



Application Note AN-RS-037

Uno sguardo più approfondito al Raman a 785 nm

Capacità, design dello spettrografo, risoluzione e MIRA

Fin dall'inizio, Metrohm Raman si è specializzata nella spettroscopia Raman a 785 nm, dal momento che esistono prove concrete della superiorità dell'eccitazione laser a 785 nm rispetto ad altre opzioni. In ultima istanza la lunghezza d'onda può indicare ai clienti Raman quale sistema scegliere – 532 nm per un segnale forte o 1.064 nm per una fluorescenza ridotta. Selezionando la spettroscopia Raman a 785 nm con abbattimento della fluorescenza, gli utenti avranno il meglio delle due

opzioni. La sensibilità di campionamento e i tempi di analisi ridotti, il formato piccolo e le capacità superiori di identificazione sono le argomentazioni più forti a favore dell'uso dei sistemi Raman palmari a 785 nm. Da sempre, l'argomentazione principale a sfavore dell'uso di Raman a 785 nm è che circa il 20–30% dei materiali con l'eccitazione a questa lunghezza d'onda presenta fluorescenza. Il metodo XTR® brevettato di Metrohm riduce l'interferenza della fluorescenza e ci consente di offrire il meglio dell'analisi Raman.

Questa applicazione descrive il rapporto segnale-rumore (SNR) in termini di produttività elevata, design dello spettrografo con spazio libero, efficienza quantica del rivelatore CCD e potenze del laser basse per i sistemi a 785 nm. Un elevato SNR e una buona

risoluzione spettrale si traducono, in ultima istanza, una migliore corrispondenza della libreria per un'identificazione rapida e accurata del materiale con MIRA XTR DS.

INTRODUZIONE

La risoluzione di un sistema è la sua capacità di risolvere la larghezza di banda naturale delle bande Raman. I sistemi MIRA (Metrohm Instant Raman Analyzer) hanno una risoluzione di $8\text{--}10\text{ cm}^{-1}$ con SNR

di circa 2400. In definitiva, l'alta risoluzione contribuisce a una migliore correlazione della libreria per l'identificazione del materiale e una migliore identificazione dei componenti in una miscela.

ALTA PRODUTTIVITÀ

L'alta produttività, o la consegna del numero massimo di fotoni al rivelatore, è il fattore più importante per ottenere un SNR elevato per qualsiasi spettrometro Raman. I sistemi a 785 nm hanno un vantaggio intrinseco perché le lunghezze d'onda corte diffondono più fotoni Raman rispetto alle lunghezze d'onda più lunghe (λ). La relazione tra segnale e

lunghezza d'onda di eccitazione è espressa come $1/\lambda^4$ e può essere utilizzato per determinare che 3,2 volte più fotoni Raman vengono emessi con un'eccitazione di 785 nm rispetto a 1064 nm. Anche così, solo un fotone incidente su un milione verrà emesso come luce Raman diffusa.

DESIGN DELLO SPETTROGRAFO

Gli spettrometri MIRA sono costruiti su un design dello spazio libero, che è in qualche modo unico nel mondo del Raman portatile. Molti sistemi utilizzano l'accoppiamento in fibra ottica, che soffre di una minore produttività e, in genere, di un rumore di fondo più elevato derivante dall'autofluorescenza nelle fibre stesse e dal filtraggio incompleto della luce incidente. Il tipo di rivelatore influenza anche la

sensibilità di un sistema. Negli spettrometri a 785 nm come MIRA, i rivelatori Charge Coupled Device (CCD) ottimizzano la capacità di trasmissione con un'efficienza quantistica del 75–85% contribuendo al contempo a un rumore minimo. In breve, il design di MIRA offre la migliore combinazione possibile di SNR e sensibilità.

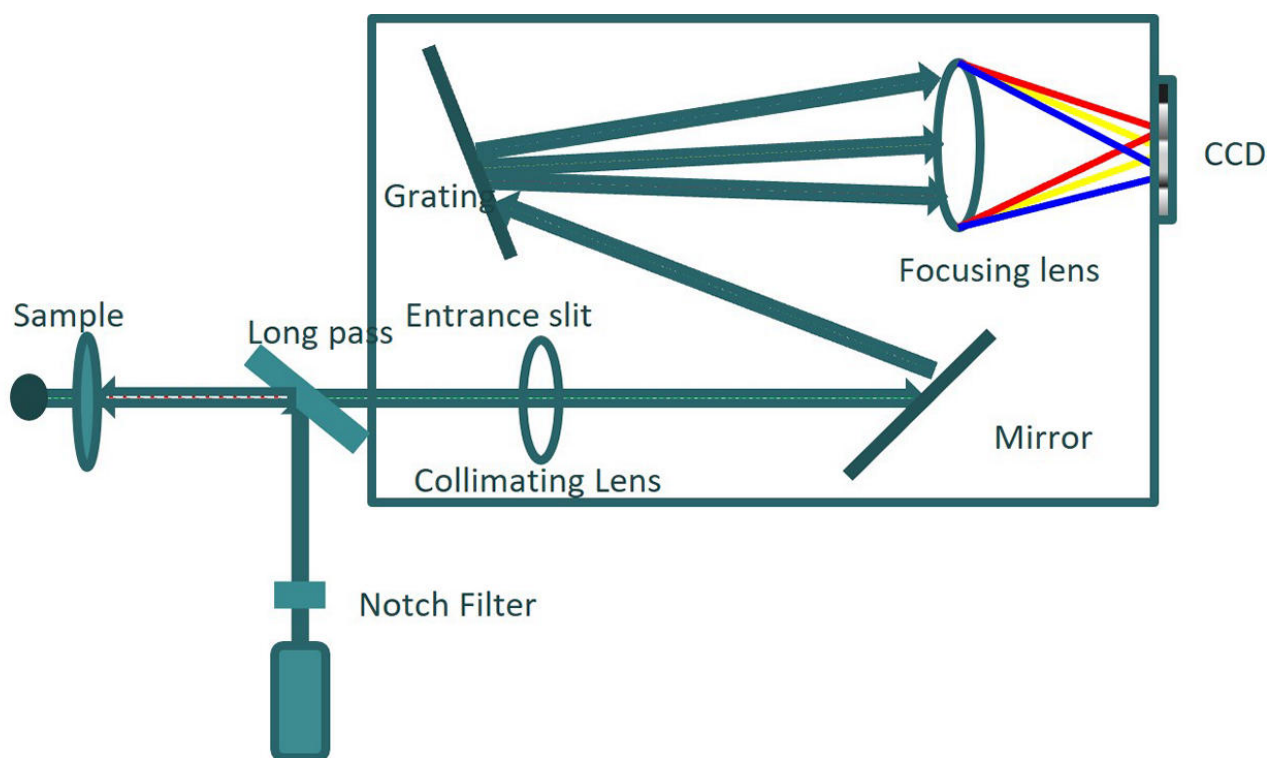


Figure 1. Design dello spettrometro Raman a spazio libero.

BASSE POTENZE LASER

Quando un sistema Raman ha una capacità di trasmissione elevata, una buona efficienza quantistica e un rumore di fondo molto ridotto, è possibile utilizzare un laser a 785 nm a bassa potenza con tempi di integrazione molto brevi per raccogliere dati con un eccellente SNR. Ciò significa una migliore

sensibilità per una corrispondenza ottimale delle librerie. Le basse potenze del laser preservano la durata della batteria del sistema, essenziale per le applicazioni sul campo Raman portatili. Una potenza laser inferiore comporta anche un minor rischio di degradazione del campione per un'analisi più sicura.

CONFRONTO SEGNALE-RUMORE

È possibile trovare una dimostrazione di come sono correlati lunghezza d'onda, potenza laser, tempi di acquisizione e SNR nella **Tabella 1** e in **figura 2**. Osserva che il Raman a 1064 nm richiede 440 mW di

potenza laser (contro 50 mW per i sistemi a 785 nm) e quasi 10 volte il tempo di campionamento per confrontare l'SNR per il Raman a 785 nm.

Wavelength	Laser Power	Sample Time	SNR
785 nm	50 mW	0.98 s	487
1064 nm	440 mW	9.30 s	492
1064 nm	380 mW	10.48 s	354
1064 nm	260 mW	15.22 s	277
1064 nm	180 mW	22.72 s	165
1064 nm	100 mW	31.60 s	121
1064 nm	50 mW	40.53 s	71

Table 1. I colori nella tabella 1 corrispondono a quelli nella figura 2.

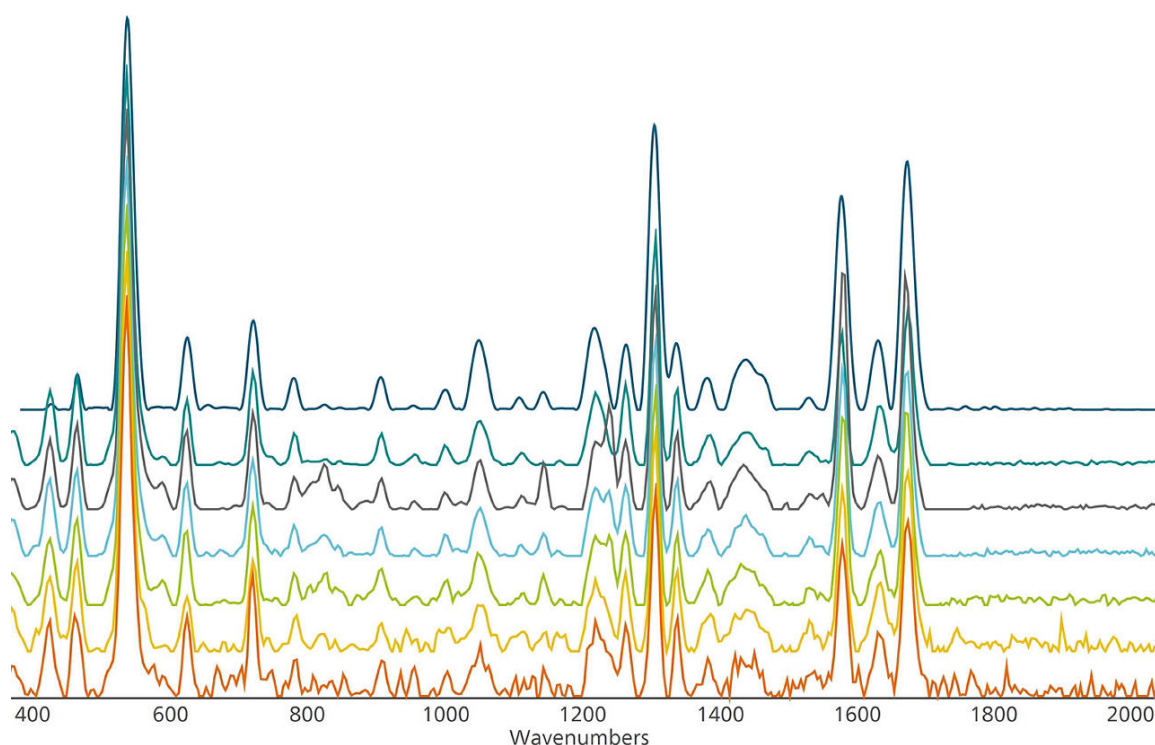


Figure 2. SNR spettrale a diverse lunghezze d'onda e potenze laser.

CAMPIONAMENTO A 785 NM

Per riassumere la **Tabella 1** e la **Figura 2**, Raman a 785 nm raccoglie dati ad alta risoluzione con tempi di acquisizione molto brevi e bassa potenza laser. Questa combinazione riduce il rischio di degradazione del laser per il campione. Negli scenari peggiori, può impedire l'accensione di materiali sensibili o instabili.

Riduce inoltre l'assorbimento di corrente, preservando la durata della batteria, una risorsa fondamentale per le lunghe ore sul campo. Una migliore precisione nell'identificazione dei componenti in una miscela è un altro vantaggio significativo.

In definitiva, un SNR elevato migliora la correlazione della libreria per un'identificazione del materiale superiore e il riconoscimento dei componenti in una miscela. La **figura 3** mostra l'identificazione positiva di entrambi i componenti in una miscela di zucchero e acido citrico. Con 1064 nm Raman, è stato identificato

solo lo zucchero. Questa miscela mostra una fluorescenza significativa nel suo spettro Raman, ma le routine XTR sul nostro sistema a 785 nm (MIRA XTR DS) hanno raggiunto una risoluzione sufficiente per consentire l'identificazione di entrambi i componenti e dei relativi pesi spettrali.

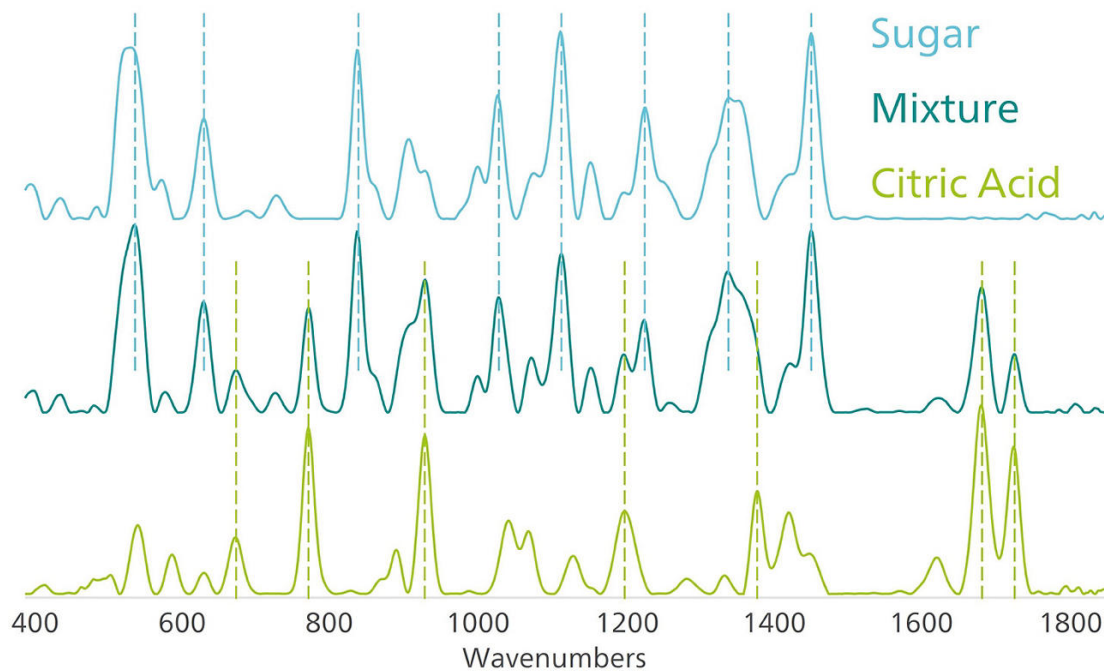


Figure 3. Miscela identificata da MIRA XTR DS come zucchero (56% peso spettrale) e acido citrico (32%).

Il Raman portatile a 785 nm è intrinsecamente una forma unica di spettroscopia. Pochissime tecniche analitiche possono essere paragonate alla sua capacità di fornire un'identificazione istantanea dei

materiali in loco. Metrohm Raman porta il campionamento a 785 nm a un livello superiore con sensibilità, robustezza, praticità e precisione.

CONTACT

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

info@metrohm.it

CONFIGURAZIONE



MIRA XTR Advanced

MIRA XTR è un'alternativa ai sistemi ad alta potenza da 1.064 nm. Alimentato da un'elaborazione computazionale avanzata, MIRA XTR utilizza un laser a 785 nm più sensibile insieme agli algoritmi XTR per estrarre i dati Raman dalla fluorescenza del campione. MIRA XTR dispone anche di Orbital Raster Scanning (ORS) per fornire una migliore copertura del campione aumentando la precisione dei risultati.

Il pacchetto MIRA XTR Advanced include lo standard di calibrazione, il supporto universale intelligente, il supporto rettangolare, il porta vial e l'accessorio SERS MIRA. Un pacchetto completo per qualsiasi tipo di analisi. Funzionamento classe 3B. MIRA XTR supporta le librerie Raman palmari Metrohm.