

Kemometriai Módszerek Analitikai Kémiai Alkalmazása

Application of chemometrics in analytical chemistry

ELEK János¹ (PhD), TÖRÖK János² (PhD), DARÓCZI Csilla^{1,3} (MSc)

¹Science Port Kft, 4032 Debrecen, Böszörményi út 138, elek@scienceport.hu

²Fumoprep Kft, 1042 Budapest, Ipari Park utca 10

³Debreceni Egyetem, Biomérnöki Tanszék, 4032, Debrecen, egyetem Tér 1.

ABSTRACT

The spectroscopic analysis methods play very important role in the portfolio of our company. Due to the multivariate nature of the data the evaluation can mainly be carried out by use of chemometric methods. Despite the fact, that by now chemometrics has a separate chapter in the Pharmacopoeia many analysts and decision makers still have a blurry vision on the application of this methodology. We heard various arguments during the years, from the “they screw statistics till they get the desired result”, “it is well known that infrared spectroscopy is not quantitative” remarks to the “chemometric modelling is not selective” misconceptions. Two case studies will be presented in this talk which will possibly change this generally distance keeping, negative attitude.

The first example is the a multivariate FT-IR solution of a complicated analytical issue in GLP regulated quality assurance environment. The second example presents how X-ray fluorescent spectroscopy can support interdisciplinary research, in our case the examination of a roman age stele.

Keywords: chemometrics, spectroscopy, regulatory, multivariate statistics

KIVONAT

Cégünk portfóliójában kiemelt szerepet kapnak a spektroszkópiás módszerekkel végzett analitikai mérések. Az adatok értékelése, azok többváltozós szerkezetéből adódóan jobbára csak kemometriai, statisztikai módszerekkel lehetséges. Annak ellenére, hogy a kemometria módszertana már a gyógyszerkönyvekben is külön fejezetet kapott, tapasztalatink szerint sok helyen még mindig nagyon homályos elképzelés lengi körül a statisztikai módszerek alkalmazását. Kezdve az „addig statisztikáznak míg a várt eredményt nem kapják”, „az infravörös spektroszkópia köztudottan nem kvantitív” jellegű megállapításoktól, a „kemometriában nem szelektívek a módszerek” jellegű tévhitekig. Jelen előadásban két olyan esettanulmányt szeretnék bemutatni, ami változtathat ezen az általánosan távolságtartó és negatív megítélésen.

Az első példa egy sokváltozós FT-IR módszer alkalmazásának bemutatása egy komplikált analitikai probléma megoldására, mindezt ráadásul GLP minőségbiztosítási környezetben. A második példában bemutatjuk hogy lehet segítségünkre interdiszciplináris területeken – jelen esetben egy római kori stél vizsgálatában – a röntgenfluoreszcens spektroszkópia.

Kulcsszavak: kemometria, spektroszkópia, szabályzás, többváltozós statisztika