



Application Note AN-RS-045

# Transfer von RMID-Operationen zu tragbaren Raman-Geräten

## Bibliotheks- und Modelltransfer von NanoRam 785 zu MIRA P

Für Ergebnisse in Laborqualität in nicht-traditionellen Prüfszenarien, wie z. B. der Materialprüfung am Wareneingang, übertrifft die Raman-Spektroskopie die traditionellen Methoden zur Identifizierung und Überprüfung von Rohstoffen (RMID). Tragbare Raman-Geräte rationalisieren RMID-Prozesse und verifizieren effizient die Qualität und Konsistenz eines Materials. Diese Effizienz hilft den Herstellern, Zeit und Ressourcen zu sparen und sorgt für einen zuverlässigeren und kostengünstigeren Betrieb.

Verifizierungsmodelle sind der Schlüssel zu RMID mit Raman-Spektroskopie. Es ist möglich, etablierte und validierte Verifikationsmodelle, die bereits im

Routineeinsatz sind, von einem Raman-Produkt von Metrohm auf ein anderes zu übertragen. Obwohl beispielsweise NanoRam 785 nicht mehr verkauft wird, können bestehende Kunden ihre RMID-Aktivitäten problemlos auf MIRA P umstellen. Diese Application Note beschreibt die Übertragung von Benutzer- und kundenspezifischen Bibliotheken und Modellen von NanoRam 785 auf MIRA P, um einen möglichst reibungslosen Übergang zu gewährleisten. Die Übertragung von Modellen zwischen MIRA P-Geräten wird in einer separaten Application Note (AN-RS-044) behandelt.

## EINFÜHRUNG

NanoRam 785 (NR785)-Benutzer finden auf der Metrohm-Website [1] Grundlagen zum Modellbau für MIRA P.

Bei den Lesern dieser Anwendung wird davon ausgegangen, dass es sich um NR785-Anwender handelt, die mit den RMID-Grundlagen vertraut sind und bereits mit etablierten Modellen arbeiten.

Die Übertragung von Modellen zwischen NR785 und MIRA P erfordert lediglich einen Wechsel des Dateiformats und eine erneute Zusammenstellung des NR785-Modells für MIRA P. Neue Benutzer werden feststellen, dass die Qualitätsprüfung mit MIRA P und seiner Software MIRA Cal P einfach und intuitiv ist.

## TERMINOLOGIE

Die Terminologie der Software unterscheidet sich zwischen NanoRam ID (NID) und MIRA Cal P. Die

Begriffe sind in **Tabelle 1** definiert.

**Tabelle 1.** Relevante Begriffe, die in NID und MIRA Cal P verwendet werden.

Software	NanoRam-ID	MIRA Cal P
Datenerfassung	Betriebsvoreinstellung	Vorgehensweise bei der Arbeit (OP)
Überprüfungsparameter	Verfahren	Trainingsset-Modell
Datendateiformat	CSV	BRMS
ROC-Kurve	Eine analytische Methode zur Bewertung der Leistung eines Modells bei verschiedenen Schwellenwerten.	

## IDENTIFIZIERUNG VS. VERIFIZIERUNG

Identifizierungsmethoden messen die spektrale Ähnlichkeit zwischen einer unbekannten Probe und einer Sammlung von Bibliotheksspektren. Die Identifizierung kann mit einer kundenspezifischen Bibliothek oder einer Bibliothek von Standards wie der [Umfassende USP-Bibliothek von Metrohm](#) durchgeführt werden.

Im Gegensatz zur Identifizierung werden bei der **Verifizierung** nur sehr geringe spektrale Unterschiede festgestellt, um eine hohe Spezifität zu erreichen. Jedes Probenspektrum wird auf einen Trainingssatz projiziert (d. h. eine Sammlung von Spektren, die die Zielsubstanz repräsentieren), um zu sehen, wie gut es den Kriterien des Modells entspricht. Mit diesem Verfahren können sehr ähnliche Proben (z. B. dieselbe Chemikalie von zwei verschiedenen Herstellern) unterschieden werden, so dass die Verifizierungsstandards streng eingehalten werden. Die Art des Transfers hängt von der Art des Tests ab - Bibliothekstransfer zur Identifizierung und Methoden-/Modelltransfer zur Verifizierung.



### Schritt 1. Datenexport

Identifikation	Verifizierung
Bibliotheksdaten werden aus der B&W Tek NID-Software als CSV-Dateien exportiert	Methodendaten werden aus der B&W Tek NID-Software als CSV-Dateien exportiert

### Schritt 2. Datenformat konvertieren

Identifikation	Verifizierung
Für beide Übertragungsarten werden die exportierten CSV-Dateien in das binäre BRMS-Format konvertiert, damit sie von MIRA P verwendet werden können. Metrohm stellt dafür ein Software-Konvertierungstool zur Verfügung.	

**Schritt 3.** Konfigurieren Sie die MIRA Cal P-Software

Identifikation	Verifizierung
Das Konvertierungstool erstellt einen Ordner mit konvertierten Bibliotheksdaten, die in MIRA Cal P importiert werden. Es wird eine neue Bibliothek erstellt und zur sofortigen Verwendung mit dem Gerät synchronisiert. Dies ist ein sehr unkomplizierter Prozess.	Metrohm bietet eine einfache Verifikations-SOP an. Für jedes Material wird in MIRA Cal P eine neue OP erstellt, mit dem Gerät synchronisiert und zur Erfassung von Validierungscans verwendet.

**Schritt 4.** Neues Modell in MIRA Cal P

Identifikation	Verifizierung
—	Importieren Sie die konvertierten Daten aus NR785 in die entsprechenden Ordner in MIRA Cal P. Erstellen Sie einen Trainingssatz mit den Transferproben. Erstellen Sie einen Validierungssatz. Erzeugen Sie alle ROC-Kurven, wählen Sie dann die beste Kurve aus und speichern Sie sie. Fügen Sie das validierte Modell zum OP hinzu. Synchronisieren Sie MIRA P und das Modell ist einsatzbereit.

Nach dem Transfer und der ROC-Optimierung sind die Modelleinstellungen für ein Laktose-Beispiel in Tabelle

2 unten aufgeführt.

**Tabelle 2.** ROC-optimierte Modelleinstellungen.

PCS	3
Vorbehandlung	Mittelwert Mittelpunkt
Entfernungsmesser	Kombiniert
Konfidenzintervall	0,95
Normalisierung	Min./Max.-Normalisierung
Glatt	Ja
Punkte	13
Poly-Reihenfolge	3
Ausgangslage	Nein
Derivat	Ja
IVC	Ja

## VALIDIERUNG MIT P-WERTEN

Die **Validierung** eines Modells zeigt, dass das Modell ein Material auf einem neuen Gerät angemessen bewertet. Mit anderen Worten: Die Validierungsdaten dienen als „Diagnose“, wie das Modell auf dem neuen Gerät funktioniert.

Die Validierung ist eine Bewertung einer Methode anhand von Testproben:

- bei denen ein Bestehen erwartet wird (positive Proben). Dabei handelt es sich um Proben des Zielmaterials, die sich von den Proben unterscheiden, die zum Erstellen des Trainingssatzes verwendet wurden.
- bei denen ein Fehlschlag erwartet wird (negative Proben). Dabei kann es sich um unterschiedliche Materialien oder um ähnliche, aber unterschiedliche Materialien handeln. Dadurch wird die Spezifität eines Modells sichergestellt.

**Tabelle 3.** Validierungstestergebnisse mit bestandenen (grün) und nicht bestandenen (rot) p-

**Tabelle 3** zeigt die Ergebnisse des Validierungstests für ein Laktosemodell nach dem Transfer. Laktose ist ein hervorragender Indikator für den Erfolg der Übertragung, da sie aufgrund der Fluoreszenz ein besonders schwieriges Material für 785-nm-Raman ist.

Die Robustheit und Spezifität des Modells sind nach dem Transfer recht hoch. Dies wurde getestet, indem verschiedene Arten von Laktose (mit eindeutigen CAS-Nummern) in den negativen Validierungssatz aufgenommen wurden, und es wurde bestätigt, dass sie entsprechend versagten.

Werten.

## VALIDIERUNG MIT P-WERTEN

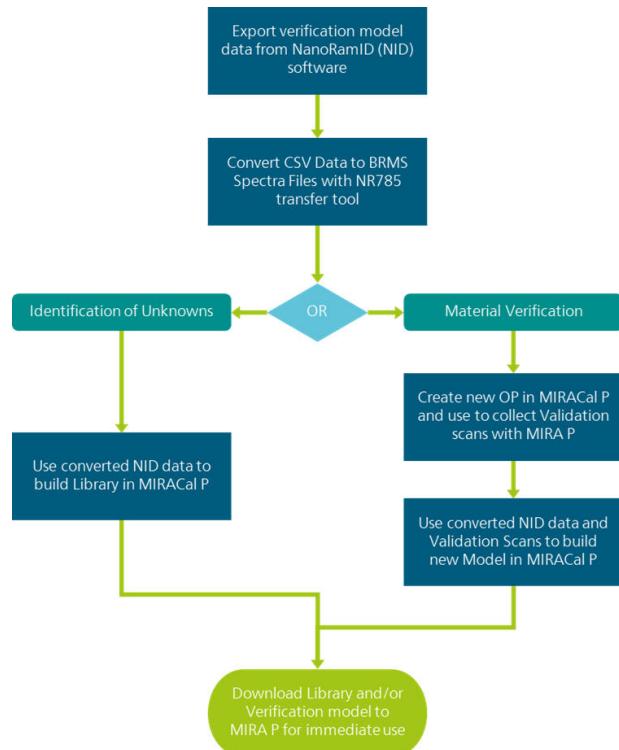
Positive Samples	p-values	Negative Samples	p-values
$\alpha$ -Lactose Monohydrate	0.194	Acetaminophen	0.001
$\alpha$ -Lactose Monohydrate	0.672	Calcium Stearate	0.001
$\alpha$ -Lactose Monohydrate	0.56	Citric Acid	0.001
$\alpha$ -Lactose Monohydrate	0.673	Dextrose	0.001
		$\alpha$ -D-Lactose Monohydrate	0.012
		Lactose Anhydrous	0.001
		Lactose/APAP	0.001
		L-Thyroxine	0.001
		Sucrose	0.001
		Theophylline	0.001

Die Übertragung der Bibliothek und der Modelle von NanoRam 785 auf MIRA P ist ein einfaches Verfahren, das einen schnellen und effizienten Übergang

ermöglicht. Nutzen Sie das Raman-Portfolio von Metrohm für die bestmögliche RMID-Erfahrung.

## REFERENZEN

1. Gelwicks, M. J. Real World Raman: Simplifying Incoming Raw Material Inspection. *Analyze This – The Metrohm Blog*, 2021



## CONTACT

Metrohm Deutschland  
 In den Birken 3  
 70794 Filderstadt

[info@metrohm.de](mailto:info@metrohm.de)

## KONFIGURATION



### MIRA P Basic

Der Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P ist ein leistungsstarkes, tragbares Raman-Spektrometer, das für die schnelle, zerstörungsfreie Bestimmung und Verifizierung verschiedener Materialtypen, wie pharmazeutische Wirkstoffe und Hilfsstoffe, eingesetzt wird. Trotz der geringen Größe des Geräts verfügt das MIRA P über ein robustes Design und einen hocheffizienten Spektrographen, der mit unserer einzigartigen Orbital-Raster-Scan (ORS)-Technologie ausgestattet ist. Das MIRA P erfüllt die Richtlinien der FDA 21 CFR Part 11 vollständig.

Das MIRA P Basic-Paket ermöglicht es dem Benutzer, das MIRA P an seine Bedürfnisse anzupassen. Das MIRA Basic-Paket ist ein Starter-Paket, das die für den Betrieb des MIRA P erforderlichen Grundkomponenten enthält.

Das Basispaket enthält das MIRA Kalibrier-/Verifizierungszubehör, die USP-Bibliothek und den LWD-Aufsatz für Analysen in Flaschen oder Beuteln. Betrieb der Laserschutzklasse 3B.



### MIRA P Advanced

Der Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P ist ein leistungsstarkes Raman-Handspektrometer, das für eine schnelle zerstörungsfreie Bestimmung und Verifizierung verschiedenster Materialien, z. B. pharmazeutische Wirkstoffe und Arzneimittelträger, eingesetzt werden kann. Trotz seiner geringen Grösse ist der MIRA P sehr robust und verfügt über eine hocheffiziente Spektrographkonstruktion, die mit unserer einzigartigen Orbital-Raster-Scan-Technologie (ORS) ausgestattet ist. MIRA P erfüllt die FDA-Vorschriften 21 CFR Part 11.

Das Advanced Package umfasst eine Aufsatzzlinse, mit der Materialien direkt oder in ihren Gebinden analysiert werden können (Laserklasse 3b), sowie einen Vial-Halter-Aufsatz zur Analyse von Proben, die sich in Glasvials befinden (Laserklasse 1).



### MIRA P Flex

Das MIRA P Flex Package erlaubt es dem Benutzer, MIRA P an seine Bedürfnisse anzupassen. Das Flex Package umfasst alle Grundkomponenten für den Betrieb des MIRA P ohne Aufsätze zur Probennahme. Für den Betrieb wird mindestens ein Aufsatz zur Probennahme benötigt. Das MIRA P Flex Package beinhaltet die USP-Bibliothek, Zubehör für die Kalibrierung/Verifizierung, und ein USB-Kabel. Betrieb mit Klasse 3B.