Application Note: MO003

质检质控新法宝：Qcheck高精度识别工具

沈怡 博士，赛默飞世尔科技，上海Demo实验室

关键词： Qcheck、真伪鉴别、质量控制、精确识别、高灵敏度算法

关键词
- Qcheck
- 真伪鉴别
- 质量控制
- 精确识别
- 高灵敏度算法

介绍

质量检验和控制实验室的首要任务是确证产品是否符合标准，其主要的手段之一是通过傅立叶变换红外光谱法。通常的做法是把未知样品和谱库中标准样品的红外谱图进行比对后给出判断结果。但随着技术日新月异的发展和倒置工程的深入研究，传统的比对算法已日渐受到严峻的挑战。比方说针对化学成分非常接近，仅仅是配比不同的材料，或者说是某些天然产物，成分基本相同，只是由于产地的不同而略有差异，传统的算法很难精确一一识别判断。

图1显示了麻和亚麻的红外谱图，由于它们化学成分非常接近，所以红外谱图也非常类似，传统算法无法精确辨别两个谱图之间的细微差别，所以认为是同种材料。

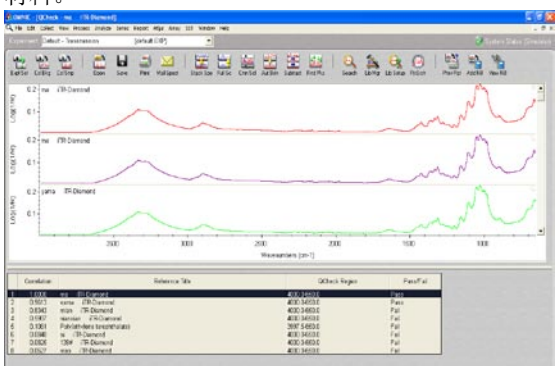

图1

再比如，主成份均为天然纤维素的几种商品化纤维，Model纤维、Viloft纤维、Tencel纤维从一维谱图看几乎没有差别（图2），传统的算法无法区分。

不仅如此，目前市面上更是充斥着各种真伪难辨的产品，或者是添加了微量非法添加剂的食品和材料等等，这些均给质检部门提出了一个新的命题：如何精确识别只有细微差别的样品？

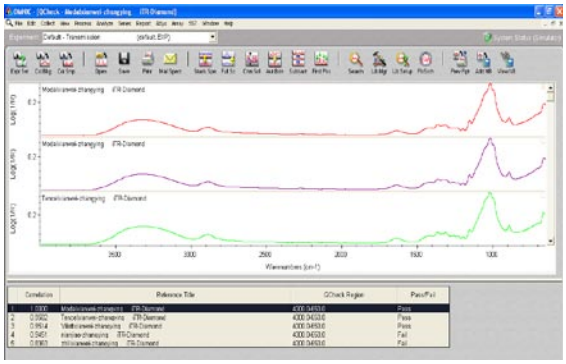

图2

解决方案

赛默飞世尔科技公司分子光谱部最新推出的Qcheck高精度识别技术采用专利优化高灵敏度算法，精确辨认相近物质间的细微差别，显著拓展傅立叶红外光谱在材料鉴别和产品控制上的功能。

实例

精确定性鉴别

麻和亚麻

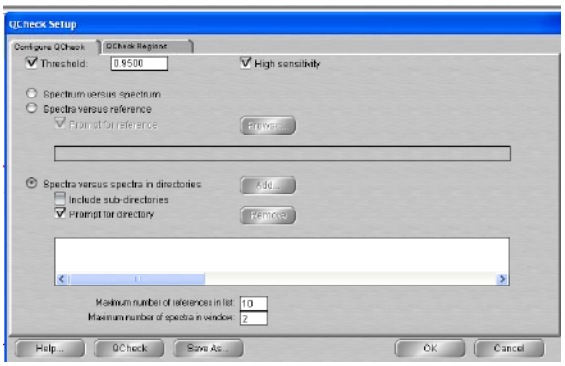

图3

选择Qcheck高灵敏度算法（图3），亚麻和麻的相似度从原来的96.13%（图1）跌到了82.14%（图4），软件判定这是两种不同的材料，既通过Qcheck功能，仅用傅立叶红外光谱已经可以迅速准确的区分麻和亚麻这两种材料。

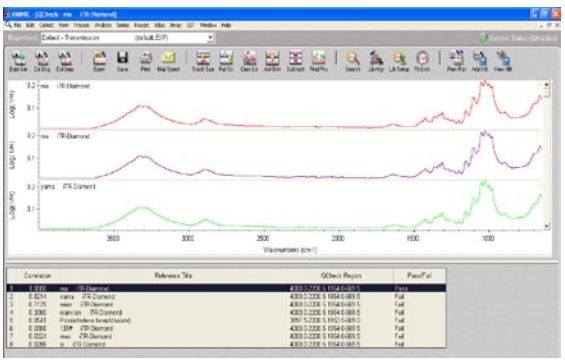

图4

纤维

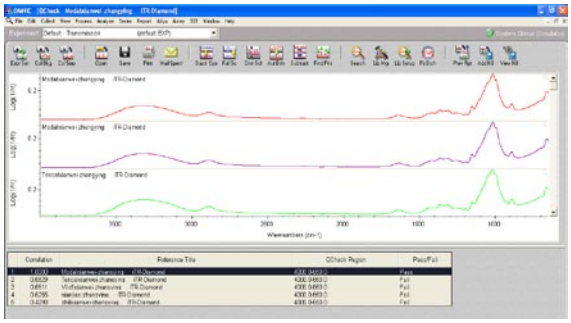

图5

同样选择Qcheck高灵敏度算法，Model纤维和Tencel纤维的相似度从原来的95.82%（图2）跌到了68.29%（图5），软件判定这两个为不同材料。

奶粉和毒奶粉

选取含微量三聚氰胺的奶粉做红外谱图，选用Qcheck高精度算法与没有添加三聚氰胺的奶粉谱图做比对，得到的匹配值仅为49.59%（见图6），迅速判定该奶粉不合格。该手段可衍生用于迅速区分市场上流通的各种食品药品等材料的真伪和质量。

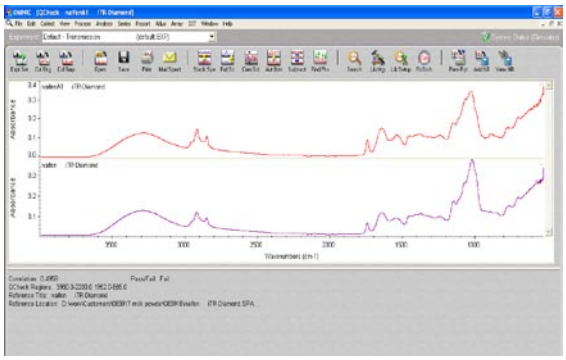

图6

快速半定量分析

醋酸乙烯　EVA

乙烯和醋酸乙烯酯的共聚物材料往往作为食品的包装材料使用，其中醋酸乙烯酯EVA的含量是生产上需要把关的指标之一。图7是EVA含量未知的一个材料在Qcheck普通算法下得到的结果，分析认为EVA含量很可能是24.6%。但由于EVA含量为24.6%和28%的红外谱图非常类似，普通算法无法区分，所以也不排除EVA含量为28%的可能性。

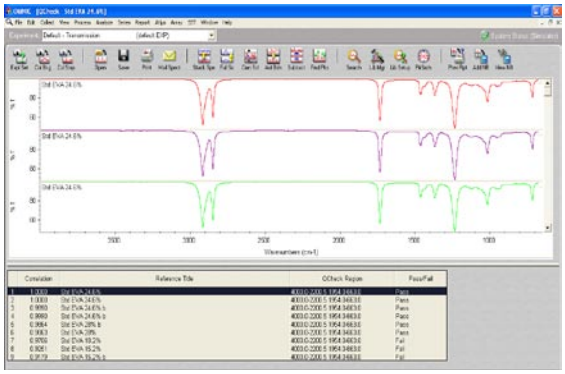

图7

选用高灵敏度算法，Qcheck的分析结果直接认定该材料中EVA含量为24.6%，而不是28%（图8）。通过其他分析手段鉴定该材料，确证EVA含量为24.6%。

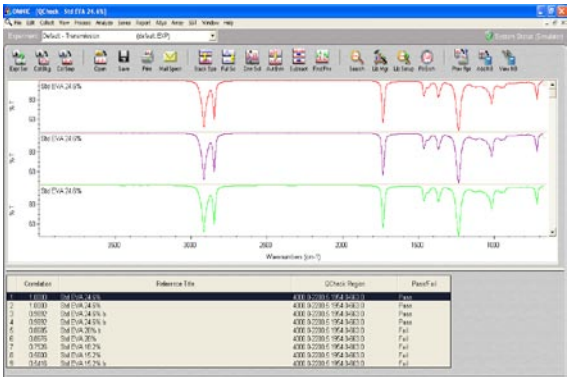

图8

这个示例不仅再一次证实Qcheck高精度算法的优越性，同时揭示了Qcheck作为快速半定量分析工具的独特魅力。Qcheck不仅可用来对组分含量进行半定量分析，还可对许多理化指标进行快速半定量，如材料的分子量分布，共聚物的玻璃化转变温度、熔融温度等等。

总结

1.Qcheck高精度识别工具界面友好，使用简单，双重分析算法给予质检部门“火眼金睛”，保障质检部门轻松“打假”，同时满足质控实验室的苛刻要求。

2.高精度算法在对物质精确定性的同时，还可快速实现多种理化参数的半定量分析，显著提高繁忙分析实验室的工作效率。

赛默飞世尔科技

上海
上海浦东
新金桥路27号6号楼
邮编：201206
电话：021-68654588
传真：021-64457830

北京
北京东城区安定门东大街28号
雍和大厦西楼F座7层702-715室
邮编：100007
电话：010-84193588
传真：010-66210845

广州
广州市东风中路410-412号
健力宝大厦3003-3004室
邮编：510030
电话：020-83487138
传真：020-83486621

服务热线
800 810 5118
400 650 5118

analyze.cn@thermofisher.com
www.thermo.com.cn