

## Идентификация сырья с использованием бесконтактной рамановской спектроскопии



### Введение

Пространственная рамановская спектроскопии (SORS) — это мощная технология, которая используется для идентификации веществ в закрытой упаковке. SORS делает возможным анализ веществ через плотную или непрозрачную упаковку, например пакеты из крафт-бумаги, пластиковые бочки или бутылки. В этом обзоре технической информации объясняется, как работает технология бесконтактной спектроскопии комбинационного рассеяния и как ее применение для идентификации сырья помогает увеличить скорость и оптимизировать процесс контроля качества.

## Идентификация сырья через упаковку

Чтобы избежать производственных ошибок в фармацевтической промышленности, при приемке сырья должна выполняться его идентификация. Она может потребовать больших ресурсов, особенно в случае обязательного или желательного анализа всего сырья без исключения. Рамановская спектроскопия используется повсеместно для идентификации сырья благодаря ее скорости и удобству. Тем не менее необходимым условием ее использования является прямая видимость сырья, что не выполняется для большинства типов упаковок. Пакеты, бочки, бутылки и мягкие контейнеры обычно сделаны из непрозрачных или флуоресцирующих материалов, а это означает, что для проведения анализа традиционными спектроскопическими методами упаковку необходимо вскрыть. При этом необходимо использовать стенд для манипуляций с порошками и защитную одежду, а также проводить уборку, что существенно повышает затраты и требует привлечения персонала.

## SORS

Пространственная рамановская спектроскопия (SORS) является разновидностью рамановской спектроскопии и позволяет за считанные секунды получать высококачественные спектры комбинационного рассеяния содержимого непрозрачных упаковок для эффективной идентификации их содержимого. На рис. 1 приведены результаты измерений сахарозы методом SORS через бочку из полипропилена толщиной 1,5 мм. Традиционные рамановские спектрометры не работают через непрозрачные упаковки с флуоресцентными свойствами. В то же время SORS позволяет получить высококачественный спектр через несколько миллиметров непрозрачного пластика, несколько слоев бумаги, миллиметры цветного стекла и позволяет достоверно идентифицировать вещества там, где раньше это не представлялось возможным (см. рис. 1А и 1В). Спектр SORS на рис. 1С в точности совпадает с эталонным спектром сахарозы, приведенным на рис. 1D.

## Принцип работы SORS

В ходе проведения измерения методом SORS автоматически записываются два спектра при различных положениях возбуждающего лазера относительно упаковки (рис. 2). В месте, где подсвечивается вещество или упаковка, записывается сложный спектр комбинационного рассеяния упаковки или спектр «нулевого смещения», затем лазер смещается на несколько миллиметров в сторону, и под поверхностью упаковки записывается спектр содержимого или спектр «смещения». Вычитание масштабированных спектров «нулевого смещения» и «смещения» позволяет исключить сигналы упаковки, оставив для анализа только спектр содержимого. Затем спектр SORS без сигналов упаковки и фоновых сигналов сопоставляется с эталонным спектром для идентификации.



Примеры упаковок

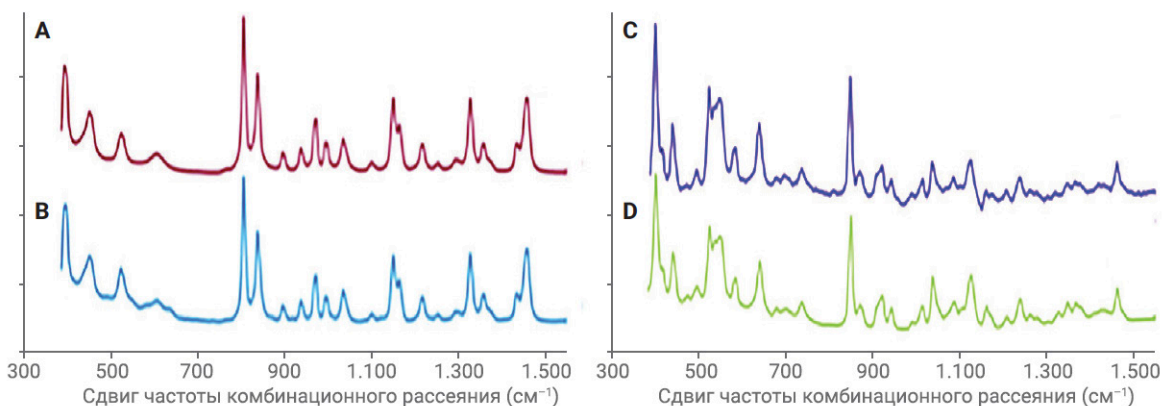
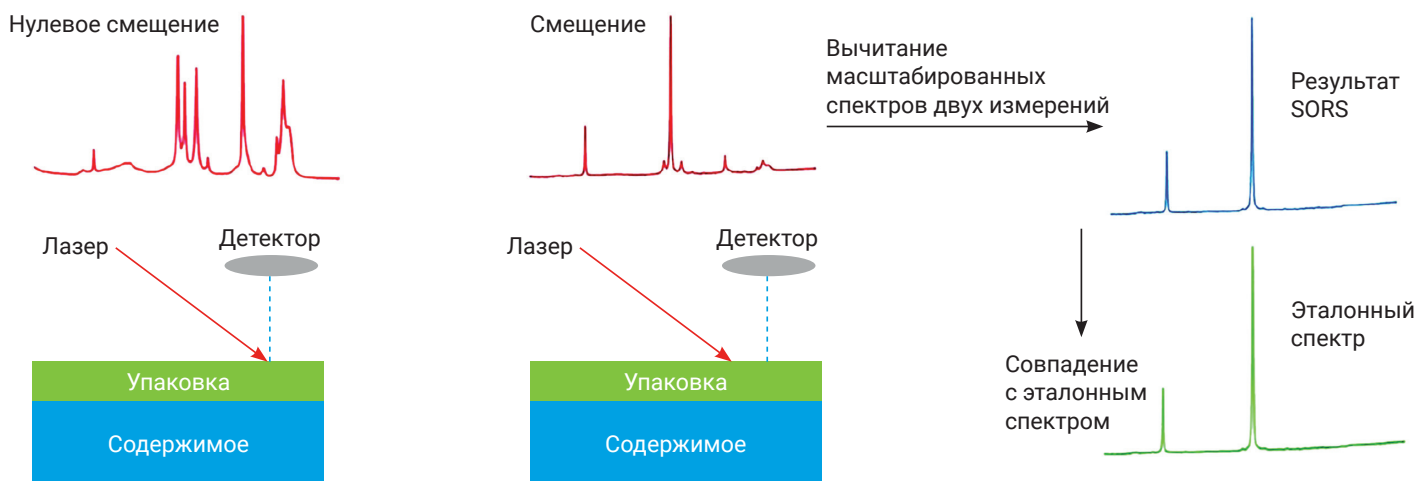


Рис. 1. А) Традиционный спектр комбинационного рассеяния при измерении через полипропиленовую упаковку, без сахарозы; В) с сахарозой; С) спектр SORS, измеренный через эту же полипропиленовую упаковку,  $t = 8$  с; D) эталонный спектр сахарозы.



**Рис. 2.** Измерения методом SORS через упаковку. Положения лазера без смещения (слева) и при смещении в пространстве (справа). Вычитание масштабированных спектров позволяет получить чистый спектр содержимого, который сопоставляется с эталонным спектром для идентификации.

## Преимущества SORS для идентификации сырья

SORS полностью меняет подход к процессу идентификации сырья, позволяя анализировать сырье прямо в карантинной зоне для повышения пропускной способности.

- Больше не нужно вскрывать упаковки или отбирать пробы в специальной комнате.
- Значительно снизилась необходимость перемещения упаковок и других манипуляций с ними.
- Можно проверить все сырье без исключения.
- Легко проводить несколько анализов одной упаковки сырья (альтернативный анализ).

С помощью метода SORS можно анализировать сырье при «прямой видимости» или через прозрачную (упаковочный материал или бутылки из прозрачного стекла) и непрозрачную упаковку (мягкие контейнеры, бутылки из янтарного стекла, белые бочки из полипропилена или пакеты из крафт-бумаги).

- Спектральные сигналы упаковки вычитаются в динамическом режиме, при этом получаются чистые спектры сырья, которые используются для его идентификации. Влияние упаковки при этом полностью исключается.
- Метод позволяет с легкостью подстраиваться под любые условия: упаковка разной прозрачности, цвета и толщины, непрозрачная упаковка, флуоресцирующие материалы упаковки и материалы различного химического состава.

SORS позволяет сохранять целостность упаковки сырья. Во время идентификации сохраняются стерильность и условия хранения внутри упаковки.

- Сохраняется стерильность сырья, необходимая для производства сложных биологических препаратов, таких как поверхностно-активные вещества, буферы и питательные среды.
- Сохраняется срок годности такого сырья, как полисорбаты, и исключается вероятность его загрязнения.

## Спектрометры Agilent для идентификации сырья на основе технология пространственной спектроскопии комбинационного рассеяния (SORS)

Agilent Vaya — первый ручной рамановский спектрометр с технологией SORS для быстрой идентификации сырья через упаковку. Будучи совместимым с большинством сырья, спектрометр Agilent Vaya срабатывает мгновенно через прозрачные виалы, прозрачные или непрозрачные емкости, белые или окрашенные бочки, мягкие контейнеры, пакеты из крафт-бумаги и бутылки из цветного стекла.



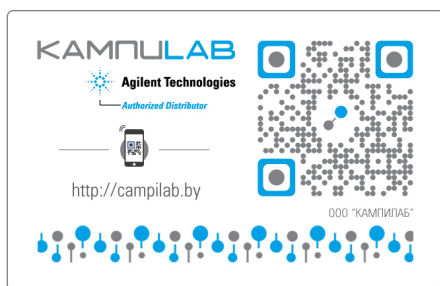
Рамановский спектрометр Agilent Vaya

Спектрометр Agilent RapID — это портативная мобильная система для анализа сырья в наиболее плотных непрозрачных упаковках. Он применим для большинства фармацевтических материалов и наполнителей почти в любой упаковке (за исключением металлических и картонных бочек).



Рамановский спектрометр Agilent RapID

Спектрометры Agilent RapID и Vaya могут использоваться непосредственно в карантинных зонах склада. С простыми рабочими процессами, считывателем штрих-кодов и встроенной сетевой поддержкой рутинные тесты выполняются быстро и эффективно. Спектрометры Agilent RapID и Vaya разработаны для применения в процессах идентификации сырья, отвечающих правилам GMP, и соответствуют требованиям части 11 раздела 21 Свода федеральных законоположений США.



[www.agilent.com/chem/raman](http://www.agilent.com/chem/raman)

DE.4275810185

Информация в этом документе может быть изменена без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2020  
Напечатано в США 25 февраля 2020 г.  
5994-1806RU