

Identify 数据分析向导

文件编号: cPH60-DSC-37

目录

自动识别数据文件 参数调节 数据库设置 添加曲线到数据库 结果导出 质量控制设置

1、自动识别数据文件

将已获得的 DSC 曲线载入到 Proteus7.0 后,转换为温度坐标,选中需要分析的曲线,然后找到"附加 功能"菜单下的"识别"按钮,只需要单击一下即可对曲线进行自动识别。如下图所示:



点击后即可进入自动识别的结果界面,如下图所示,图中箭头所指的部分分别为单条曲线相似度结果、分类曲线相似度结果以及所用数据库。相似度结果中,后缀为 DSC 的为数据库曲线数据,后缀



为 lit 的为数据库文献数据。



2、参数调节

通常对曲线进行自动识别时选用默认的参数即可,但对于某些曲线可能需要对自动识别的参数进行 适当调整。

下图中红框内为可调节参数,主要有搜索温度范围、运算法则类型和搜索参数三项。

其中搜索温度范围可以根据自己需要将曲线上左右两条直线拖动选择或者直接在最小值和最大值中 输入温度范围;

运算法则有两种为:单效/组分(适应于单组分样品或所选温度范围内只有单个热效应的曲线)、多效/组分(适应于多组分样品或所选温度范围内有多个热效应的曲线);

搜索参数:共有五种分别为: standard: 适用于所有查询(默认), amorphous: 特别适用于无定形样 品查询, crystalline: 特别适用于晶态样品查询, demanding: 可获得更好的匹配度, qualitative: 不 考虑热效应的大小和形状。

NETZ5CH



3、数据库设置

Identify 数据库有自带的数据库: Organics_Food_pharma NETZSCH, polymer Measurements NETZSCH, polymer poster NETZSCH, 自带数据库是写保护的,即用户不能对数据库中的文件进行更改。但用户可以自由定义自己需要的数据库,具体操作步骤如下:

NETZ5CH



点击上图红框中的"管理库/类"按钮会弹出对应对话框,其中可以新建数据库,编辑数据库,将已 存在文件加入到数据库中,删除数据库或文件;新建分类文件,编辑分类文件,将已有文件加入到 指定的分类文件中,删除分类文件。

				类				
名称	条目		新建	名称		条目	*	新建
Organics_Food_Pharma NETZSCH	80		重命名	PA1x_semi-cryst.		4	-	重命
Polymer Measurements NETZSCH	67			PA6.x_semi-cryst.		10		
Polymer Poster NETZSCH	70		刪除	PE		8		一一时候
pp	1			POM		4		
				Lnn		1	•	
				材料/测量				
				可用			已选择	
则量/文献数据				Search		Search		
Search				(HBA, HNA)-LCP_lit	-	PA11_DSC		
名称	效果	*	新建	4-phenylsemicarbazide_lit 5,5-diethylbarbituric_acid_lit	III	PA12_DSC		
4-phenylsemicarbazide lit	4		(白炽	8-hydroxyquinoline_lit		PA12_lit		
5.5-diethylbarbituric acid lit	3		5冊時 …	ABS_lit				
8-hydroxyquinoline lit	2		刪除	acenaphthylene_lit				
acenaphthylene lit	3			Adamantane_DSC aloba-D-glucose_DSC				
Adamantane_DSC	1			alpha-lactose_amorphous_DSC	>			
alpha-D-glucose_DSC	1	-		alpha-lactose_monohydrate_DSC	<			
效果				alpha-NPD_DSC				
名称			查看	ASA_DSC				
吸热峰在 122°C (起始点)				ASA_III bakelite_DSC				
放热峰在 131°C (起始点)		_		benzoapyrene_DSC				
吸热峰在 213°C (起始点)				benzoeacid_DSC				
放热峰在 267°C (起始点)				benzoic_acid_lit				
				biphenyl_DSC				
				biuret_lit				
				BR 14cie lit	-			

4、添加曲线到数据库

另外,还可以将分析软件中的曲线直接添加到数据库中作为数据库中的文件,此时只需选中曲线, 点击图中"添加当前曲线"按钮,选中要添加到的数据库即可。如下图所示



5、结果导出

分析结果可以以图形和/或数据结果的形式导出,点击导出结果,选中所需形式导出即可,图形及数据结果如下图所示

NETZSCH



😹 [1] PE 3040 2t.ngb-sdg PE 3040 1# 2014/10/15 15:07:52 🖓 [2] Polymarp PE-UHNW (152) -01.ngb-sdg (PE-U PE-UHNW (152) -01 2013/12/5 1:03:00)



Results of NETZSCH Curve Recognition System Identify:

未知的测量: PE 3040 2t		
捜索温度范围: -100.1℃ 197.9℃		
算法类型: 单一效应/组件		
搜索参数: standard		
Selected Search Libraries: Organics_Food_Pharma NETZSCH Polymer Measurements NETZSCH Polymer Poster NETZSCH pp		
Results:		
Material	Similarity	Class
PE-UHMW DSC	95.23%	PE
benzoeacid DSC	93 91%	POM
maltose cryst DSC	87 44%	PA1x semi-cryst
fructose cryst DSC	86.33%	PA6.x semi-cryst
magnesium stearate DSC	81.97%	PVC
phenacetin DSC	81.35%	
Naftopidil DSC	80.63%	
phenacetin-p-aminobenzoic acid eutectic DSC	55.42%	
PE-HD DSC	46.07%	
Cimetidine cryst DSC	36.50%	

MMS: 4.95%

2.70% 0.25% 0.00%



6、质量控制设置

在"设置"里可以对质量控制的阈值进行设置,首先勾选"激活质量控制功能",然后选取所使用分类文件,并设置相似度阈值,最后对曲线进行 identify 识别即可获得产品曲线是否合格。 示例中显示产品曲线与数据库中 PE 分类相似对未达到 90%以上,因此质量控制结果显示失败。







[2] [1] PE 3040 2t.ngb-sdg PE 3040 1# 2014/10/15 15:07:52 [2] Polyma-p PE-UHRW (152) -01.ngb-sdg (PE-U PE-UHRW (152) -01 2013/12/5 1:03:00)

耐驰科学仪器商贸(上海)有限公司 应用实验室 高星 初稿: 2015.6. 最后修订于: 2015.5. 技术支持邮箱: <u>nsi-lab@netzsch.com</u> <u>www.ngb-netzsch.com.cn</u>