необхідність створення нових методів для наступного покоління приладів TruScan. Додавання нового портативного раманівського аналізатора TruScan G3 до вашого набору приладів дозволить безперешкодно виконувати точну хімічну ідентифікацію, використовуючи при цьому поточні методи TruScan RM. Дані про перенесення методів, наведені в цій примітці, підтверджують, що буде досягнута правильна хімічна ідентифікація, незалежно від того, чи був метод створений на TruScan RM або на портативному раманівському аналізаторі TruScan G3.

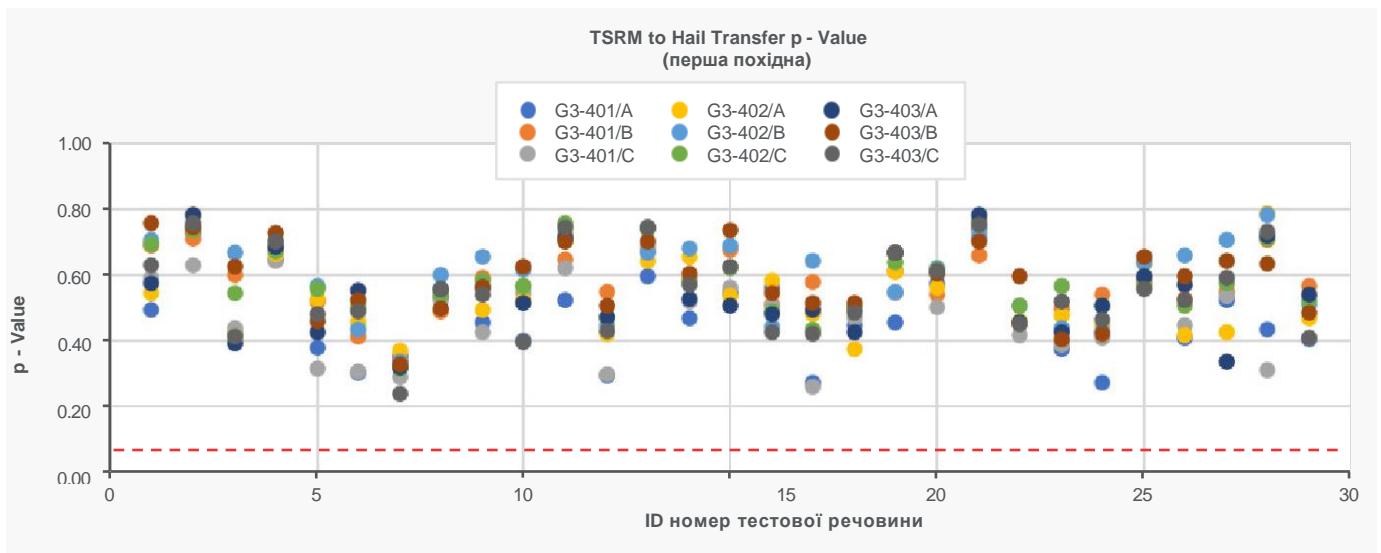


Рис 2. Значення  $p$ -value отримані при оцінці методів TruScan RM, перенесених на прилади TruScan G3. Умовні позначення в легенді означають збір даних на TruScan G3 з використанням методу, створеного на TruScan RM, що був перенесений на прилад TruScan G3. Всі ідентифікації тестових речовин пройшли зі 100% ефективністю в 9 комбінаціях. Червона лінія на рівні 0,05 вказує на поріг "пройшов/не пройшов" для позитивної ідентифікації. Цей набір даних показує, що перенесення методу з TruScan RM на портативний аналізатор TruScan G3 забезпечує таку ж ефективність ідентифікації речовин, на яку звикли покладатися користувачі.

Дізнатись більше [thermofisher.com/truscan](https://thermofisher.com/truscan)

**thermo** scientific