Application Note AN-RS-013

Determinación del contenido del contenedor

Método sencillo y guiado para la identificación de materiales con Raman

La identificación de materiales desconocidos en el campo puede ser un asunto complicado, especialmente en situaciones críticas. Es imperativo saber lo más posible sobre la sustancia rápidamente, pero con precaución. La seguridad es primordial cuando se trata de incógnitas. ese material es toxico? ¿Lo encenderá un rayo láser? ¿Existe un peligro inmediato para el medio ambiente? El experto más cercano está lejos, pero la crisis está aquí y ahora, ¿qué puedes hacer?

Tanto para la velocidad como para la seguridad, la identificación de materiales desconocidos a través de contenedores es esencial. Juntos, el analizador portátil Mira DS Raman con el accesorio universal inteligente (iUA) brinda al usuario capacidades de identificación de contenido con un solo toque. Cuando el iUA se conecta a Mira DS, el procedimiento operativo de Content ID se activa automáticamente, proporcionando al usuario flujos de trabajo guiados fácilmente. Content ID distingue el contenido del contenedor del material del contenedor y proporciona identificación de ambos. Esta nota de aplicación demuestra el uso de iUA combinado con Mira DS para la determinación del contenido del contenedor, incluido el flujo de trabajo guiado y ejemplos de espectros y resultados de Content ID. Obtenga respuestas seguras en segundos sin contacto de muestra, utilizando un Mira DS con iUA.

ACCESORIO UNIVERSAL INTELIGENTE

El accesorio universal inteligente (iUA) combina tres distancias focales en una punta inteligente que simplifica el muestreo con Mira DS.

Los usuarios pueden medir con seguridad y facilidad materiales desconocidos a través de barreras gruesas o delgadas, o incluso en la superficie:

Superficie <1 mm de distancia focal

Bolsa Distancia focal de ~5 mm, para muestreo a través de una barrera delgada, bolsa o botella

Botella Distancia focal de ~8 mm, para tomar muestras a través de una botella de vidrio o plástico más gruesa, por ejemplo

Visualización clara del contenido y del material del contenedor

El iUA es una punta redisenada que ofrece funcionalidad adicional. Gire el iUA y Mira DS comunica el mejor uso de esa posición para la identificación directa y simple de materiales (ejemplo mostrado a la derecha). Simplemente presione la punta contra el material desconocido, toque "Adquirir" y el sistema hace todo el trabajo, brindando respuestas en segundos.

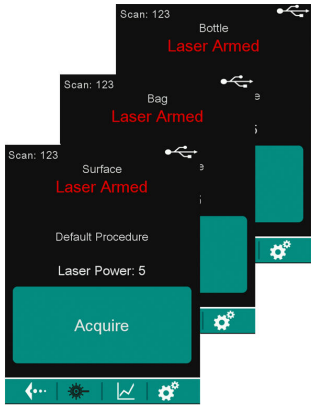

Figure 1. Comunicación inteligente iUA en pantalla de 3 posiciones

Cuando el iUA está conectado a Mira DS, el procedimiento operativo (OP) de Content ID se activa automáticamente en el dispositivo y se puede seleccionar tocando "Cambiar procedimiento" y eligiendo el procedimiento operativo de Content ID:

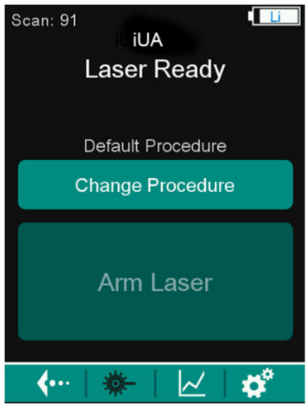

Figure 2. Pantalla de inicio de Mira DS iUA

Una vez que se especifica Content ID OP, Mira DS lleva al usuario a través de un flujo de trabajo guiado de dos pasos muy simple (ejemplo mostrado a la derecha). Coloque el iUA debajo de la línea de llenado, en el exterior del contenedor, para la primera adquisición. Coloque el iUA por encima de la línea de llenado para la segunda adquisición. Mira DS optimizará, promediará, igualará e informará los resultados tanto del contenedor como de su contenido automáticamente en cuestión de segundos (ejemplo que se muestra en la Figura 4).

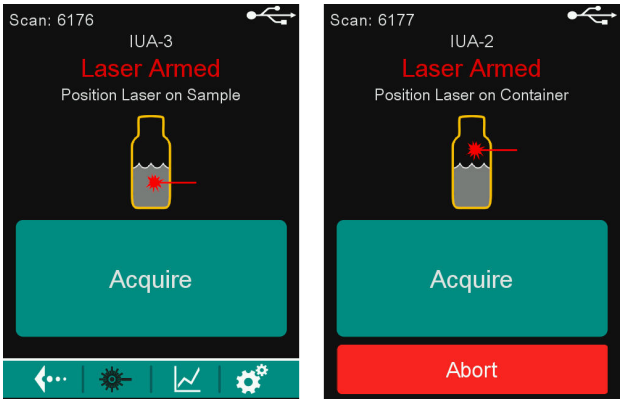

Figure 3. Flujo de trabajo de identificación de contenido

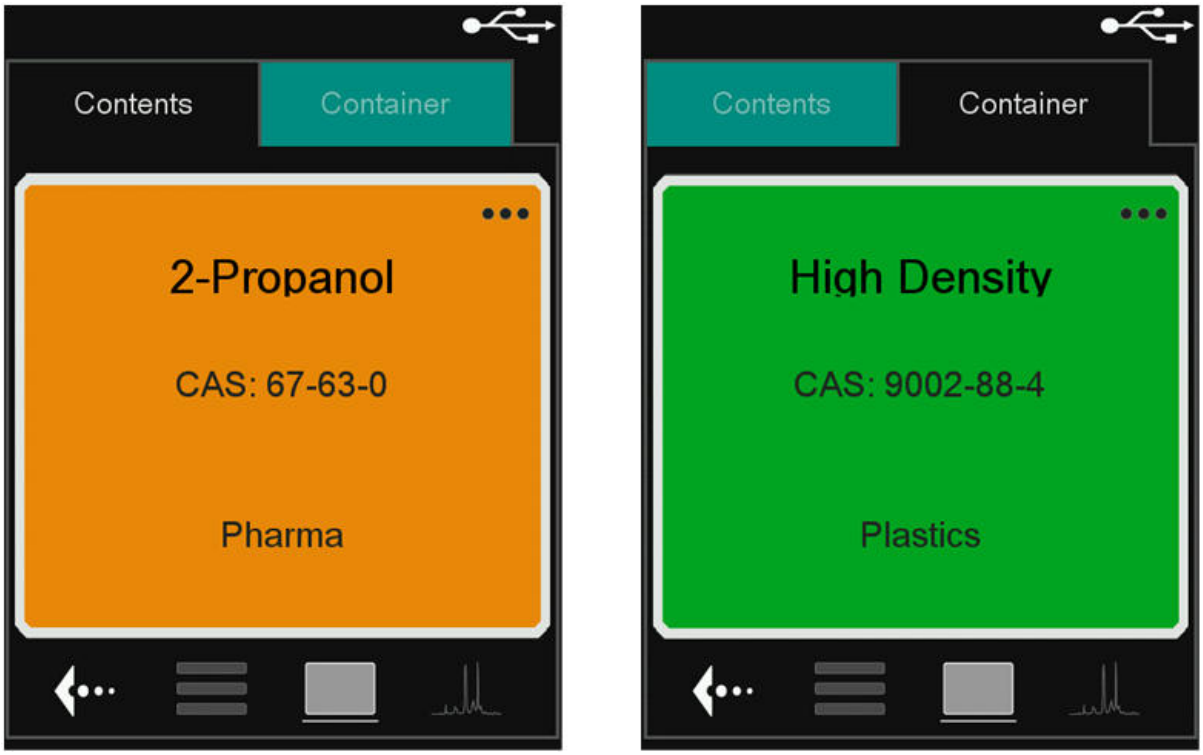

Figure 4. Resultados de identificación de contenido

EJEMPLOS DE IDENTIFICACIÓN DE CONTENIDO

La poderosa combinación de Smart Acquire, iUA y algoritmos patentados en Mira DS brinda resultados asombrosos. Considerar:

- prueba a través de la barrera
- análisis seguro de mezclas
- identificación precisa de los componentes principales en presencia de contaminantes

El primer ejemplo a continuación muestra el ID de contenido de una mezcla líquida (jarabe para la tos), compuesta principalmente de ~30 % p/v de glicerina (glicerol) con ingredientes activos, a través de una botella de plástico marrón.

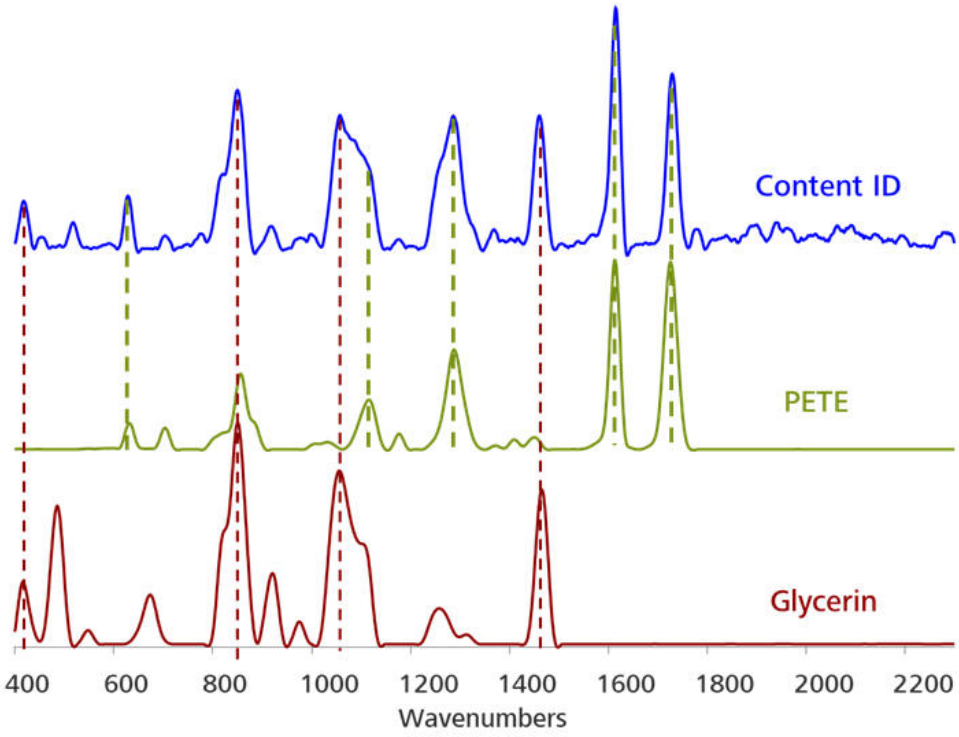

Figure 5. Espectros de biblioteca de glicerina y PETE superpuestos con Content ID, para demostrar la capacidad de Mira DS para resolver espectros complejos.

Con MiraCal DS, los resultados muestran que la glicerina tenía un peso espectral de ~41 % en el resultado de Content ID. PETE fue identificado dentro de la biblioteca ilícita con un coeficiente de correlación de biblioteca (HQI) de 0,99. Los resultados reales de la captura de pantalla de Mira DS se encuentran a continuación.

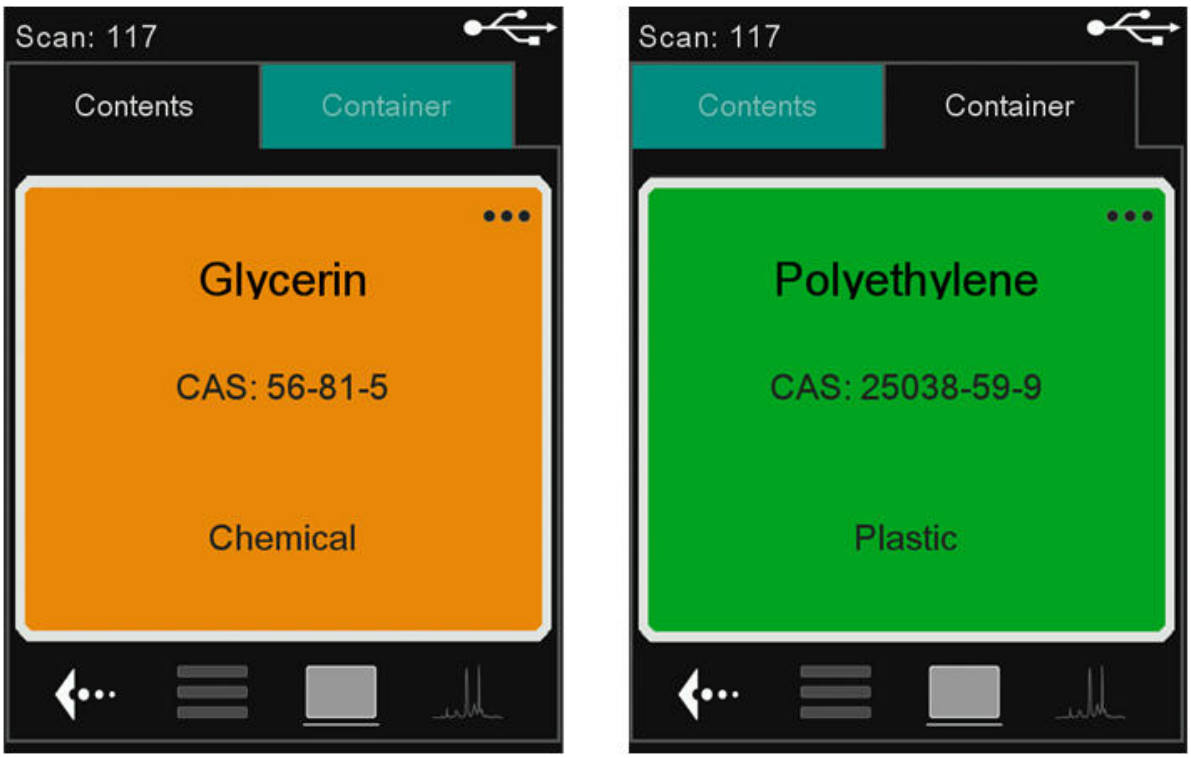

Figure 6. Captura de pantalla real de las pantallas de resultados de Mira DS para jarabe para la tos

Un segundo ejemplo de los resultados de Content ID es el análisis de paracetamol a través de su botella de plástico blanco opaco (abajo).

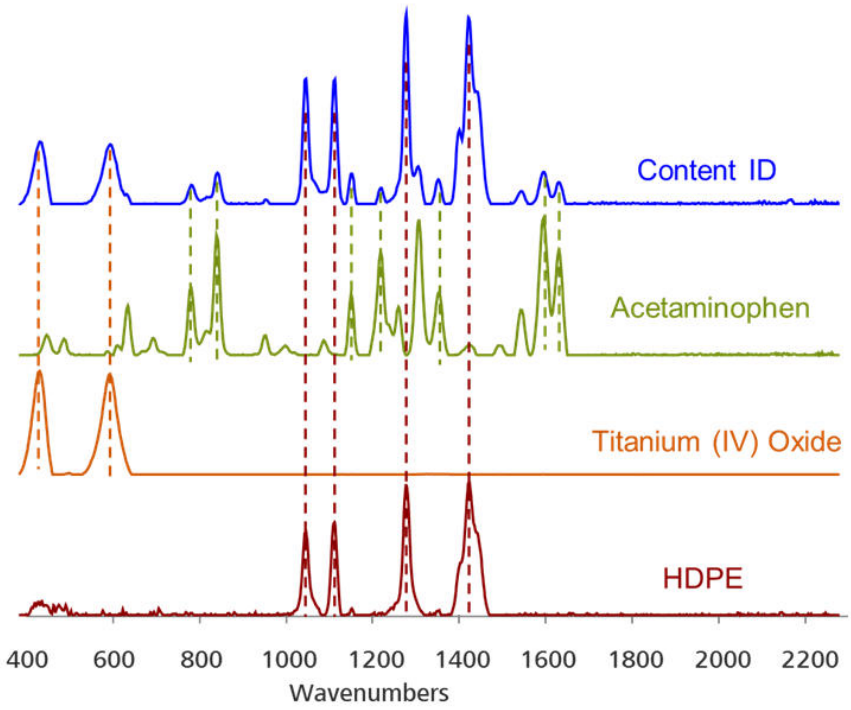

Figure 7. Espectros de biblioteca de paracetamol, HDPE y óxido de titanio superpuestos con Content ID para ilustrar los resultados de Content ID.

Este es un ejemplo único porque Content ID, en combinación con Mixture Matching en Mira DS, pudo analizar ambos componentes del contenedor, el plástico y el agente colorante (HDPE y óxido de titanio, respectivamente), además de una identificación positiva del acetaminofén dentro. Todos los componentes se identificaron con un HQI de 0,99.

Tabla 1. Especificaciones de Mira DS utilizadas para los análisis que se muestran en esta nota de aplicación

Longitud de onda	785 nm
Gama	400–2300cm^{-1}
Punta precisa	iUA
Versión de firmware	8.0.1.136
Versión del Software	1.1.14
Potencia del láser	5
Integración Tiempo (s)	10,0
Promedios	2
Biblioteca	Ilícito
Límite	0,96

CONTACT

Metrohm Argentina S.A.
Avda. Regimiento de
Patricios 1456
1266 Buenos Aires
info@metrohm.com.ar

CONFIGURACIÓN

MIRA DS Advanced

El Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) DS es un resistente espectrómetro Raman de mano de alto rendimiento que se utiliza para la determinación rápida y no destructiva de materiales ilícitos, como drogas, explosivos, materiales de partida y agentes peligrosos. A pesar del pequeno tamano de este aparato, el Mira DS es sumamente robusto y cuenta con un espectrógrafo de alta eficiencia equipado con nuestra exclusiva tecnología Orbital-Raster-Scan (ORS).

El paquete Advanced incluye un patrón de calibración, un accesorio universal para análisis en botellas y/o bolsas o para el análisis directo, y también incluye el accesorio de ángulo recto, ideal para analizar muestras sobre una superficie o en una bolsa. Operación de láser de clase 3B. El MIRA DS es compatible con las librerías Raman de mano de Metrohm.