



Application Note AN-RS-001

Identificación de polímeros con espectroscopía Raman

Determinación rápida y no destructiva de plásticos coloreados

A pesar de su precisión en el análisis de polímeros, la espectroscopia Raman tiene dificultades para identificar con precisión los plásticos coloreados debido a la interferencia de fluorescencia de los pigmentos y aditivos. Los resultados de identificación de polímeros pueden ser menos confiables en estas condiciones.

El uso de múltiples longitudes de onda de excitación, bibliotecas de referencia integrales y el empleo de técnicas avanzadas mejoran la confiabilidad del análisis Raman. Las soluciones Raman de Metrohm

abarcen todas estas capacidades y proporcionan una identificación de polímeros rápida y precisa. Esta nota de aplicación se centra en la tecnología avanzada XTR® de Metrohm, que mejora la identificación de sustancias extrayendo la señal Raman de los espectros con fluorescencia de fondo fuerte y oclusiva. Se examinan varios tipos de polímeros coloreados, mostrando los beneficios de utilizar la espectroscopia Raman de 785 nm con la novedosa técnica de rechazo de fluorescencia XTR.

Esta nota de aplicación describe la identificación de poli(etileno-acetato de vinilo), también conocido como PEVA, poliestireno (PS) y polipropileno (PP) en plásticos coloreados con espectroscopia Raman. Las mediciones con el espectrómetro Raman portátil

MIRA XTR no requieren preparación de muestras y proporcionan resultados inmediatos e inequívocos. La determinación rápida y no destructiva se lleva a cabo mediante la aplicación del algoritmo XTR seguida de una búsqueda automatizada en la biblioteca.

EXPERIMENTO

Todos los espectros se midieron utilizando MIRA XTR, a una longitud de onda de 785 nm y con Orbital Raster Scan (ORSTM), en modo de adquisición automática. La oclusión de la fluorescencia inicia automáticamente los algoritmos XTR y devuelve un espectro base de alta resolución del material.

Todas las muestras de este estudio eran materiales domésticos y de oficina comunes, probados a través de contacto directo utilizando el Accesorio Universal

Inteligente (iUA).

La biblioteca de productos químicos ilícitos y generales de Metrohm es una base de datos espectral completa de materiales comunes para la identificación precisa de muestras mixtas. Cada muestra se identificó utilizando esta biblioteca en el software MIRA Cal. Se muestra una gama de estándares de polímeros en **Figura 1**, ilustrando sus huellas dactilares distintivas en el espectro Raman.

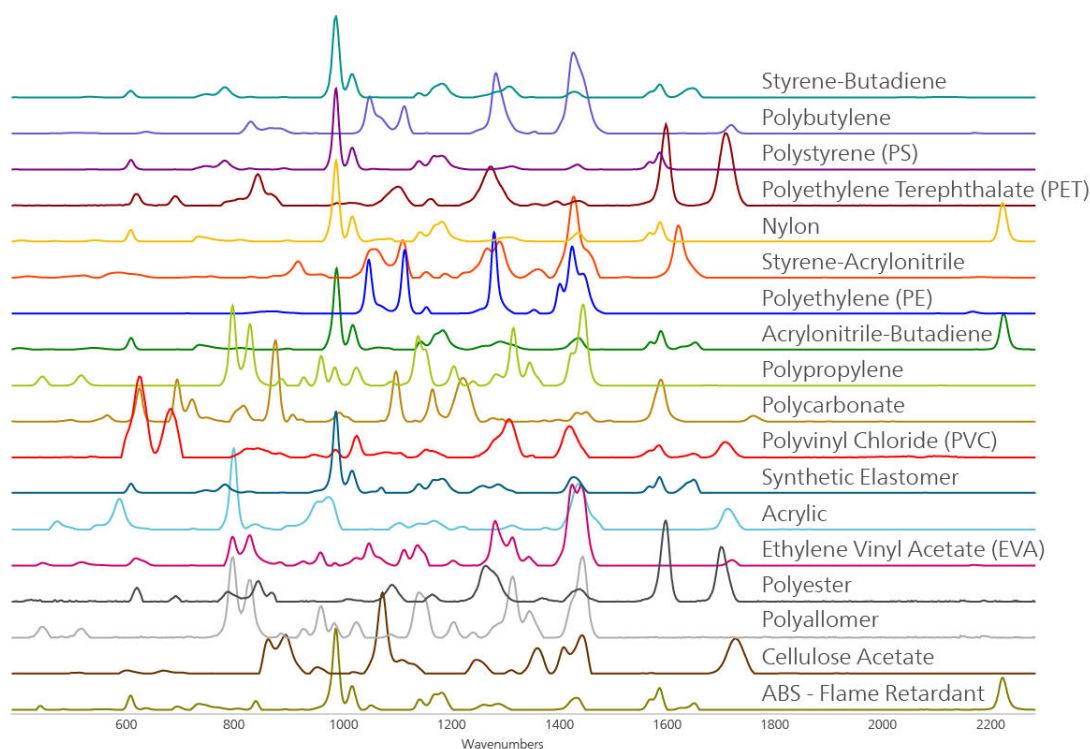


Figure 1. Los espectros de la biblioteca Raman apilados para una amplia gama de muestras de polímeros demuestran cuán distintos son los picos de huellas dactilares Raman para cada material.

Se recopilaron los espectros Raman de varios elementos compuestos por polímeros desconocidos en diferentes colores (Figura 2) y se comparó con la

biblioteca de sustancias químicas ilícitas y generales MIRA.

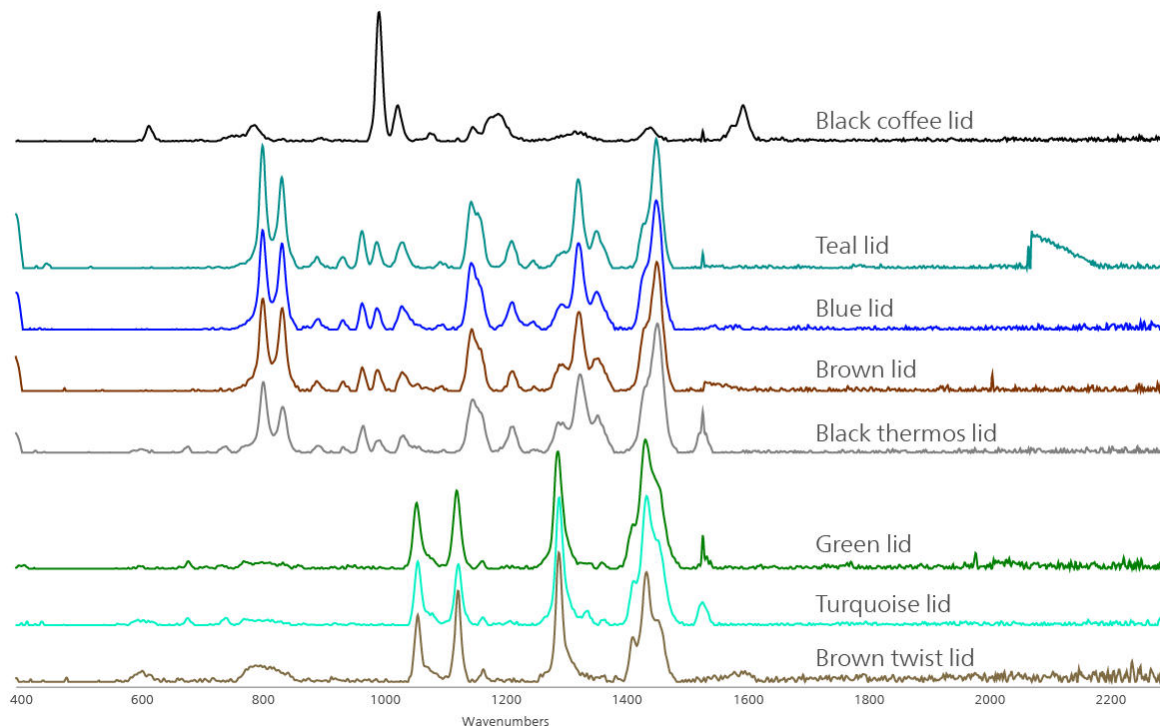


Figure 2. Espectros Raman apilados y resueltos de varios plásticos fuertemente coloreados.

Los resultados se muestran en el dispositivo en cuestión de segundos e incluyen el nombre, el número CAS y el HQI (Índice de calidad de acierto), una medida de la fuerza de la correlación entre los espectros de la muestra y la biblioteca. **Figura 3**

Demuestra la precisión de los datos recopilados incluso de muestras intensamente coloreadas comparando los espectros de la muestra y de la biblioteca.

RESULTADOS

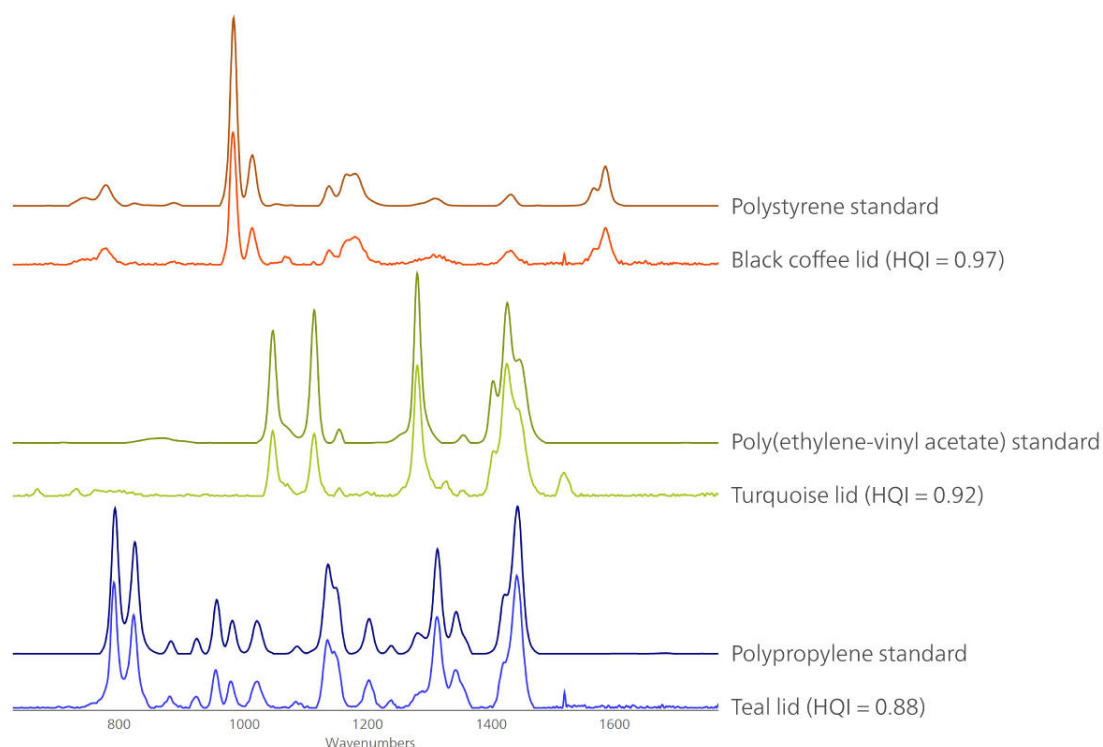


Figure 3. Una comparación directa de los espectros experimentales y de biblioteca demuestra la precisión y resolución tanto de los espectros como de los resultados. Cada muestra de plástico corresponde a un único espectro de biblioteca con altos valores de HQI.

CONCLUSIONES

Metrohm tiene soluciones únicas que superan el problema de la fluorescencia manteniendo todos los beneficios de la interrogación de 785 nm:

identificación rápida, precisa y no destructiva de polímeros coloreados.

CONTACT

Metrohm México
Calle. Xicoténcatl #181, Col.
Del Carmen, Alcaldía
Coyoacán.
04100. Ciudad de México
México

info@metrohm.mx

CONFIGURACIÓN



MIRA XTR Advanced

El MIRA XTR es una alternativa para los sistemas de alta potencia de 1064 nm. Con un procesamiento computacional avanzado, el MIRA XTR utiliza un láser de 785 nm más sensible junto con algoritmos XTR para extraer los datos Raman de la fluorescencia de la muestra. El MIRA XTR también cuenta con el escaneo Orbital Raster Scanning (ORS) para proporcionar una mejor cobertura de la muestra, aumentando así la exactitud de los resultados.

El paquete Advanced de MIRA XTR incluye un patrón de calibración, el accesorio universal inteligente, el accesorio de ángulo recto, el accesorio para el vial y el accesorio MIRA SERS. Un paquete completo para cualquier tipo de análisis. Operación de clase 3B. El MIRA XTR es compatible con las librerías Raman de mano de Metrohm.



Accesorio universal inteligente (iUA)

El iUA es un accesorio con sistema óptico de recogida con 3 posiciones para sistemas MIRA. El accesorio iUA aúna la flexibilidad de un accesorio universal con el modo de funcionamiento inteligente de los accesorios SmartTip para MIRA. Cada posición indica su respectivo propósito ideal, es decir, el uso para analizar una superficie, una bolsa o una botella.



Librería MIRA de materiales ilícitos y productos químicos en general

Librería MIRA (Metrohm Instant Raman Analyzer) de materiales ilícitos, incluidas drogas, químicos industriales tóxicos y materiales industriales tóxicos, precursores y productos químicos en general.