

Identificación de polímeros con espectroscopia Raman

Esta nota de aplicación describe la identificación por espectroscopia Raman de polímeros como ABS, PE, PS, PET y PMMA en varios tintes. La determinación rápida y no destructiva tiene lugar después de que se

haya creado una base de datos de espectro adecuada. Las mediciones con el espectrómetro Raman Mira M-1 no requieren preparación de muestras y brindan resultados inmediatos e inequívocos.

INTRODUCCIÓN

La industria actual, pero también la vida cotidiana, no se puede imaginar sin los polímeros. La espectroscopia Raman portátil es especialmente adecuada para la identificación de polímeros de uso común, ya que se obtienen resultados evidentes en cuestión de segundos. Además, debido a que el análisis Raman no es destructivo, el uso posterior o el reciclaje de la muestra permanece sin restricciones. En este estudio, se construyó una biblioteca de polímeros generalizados de diferentes colores y posteriormente se utilizó para la identificación de muestras de polímeros desconocidos.

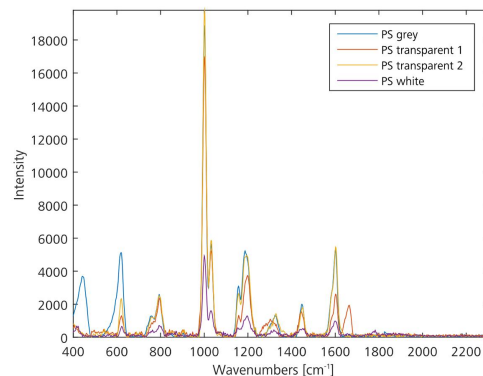


Figure 1. Espectros Raman de diferentes muestras de poliestireno

EXPERIMENTAL

Todos los espectros se midieron usando el espectrómetro Raman portátil Mira M-1 en modo de adquisición automática, es decir, los tiempos de integración se determinaron automáticamente. Se utilizó una longitud de onda láser de 785 nm y la técnica Orbital-Raster-Scan (ORS). Como muchas de las muestras de polímero eran muy delgadas, los espectros se registraron con el adaptador de apuntar y disparar, que es adecuado para una distancia de

trabajo corta (SWD).

Una amplia colección de ABS (acrilonitrilo butadieno estireno), PA (poliamida), PC (policarbonato), PE (polietileno), PP (polipropileno), PS (poliestireno), PET (tereftalato de polietileno), PVC (poli(cloruro de vinilo)), y PMMA (poli(metacrilato de metilo)) patrones de polímero y muestras de diferentes colores se utilizaron para crear una biblioteca completa con el software Mira Cal.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para cada tipo de polímero, se eligió un espectro (es decir, un color) y estos espectros se superpusieron. La superposición (Figura 2) muestra que cada uno de los polímeros tiene un espectro único que lo diferencia de los demás plásticos analizados. El área espectral que contiene la mayoría de los picos alcanza de 600 a 1800 cm^{-1} ; demostrando que el rango espectral de Mira M-1 es apropiado para las muestras de polímero estudiadas.

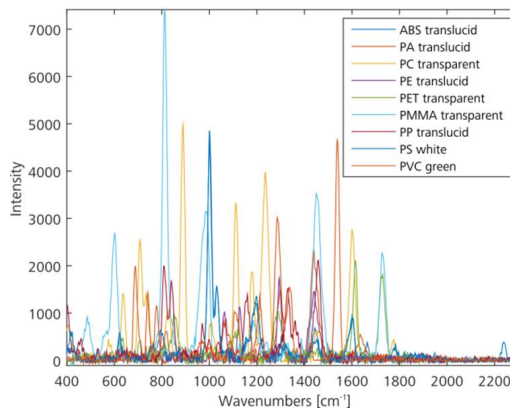


Figure 2. Superposición de los espectros de muestras de polímeros seleccionados (gráfico realizado con MATLAB)

Los espectros de varios artículos cotidianos y de laboratorio de polímeros desconocidos y diferentes colores (figura 3) fueron cotejados con la biblioteca. La biblioteca, que se había construido utilizando estándares de polímeros de diferentes colores, fue útil para identificar las muestras de prueba: las muestras opacas se identificaron por colores específicos, mientras que las muestras transparentes y translúcidas, en muchos casos, se identificaron solo como tales.

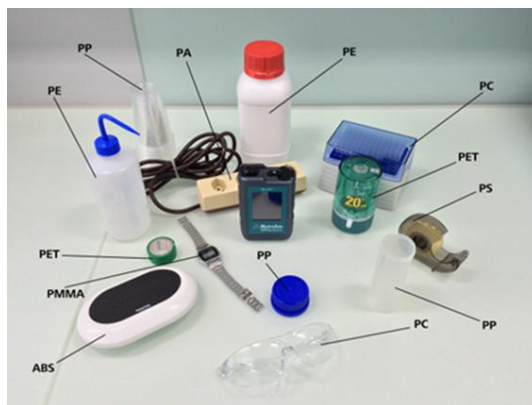


Figure 3. Elementos medidos contra la biblioteca

Como puede verse en **Figura 4**, las señales de las muestras oscuras, como las negras, grises y azul oscuro, fueron de muy baja intensidad y no se pudo observar ningún pico específico del polímero. Este es un fenómeno que se encuentra en muchas técnicas espectroscópicas y se debe a la absorción de la luz láser por el negro de humo.

Debido a que no fue posible la identificación de las muestras oscuras (principalmente gris oscuro y negro), se excluyeron de la biblioteca y solo se mantuvieron en la biblioteca las muestras transparentes, translúcidas y de colores claros.

Los valores de correlación espectral, que indican qué tan bien coincide el espectro de la muestra con el espectro de referencia en la biblioteca, fueron superiores a 0,90 para todas las muestras medidas (incluidas, entre otras, las que se muestran en **figura 3**). Todas las muestras de polímeros se identificaron sin ambigüedades utilizando el espectrómetro Mira M-1.

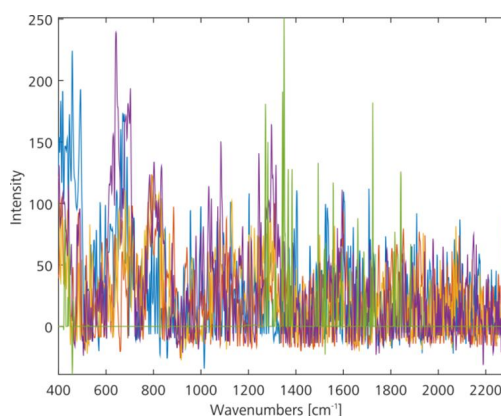


Figure 4. Superposición de los espectros de varios polímeros de color oscuro.

CONCLUSIONES

Este estudio muestra que Mira M-1 se puede utilizar para identificar sin ambigüedades varios polímeros de diferentes colores midiendo sus espectros y comparándolos con una biblioteca. La identificación toma solo unos segundos.

Los problemas surgen solo cuando se deben analizar

polímeros de color oscuro. Estas muestras absorben fuertemente la luz láser del espectrómetro y, por lo tanto, algunos picos específicos de polímeros no aparecen en el espectro. Por lo tanto, las muestras de color oscuro no pueden identificarse mediante espectroscopia Raman.

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



MIRA P Advanced

El Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P es un potente espectrómetro Raman portátil que se puede utilizar para determinar y verificar de forma rápida y no destructiva los más diversos materiales como, por ejemplo, principios activos y excipientes de uso farmacéutico. Pese a su pequeño tamaño, el MIRA P es muy robusto y cuenta con un espectrógrafo de diseño muy eficiente, que está equipado con nuestra extraordinaria tecnología Orbital Raster Scan (ORS). El MIRA P cumple la normativa FDA 21 CFR Parte 11.

El paquete Advanced incluye una lente adicional con la que los materiales se pueden analizar directamente o en sus recipientes (láser de clase 3b) y un accesorio de soporte de vial para analizar las muestras que se encuentran en viales de vidrio (láser de clase 1).