

Tecnologia Raman "See Through": maggiori capacità per l'identificazione attraverso l'imballaggio mediante strumento Raman con eccitazione di 785 nm e 1.064 nm

La spettroscopia Raman è una forma di spettroscopia molecolare che fornisce informazioni molecolari specifiche sui materiali. Raman è ampiamente utilizzato per test di identificazione rapidi, non distruttivi e non invasivi nella ricerca chimica, materiale, farmaceutica e biomedica, nella diagnostica medica e, sempre più, dalle forze dell'ordine. Una limitazione della spettroscopia Raman è che i campioni possono essere misurati solo direttamente o attraverso contenitori trasparenti. Sebbene questa non sia realmente una limitazione in

un ambiente di laboratorio, per la strumentazione portatile distribuita sul campo la preferenza è identificare i campioni così come sono, con una manipolazione minima del campione e l'apertura delle confezioni. L'identificazione Raman attraverso imballaggi opachi renderebbe la tecnologia più facile da usare per le materie prime in entrata nei magazzini e per i soccorritori, gli agenti doganali e altri che hanno bisogno di identificare rapidamente i materiali senza toccarli.

GUARDA ATTRAVERSO LA TECNOLOGIA RAMAN

La spettroscopia Raman (STRaman™) è una tecnologia di recente sviluppo che espande la capacità della spettroscopia Raman di misurare campioni al di sotto del materiale di imballaggio di dispersione per diffusione. Il Raman convenzionale ha tipicamente un'area di campionamento molto piccola con un'elevata densità di potenza nel punto focale del laser sul campione, il che significa che viene misurata solo una porzione limitata di un campione e che i campioni possono riscaldarsi o bruciarsi. La tecnologia ST è stata progettata per superare questi problemi. La tecnologia è disponibile su sistemi Raman portatili e

palmari con 785 nm e con laser ad eccitazione laser a 1064 nm. La STRaman™ presenta un'area di campionamento molto più ampia rispetto all'approccio confocale. Il design potenzia l'intensità relativa del segnale proveniente da strati più profondi, aumentando quindi la profondità di campionamento effettiva e consentendo di misurare il materiale all'interno di contenitori opachi. L'area di campionamento più ampia ha l'ulteriore vantaggio di evitare danni al campione, riducendo la densità di potenza e migliorando la precisione delle misure eliminando l'effetto eterogeneo.

ESEMPI DI IDENTIFICAZIONE TRASPARENTE

Abbiamo dimostrato le capacità della STRam a 785 nm per l'identificazione di pacchetti passanti[1,2] come bottiglie di polietilene bianco, un imballaggio comune per prodotti chimici solidi e altri imballaggi opachi come buste bianche e manila. Uno spettro di materiale al di sotto degli strati opachi viene raccolto a causa della maggiore profondità di campionamento della tecnologia. Insieme ad algoritmi di identificazione avanzati, il contributo del segnale Raman del pacchetto viene rimosso e il campione identificato correttamente. L'identificazione tramite plastica colorata, più strati opachi e vetro spesso può essere effettuata con STRaman™ tecnologia con eccitazione a 785 nm. Viene fornito un esempio di

identificazione del benzoato di sodio all'interno di una bottiglia di PE bianca **Figura 1**. Le compresse rivestite possono anche essere identificate poiché la tecnologia See-through penetra nello strato di rivestimento e misura lo spettro Raman della compressa sottostante. Poiché la densità di potenza del sistema è inferiore al segnale altamente focalizzato utilizzato nel Raman convenzionale, è possibile misurare anche i rivestimenti colorati delle compresse e i campioni scuri senza bruciare la superficie con il laser. La **figura 2** mostra lo spettro Raman di una polvere nera raccolta con lo STRam a piena potenza laser senza subire bruciature.

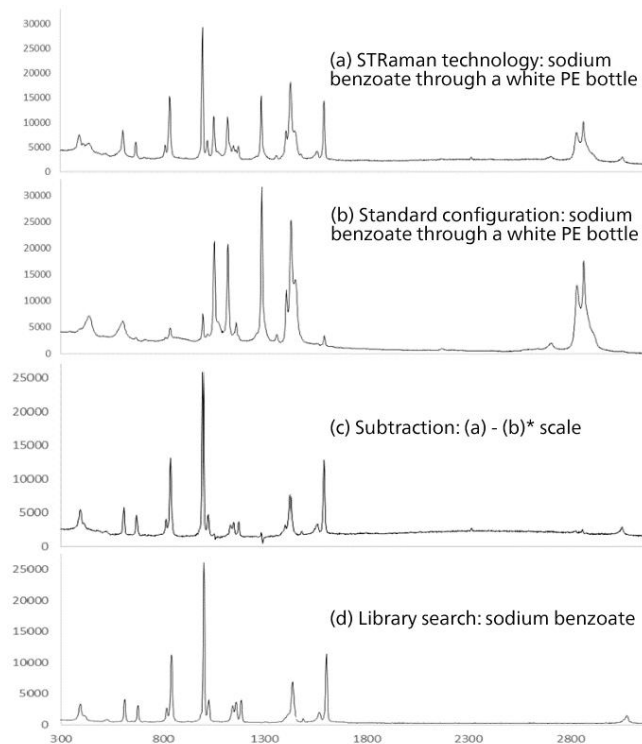


Figure 1. Identificazione STRam del benzoato di sodio attraverso una bottiglia di polietilene bianco: (a) Spettro misurato attraverso la bottiglia utilizzando la tecnologia STRaman; (b) spettro misurato con una configurazione Raman standard; (c) il risultato della sottrazione scalare di (b) da (a); e (d) spettro puro del benzoato di sodio.

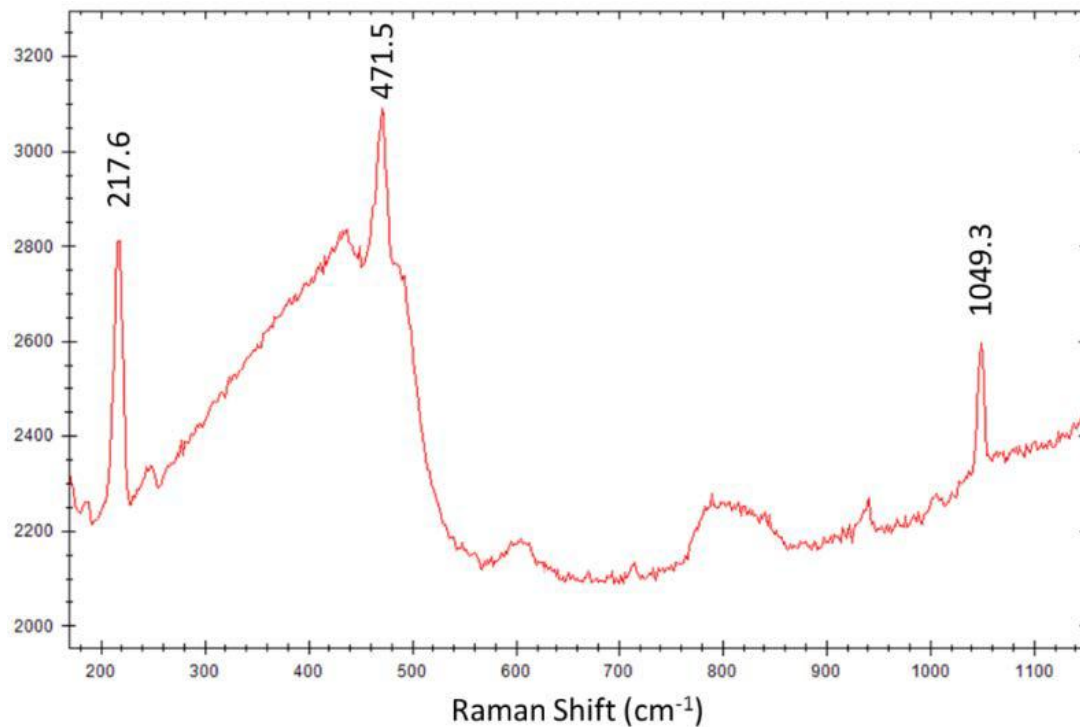


Figure 2. Spettro STRam di polvere scura.

Molte materie prime vengono fornite in sacchi di carta kraft a uno o più strati, a volte anche con uno strato di rivestimento in plastica. La carta kraft marrone, così come molti altri materiali di colore scuro, ha un forte fluorescenza misurata con Raman a 785 nm. L'applicazione della tecnologia STRaman ai nostri sistemi Raman a 1064 nm consente l'identificazione dei materiali anche attraverso materiali di imballaggio così difficili. Per illustrare, abbiamo ottenuto una serie di diversi sacchetti di carta multistrato utilizzati come contenitori di materie prime presso aziende farmaceutiche, selezionato diversi eccipienti comunemente usati con diversi punti di forza di dispersione Raman e testato la capacità di STRaman™

a 1064 nm per identificarli attraverso i sacchetti di carta. Come mostra la **Tabella 1** anche il più debole materiale attivo Raman fosfato trisodico, che è circa 40 volte più debole del carbonato di calcio, è identificato positivamente (un ID positivo significa che la sostanza chimica corretta è elencata come la migliore hit, con un indice di qualità della hit superiore a una soglia impostata, e superiore al 2nd colpito da un determinato margine. La soglia HQI è impostata su 85 e il margine è impostato su 2 in questi test). A 785 nm di eccitazione, tuttavia, il fosfato trisodico può essere identificato con successo solo attraverso il sacchetto di carta kraft bianco.

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

Tabella 1. Identificazione positiva di campioni in sacchetti di carta kraft utilizzando il sistema STRam-1064.

La Figura 3 mostra lo spettro del fosfato trisodico misurato attraverso un sacchetto a due strati di carta kraft bianca e marrone, con risultato di ricerca in libreria positivo. Sebbene lo spettro sia dominato dalla

fluorescenza e dalle caratteristiche Raman del sacchetto di carta, l'algoritmo utilizzato in STRaman è in grado di estrarre da esso la firma del fosfato trisodico e di identificarlo in modo affidabile.

VANTAGGI STRAM

Ulteriori vantaggi della tecnologia STRam sono la sua maggiore area di campionamento. Grazie a questo design Raman può essere utilizzato più ampiamente e

fornire risultati più ripetibili per campioni eterogenei, come polveri miste o prodotti naturali.

CONCLUSIONE

La capacità di misurare i campioni all'interno delle confezioni, eliminando la necessità di preparazione del campione, è uno dei maggiori vantaggi di Raman. I progressi ottenuti con la tecnologia STRaman fanno un ulteriore passo avanti nella misurazione attraverso confezioni opache - dalle bottiglie di plastica bianche ai sacchi di fibra, ai sacchi di carta kraft, alle buste e persino alla pelle - consente una facile adozione di

questo strumento spettroscopico in molti ambienti di lavoro, in laboratorio o sul campo. Lo sviluppo della tecnologia per l'eccitazione laser sia a 785 nm che a 1064 nm riguarda anche gli imballaggi scuri e molto colorati che sono influenzati dalla fluorescenza. Questo apre a Raman molti nuovi potenziali utenti, per i quali in precedenza non era uno strumento praticabile.

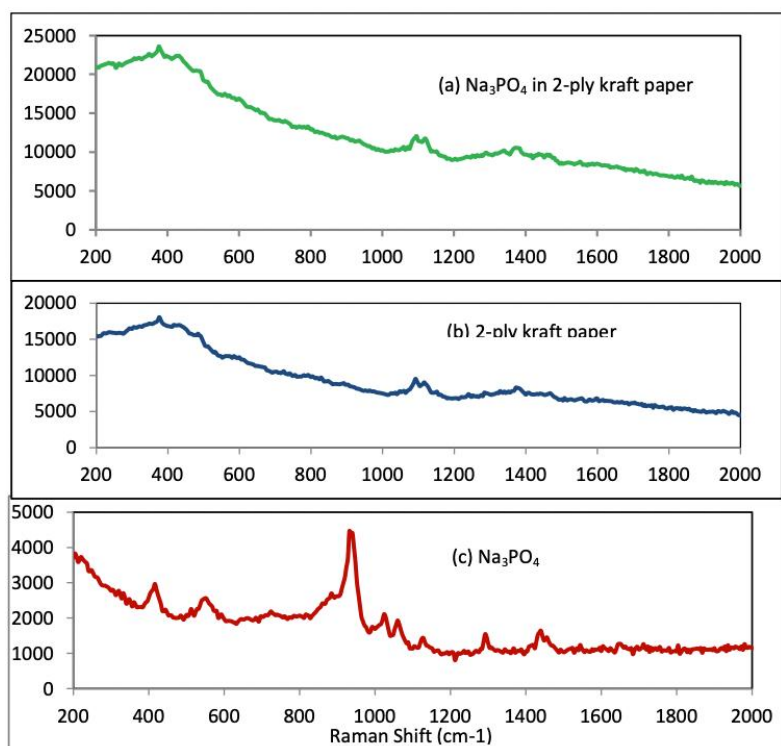


Figure 3. STRam-1064 identificazione del fosfato trisodico in un sacchetto a doppio strato di strati di carta kraft bianca e marrone (a) Spettro misurato attraverso il sacchetto a doppio strato utilizzando la tecnologia STRaman; (b) spettro del sacco a doppio strato misurato con configurazione Raman standard; (c) spettro puro del fosfato trisodico.

RIFERIMENTI

1. J. Zhao, KA Bakeev, J. Zhou, "Raman Spectroscopy Peers Through Packaging", Photonics Spectra, febbraio 2018, https://www.photonics.com/a62932/Raman_Spectroscopy_Peers_Through_Packaging.
2. KA Bakeev, "See-Through Science", The Analytical Scientist, maggio 2018, <https://theanalyticalscientist.com/issues/0518/see-through-science/>.

CONTACT

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

info@metrohm.it