



Application Note 410000029

# See-through-Raman-Technologie

## Identifizierung durch Verpackungen mit Raman-Anregung bei 1064 nm

Die Raman-Spektroskopie wird häufig für die schnelle, zerstörungsfreie Identifizierung in wissenschaftlichen, medizinischen und polizeilichen Bereichen eingesetzt. Traditionell wird sie zur direkten Probenahme von Materialien oder durch transparente/durchscheinende Barrieren hindurch verwendet, was ihre praktische Anwendbarkeit vor Ort einschränkt. Eine neue und einzigartige

Weiterentwicklung – die Raman-Identifizierung durch undurchsichtige Verpackungen – überwindet diese Einschränkung. Die Analyse durch die Verpackung hindurch ermöglicht eine einfachere, sicherere und schnellere Materialidentifizierung und vermeidet den Kontakt mit unbekannten Substanzen bei Lagerinspektionen, Ersthelfern und Zollbeamten.

## EINFÜHRUNG

Die See-through-Raman-Spektroskopie (ST) ist eine kürzlich entwickelte Technologie, die die Möglichkeiten der Raman-Spektroskopie zur Messung von Proben durch Verpackungsmaterialien hindurch erweitert. Die Technologie ist auf dem tragbaren Ramansystem TacticID-1064ST (TID1064ST) von Metrohm mit 1064-nm-Laseranregung verfügbar. Dieses Design erhöht die relative Intensität des Signals aus tieferen Schichten, was die effektive Probentiefe

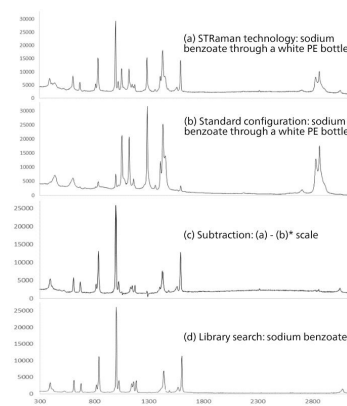
erhöht und die Messung von Materialien in optisch undurchsichtigen Behältern ermöglicht.

Die ST-Technologie bietet außerdem einen großen Erfassungsbereich der Probe. Die größere Abtastfläche hat den zusätzlichen Vorteil, dass eine Beschädigung der Probe durch eine geringere Leistungsdichte verhindert und die Messgenauigkeit bei heterogenen Materialien verbessert wird.

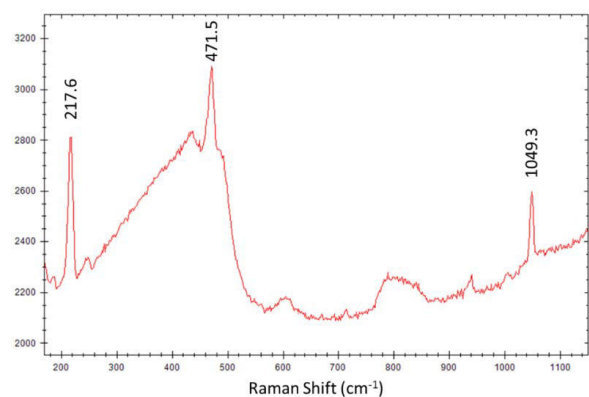
## SEE-TROUGH (ST) UND GÄNGIGE BEHÄLTER

Die Identifizierung von Materialien in weißen Polyethylen (PE)-Flaschen (einer gängige Verpackung für feste Chemikalien) und anderen undurchsichtigen Verpackungen wie weißen und Manila-Umschlägen wird mit 1064 nm Raman-Spektroskopie demonstriert. Der Beitrag des Behälters wird mit fortschrittlichen Identifizierungsalgorithmen entfernt, und die Probe wird korrekt identifiziert. Die Identifizierung durch farbigen Kunststoff, mehrere undurchsichtige Schichten und dickes Glas hindurch kann mit dem TID1064ST durchgeführt werden. Die Identifizierung von Natriumbenzoat in einer weißen PE-Flasche ist in **Abbildung 1** dargestellt.

Auch beschichtete Tabletten können identifiziert werden. Die ST-Technologie durchdringt die Überzugsschicht und misst das Ramanspektrum der darunter liegenden Tablette. Auf diese Weise kann das Gerät effektiv durch farbige und dunkle Materialien hindurchmessen und ermöglicht eine zuverlässige Analyse, ohne durch Oberflächeneffekte beeinträchtigt zu werden. **Abbildung 2** zeigt das Raman-Spektrum einer Tablette mit einem sehr dunklen Überzug. Trotz der Störung durch die Beschichtung sind die charakteristischen Peaks noch erkennbar.



**Abbildung 1.** STRam-Identifizierung von Natriumbenzoat durch eine weiße Polyethylenflasche: (a) Mit der STRam-Technologie durch die Flasche gemessenes Spektrum; (b) mit einer Standard-Raman-Konfiguration gemessenes Spektrum; (c) das Ergebnis der skalierten Subtraktion von (b) von (a); und (d) reines Spektrum von Natriumbenzoat.



**Abbildung 2.** Beispiel für ein 1064ST-Spektrum einer Tablette mit sehr dunkler Beschichtung.

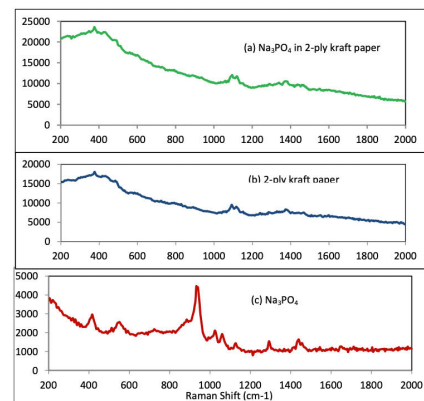
## APPLIKATIONEN DER ST-TECHNOLOGIE

Viele Rohstoffe werden in ein- oder mehrlagigen Kraftpapiersäcken verpackt, oft mit einer Kunststoffauskleidung. Braunes Kraftpapier weist unter 785 nm Raman-Anregung eine starke

Fluoreszenz auf, was die Materialidentifizierung erschweren kann. Mit den ST- und 1064-nm-Raman-Technologien ist jedoch eine genaue Identifizierung auch in solchen schwierigen Verpackungen möglich.

Um dies zu demonstrieren, haben wir die Fähigkeit von ST Raman bei 1064 nm zur Identifizierung mehrerer gängiger Hilfsstoffe - mit unterschiedlicher Raman-Streustärke - durch mehrschichtige Papiersäcke hindurch untersucht, die bei der Verpackung pharmazeutischer Rohstoffe verwendet werden. Wie in **Tabelle 1** dargestellt, wurde sogar Trinatriumphosphat, ein bekanntermaßen geringer Raman-Streuer, korrekt identifiziert. Eine positive Identifizierung erfordert einen Trefferqualitätsindex (HQI) über 85, der den zweitbesten Treffer um mindestens 2 Punkte übertrifft. Im Gegensatz dazu konnte Trinatriumphosphat nur durch weißes Kraftpapier mit einer Anregung von 785 nm identifiziert werden.

**Abbildung 3** zeigt das Spektrum von Trinatriumphosphat, gemessen durch einen zweilagigen Beutel aus weißem und braunem Kraftpapier, mit einem positiven Bibliothekssuchergebnis. Obwohl das Spektrum von den spektralen Merkmalen der Papiertüte dominiert wird, ist der TID1064ST in der Lage, Trinatriumphosphat zuverlässig zu identifizieren.



**Abbildung 3.** STRam-1064-Identifizierung von Trinatriumphosphat in einem Doppelschichtbeutel aus weißen und braunen Kraftpapierschichten (a) Mit der STRaman-Technologie durch den Doppelschichtbeutel gemessenes Spektrum; (b) mit der Standard-Raman-Konfiguration gemessenes Spektrum des Doppelschichtbeutels; (c) reines Spektrum von Trinatriumphosphat.

**Tabelle 1.** Positive Identifizierung von Proben in Kraftpapiersäcken mit Hilfe der 1064 nm ST-Technologie.

| Verpackungsmaterial und # Schichten                              | Kalziumkarbonat ( $\text{CaCO}_3$ ) | Dextrin    | Cyclodextrin | d-Maltose $\text{H}_2\text{O}$ | Trinatriumphosphat ( $\text{Na}_3\text{PO}_4$ ) |
|------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|------------|--------------|--------------------------------|-------------------------------------------------|
| 1 weißes Kraftpapier + 1 braunes Kraftpapier                     | 97.7                                | 96.7       | 95.6         | 93.8                           | 93.2                                            |
| 2 Schichten braunes Kraftpapier                                  | 97.6                                | 92.2       | 91.6         | 90.9                           | 88.7                                            |
| 2 Schichten weißes Kraftpapier                                   | 96.8                                | 98.0<br>25 | 95.2         | 95.0                           | 94.9                                            |
| 1 weißes Kraftpapier mit blauen Streifen + 1 braunes Kraftpapier | 95.1                                | 92.8       | 91.4         | 91.35                          | 89.0                                            |
| 1 weißes Papier + 1 gewebte Faser                                | 96.2                                | 95.7       | 93.2         | 92.6                           | 91.1                                            |
| 1 weißes Kraftpapier + 1 Plastikfolie + 1 braunes Kraftpapier    | 96.1                                | 91.8       | 92.0         | 90.7                           | 88.4                                            |
| 1 weißes Kraftpapier + 2 braune Kraftpapiere                     | 97.4                                | 94.6       | 94.0         | 92.9                           | 93.0                                            |

## FAZIT

Einer der größten Vorteile der Raman-Spektroskopie ist die Möglichkeit, Proben im Inneren von Verpackungen zu messen, ohne dass ein Probenkontakt erforderlich ist. Die ST-Technologie von Metrohm ermöglicht Messungen durch undurchsichtige Materialien hindurch: von weißen Plastikflaschen bis hin zu Faser- und Kraftpapiersäcken, Briefumschlägen und sogar Haut.

Dies erleichtert den Einsatz dieses spektroskopischen Werkzeugs in vielen Arbeitsumgebungen, vom Labor bis zum Feld. Die Kombination aus ST-Technologie und 1064-nm-Laseranregung eignet sich selbst für dunkle und stark gefärbte Verpackungsmaterialien. Dies macht Raman für viele neue potenzielle Nutzer interessant, für die es bisher kein brauchbares Werkzeug war.

## CONTACT

Metrohm Deutschland  
In den Birken 3  
70794 Filderstadt

[info@metrohm.de](mailto:info@metrohm.de)

## KONFIGURATION



### TacticID®-1064 ST Basic

Das TacticID®-1064 ST ist ein Raman-Handspektrometer mit einem 1064-nm-Laser für die schnelle Identifikation von Sprengstoffen, Betäubungsmitteln und anderen verdächtigen Substanzen vor Ort. Das TacticID®-1064 ST kann Proben durch undurchsichtige und transparente Verpackungen zerstörungsfrei analysieren. Den Benutzern, z. B. Sicherheitspersonal, Einsatzkräften (etwa von Strafverfolgungsbehörden), Zoll und Grenzschutz sowie Bombenräumkommandos und Teams zur Gefahrstoffbeseitigung, wird der Gefährdungsgrad klar und deutlich angezeigt, sodass sie selbst bei minimalem Kontakt mit der Probe schnell reagieren können.

Das TacticID®-1064 ST greift auf die bewährte Raman-Spektroskopie in Verbindung mit der patentierten STRaman®-Technologie zurück und ermöglicht Benutzern die als Beweismittel dienende Echtzeit-Identifikation von unbekannten Chemikalien, Betäubungsmitteln, pharmazeutischen Drogen, Sprengstoffen und vielen anderen Substanzen selbst durch blickdichte Barrieren und in weniger als einer Minute. Ansprechzeit und operative Unsicherheit werden somit erheblich reduziert.

Das TacticID®-1064 ST mit einer Laseranregung bei 1064 nm und ST-Adapter für die Identifikation durch Verpackungen scannt einen grossen Probenbereich und erzeugt ein fluoreszenzfreies Spektrum. Dadurch können Benutzer schwierige Strassenproben, inhomogene Gemische und Substanzen direkt durch die Verpackung identifizieren.

Dieses System mit Schutzart IP68 verfügt über ein besonders helles Display mit Touchscreen und/oder Tasten und lässt sich selbst mit Schutzkleidung einfach bedienen.

Das Metrohm TacticID®-1064 ST Basic-Paket enthält einen Aufsatz für die Identifikation durch Verpackungen, einen Universalaufsatz, einen Polystyrol-Aufsatz, einen robusten Tragekoffer, Kabel, Netzteil und eine Laserschutzbrille.



### TacticID-1064 ST Advanced

Das TacticID®-1064 ST ist ein Raman-Handspektrometer mit einem 1064-nm-Laser für die schnelle Identifikation von Sprengstoffen, Betäubungsmitteln und anderen verdächtigen Substanzen vor Ort. Das TacticID®-1064 ST kann Proben durch undurchsichtige und transparente Verpackungen zerstörungsfrei analysieren. Den Benutzern, z. B. Sicherheitspersonal, Einsatzkräften (etwa von Strafverfolgungsbehörden), Zoll und Grenzschutz sowie Bombenräumkommandos und Teams zur Gefahrstoffbeseitigung, wird der Gefährdungsgrad klar und deutlich angezeigt, sodass sie selbst bei minimalem Kontakt mit der Probe schnell reagieren können.

Das TacticID®-1064 ST greift auf die bewährte Raman-Spektroskopie in Verbindung mit der patentierten STRaman®-Technologie zurück und ermöglicht Benutzern die als Beweismittel dienende Echtzeit-Identifikation von unbekannten Chemikalien, Betäubungsmitteln, pharmazeutischen Drogen, Sprengstoffen und vielen anderen Substanzen selbst durch blickdichte Barrieren und in weniger als einer Minute. Ansprechzeit und operative Unsicherheit werden somit erheblich reduziert.

Das TacticID®-1064 ST mit einer Laseranregung bei 1064 nm und ST-Aufsatz für die Identifikation durch Verpackungen scannt einen grossen Probenbereich und erzeugt ein fluoreszenzfreies Spektrum. Dadurch können Benutzer schwierige Strassenproben, inhomogene Gemische und Substanzen direkt durch die Verpackung identifizieren.

Dieses System mit Schutzart IP68 verfügt über ein besonders helles Display mit Touchscreen und/oder Tasten und lässt sich selbst mit Schutzkleidung einfach bedienen.

Das Metrohm TacticID®-1064 ST Advanced-Paket enthält einen Aufsatz für die Identifikation durch Verpackungen, einen Universalaufsatz, einen SWD-Aufsatz, einen Vialhalter, einen LWD-Aufsatz, einen Winkelaufsatz, einen Polystyrol-Aufsatz, eine Transflexionssonde, einen robusten Tragekoffer, Kabel, Netzteil und eine Laserschutzbrille.