

Diferenciación de sales inorgánicas mediante espectroscopia Raman

Esta nota de aplicación muestra la capacidad de los sistemas Raman portátiles como el Mira M-1 para identificar y diferenciar entre sales como carbonatos, fosfatos y sulfatos. El enfoque principal de este trabajo

fue evaluar la influencia de la parte catiónica y el agua de cristalización en la identificación espectroscópica Raman de las sales mencionadas.

INTRODUCCIÓN

Las sales inorgánicas suelen tener la misma parte aniónica, mientras que la parte catiónica difiere. Muchas sales se pueden distinguir por el número de moléculas de agua que se unen a la sal.

En este estudio se investigaron las influencias en el espectro Raman de la parte catiónica de la sal y el

número de moléculas de agua unidas a su parte aniónica. Aunque las diferencias entre las sales son muy pequeñas, los espectros que se registraron con un espectrómetro Raman portátil diferían lo suficiente como para diferenciarlos.

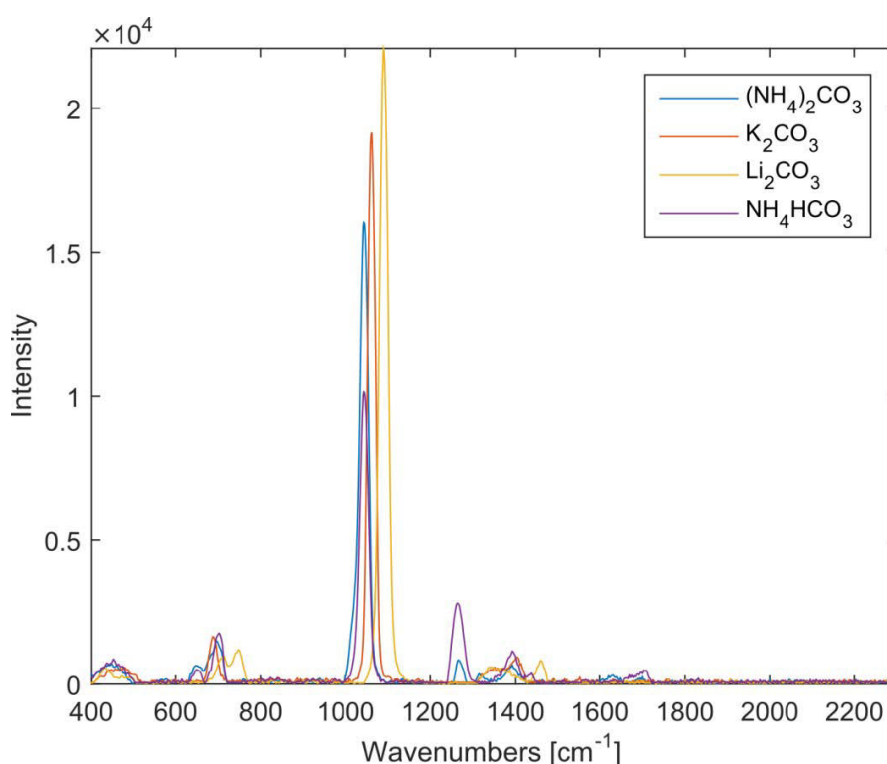


Figure 1. Espectros Raman superpuestos de diferentes sales de carbonato.

EXPERIMENTAL

Todos los espectros se midieron utilizando 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). Las muestras se

analizaron en viales pequeños con el adaptador de soporte de viales. Se eligieron tres aniones diferentes que dan actividad Raman: carbonato, fosfato y sulfato. Se varió la parte catiónica de las sales y se investigaron los cambios espectrales resultantes.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La **Figura 2** muestra cómo el pico de carbonato en el espectro Raman cambia dependiendo del catión contrario. Este cambio es lo suficientemente significativo como para usarlo para diferenciar entre las diversas sales de carbonato (excepto el carbonato de amonio y el bicarbonato de amonio, donde la diferencia es muy pequeña).

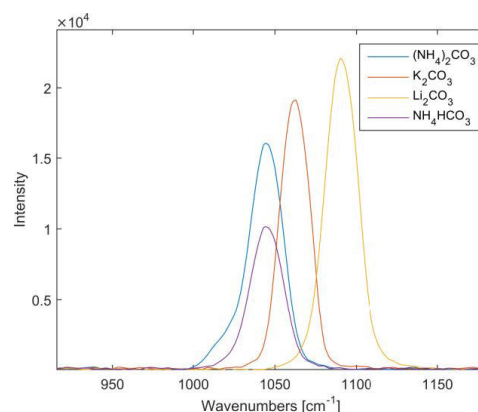


Figure 2. Principales picos de los distintos carbonatos.

También se observan resultados similares para varios fosfatos; las diferencias en los espectros son útiles para su diferenciación (ver **figura 3**) – a pesar de que existen algunas dificultades al tratar de distinguir

entre el fosfato diamónico y el fosfato dipotásico (debido al radio iónico similar del potasio y el amonio).

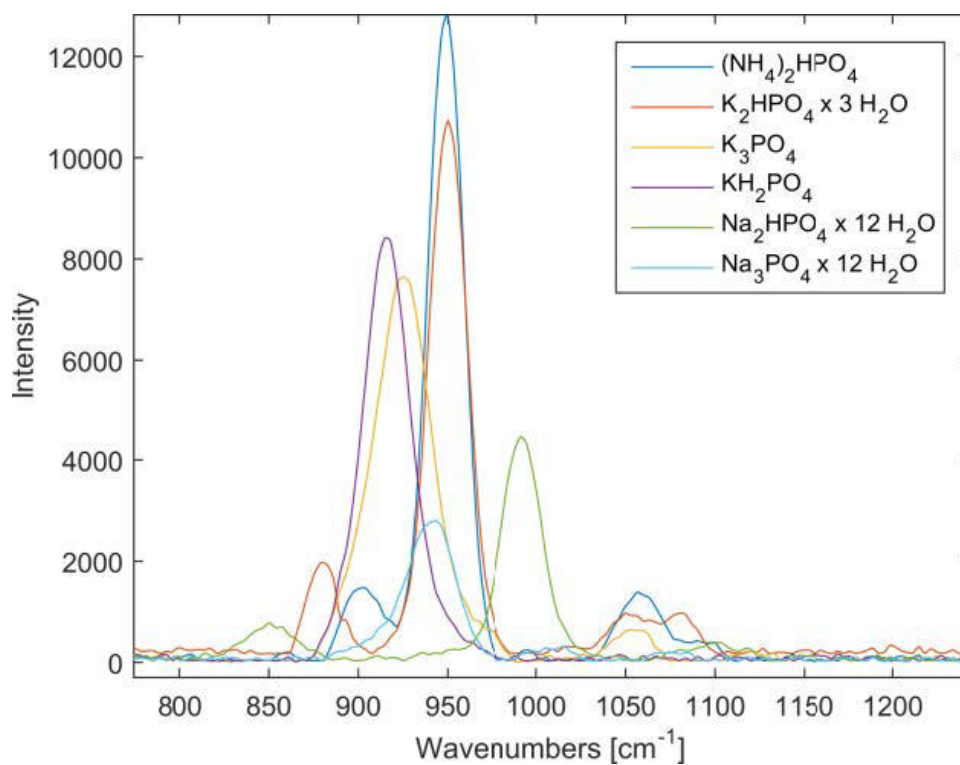


Figure 3. Principales diferencias en los espectros de los fosfatos.

Los sulfatos analizados también diferían significativamente entre sí, lo que permitió su identificación inequívoca con el dispositivo portátil Mira M-1 (ver **Figura 4**), aunque $\text{CuSO}_4 \times 7 \text{H}_2\text{O}$,

K_2SO_4 , SnSO_4 , and $\text{ZnSO}_4 \times 7 \text{H}_2\text{O}$ no se pudo identificar sin ambigüedades debido a sus espectros similares.

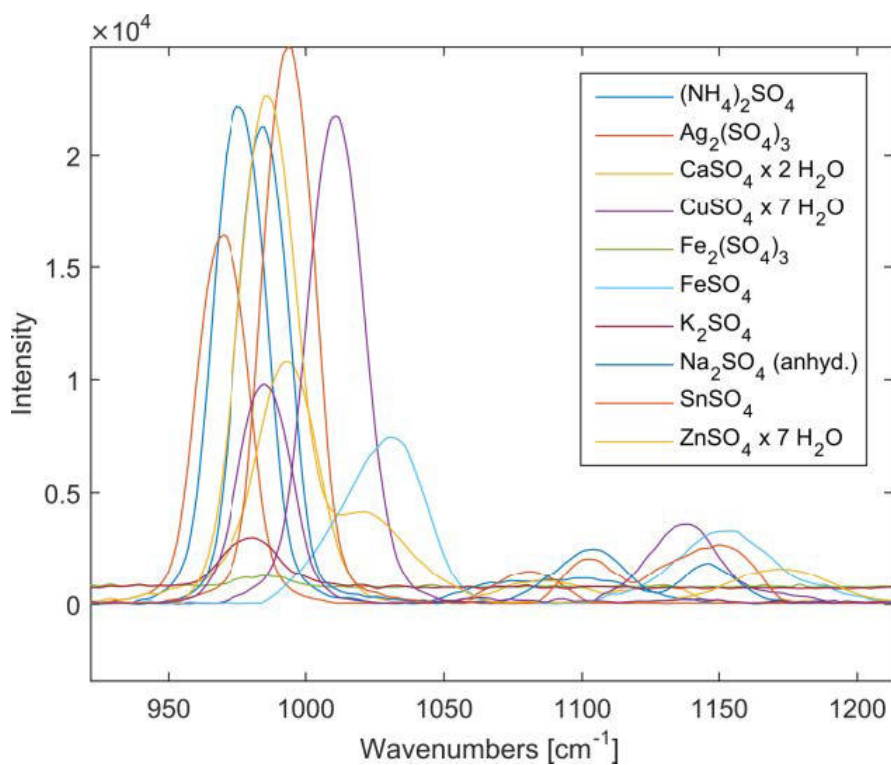


Figure 4. Principales diferencias en los espectros de los sulfatos.

CONCLUSIONES

En términos generales, los espectrómetros portátiles Raman, como el Mira M-1, son muy útiles cuando se trata de identificar materiales inorgánicos, incluso cuando se trata de sales que tienen la misma parte

aniónica. Las diferencias en las partes catiónicas de las sales ayudan a identificar inequívocamente muchas sales con el analizador portátil Raman Mira M-1.

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).