

Identificazione di zuccheri strutturalmente molto simili utilizzando uno spettrometro Raman portatile

Questa Application Note descrive l'identificazione mediante spettroscopia Raman di zuccheri come D-galattosio, D-glucosio, D-maltosio, D-mannosio, D-sorbitolo, fruttosio, saccarosio e inositolo. La determinazione rapida e non distruttiva avviene dopo

che è stato creato un database di spettro adatto. Le misurazioni con lo spettrometro Raman portatile Mira M-1 non richiedono la preparazione del campione e forniscono risultati immediati e inequivocabili.

INTRODUZIONE

L'industria di oggi, ma anche la vita quotidiana, non si può immaginare senza zucchero. Gli zuccheri sono utilizzati dai produttori di sostanze chimiche nelle reazioni, dai produttori di alimenti come aroma e dai produttori di farmaci come conservanti, stabilizzanti e agenti mascheranti per i farmaci. Zucchero è un termine generico per saccaridi, ma ci sono tre gruppi generali di saccaridi: monosaccaridi, disaccaridi e polisaccaridi. I monosaccaridi sono le forme di carboidrati più semplici e sono costituiti da singole porzioni di zucchero che diventano gli elementi costitutivi degli altri gruppi di saccaridi. I monosaccaridi comuni sono il fruttosio (zucchero della frutta), il glucosio (destrosio), il galattosio (zucchero del latte).

I disaccaridi contengono due monosaccaridi o il doppio delle porzioni zuccherine. I più comuni sono il saccarosio (glucosio + fruttosio), il lattosio (galattosio + glucosio) e il maltosio (glucosio + glucosio). Al contrario, i polisaccaridi sono caratterizzati da uno schema ripetitivo di monosaccaridi o disaccaridi polimerizzati e danno luogo a materiali come cellulosa, amidi e glicogeno.

In questo studio, viene mostrata un'alternativa rapida all'identificazione e alla conferma chimica umida e dispendiosa in termini di tempo HPLC, FT-IR, colorimetrica e di zuccheri strutturalmente simili comunemente usati.

ANALISI

Tutti gli spettri sono stati misurati utilizzando lo spettrometro Raman Mira M-1 in modalità di acquisizione automatica, ovvero i tempi di integrazione sono stati determinati automaticamente. Sono state utilizzate una lunghezza d'onda laser di 785 nm e la tecnica Orbital-Raster-Scan (ORS). Poiché tutti i campioni di zucchero sono stati confezionati in sacchetti di plastica, gli spettri sono stati registrati con l'adattatore point-and-shoot adatto per una breve distanza di lavoro (SWD).

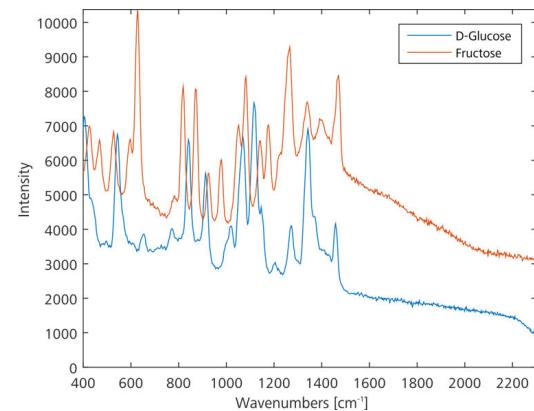


Figure 1. Spettri Raman sovrapposti di D-glucosio e fruttosio

La tecnica ORS menzionata aumenta in modo significativo l'accuratezza, la riproducibilità e, di conseguenza, l'affidabilità delle misurazioni, poiché il laser effettua una scansione su un'area estesa della superficie del campione.

Una collezione di campioni **D-galattosio**, **D-glucosio**, **D-maltosio**, **D-mannosio**, **D-sorbitolo**, **fruttosio**, **saccarosio** e **inositolo** sono stati utilizzati per creare una libreria specifica con il software Mira Cal.

RISULTATI E DISCUSSIONE

Gli spettri di tutti i diversi zuccheri utilizzati per la libreria sono stati sovrapposti. La sovrapposizione (**figura 2**) mostra che ogni zucchero ha uno spettro unico che lo differenzia dalle altre materie plastiche analizzate. L'area spettrale contenente la maggior parte dei picchi va da 400 a 1800 cm^{-1} ; dimostrando che l'intervallo spettrale di Mira M-1 è appropriato per i campioni di zucchero studiati.

La **Figura 3** dimostra come il Mira (con la tecnica ORS) consenta l'identificazione univoca degli zuccheri strutturalmente simili attraverso misurazioni ad alta sensibilità di campioni in polvere o cristallini. Il fruttosio un chetosio e il glucosio un aldosio sono entrambi monosaccaridi con la stessa composizione chimica. Questi due composti possono essere facilmente differenziati con Mira in base ai valori di correlazione spettrale.

Dando un'occhiata ai valori di correlazione quando si confronta il glucosio con il fruttosio o viceversa, si può vedere lo stesso valore di correlazione di $0,15$. Ciò dimostra l'elevata selettività dello spettrometro Raman Mira M-1 e si applica anche alle altre sostanze. I valori di correlazione spettrale che indicano quanto bene lo spettro del campione corrisponde allo spettro di riferimento nella libreria erano superiori a $0,99$ per tutti i campioni misurati, mentre i valori di correlazione spettrale sono inferiori a $0,4$ quando lo spettro del campione non corrisponde allo spettro della libreria (vedi **Figura 3**).

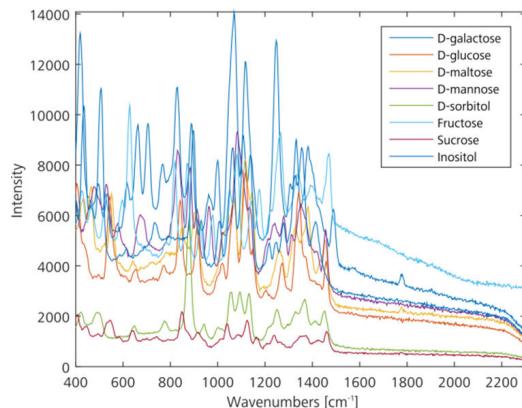


Figure 2. Sovrapposizione dei vari zuccheri che mostrano un elevato grado di selettività spettrale (plot realizzati con MATLAB)

Lib Smpl	Gal	Glu	Mal	Man	Sor	Fru	Suc	Ino
Gal	1.00	0.12	0.17	0.13	0.14	0.05	0.16	0.09
Glu	0.12	1.00	0.41	0.18	0.13	0.15	0.31	0.14
Mal	0.17	0.41	1.00	0.07	0.13	0.05	0.13	0.31
Man	0.13	0.18	0.07	1.00	0.25	0.05	0.05	0.14
Sor	0.14	0.13	0.13	0.25	1.00	0.22	0.03	0.01
Fru	0.05	0.15	0.05	0.05	0.22	1.00	0.06	0.16
Suc	0.16	0.31	0.13	0.05	0.03	0.06	1.00	0.03
Ino	0.09	0.14	0.31	0.14	0.01	0.16	0.03	1.00

Figure 3. Valori di correlazione che mostrano i risultati di selettività del Mira M-1

CONCLUSIONI

In questa Application Note, l'analizzatore Raman portatile Mira è in grado di identificare e confermare lo zucchero ed i suoi derivati utilizzati in vari settori. Le misurazioni Mira sono rapide e confermate rispetto alle tradizionali tecniche chimiche a umido e offrono

all'utente l'opportunità di una soluzione portatile. Per campioni di polisaccaridi come amido, cellulosa microcristallina, che mostrano un effetto di fluorescenza, si consiglia lo strumento Mira XTR.

CONTACT

Metrohm Italiana Srl
Via G. Di Vittorio, 5
21040 Origgio (VA)

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



MIRA P Advanced

Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P è uno spettrometro raman palmare ad alte prestazioni utilizzabile per determinazione e verifica rapide e non distruttive di svariate tipologie di materiale tra cui principi attivi ed eccipienti farmaceutici. Nonostante le dimensioni ridotte, MIRA P è estremamente robusto e dispone di uno spettrografo ad alta efficienza dotato della tecnologia brevettata ORS (Orbital Raster Scan). MIRA P soddisfa la normativa FDA 21 CFR parte 11.

La configurazione Advanced Package comprende una lente accessoria che permette l'analisi dei materiali diretti o attraverso gli imballi originali (laser classe 3b) e un porta vial per analizzare i campioni contenuti in vial di vetro (laser classe 1).