

UREĐAJ I METODA ZA SLIJEPO IZDVAJANJE ČISTIH KOMPONENATA IZ DVA MJERENJA U SPEKTROSKOPIJI POMOĆU ANALIZE RIJETKIH KOMPONENATA

Ref: RI-SM-WP-08-104v03

Inovacija se odnosi na sustav računalne obrade podataka u svrhu slijepog izdvajanja više od dvije čiste komponente iz dva mjerenja u području spektroskopije i spektrometrije.

TRŽIŠNA PRILIKA

Inovacija može biti primijenjena u identifikaciji spojeva u farmaceutskoj industriji, kemijskoj sintezi, kontroli kvalitete hrane i kontroli zagađenosti okoliša. Inovacija može biti primijenjena u obliku programskog paketa za analizu podataka. Glavna prednost inovacije je mogućnost izdvajanja više od dvije čiste komponente iz samo dvije različite smjese. Na taj način se smanjuje broj potrebnih mjerenja čime se štedi na vremenu i resursima. Druga velika prednost metode je da procjenjuje broj čistih komponenata prisutnih u smjesi. Postojeće metode izdvajanja čistih komponenata koriste ili usporedbu s bazama čistih komponenata ili neku od metoda slijepog razdvajanja izvora (BSS) koje zahtijevaju da broj različitih smjesa bude veći ili jednak od nepoznatog broja čistih komponenata. Dvije najčešće korištene metode s opisanim ograničenjem su analiza nezavisnih komponenata (ICA) i faktorizacija nenegativne matrice (NMF).

OPIS INOVACIJE

Inovacija se općenito odnosi na računalni sustav za obradu podataka (programski paket) koji provodi slijepo izdvajanje čistih komponenata iz spektroskopskih podataka za dvije različite smjese. Posebno, inovacija se odnosi na primjenu analize rijetkih komponenata (SCA) u slijepom razdvajanju dvije smjese spektroskopskih podataka na više od dvije čiste komponente.

Metoda je primjenjiva na sljedeće spektroskopske metode: NMR spektroskopiju, EPR spektroskopiju, IC spektroskopiju, UV

spektroskopiju, Ramanovu spektroskopiju i masenu spektrometriju.

STATUS INTELEKTUALNOG VLASNIŠTVA

Inovacija je predmet međunarodne patentne prijave. Tvrtke zainteresirane za komercijalno iskorištavanje ove prijave, kao i postojećeg znanja i iskustva, neka se slobodno obrate tvrtki Ruđer inovacije.

Vezane znanstvene publikacije:

I. Kopriva, I. Jerić, "Multi-component Analysis: Blind Extraction of Pure Components Mass Spectra using Sparse Component Analysis", Journal of Mass Spectrometry, DOI: 10.1002/jms.1627

I. Kopriva, I. Jerić, V. Smrečki, "Extraction of multiple pure component ¹H and ¹³C NMR spectra from two mixtures: novel solution obtained by sparse component analysis-based blind decomposition", Analytica Chimica Acta DOI: 10.1016/j.aca.2009.09.019.

I. Kopriva, I. Jerić, A. Cichocki, „Blind Decomposition of Infrared Spectra Using Flexible Component Analysis”, Chemometrics and intelligent laboratory systems, 97 (2009), 2; 170-178.

KONTAKT OSOBA

Davor Aničić, mag.phys.
 Ruđer inovacije d.o.o.
 Bijenička 113, Zagreb, Hrvatska
T +385 1 2360 236
M +385 91 4040 146
F +385 1 2347 811
E davor.anicic@r-i.hr
W www.r-i.hr