



Application Note AN-RS-013

Determinazione dei contenuti del contenitore

Metodo semplice e guidato per l'identificazione dei materiali con Raman

L'identificazione di materiali sconosciuti sul campo può essere un processo complicato, soprattutto in situazioni critiche. È imperativo sapere quanto più possibile sulla sostanza, ma con cautela. La sicurezza è un premio quando si ha a che fare con sconosciuti. Quel materiale è tossico? Un raggio laser lo accenderà? Esiste un pericolo immediato per l'ambiente? L'esperto più vicino è lontano, ma la crisi è qui e ora, cosa puoi fare?

Sia per la velocità che per la sicurezza, l'identificazione di materiali sconosciuti attraverso i contenitori è essenziale. L'analizzatore portatile Mira DS Raman insieme all'intelligente Universal Attachment (iUA)

offrono all'utente funzionalità di identificazione dei contenuti con un solo tocco. Quando l'iUA è collegato a Mira DS, la procedura operativa di Content ID si attiva automaticamente, fornendo all'utente semplici flussi di lavoro guidati. Content ID distingue il contenuto del contenitore dal materiale del contenitore e fornisce l'identificazione di entrambi. Questa Application Note mostra l'uso di iUA in combinazione con Mira DS per la determinazione del contenuto del contenitore, incluso il flusso di lavoro guidato ed esempi di spettri e risultati di Content ID. Ottieni risposte sicure in pochi secondi senza alcun contatto di esempio, utilizzando Mira DS con iUA.

INTELLIGENT UNIVERSAL ATTACHMENT

L'intelligent Universal Attachment (iUA) combina tre lunghezze focali in un unico Smart Tip che semplifica il campionamento con Mira DS.

Gli utenti possono misurare in modo semplice e sicuro materiali sconosciuti attraverso barriere spesse o sottili, o anche in superficie:

Superficie <Lunghezza focale 1 mm

Borsa Lunghezza focale di circa 5 mm, per il campionamento attraverso una barriera sottile, una borsa o una bottiglia

Bottiglia Lunghezza focale di ~8 mm, per il campionamento attraverso una bottiglia di plastica o vetro più spessa, ad esempio

Visualizzazione chiara del contenuto e del materiale del contenitore

L'iUA è una punta ridisegnata che offre funzionalità aggiuntive. Ruota l'iUA e Mira DS comunicherà il miglior uso di quella posizione per l'identificazione diretta e semplice dei materiali (**esempio mostrato a destra**). Basta premere la punta contro il materiale sconosciuto, toccare "Acquisisci" e il sistema fa tutto il lavoro, fornendo risposte in pochi secondi.

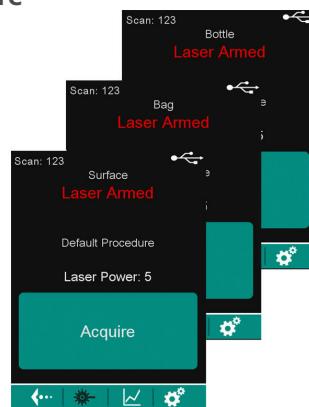


Figure 1. Comunicazione intelligente su schermo iUA a 3 posizioni

INTELLIGENT UNIVERSAL ATTACHMENT

Quando l'iUA è collegato a Mira DS, la procedura operativa (OP) Content ID diventa automaticamente attiva sul dispositivo e può essere selezionata toccando "Procedura di modifica" e scegliendo la procedura operativa di Content ID:

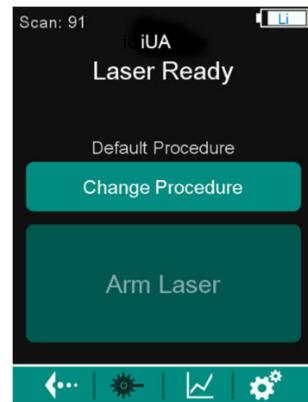


Figure 2. Schermata iniziale di Mira DS iUA

Una volta specificato Content ID OP, Mira DS guida l'utente attraverso un flusso di lavoro guidato in due fasi molto semplice (**esempio mostrato a destra**). Posizionare l'iUA sotto la linea di riempimento, all'esterno del contenitore, per la prima acquisizione. Posizionare l'iUA sopra la linea di riempimento per la seconda acquisizione. Mira DS ottimizzerà, medierà, abbinerà e riporterà automaticamente i risultati sia per il contenitore che per il suo contenuto in pochi secondi (**esempio mostrato in Figura 4**).

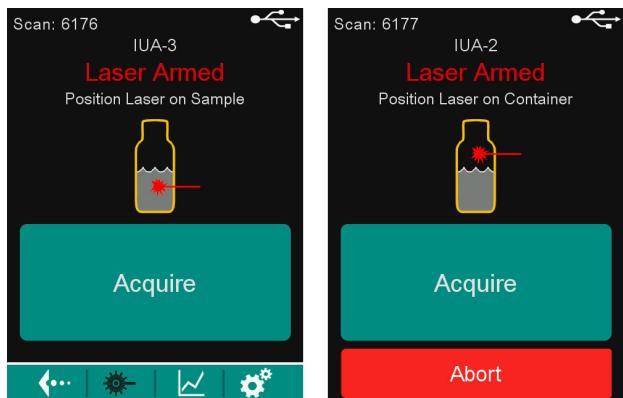


Figure 3. Flusso di lavoro di Content ID

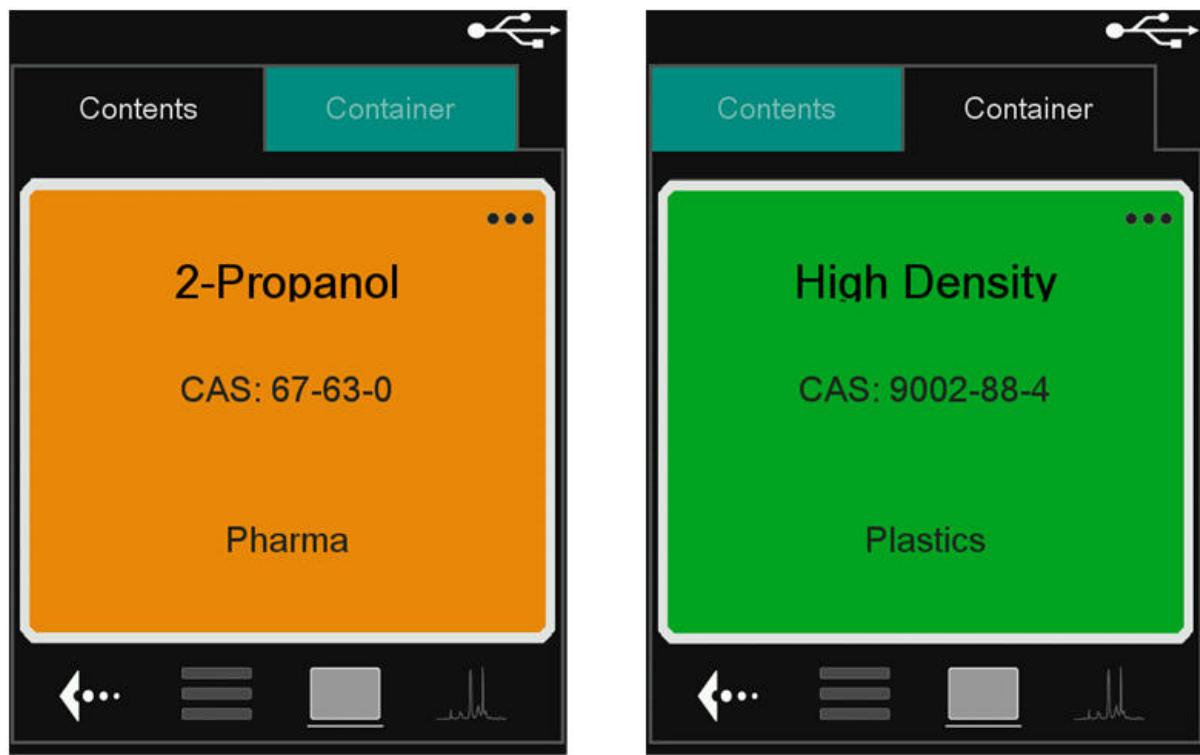


Figure 4. Risultati di Content ID

ESEMPI CONTENT ID

La potente combinazione di Smart Acquire, iUA e algoritmi proprietari in Mira DS fornisce risultati sorprendenti. Considera:

- test di barriera
- analisi sicura delle miscele
- accurata identificazione dei principali costituenti in presenza di contaminanti

Il primo esempio seguente mostra l'ID contenuto di una miscela liquida (sciroppo per la tosse), composta principalmente da circa il 30% p/v di glicerina (glicerolo) con principi attivi, attraverso una bottiglia di plastica marrone.

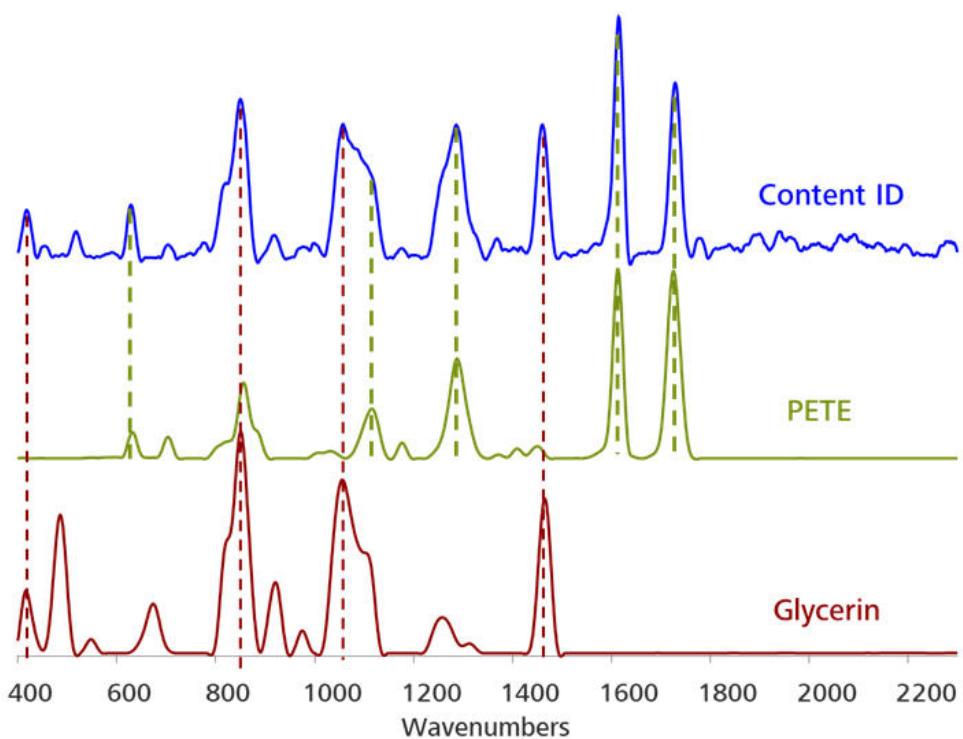


Figure 5. Spettri della libreria di glicerina e PETE sovrapposti a Content ID, per dimostrare la capacità di Mira DS di risolvere spettri complessi.

Utilizzando MiraCal DS, i risultati mostrano che la glicerina aveva un peso spettrale di circa il 41% nel risultato di Content ID. PETE è stato identificato

all'interno della libreria illecita con un coefficiente di correlazione (HQI) di 0,99. I risultati effettivi dello screenshot di Mira DS si trovano di seguito.

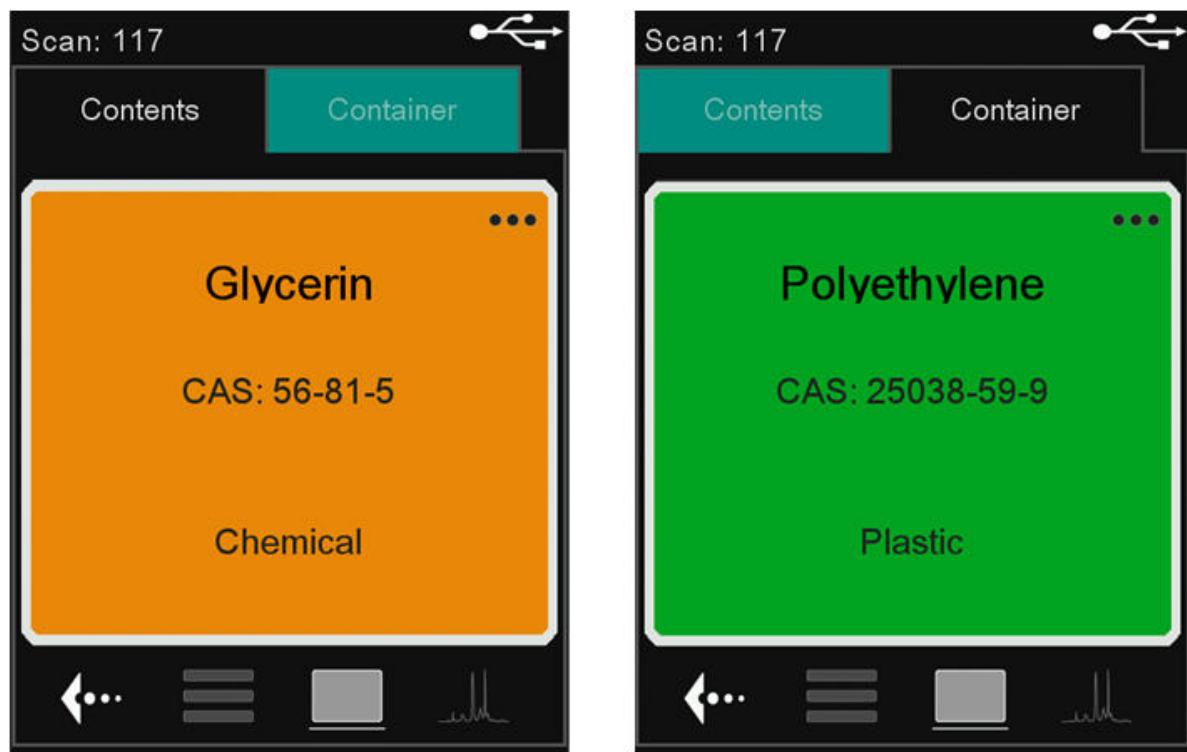


Figure 6. Schermata reale dei risultati di Mira DS visualizzati per lo sciroppo per la tosse

Un secondo esempio di risultati di Content ID è l'analisi del paracetamolo attraverso la sua bottiglia di

plastica bianca opaca (sotto).

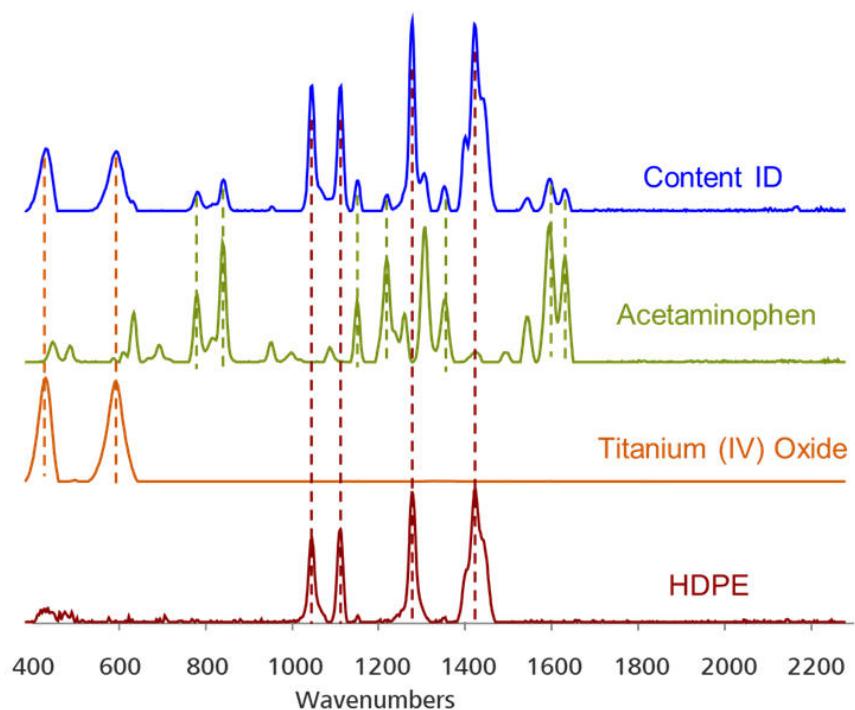


Figure 7. Spettri della libreria di paracetamolo, HDPE e ossido di titanio sovrapposti a Content ID per illustrare i risultati di Content ID.

Questo è un esempio unico perché Content ID, in combinazione con Mixture Matching su Mira DS, è stato in grado di analizzare entrambi i componenti del contenitore, la plastica e l'agente colorante

(rispettivamente HDPE e ossido di titanio), oltre a un ID positivo del paracetamolo all'interno. Tutti i componenti sono stati identificati con un HQI di 0,99.

Tabella 1. Specifiche Mira DS utilizzate per le analisi visualizzate in questa nota applicativa

Lunghezza d'onda	785 nm
Gamma	400–2300 cm ⁻¹
Suggerimento intelligente	iUA
Firmware versione	8.0.1.136
Software versione	1.1.14
Potenza laser	5
Integrazione Tempo/i medie	10,0 2
Libreria	Illecito
Soglia	0,96

CONTACT

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

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



MIRA DS Advanced

Lo strumento Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) DS è uno spettrometro Raman palmare rinforzato e ad alte prestazioni, utilizzabile per la determinazione rapida e non distruttiva di materiali illeciti, quali farmaci, esplosivi, materie prime e agenti pericolosi. Nonostante le dimensioni ridotte dello strumento, MIRA DS è estremamente robusto e dispone di uno spettrografo ad alta efficienza dotato della nostra tecnologia unica Orbital-Raster-Scan (ORS).

Il pacchetto Advanced include uno standard di calibrazione, il supporto universale per l'analisi all'interno di bottiglie o sacchetti o per l'analisi diretta e il supporto rettangolare ideale per l'esecuzione di campioni su una superficie e/o in un sacchetto. Funzionamento classe 3B. MIRA DS supporta le librerie Raman palmari Metrohm.