



Application Note AN-RS-034

逐格扫描技术(ORSTM)

逐格扫描技术为785 nm拉曼提供更安全的采样方式

光学系统有效地收集光线的能力被称为吞吐量。在一个非常适宜的世界里,拉曼光谱系统只需要一个小的激光点和一个类似大小的孔径来收集高分辨率的光谱。然而,世界往往更复杂。识别异质样品中的所有成分需要一个更大的区域。为了达到这个目的,可以增加激光光斑的大小以覆盖更多的区域。不幸的是,高分辨率需要一个小孔径,这减少了系统可以收集的拉曼光量,从

而牺牲了灵敏度。另外,小孔径可以在样品上快速移动(光栅化)以收集样品的大面积信息。这就是瑞士万通开发的专利——逐格扫描技术(ORSTM)的原理。

ORSTM技术是瑞士万通拉曼专有的克服低分辨率、低灵敏度的方法,同时还能增大采样面积。本应用报告中详细说明了各种应用。

介绍

图1 显示了逐格扫描扫描图示,它被定义为一束聚焦的

激光在大面积范围内快速移动。

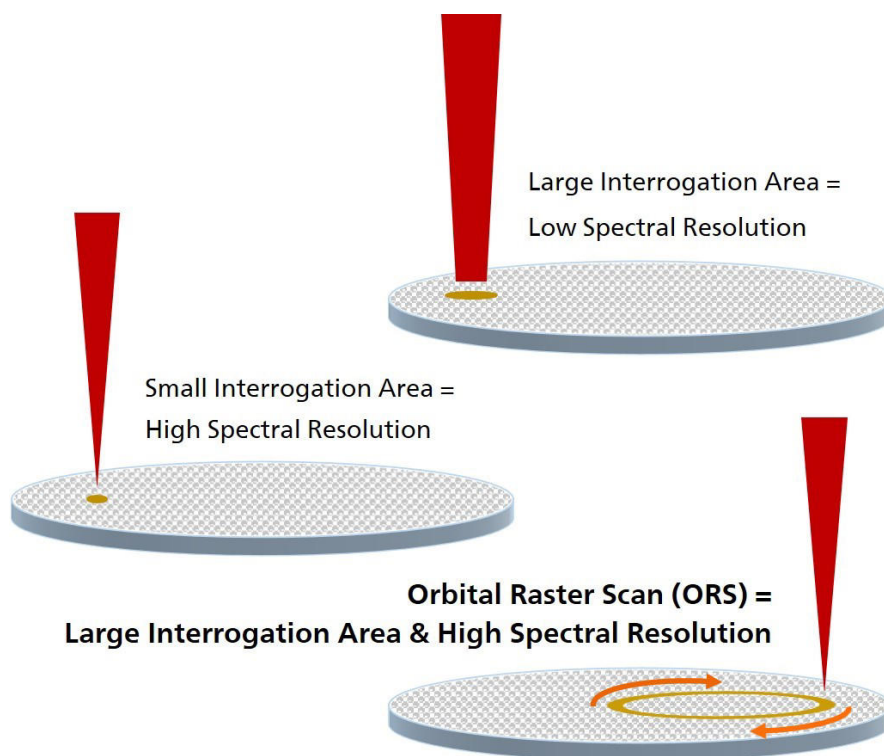


图 1. ORS技术快速收集样本的信息。

拉曼光谱被用于许多不同的应用和行业,其中高质量的数据是不可少的。瑞士万通拉曼系统和ORS技术体现

在多个应用,例如药品监管、材料鉴定和SERS(表面增强拉曼散射)基质的采样。

ORS和药品抽样

各国《药典》是药品生产、药品和原材料质量控制以及所需测试仪器的完整标准。拉曼光谱仪越来越多地用于药物的质量控制,因为它们使用简单、灵活,并提供快速、无损的测量。《欧洲药典》中新修订的章节2.2.48(拉曼光谱)侧重于提高结果的可靠性,并特别提到ORS技术^[1]。

«使用拉曼光谱[...]时,必须注意确保测量具有代表性。可以通过例如旋转样品、使用逐格扫描(ORS)对样品

进行多次测量来实现[...]»。[1].

药物是赋形剂和活性药物成分(API)的混合物,其比例受到严格控制。大多数拉曼系统的小光束直径(40–200 μm)和片剂中的小颗粒尺寸(平均36–39 μm)可能会导致采样误差^[2]。带有ORS的MIRA和MISA拉曼光谱仪将激光光栅化为直径2000 μm 的圆,以便在极短的时间内对大面积进行扫描,并在一次扫描中捕获所有成分。



ORS和样品保护

所有MIRA和MISA拉曼光谱仪都可以使用低激光功率来收集高分辨率光谱。这是785 nm激光和ORS技术相结合的成果。例如在MIRA和MISA拉曼光谱仪中,50 mW激光器足以在785 nm处获得良好的拉曼信号

,而1064 nm系统必须使用 420 ± 30 mW激光器,以补偿在较长波长下表现出的低信噪比和较少的拉曼散射。低激光功率和ORS的组合是检测敏感材料的理想选择,例如深色物质和易挥发物质。

聚苯乙烯的拉曼光谱鉴定

传统1064 nm和MIRA XTR DS 785 nm拉曼系统扫描

聚苯乙烯。(图2)。

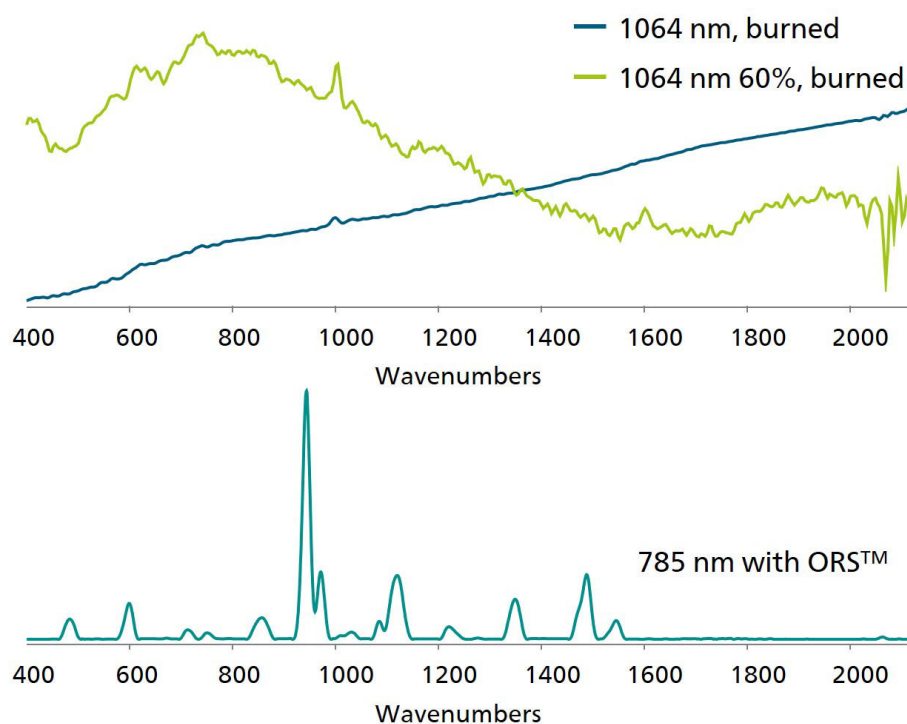


图 2. 1064nm和785nm系统收集的拉曼光谱的比较。

图3左侧的坑是100%功率下1064 nm激光系统燃烧样品时产生的。在60%激光功率下进行的第二次测试

得出了相同的结果(图3,右侧),两次测试都未能识别材料。



Figure 3. Grey plastic pen, burned with a 1064 nm system and identified as polystyrene with MIRA XTR DS.

MIRA XTR DS collected high quality data with no sample damage and identified the plastic as polystyrene, with a Hit Quality Index (HQI) of

0.91. This indicates high correlation between the sample spectrum and a library spectrum.

聚苯醚（PPE）的拉曼光谱鉴定

使用MIRA系统对PPE进行无损鉴别。

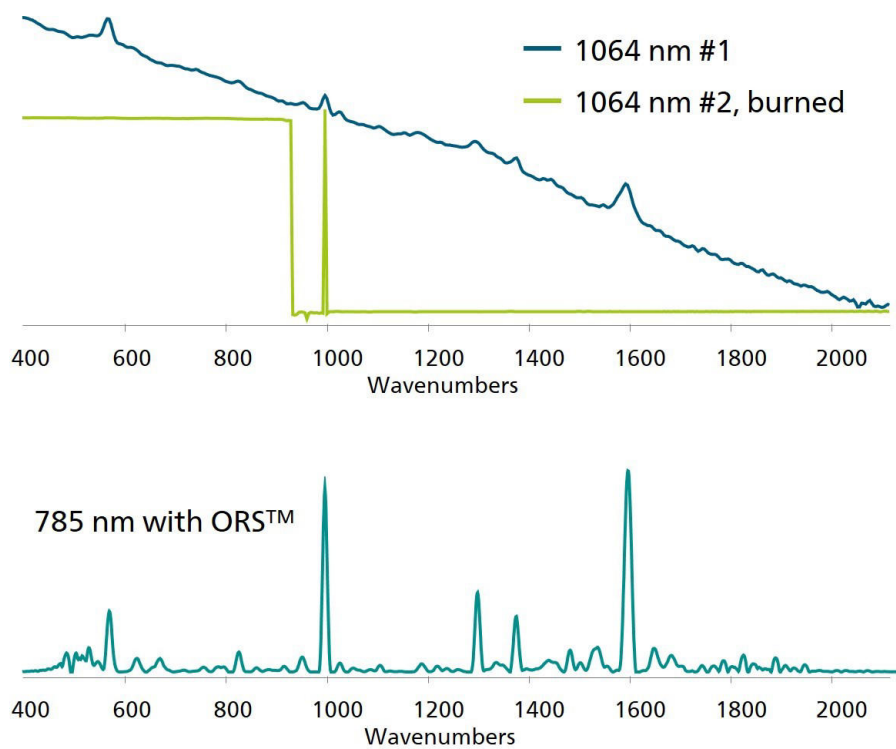


图 4. 1064nm和785nm系统鉴别有色材料时的拉曼光谱比较。

使用1064nm激光系统的第一次测试产生了低分辨率光谱,尽管其中有一些可识别的拉曼峰。第二次测试燃

烧了材料(图5),没有得到任何有用的信息。



图 5. 使用1064nm系统燃烧样品的示例。该材料经MIRA XTR DS鉴定为聚苯醚（PPE）。

再次强调,MIRA XTR DS很容易识别出这些材料,从而

对PPE进行了正面识别,HQI=0.91。

这些成功案例都是785 nm激光和ORS技术相结合的成果。

ORS和P-SERS衬底

P-SERS是嵌入纳米颗粒的纸基基材,用于增强拉曼信号,并允许使用SERS技术灵敏地检测痕量分析物。P-

SERS与MISA(配有ORS技术的785 nm拉曼光谱仪)一起使用。



由银和金胶体制备的P-SERS基底,纳米颗粒在纸纤维上呈现非均匀分布[3]。这可以在下面的SEM图像中看到 (图6)。

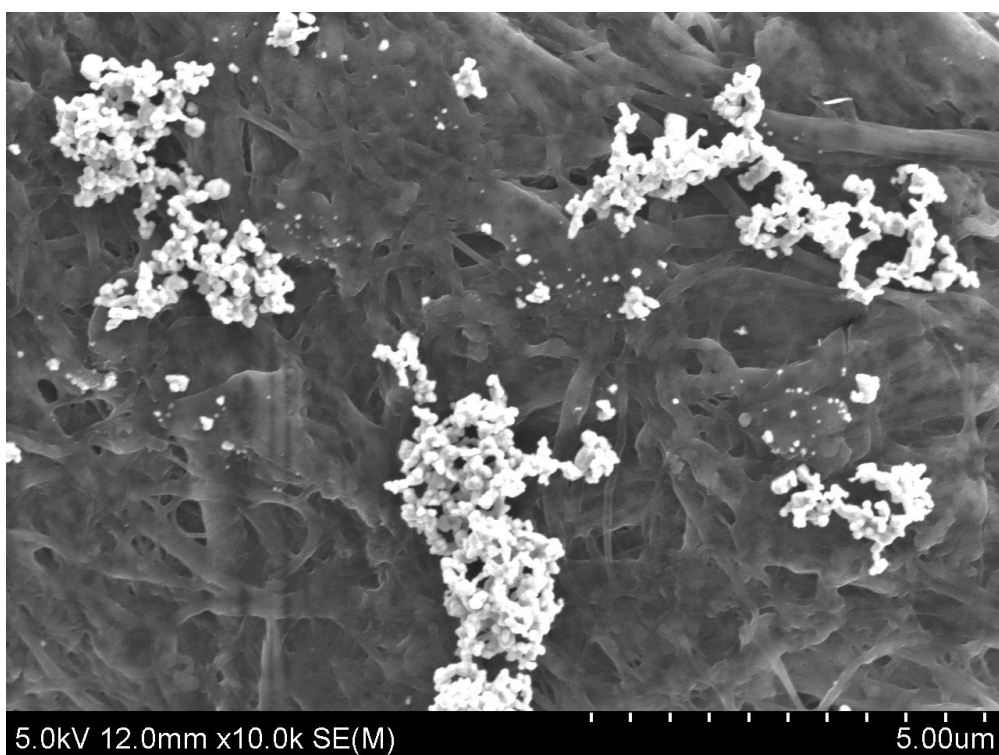
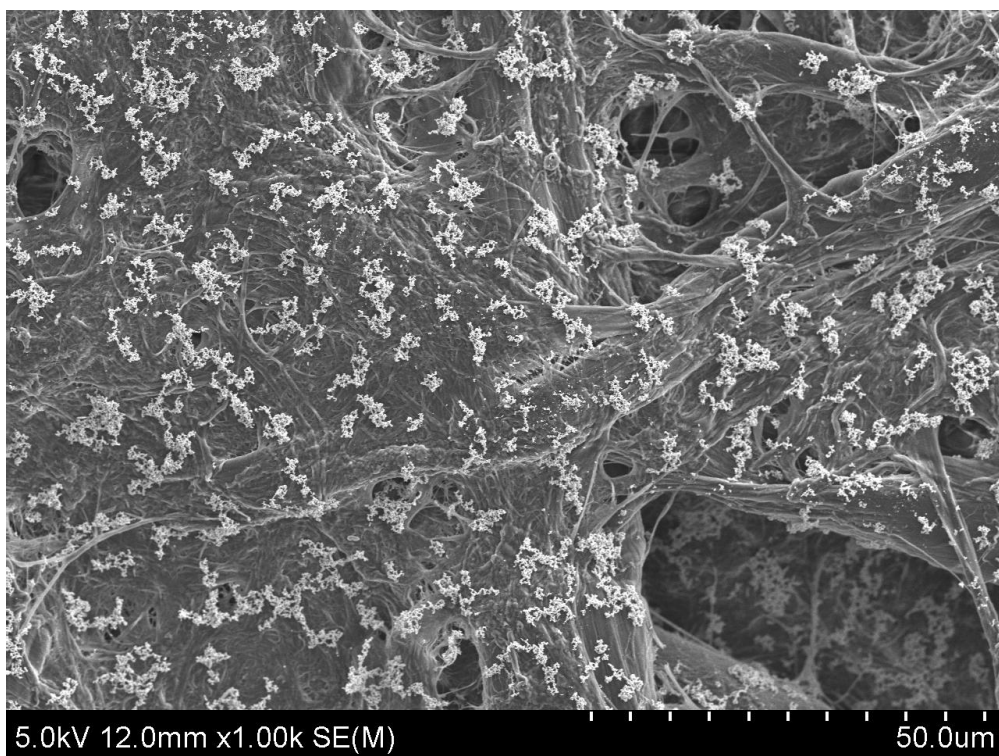


图6. 银纳米粒子在P-SERS衬底上的分布。

在ORS关闭的情况下扫描P-SERS上的标准品,并将其与
ORS打开的数据进行对比,这是ORS优势的非常好的证

明。

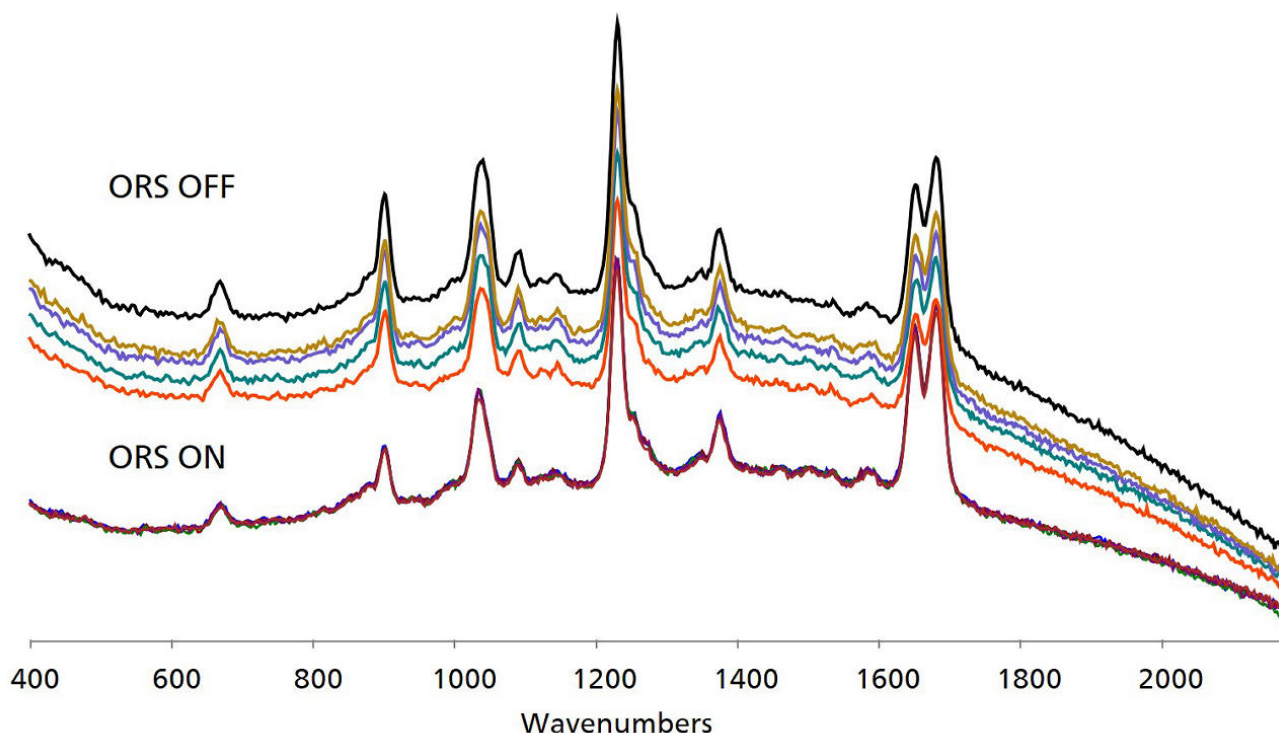


图 7 ORS打开和关闭时获取的SERS数据。

在ORS开启的情况下,光谱的一致性非常理想,ORS关闭下每个光谱则很分散。在ORS开启的情况下,SERS信号强度的变化(一组5个光谱的标准偏差=1.4%)明显低

于ORS关闭的情况($SD=10\%$)。这证实了ORS在获取一致性数据方面的优势。

结论

瑞士万通的所有拉曼系统都具有ORS功能,与固定光束系统相比,它有三个显著的优点。

1. 减少样品被破坏、烧毁的风险。

2. 更好的数据一致性,即使是异质的样品。
3. 更好的图谱质量,因为ORS技术可以覆盖较大样品区域而不损失分辨率。

参考

[1] European Pharmacopoeia (Ph. Eur.) 10th Edition | EDQM - European Directorate for the Quality of Medicines <https://pheur.edqm.eu/home> (accessed 2021-11-08). [2] Smith, C. J.; Stephens, J. D.; Hancock, B. C.; Vahdat, A. S.; Cetinkaya, C. Acoustic Assessment of Mean Grain Size in

Pharmaceutical Compacts. *Int. J. Pharm.* **2011**, 419 (1–2), 137–146. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2011.07.032> [3] Yu, W. W.; White, I. M. Inkjet Printed Surface Enhanced Raman Spectroscopy Array on Cellulose Paper. *Anal. Chem.* **2010**, 82 (23), 9626–9630. <https://doi.org/10.1021/ac102475k>



CONTACT

Metrohm Taiwan Ltd.
開封街二段 46 號 5 樓
108 台北市

info@metrohm.com.tw

配置



MIRA P Advanced

瑞士万通快速拉曼分析仪 (MIRA) P 是一款性能强大的手持式拉曼光谱仪,可用于各种材料的快速无损测定和验证,例如药物有效成分和赋形剂。MIRA P 小而坚固,配备了瑞士万通的ORS技术。MIRA P 符合 FDA 联邦法规 21 章第 11 款的规定

。Advanced Package 包含一个附加透镜,可用它直接分析材料或者在材料容器中分析(3b 级激光器),还有一个小管支架套筒用于分析玻璃小管中的样本(1 级激光器)。



MISA Advanced

Metrohm Instant SERS Analyzer (MISA) 是一款高性能、便携式分析系统,可快速检测/鉴定非法物质、食品添加剂和微量食品污染物。MISA 的特点是配备了 Metrohm 的轨道光栅扫描 (ORS) 技术设备的光谱仪。其空间需求小和并且电池寿命有所延长,适用于现场测试或移动实验室应用。MISA 提供各种 1 级激光附件,可灵活选择取样。该分析仪可通过 BlueTooth 或 USB 连接运行。

MISA Advanced 套件是一个完整套件,其作用是让用户能用 Metrohms 纳米颗粒溶液和 P-SERS 试剂条进行 SERS 分析。

MISA Advanced 套件包含了一个 MISA 小管附件、一个 P-SERS-附件、一个 ASTM 校正标准件、一个 USB 迷你电缆、一个 USB 供电单元和用于运行 MISA 仪器的 MISA Cal 软件。还随供了一个用来安全保管仪器和附件的坚固保护箱。