

Identificación de azúcares estructuralmente muy similares utilizando un espectrómetro Raman portátil

RESUMEN

Esta nota de aplicación describe la identificación por espectroscopia Raman de azúcares como D-galactosa, D-glucosa, D-maltosa, D-manosa, D-sorbitol, fructosa, sacarosa e inositol. La determinación rápida y no destructiva tiene lugar después de que se haya creado

una base de datos de espectro adecuada. Las mediciones con el espectrómetro Raman portátil Mira M-1 no requieren preparación de muestras y brindan resultados inmediatos e inequívocos.

INTRODUCCIÓN

La industria actual, pero también la vida cotidiana, no se puede imaginar sin azúcar. Los azúcares son utilizados por los fabricantes de productos químicos en las reacciones, por los fabricantes de alimentos como sabor y por los fabricantes de medicamentos como conservantes, estabilizadores y agentes de enmascaramiento de medicamentos. Azúcar es un término genérico para sacárido y hay tres grupos generales de sacáridos: monosacáridos, disacáridos y polisacáridos. Los monosacáridos son las formas de carbohidratos más simples y consisten en fracciones de azúcar individuales que se convierten en los componentes básicos de los otros grupos de sacáridos. Los monosacáridos comunes son la fructosa (azúcar de la fruta), la glucosa (dextrosa), la galactosa (azúcar de la leche).

Los disacáridos contienen dos monosacáridos o el doble de azúcares. Los más comunes son sacarosa (glucosa + fructosa), lactosa (galactosa + glucosa) y maltosa (glucosa + glucosa). Por el contrario, los polisacáridos se caracterizan por un patrón repetitivo de monosacáridos o disacáridos polimerizados y dan como resultado materiales como celulosa, almidones y glucógeno.

En este estudio, se muestra una alternativa rápida a la HPLC, FT-IR, FT-IR, colorimétrica y la identificación química húmeda y la confirmación de azúcares estructuralmente similares de uso común que requieren mucho tiempo.

EXPERIMENTO

Todos los espectros se midieron usando el espectrómetro Mira M-1 Raman en modo de adquisición automática, es decir, los tiempos de integración se determinaron automáticamente. Se utilizó una longitud de onda láser de 785 nm y la técnica Orbital-Raster-Scan (ORS). Como todas las muestras de azúcar se empaquetaron en bolsas de plástico, los espectros se registraron con el adaptador de apuntar y disparar que es adecuado para una distancia de trabajo corta (SWD).

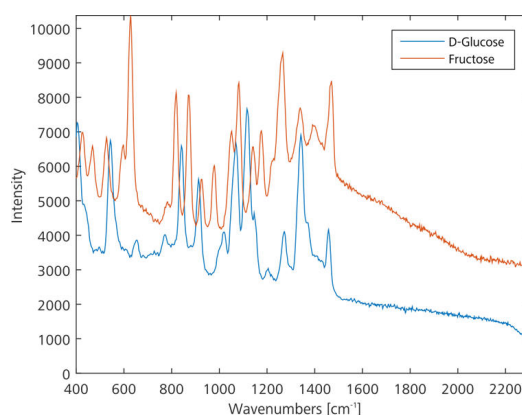


Figure 1. Espectros Raman superpuestos de D-glucosa y fructosa

La técnica ORS mencionada aumenta significativamente la precisión, la reproducibilidad y, por lo tanto, la confiabilidad de las mediciones, ya que el láser barre un área extendida de la superficie de la muestra.

Se utilizó una colección de muestras de **D-galactosa**, **D-glucosa**, **D-maltosa**, **D-manosa**, **D-sorbitol**, **fructosa**, **sacarosa** e **inositol** para construir una biblioteca específica con el software Mira Cal.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se superpusieron los espectros de todos los diferentes azúcares utilizados para la biblioteca. La superposición (**Figura 2**) muestra que cada azúcar tiene un espectro único que lo diferencia de los demás plásticos analizados. El área espectral que contiene la mayoría de los picos alcanza de 400 a 1800 cm^{-1} ; demostrando que el rango espectral de Mira M-1 es apropiado para las muestras de azúcar estudiadas.

La **Figura 3** demuestra cómo el Mira (con la técnica ORS) permite la identificación inequívoca de los azúcares estructuralmente similares a través de mediciones de alta sensibilidad de muestras cristalinas o en polvo. La fructosa, la cetosa y la glucosa, la aldosa, son monosacáridos con la misma composición química. Estos dos compuestos se pueden diferenciar fácilmente con Mira en función de los valores de correlación espectral.

Echando un vistazo a los valores de correlación al comparar la glucosa con la fructosa o viceversa, se puede ver el mismo valor de correlación de 0,15. Esto muestra la alta selectividad del espectrómetro Mira M-1 Raman y también se aplica a las otras sustancias. Los valores de correlación espectral que indican qué tan bien coincide el espectro de la muestra con el espectro de referencia en la biblioteca fueron superiores a 0,99 para todas las muestras medidas, mientras que los valores de correlación espectral son inferiores a 0,4 cuando el espectro de la muestra no coincide con el espectro de la biblioteca (ver **Figura 3**).

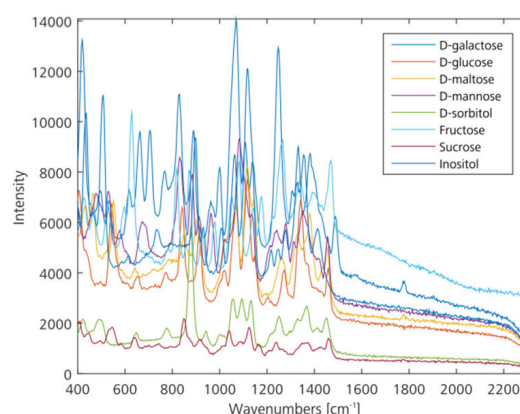


Figure 2. Superposición de los diversos azúcares que muestran un alto grado de selectividad espectral (gráficos realizados con MATLAB)

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. Valores de correlación que muestran los resultados de selectividad del Mira M-1

CONCLUSIONES

En esta nota de aplicación, se demuestra que el analizador Raman portátil Mira es capaz de identificar y confirmar el azúcar y los derivados del azúcar utilizados en una variedad de industrias. Las mediciones de Mira son rápidas y confirmativas en comparación con las técnicas químicas húmedas

tradicionales y brindan al usuario la oportunidad de una solución portátil. Para muestras de polisacáridos como almidón, celulosa microcristalina, que muestran un efecto de fluorescencia, se recomienda el instrumento Mira XTR.

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



MIRA P Advanced

El Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P es un potente espectrómetro Raman portátil que se puede utilizar para determinar y verificar de forma rápida y no destructiva los más diversos materiales como, por ejemplo, principios activos y excipientes de uso farmacéutico. Pese a su pequeño tamaño, el MIRA P es muy robusto y cuenta con un espectrógrafo de diseño muy eficiente, que está equipado con nuestra extraordinaria tecnología Orbital Raster Scan (ORS). El MIRA P cumple la normativa FDA 21 CFR Parte 11.

El paquete Advanced incluye una lente adicional con la que los materiales se pueden analizar directamente o en sus recipientes (láser de clase 3b) y un accesorio de soporte de vial para analizar las muestras que se encuentran en viales de vidrio (láser de clase 1).