

UREĐAJ I METODA ZA SLIJEPO IZDVAJANJE ČISTIH KOMPONENATA IZ MJEŠAVINA U 1D I 2D NMR SPEKTROSKOPIJI I MASENOJ SPEKTROMETRIJI ROBUSNOM VIŠEKOMPONENTNOM ANALIZOM TEMELJENOM NA RIJETKOSTI

Ref: RI-SM-WP-10-101v03

Inovacija se odnosi na sustav računalne obrade podataka u svrhu slijepog izdvajanja čistih komponenata u 1D i 2D NMR spektroskopiji i masenoj spektrometriji robusnom višekomponentnom analizom temeljenom na rijetkosti.

TRŽIŠNA PRILIKA

Inovacija može biti primijenjena u instrumentalnoj dijagnostici – određivanju i identifikaciji metabolita i biomarkera prisutnih u biološkim tekućinama (urinu, krvnoj plazmi, cerebralnoj tekućini, slini, amniotskoj tekućini, žuči, suzama itd.) ili uzorcima tkiva koji se koriste za dijagnostiku bolesti, određivanje ksenobiotske toksičnosti ili hranjivosti. Također se može koristiti za kemijsku sintezu, kontrolu kvalitete hrane i kontrolu zagađenja, npr. za identifikaciju i karakterizaciju komponenata dobivenih iz prirodnih izvora (mikroorganizama, biljaka i životinja). Metoda procjenjuje broj čistih komponenata prisutnih u smjesi uz smanjeni broj potrebnih mjerenja čime se štedi na vremenu i resursima.

OPIS INOVACIJE

Prednost predložene metode u usporedbi s drugim metodama slijepo dekompozicije je u tome što s njom može odrediti broj komponenata, njihove koncentracije te odrediti same komponente iz dostupnih mješavina čak i u slučaju kada je broj komponenata veći od broja mješavina. Postojeće metode za izdvajanje čistih komponenata koriste ili pristup uspoređivanja s bazama komponenata ili neku od metoda slijepog izdvajanja komponenata (BSS) koje zahtijevaju da broj analiziranih mješavina bude jednak ili veći broju komponenata (koji često i nije poznat). Dvije najkorištenije metode s tim ograničenjima su Analiza nezavisnih komponenata (ICA) i Faktorizacija nenegativne matrice (NMF).

Naša prethodno razvijena *Metoda za slijepo izdvajanje više od dvije čiste komponente iz dva mjerenja u spektroskopiji i spektrometriji pomoću analize rijetkih komponenata* može riješiti probleme koje ICA i NMF ne mogu ali zahtjeva visok stupanj rijetkosti među komponentama u domeni reprezentacije. Ipak, pretpostavka međusobne rijetkosti je značajno narušena kada broj komponenata, njihova složenost ili njihova sličnost rastu. Ovdje opisana metoda naslanja se na pretpostavku da su komponente međusobno rijetke tj. da se ne preklapaju samo u malom broju točaka u prikladno odabranoj domeni. Zbog toga je ova metoda uspješna u slijepom izdvajanju komponenata iz malog broja, čak i vrlo složenih mješavina. Kod analiza uzoraka uzetih iz bioloških tekućina ili uzoraka tkiva uobičajeno imamo baš to - mali broj mješavina koje su k tome vrlo složene.

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 Ruđer inovacijama.

Vezane znanstvene publikacije:

I. Kopriva, I. Jerić, "Blind Separation of Analytes in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy and Mass Spectrometry: Sparseness-Based Robust Multicomponent Analysis", Analytical Chemistry, DOI: 10.1021/ac902640y

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