



Модуль ParticleFinder – автоматическая идентификация и рамановский анализ малых частиц в ПО LabSpec 6

В последние годы рамановская спектроскопия все чаще применяется в задачах типового скрининг-анализа, например, для автоматизированных измерений образцов на планшетах с микрочайками, при макро-анализе мутных слабо-рассеивающих материалов, при удаленном анализе активной зоны химических реакторов. Высокая скорость анализа, неразрушающий характер рамановских измерений в сочетании с высокой химической чувствительностью метода делают его идеально подходящим для таких приложений.

Модуль ParticleFinder для ПО LabSpec 6 предлагает новый инструмент для анализа материалов и образцов, содержащих малые частицы, позволяя автоматически локализовать расположение частиц, проанализировать их ключевые статистические характеристики (например, размер и форму) и провести последующий локальный химический анализ. Особенно модуль полезен при работе с образцами, содержащими большое количество частиц, т.к. для их ручного последовательного поиска, маркировки местоположения, и последующего снятия спектров пользователь потратит слишком много своего рабочего времени, что сведет на нет априорные преимущества рамановского метода.

При работе с модулем ParticleFinder видеоизображение с камеры, содержащее сотни или тысячи частиц, может быть быстро обработано с помощью настраиваемой шкалы яркости для локализации и маркировки частиц. ПО выдает статистику по идентифицированным на изображении частицам, а пользователь может установить фильтр выборки определенных частиц на основе этих статистических данных, например, исключив частицы вне определенного диапазона размеров. После того, как задача локализации и маркировки частиц завершена, можно приступать к рамановским измерениям, используя богатые возможности КР-микроскопов HORIBA Scientific (XploRA Plus, XploRA One, LabRAM HR Evolution).

К типичным задачам, в которых ясно проявляются большие преимущества использования модуля ParticleFinder, можно отнести анализ частиц пыли, грязи на воздушных фильтрах, характеризацию минеральных зерен в горном деле, геологоразведке, исследование фармацевтических ингредиентов и смесей.

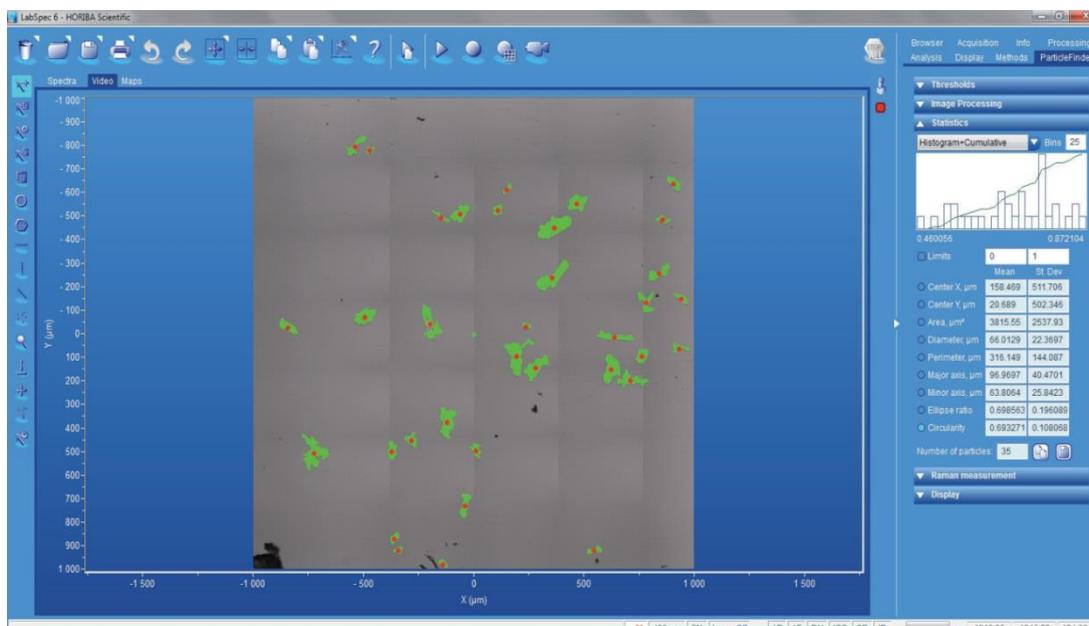


Рис. 1 Скриншот ПО LabSpec 6 с интерфейсом ParticleFinder и изображением анализируемых частиц

Основная функциональность

Модуль ParticleFinder значительно упрощает рутинную работу по локализации частиц, фильтрации, статистическому анализу и наконец, рамановским измерениям частиц.

После захвата в ПО цветного видеоизображения с камеры прибора (причем поле изображения в принципе не ограничено геометрически при использовании функции видео монтажа в LabSpec 6) средства порогового селектирования позволяют пользователю быстро локализовать и идентифицировать частицы в пределах поля изображения.

Последующее применение встроенной богатой библиотеки морфологических фильтров обеспечивает необходимую пользователю сегментацию с максимальным правдоподобием. Результаты статистической обработки представляются в окне программы в виде гистограммы, с указанием положений центров частиц (XY координаты столика), площадей, диаметров, периметров, большой и малой осей, эксцентриситетов и пр.. Локализованные частицы могут быть далее отфильтрованы и промаркированы по любому из этих статистических параметров, что позволяет проводить последующий рамановский анализ только интересных пользователю частиц.

Затем, с промаркированными частицами можно начать рамановские измерения, при которых высокоточный моторизованный столик для образца будет автоматически пододвигать каждую частицу по очереди под лазерное пятно. Доступные пользователю встроенные средства обработки данных, включая автофокус, авто-коррекцию экспозиции, авто-коррекцию базисной линии, обеспечивают получение результатов анализа самого высокого качества.

Гибкое конфигурирование КР-микроскопов HORIBA Scientific сочетает возможность использования лазеров широкого спектра возбуждения (от глубокого УФ до ближнего ИК), высоко чувствительных CCD, EMCCD и InGaAs детекторов, уникального оптического модуля DuoScan™ для быстрого сканирования лазерным пятном, с высоким спектральным разрешением оптических инструментов. Дополняя эту богатую функциональность возможностями модуля ParticleFinder, мы получаем идеальный инструмент как для задач рутинного скрининг-анализа, так и для сложных глубоких исследований материалов с малыми частицами.

Пример приложения

В данном приложении в качестве образца использовались фармкристаллы на предметном стекле. Целью анализа с применением модуля ParticleFinder являлось определение их химического состава.

Большое поле оптического изображения 2x2 мм² было синтезировано с помощью функции видео монтажа в ПО LabSpec 6. На поле можно наблюдать ряд кристаллов. Выбор порога изображения с последующей морфологической фильтрацией позволил создать четкое бинарное изображение расположенных частиц, которые затем будут автоматически последовательно анализироваться рамановским микроскопом.

Анализ был сделан по центру каждой частицы с помощью рамановского микроскопа HORIBA Scientific LabRAM HR Evolution с использованием 10X объектива и лазера возбуждения 532 нм. Рабочее спектральное разрешение составило примерно 3 см⁻¹.

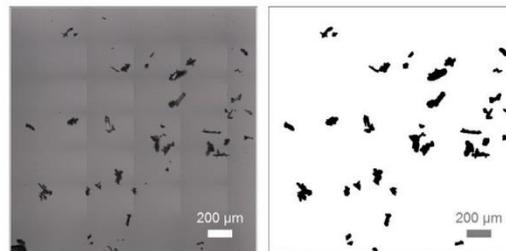


Рис. 2 - видеоизображение фармкристаллов (слева), и полученное в ParticleFinder бинарное изображение (справа), после морфологической обработки.

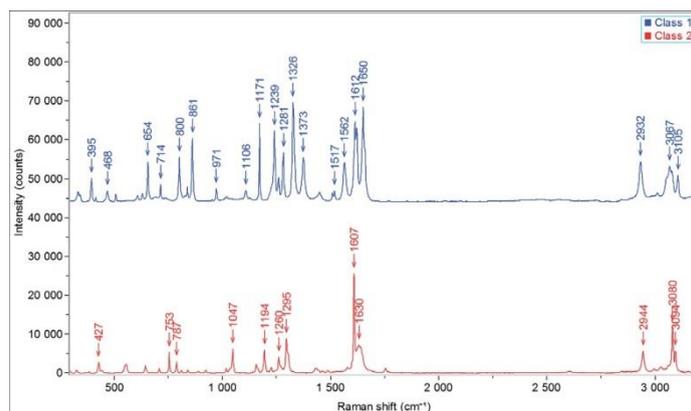


Рис. 3 – Два класса спектров частиц, автоматически выявленные с помощью метода DCA пакета мультивариантного анализа LabSpec 6 MVA

Полученные 35 спектров частиц затем анализировались с помощью метода кластеризации DCA, входящего в состав пакета мультивариантного анализа LabSpec 6 MVA. Четко проявляются спектры двух классов (показаны на рис. 3). Сверка данных с рамановской спектральной библиотекой средствами пакета KnowItAll® HORIBA Edition (Bio Rad Lab., Inc.) обеспечивает быстрое распознавание обоих спектров. Результаты анализа показывают, что из 35 частиц только две (№15 и №17) содержат 4-ацетилсалициловую кислоту (аспирин); остальные частицы содержат N-(4-гидроксифенил)-ацетамид (более известен под названием парацетамол или ацетаминофен).

Выводы

Модуль HORIBA ParticleFinder существенно повышает уровень возможной автоматизации в аналитической КР-спектроскопии. Локализация и автоматический анализ множества частиц образца может значительно увеличить темпы работ аналитических лабораторий, специализирующихся на подобных исследованиях. Автоматическое извлечение подробных геометрических параметров частиц (размер, форма, и пр.) позволяют легко сопоставить химическую информацию с физическими и структурными свойствами частиц.

Сочетание широчайших возможностей рамановских инструментов HORIBA Scientific, богатой функциональности модуля ParticleFinder и ПО LabSpec 6, обеспечивает оптимальное решение для химического анализа малых частиц.