



Application Note AN-NIR-101

Qualitätskontrolle von getrocknetem Cannabis

Chemikalienfreie Wirksamkeitstests innerhalb einer Minute mit NIRS

Cannabis hat eine lange Geschichte als Freizeitdroge und in der Medizin als schmerzlinderndes und krampflösendes Mittel. Die Entdeckung der wichtigsten Cannabinoide Tetrahydrocannabinol, Cannabidiol und Cannabigerol (THC, CBD und CBG) hat zu einem verstärkten Interesse an ihrer medizinischen Wirkung geführt. Während THC psychoaktiv ist und in den meisten Ländern als illegale Droge eingestuft wird, ist CBD in vielen Teilen der Welt für medizinische Zwecke rechtlich anerkannt. Es wird angenommen, dass CBD Ängste und Stress lindert und einen besseren Schlaf fördert. Aufgrund der unterschiedlichen Wirkungen und der möglichen rechtlichen Konsequenzen ist die Bestimmung des

Cannabinoidprofils von Cannabis von großem Interesse.

In der Regel wird die Wirksamkeit von Cannabis mittels HPLC-Analyse getestet. Die HPLC kann zwar niedrige Konzentrationen von weniger häufig vorkommenden Cannabinoiden nachweisen, erfordert jedoch chemische Reagenzien und ist recht zeitaufwändig. In dieser Application Note wird erläutert, warum die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) eine überlegene Methode für die Quantifizierung von THC, CBD und CBG in getrocknetem Cannabis ist, da sie in weniger als einer Minute Ergebnisse liefert und keine Chemikalien benötigt.

EXPERIMENTELLE AUSRÜSTUNG

Für diese Studie wurden insgesamt 702 getrocknete Cannabisproben mit unterschiedlichen THC-, CBD- und CBG-Konzentrationen verwendet. Die Vis-NIR-Spektren wurden mit einem Metrohm DS2500 Solid Analyzer (**Abbildung 1**) und dem DS2500 Holder aufgenommen. Eine 400-mg-Portion jeder Probe wurde von Hand mit einer Mühle gemahlen und dann in einen NIRS-Miniprobebecher gegeben. Anschließend wurde ein diffuser Goldreflektor mit einer Gesamtstrahlungslänge von 4 mm auf die vorbereitete Cannabisprobe gelegt. Die Datenerfassung und die Modellentwicklung wurden mit dem Softwarepaket Vision Air Complete durchgeführt.



Abbildung 1. Metrohm DS2500 Solid Analyzer mit einem NIRS-Transflexionsgefäß anstelle eines Mini-Probenbechers.

Tabelle 1. Übersicht über die Hardware- und Softwareausstattung

Ausrüstung	Metrohm-Nummer
DS2500 Solid Analyzer	2.922.0010
DS2500 Halter	6.7430.040
Mini-Probenbecher, 10 Stück inkl. 100 Einwegrücken	6.7402.030
NIRS Gold-Reflektor, 4 mm Gesamtschichtdicke	6.7420.020
Vision Air 2.0 Complete	6.6072.208

ERGEBNISSE

Die erhaltenen Vis-NIR-Spektren (**Abbildung 2**) wurden verwendet, um Vorhersagemodelle für den THC-, CBD- und CBG-Gehalt in getrocknetem Cannabis zu erstellen. Um die Qualität der Vorhersagemodelle zu überprüfen, wurden Korrelationsdiagramme erstellt, die einen

Korrelationswert (R^2) zwischen der Vis-NIR-Vorhersage und den Werten der Primärmethode (HPLC) anzeigen. Die jeweiligen Leistungszahlen (FOM) zeigen die erwartete Präzision einer Vorhersage während der Routineanalyse (**Abbildungen 3-5**).

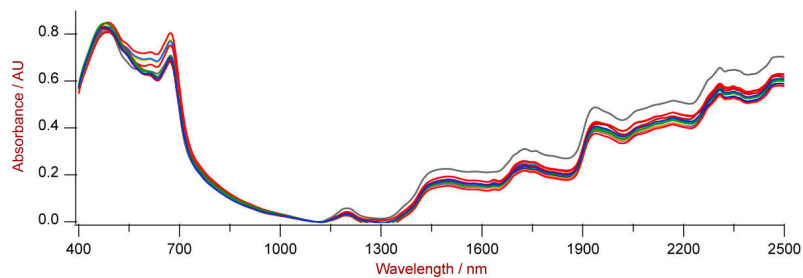


Abbildung 2. Auswahl von Vis-NIR-Spektren verschiedener Cannabisproben, gemessen mit einem Metrohm DS2500 Solid Analyzer.

Ergebnis THC

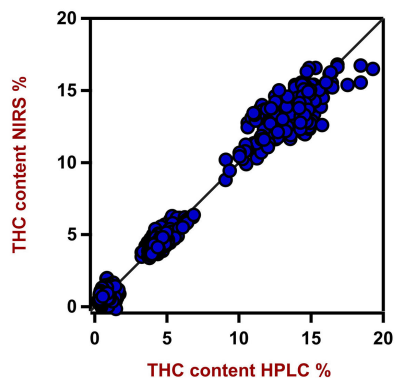


Abbildung 3. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungszahlen für die Vorhersage des THC-Gehalts in getrocknetem Cannabis unter Verwendung eines DS2500 Feststoffanalysators.

Ergebnis CBD

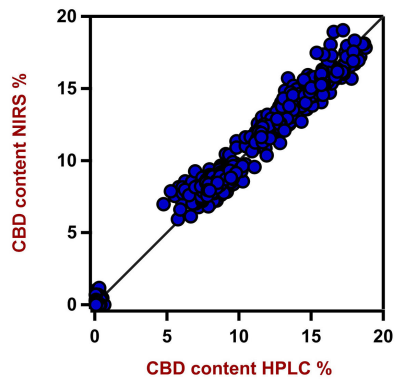


Abbildung 4. Korrelationsdiagramm und die entsprechenden Leistungszahlen für die Vorhersage des CBD-Gehalts in getrocknetem Cannabis unter Verwendung eines DS2500 Solid Analyzers.

ERGEBNISSE

Ergebnis CBG

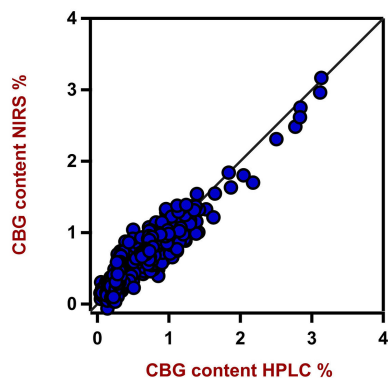


Abbildung 5. Korrelationsdiagramm und die jeweiligen Leistungszahlen für die Vorhersage des CBG-Gehalts in getrocknetem Cannabis unter Verwendung eines DS2500 Solid Analyzers.

FAZIT

In dieser Application Note wird eine Vis-NIR-Methode vorgestellt, die sich hervorragend für die schnelle Quantifizierung der drei wichtigsten Cannabinoide in Cannabis (d. h. THC, CBD und CBG) eignet. Im Vergleich zur Standard-HPLC-Methode (**Tabelle 2**)

spart die Cannabisanalyse mit Nahinfrarotspektroskopie bis zu 30 Minuten Zeit pro Analyse. Außerdem erfordert die NIRS keine chemischen Reagenzien und ist eine zerstörungsfreie Analysetechnik.

Tabelle 2. Zeit bis zum Ergebnis mit der herkömmlichen HPLC-Methode.

Parameter	Methode	Zeit zum Ergebnis
THC, CBD, CBG	HPLC	10 Min. (Vorbereitung) + 20 Min. (HPLC)

CONTACT

Metrohm Inula
Shuttleworthstraße 25
1210 Wien

office@metrohm.at

EXPERIMENTELLE AUSRÜSTUNG



DS2500 Solid Analyzer

Robuste Nahinfrarotspektroskopie für die Qualitätskontrolle im Labor sowie im Produktionsumfeld.

Der DS2500 Analyzer ist die bewährte, flexible Lösung für die Routineanalytik von Feststoffen, Cremes und optional auch Flüssigkeiten entlang der gesamten Produktionskette. Das robuste Design macht den DS2500 Analyzer unempfindlich gegen Staub, Feuchtigkeit, Vibrationen sowie Temperaturschwankungen und damit hervorragend geeignet für den Einsatz im rauen Produktionsumfeld.

Der DS2500 deckt den gesamten Spektralbereich von 400 bis 2500 nm ab und liefert in weniger als einer Minute genaue und reproduzierbare Ergebnisse. Der DS2500 Analyzer erfüllt die Anforderungen der pharmazeutischen Industrie und unterstützt durch die einfache Bedienung die Anwender in ihren täglichen Routineaufgaben.

Durch perfekt auf das Gerät abgestimmtes Zubehör werden bei jedem noch so herausfordernder Probentyp, wie z.B. grobkörnige Feststoffe wie Granulate oder halb fest-flüssige Proben wie Cremes, bestmögliche Ergebnisse erzielt. Bei Messungen von Feststoffen kann die Produktivität gesteigert werden durch Einsatz des MultiSample Cups, welches automatisierte Messungen in Serie von bis zu 9 Proben ermöglicht.



DS2500 Halter

Halter für die Verwendung mit:

- Kleinen Probengefäße (6.7402.030)
- DS2500 Iris (6.7425.100)



NIRS Probengefäß, klein, 10 Stück inkl. 100

Einwegdeckeln

Kleines Probengefäß zur Spektrenaufnahme von Pulvern und Granulaten in Reflexion. Das Probengefäß kann mit Einwegdeckeln verschlossen werden, um einen Probenverlust zu vermeiden und um das Pulver bzw. Granulat gleichmässig im Probengefäß zu verteilen.

Verwendet werden die Probengläser mit folgenden Instrumenten:

- NIRS DS2500 Analyzer (Bestellnummer: 2.922.0010)
- NIRS XDS MaserLab Analyzer (Bestellnummer: 2.921.1310)
- NIRS XDS MultiVial Analyzer (Bestellnummer: 2.921.1120)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer (Bestellnummer: 2.921.1110)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer - Solids (Bestellnummer: 2.921.1210)



NIRS Gold-Reflektor, 4 mm Gesamtschichtdicke

Gold-Reflektor für die Transflexionsmessung von Flüssigkeiten. Kombinierbar mit folgenden Geräten:

- NIRS DS2500 Analyzer (Bestellnummer: 2.922.0010)
- NIRS XDS MaserLab Analyzer (Bestellnummer: 2.921.1310)
- NIRS XDS MultiVial Analyzer (Bestellnummer: 2.921.1120)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer (Bestellnummer: 2.921.1110)
- NIRS XDS RapidContent Analyzer - Solids (Bestellnummer: 2.921.1210)