



Application Note AN-NIR-019

Menschliche Stuhlanalyse mittels Nahinfrarotspektroskopie

Bestimmung von Feuchtigkeit, Fett und Stickstoff

Mehrere Krankheiten wie Pankreasinsuffizienz oder Lebererkrankungen verursachen Malabsorption oder Maldigestion. Die daraus resultierenden Veränderungen der Stuhlzusammensetzung (z.B. in Feuchtigkeit, Stickstoffgehalt oder Fettgehalt) liefern wichtige Informationen für die medizinische Diagnostik.

Zeitaufwändige Labormethoden, die einen

erheblichen Probenvorbereitungsaufwand erfordern, können durch Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) ersetzt werden, um menschliche Stuhlproben ohne Probenvorbereitung schnell zu untersuchen. Die NIRS-Methode ist einfach anzuwenden – es sind keine Chemikalien erforderlich und Ergebnisse für mehrere Parameter werden innerhalb einer Minute ausgegeben.

EXPERIMENTELLE AUSRÜSTUNG

522 menschliche Stuhlproben wurden auf einem Metrohm DS2500 Solid Analyzer mit einem modifizierten DS2500 Halter für Petrischalen analysiert (**Abbildung 1**). Stuhlproben wurden für die Analyse im diffusen Reflexionsmodus in die Petrischalen positioniert. Referenzwerte für den Feuchte-, Fett- und Stickstoffgehalt wurden mit den jeweiligen Primärmethoden ermittelt.



Abbildung 1. DS2500 Feststoffanalysator mit menschlichen Stuhlproben.

Ausrüstung	Metrohm-Zahl
DS2500 Solid Analyzer	2.922.0010
DS2500 Halterung	6.7430.040
Vision Air 2.0 komplett	6.6072.208

ERGEBNISSE

Die erhaltenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um Vorhersagemodelle für die verschiedenen Referenzparameter zu erstellen. Der Datensatz wurde in Kalibrier- und Validierungssätze aufgeteilt, um die Qualität der Vorhersagemodelle zu

überprüfen. Korrelationsdiagramme, die die Beziehung zwischen der Vis-NIR-Vorhersage und den Referenzwerten darstellen, sind in den **Abbildungen 3–5** zusammen mit den jeweiligen Leistungszahlen (FOM) dargestellt.

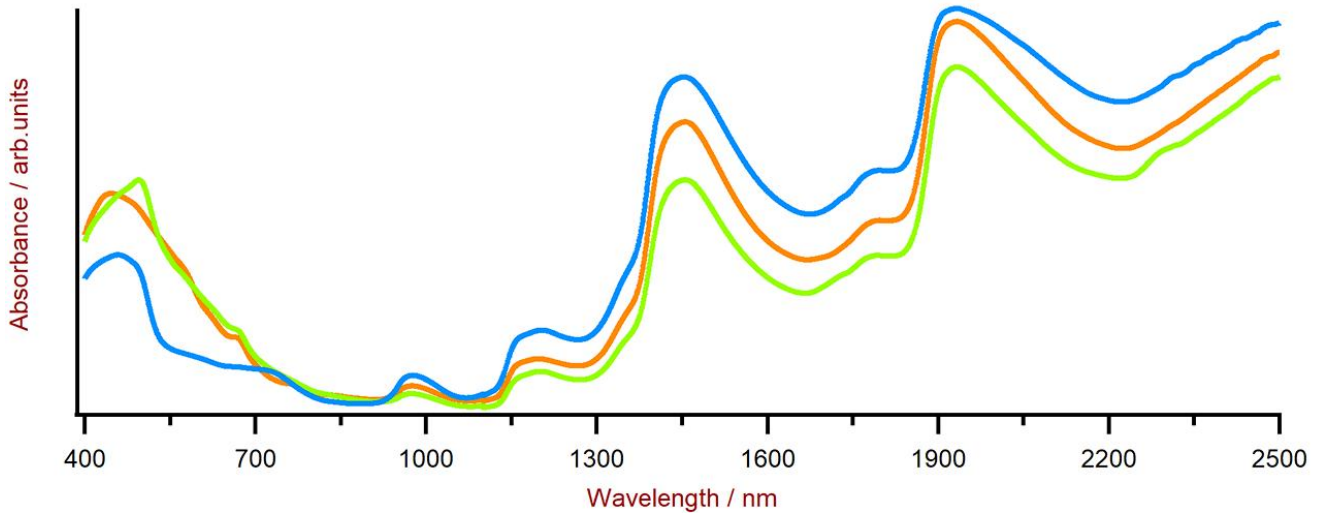
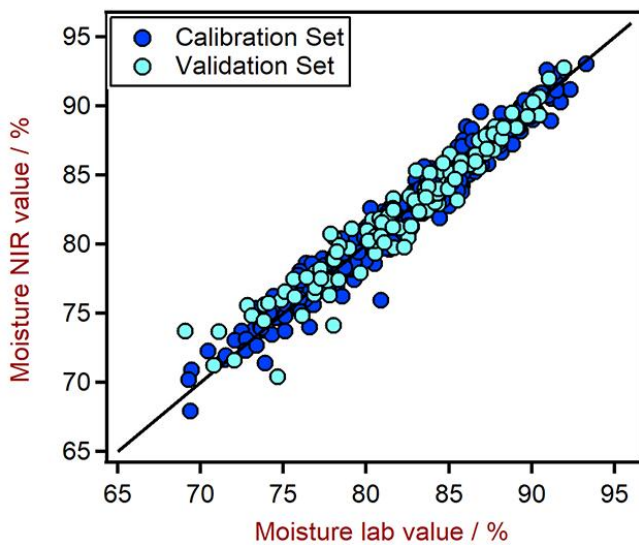
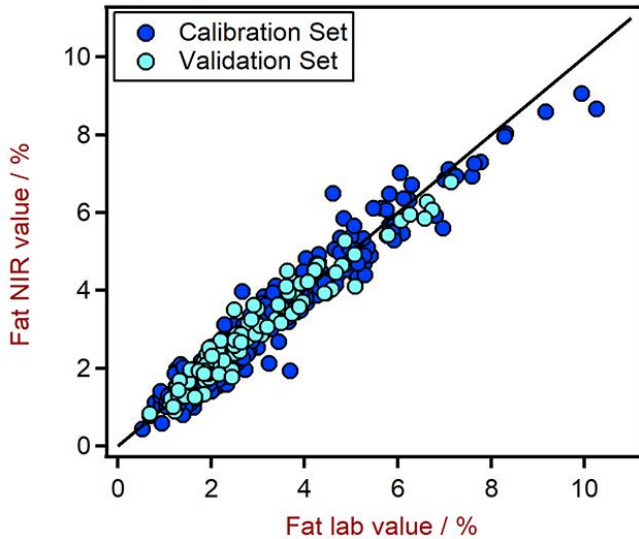


Abbildung 2. Auswahl von Vis-NIR-Spektren menschlicher Stuhlproben. Die Daten wurden mit einem DS2500 Solid Analyzer ermittelt.



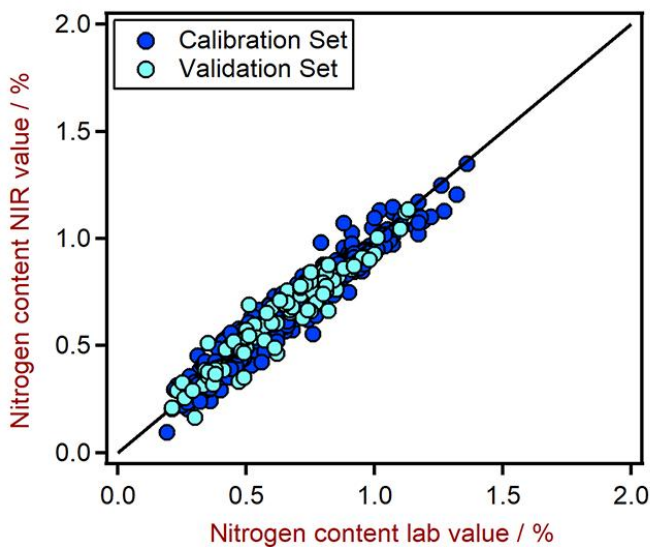
Figures of Merit	Value
R^2	0.962
Standard Error of Calibration	0.979%
Standard Error of Cross-Validation	1.103%
Standard Error of Prediction	1.266%

Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden FOMs zur Vorhersage des Feuchtegehalts im menschlichen Stuhl mit einem DS2500 Solid Analyzer.



Figures of Merit	Value
R ²	0.942
Standard Error of Calibration	0.3696%
Standard Error of Cross-Validation	0.3811%
Standard Error of Prediction	0.3523%

Abbildung 4. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden FOMs zur Vorhersage des Fettgehalts im menschlichen Stuhl mit einem DS2500 Solid Analyzer.



Figures of Merit	Value
R ²	0.936
Standard Error of Calibration	0.057%
Standard Error of Cross-Validation	0.060%
Standard Error of Prediction	0.061%

Abbildung 5. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden FOMs zur Vorhersage des Stickstoffgehalts im menschlichen Stuhl mit einem DS2500 Solid Analyzer.

FAZIT

Diese Application Note zeigt die Machbarkeit der NIR-Spektroskopie für die Analyse des Feuchtigkeits-, Fett- und Stickstoffgehalts in menschlichen Stuhlproben

mittels NIRS, die ohne Chemikalien oder Probenvorbereitung durchgeführt werden kann.

CONTACT

Metrohm Deutschland
In den Birken 3
70794 Filderstadt

info@metrohm.de

KONFIGURATION



DS2500 Solid Analyzer

Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.

Der DS2500 Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Feststoffen, Cremes und optional auch Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, Vibrationen sowie Temperaturschwankungen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab und liefert in weniger als einer Minute genaue und reproduzierbare Ergebnisse. Der DS2500 Analyzer erfüllt die Anforderungen der pharmazeutischen Industrie und unterstützt durch die einfache Bedienung die Anwender in ihren täglichen Routineaufgaben.

Durch perfekt auf das Gerät abgestimmtes Zubehör werden bei jedem noch so herausfordernder Proben typ, wie z.B. grobkörnige Feststoffe wie Granulate oder halb fest-flüssige Proben wie Cremes, bestmögliche Ergebnisse erzielt. Bei Messungen von Feststoffen kann die Produktivität gesteigert werden durch Einsatz des MultiSample Cups, welches automatisierte Messungen in Serie von bis zu 9 Proben ermöglicht.



DS2500 Halter

Halter für die Verwendung mit:

- Kleinen Probengefäße (6.7402.030)
- DS2500 Iris (6.7425.100)



Vision Air 2.0 Complete

Vision Air - Universelle Spektroskopie Software.

Vision Air Complete ist eine moderne und einfach zu bedienende Softwarelösung für den Einsatz im regulierten Umfeld.

Die Vorteile von Vision Air im Überblick:

- Individuelle Softwareanwendungen mit angepassten Nutzeroberflächen gewährleisten eine intuitive und einfache Bedienung
- Einfache Erstellung und Wartung von Arbeitsvorschriften
- SQL Datenbank für ein sicheres und einfaches Datenmanagement

Die Version Vision Air Complete (66072208) beinhaltet alle Anwendungen für die Qualitätssicherung mittels Vis-NIR Spektroskopie:

- Anwendung für das Instrumenten- und Datenmanagement
- Anwendung für die Methodenentwicklung
- Anwendung für die Routineanalyse

Weitere Vision Air Complete Lösungen:

- 66072207 (Vision Air Network Complete)
- 66072209 (Vision Air Pharma Complete)
- 66072210 (Vision Air Pharma Network Complete)