

Identification de sucres structurellement très similaires à l'aide d'un spectromètre Raman portable

Cette note d'application décrit l'identification par spectroscopie Raman de sucres tels que le D-galactose, le D-glucose, le D-maltose, le D-mannose, le D-sorbitol, le fructose, le saccharose et l'inositol. La détermination rapide et non destructive s'effectue

après la création d'une base de données de spectres appropriée. Les mesures effectuées avec le spectromètre Raman portable Mira M-1 ne nécessitent aucune préparation de l'échantillon et fournissent des résultats immédiats et sans ambiguïté.

INTRODUCTION

L'industrie d'aujourd'hui, mais aussi la vie quotidienne, ne peuvent être imaginées sans sucre. Les sucres sont utilisés par les fabricants de produits chimiques dans les réactions, par les fabricants de produits alimentaires comme arômes et par les fabricants de produits pharmaceutiques comme conservateurs, stabilisateurs et agents masquants pour les médicaments. Sucre est un terme générique pour saccharide et il existe trois groupes généraux de saccharides : les monosaccharides, les disaccharides et les polysaccharides. Les monosaccharides sont les formes d'hydrates de carbone les plus simples et se composent d'un seul groupe de sucres qui deviennent les éléments constitutifs des autres groupes de saccharides. Les monosaccharides courants sont le fructose (sucre des fruits), le glucose (dextrose) et le galactose (sucre du lait).

Les disaccharides contiennent deux monosaccharides ou deux fois plus de sucres. Les plus courants sont le saccharose (glucose + fructose), le lactose (galactose + glucose) et le maltose (glucose + glucose). En revanche, les polysaccharides se caractérisent par un schéma répétitif de monosaccharides ou de disaccharides polymérisés et donnent naissance à des matériaux tels que la cellulose, l'amidon et le glycogène.

Cette étude présente une alternative rapide à l'identification et à la confirmation chimique par voie humide, par HPLC, FT-IR, colorimétrie et chronophage, de sucres couramment utilisés et structurellement similaires.

EXPÉRIENCE

Tous les spectres ont été mesurés à l'aide du spectromètre Raman Mira M-1 en mode d'acquisition automatique, c'est-à-dire que les temps d'intégration ont été déterminés automatiquement. Une longueur d'onde laser de 785 nm et la technique ORS (Orbital-Raster-Scan) ont été utilisées. Comme tous les échantillons de sucre étaient emballés dans des polybags, les spectres ont été enregistrés avec l'adaptateur point-and-shoot qui convient pour une

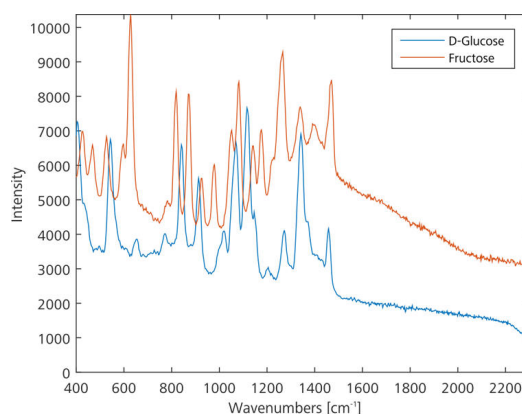


Figure 1. Spectres Raman superposés du D-glucose et du fructose

courte distance de travail (SWD).

La technique ORS mentionnée augmente considérablement la précision, la reproductibilité et donc la fiabilité des mesures, car le laser balaie une zone étendue de la surface de l'échantillon.

Une collection d'échantillons de **D-galactose, D-glucose, D-maltose, D-mannose, D-sorbitol, fructose, saccharose et inositol** a été utilisée pour construire une bibliothèque spécifique avec le logiciel Mira Cal.

RÉSULTATS ET DISCUSSION

Les spectres de tous les différents sucres utilisés pour la bibliothèque ont été superposés. La superposition (**figure 2**) montre que chaque sucre a un spectre unique qui le différencie des autres plastiques analysés. La zone spectrale contenant la majorité des pics s'étend de 400 à 1800 cm^{-1} , ce qui prouve que la gamme spectrale du Mira M-1 est appropriée pour les échantillons de sucre étudiés.

La **figure 3** montre comment le Mira (avec la technique ORS) permet d'identifier sans ambiguïté les sucres structurellement similaires grâce à des mesures de haute sensibilité sur des échantillons en poudre ou cristallins. Le fructose, un cétose, et le glucose, un aldose, sont tous deux des monosaccharides ayant la même composition chimique. Ces deux composés peuvent être facilement différenciés avec Mira sur la base des valeurs de corrélation spectrale.

Si l'on examine les valeurs de corrélation en comparant le glucose et le fructose ou vice versa, on constate la même valeur de corrélation de 0,15. Cela montre la grande sélectivité du spectromètre Raman Mira M-1 et s'applique également aux autres substances.

Les valeurs de corrélation spectrale, qui indiquent dans quelle mesure le spectre de l'échantillon correspond au spectre de référence de la bibliothèque, étaient supérieures à 0,99 pour tous les échantillons mesurés, tandis que les valeurs de corrélation spectrale sont inférieures à 0,4 lorsque le spectre de l'échantillon ne correspond pas au spectre de la bibliothèque (voir **figure 3**).

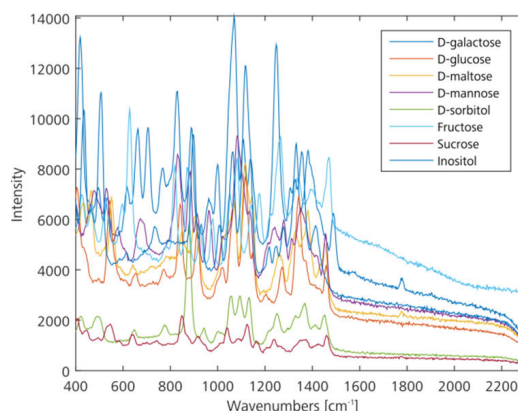


Figure 2. Superposition des différents sucres montrant un haut degré de sélectivité spectrale (tracés réalisés avec MATLAB)

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. Valeurs de corrélation montrant les résultats de sélectivité du Mira M-1

CONCLUSION

Dans cette note d'application, l'analyseur Raman portable Mira se révèle capable d'identifier et de confirmer le sucre et les dérivés du sucre utilisés dans une variété d'industries. Les mesures du Mira sont rapides et confirmatives par rapport aux techniques

chimiques humides traditionnelles et offrent à l'utilisateur la possibilité d'une solution portable. Pour les échantillons de polysaccharides tels que l'amidon, la cellulose microcristalline, qui présentent un effet de fluorescence, l'instrument Mira XTR est recommandé.

CONTACT

Metrohm France
13, avenue du Québec - CS
90038
91978 VILLEBON
COURTABOEUF CEDEX

info@metrohm.fr

CONFIGURATION



MIRA P Advanced

Le Metrohm Instant Raman Analyzer (MIRA) P est un spectromètre Raman portable performant qui s'utilise pour les déterminations rapides et non destructives et le contrôle des matériaux les plus divers, comme les principes actifs pharmaceutiques et les excipients. De très petite taille, le MIRA P est pourtant très robuste et dispose d'une structure de spectrographe haute efficacité, équipée de notre technologie « Orbital Raster Scan » (ORS) inédite. MIRA P satisfait aux prescriptions FDA 21 CFR partie 11.

Le Advanced Package comprend une lentille avec laquelle les matériaux peuvent être analysés directement ou dans leur conditionnement (classe de laser 3b), ainsi qu'un support de flacon pour analyser les échantillons dans des flacons en verre (classe de laser 1).