

Ve a través de la tecnología Raman: capacidades ampliadas para la identificación a través de la identificación de paquetes utilizando la excitación Raman de 785 nm y 1064 nm

La espectroscopia Raman es una forma de espectroscopia molecular que brinda información molecular específica de los materiales. Raman se usa ampliamente para pruebas de identificación rápidas, no destructivas y no invasivas en investigación química, de materiales, farmacéutica y biomédica, en diagnósticos médicos y, cada vez más, por parte de las fuerzas del orden. Una limitación de la espectroscopia Raman es que las muestras solo se pueden medir directamente o a través de recipientes transparentes. Aunque esto no es realmente una limitación en un

entorno de laboratorio, para la instrumentación portátil desplegada en el campo, la preferencia es identificar las muestras tal como son, con una manipulación mínima de las muestras y la apertura de los paquetes. La identificación Raman a través de envases opacos facilitaría el uso de la tecnología para las materias primas entrantes en los almacenes y para los socorristas, los agentes de aduanas y otras personas que necesitan identificar rápidamente los materiales sin tocarlos.

VER A TRAVÉS DE LA TECNOLOGÍA RAMAN

Ver a través de la espectroscopia Raman (STRaman™) es una tecnología recientemente desarrollada que amplía la capacidad de la espectroscopia Raman para medir muestras debajo de material de empaque de dispersión difusa. Raman convencional normalmente tiene un área de muestreo muy pequeña con una alta densidad de potencia en el punto focal del láser en la muestra, lo que significa que solo se mide una porción limitada de una muestra, y las muestras pueden calentarse o quemarse. La tecnología ST ha sido diseñada para superar estos problemas. La tecnología está disponible en sistemas Raman portátiles y de

mano con láser de excitación láser de 785 nm y de 1064 nm. El Straman™ La tecnología presenta un área de muestreo mucho más grande que el enfoque confocal. Este diseño mejora la intensidad relativa de la señal de las capas más profundas, lo que aumenta la profundidad efectiva de muestreo y, a su vez, permite la medida de materiales dentro de embalajes visualmente opacos. El área de muestreo más grande tiene la ventaja adicional de prevenir el dano de la muestra al reducir la densidad de potencia, así como de mejorar la precisión de la medida al eliminar el efecto heterogéneo.

EJEMPLOS DE IDENTIFICACIÓN TRANSPARENTE

Hemos demostrado las capacidades del STRam de 785 nm para la identificación a través del paquete[1,2] como botellas de polietileno blanco, un empaque común para productos químicos sólidos, y otros empaques opacos como sobres blancos y manila. Se recolecta un espectro de material debajo de las capas opacas debido a la mayor profundidad de muestreo de la tecnología. Junto con algoritmos de identificación avanzados, la contribución de la señal Raman del paquete se elimina y la muestra se identifica correctamente. La identificación a través de plástico de colores, múltiples capas opacas y vidrio grueso se puede hacer con el STRaman™ tecnología con excitación de 785 nm. Un ejemplo de

identificación de benzoato de sodio dentro de una botella blanca de PE se da en **Figura 1**. Las tabletas recubiertas también se pueden identificar ya que la tecnología transparente penetra en la capa de recubrimiento y mide el espectro Raman de la tableta subyacente. Y debido a que la densidad de potencia del sistema es más baja que la señal altamente enfocada utilizada en Raman convencional, incluso los recubrimientos de tabletas de colores y las muestras oscuras se pueden medir sin quemar la superficie con láser. **Figura 2** muestra el espectro Raman de un polvo negro recogido con el STRam a plena potencia del láser sin quemarse.

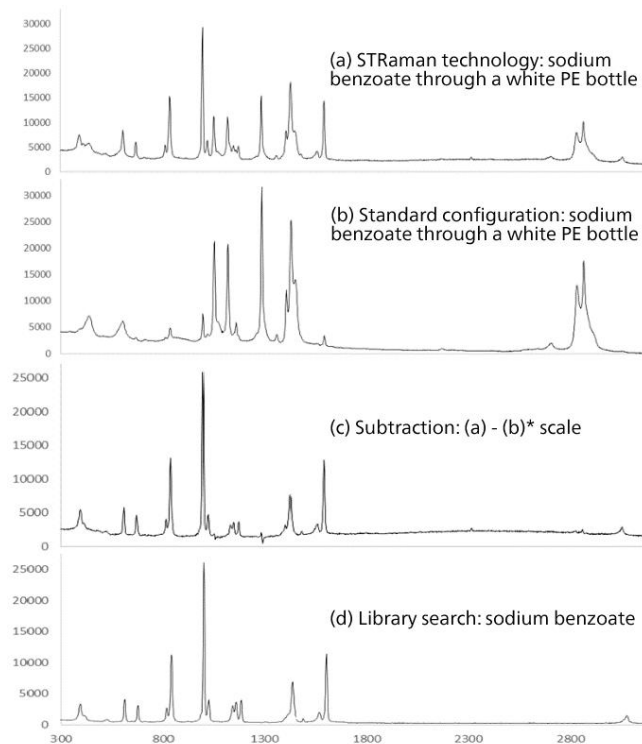


Figure 1. Identificación STRam de benzoato de sodio a través de una botella de polietileno blanco: (a) Espectro medido a través de la botella utilizando la tecnología STRaman; (b) espectro medido con una configuración Raman estándar; (c) el resultado de la resta escalada de (b) de (a); y (d) espectro puro de benzoato de sodio.

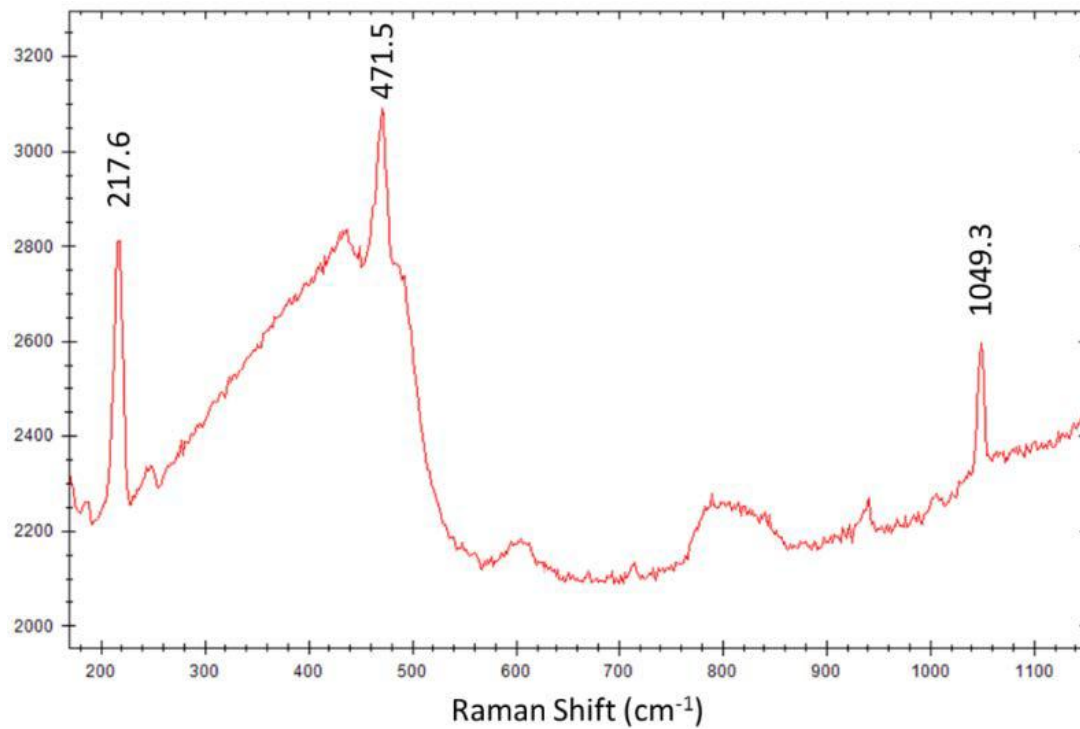


Figure 2. Espectro STRam de polvo oscuro.

Muchas materias primas se suministran en sacos de papel kraft de una o varias capas, a veces también con una capa de revestimiento de plástico. El papel kraft marrón, así como muchos otros materiales de colores oscuros, tiene un fuerte fluorescencia cuando se mide con Raman de 785 nm. La aplicación de la tecnología STRaman a nuestros sistemas Raman de 1064 nm permite la identificación de materiales incluso a través de materiales de embalaje tan complicados. Para ilustrar, obtuvimos una serie de diferentes bolsas de papel multicapa utilizadas como contenedores de materia prima en las compañías farmacéuticas, seleccionamos varios excipientes de uso común con diferentes fuerzas de dispersión Raman y probamos la capacidad de STRaman™ a 1064 nm para

identificarlos a través de las bolsas de papel. Como **tabla 1** muestra, incluso el fosfato trisódico del material activo Raman más débil, que es aproximadamente 40 veces más débil que el carbonato de calcio, se identifica positivamente (una identificación positiva significa que el producto químico correcto figura como el principal éxito, con un índice de calidad de éxito por encima de un umbral establecido, y más alto que el 2^{Dakota del Norte} golpeado por un margen establecido. El umbral de HQI se establece en 85 y el margen se establece en 2 en estas pruebas). Sin embargo, a una excitación de 785 nm, el fosfato trisódico solo se puede identificar con éxito a través de la bolsa de papel kraft blanca.

Packaging Material	Calcium Carbonate (CaCO ₃)	Dextrin	Cyclodextrin	d-Maltose H ₂ O	Trisodium Phosphate (Na ₃ PO ₄)
2 layers: 1 white kraft + 1 brown kraft	97.7	96.7	95.6	93.8	93.2
2 layers of brown kraft	97.6	92.2	91.6	90.9	88.7
2 layers of white paper	96.8	98.025	95.2	95.0	94.9
2 layers: 1 white kraft paper with blue bands + 1 brown kraft paper	95.1	92.8	91.4	91.35	89.0
2 layers: 1 white paper + 1 woven fiber	96.2	95.7	93.2	92.6	91.1
3 layers: 1 white kraft + 1 plastic film + 1 brown kraft	96.1	91.8	92.0	90.7	88.4
3 layers: 1 white kraft + 2 brown kraft	97.4	94.6	94.0	92.9	93.0

Table 1. Identificación positiva de muestras en bolsas de papel kraft mediante sistema STRam-1064.

figura 3 muestra el espectro del fosfato trisódico medido a través de una bolsa de dos capas de papel kraft blanco y marrón, con un resultado de búsqueda positivo en la biblioteca. Aunque el espectro está

dominado por la fluorescencia y las características Raman de la bolsa de papel, el algoritmo utilizado en STRaman es capaz de extraer de él la firma del fosfato trisódico e identificarlo de forma fiable.

VENTAJAS DE STRAM

Las ventajas adicionales de la tecnología STRam son su mayor área de muestreo. Debido a este diseño, Raman se puede usar más ampliamente y brindar

resultados más repetibles para muestras heterogéneas, como polvos mixtos o productos naturales.

CONCLUSIÓN

La capacidad de medir muestras dentro de paquetes, eliminando la necesidad de preparación de muestras, es una de las principales ventajas de Raman. Los avances producidos con la tecnología STRaman suponen que un paso más allá para medir a través de paquetes opacos, desde botellas de plástico blancas hasta sacos de fibra, sacos de papel kraft, sobres e incluso piel, permite una fácil adopción de

esta herramienta espectroscópica en muchos entornos de trabajo, en el laboratorio o en el campo. El desarrollo de la tecnología para la excitación láser de 785 nm y 1064 nm aborda incluso los envases oscuros y con muchos colores que están influenciados por la fluorescencia. Esto abre Raman a muchos nuevos usuarios potenciales, para quienes anteriormente no había sido una herramienta viable.

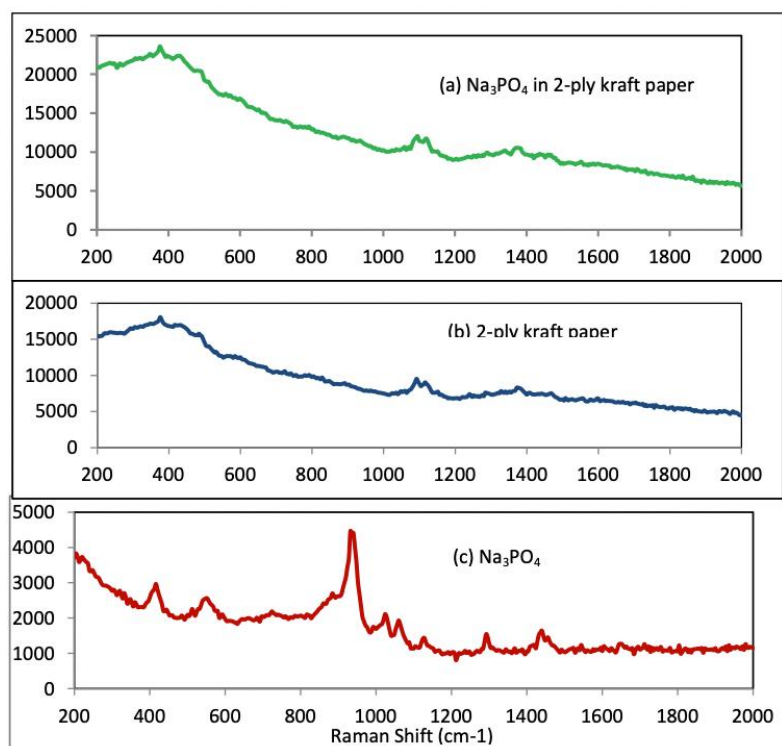


Figure 3. STRam-1064 identificación de fosfato trisódico en bolsa bicapa de capas de papel kraft blanco y marrón (a) Espectro medido a través de la bolsa bicapa utilizando la tecnología STRaman; (b) espectro de la bolsa bicapa medido con configuración Raman estándar; (c) espectro puro de fosfato trisódico.

REFERENCIAS

1. j Zhao, KA Bakev, J. Zhou, "Espectroscopia Raman Peers Through Packaging", Photonics Spectra, febrero de 2018, https://www.photonics.com/a62932/Raman_Spectroscopy_Peers_Through_Packaging.
2. ka Bakeev, "Ciencia transparente", The Analytical Scientist, mayo de 2018, <https://theanalyticalscientist.com/issues/0518/see-through-science/>.

OTRAS LECTURAS

Nota de aplicación relacionada

[Application Note sobre la espectroscopía Raman para realizar identificaciones a través de los materiales](#)

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es