

La spettrofotometria

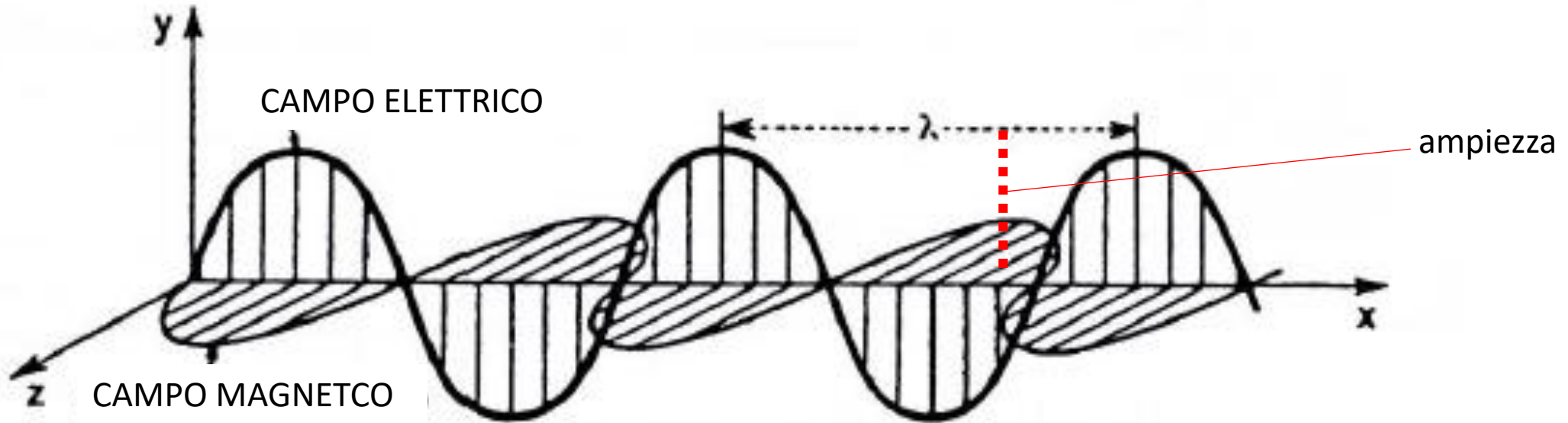
La misurazione dell'assorbimento e dell'emissione di radiazione da parte della materia è chiamata **spettrometria**.

Gli strumenti specifici usati nella spettrometria sono chiamati **spettrofotometri, spettroradiometri o spettrometri** a seconda della loro geometria.

In tutti i metodi spettrometrici vengono misurate due grandezze fondamentali:

- la **lunghezza d'onda** (o *energia* della radiazione)
- la *quantità* di radiazione a quella lunghezza d'onda

RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA



Perpendicolare alla direzione di propagazione

Forma di energia trasmessa nello spazio ad elevata velocità

Con il termine LUCE si intende la radiazione elettromagnetica VISIBILE

La radiazione elettromagnetica è caratterizzata da: frequenza, lunghezza d'onda, la velocità e l'ampiezza

La radiazione elettromagnetica è descritta anche come un insieme di pacchetti o quanti di energia

Proprietà dell'onda elettromagnetica

Ampiezza: quantità vettoriale (modulo e verso e direzione) che descrive la misura della forza del campo elettrico o magnetico ad un punto di massimo d'onda

Periodo: è il tempo in secondi necessario a due massimi o minimi successivi di passare attraverso un punto dello spazio

Frequenza: è numero di oscillazioni che si hanno in un secondo

Lunghezza d'onda: è la distanza lineare tra due massimi o due minimi successivi

Il prodotto di frequenza X lunghezza d'onda descrive **la velocità dell'onda**

UNITA' DI MISURA IN SPETTROMETRIA

Nome	Simbolo	Unità di misura per	Intervallo d'uso (*)
Nanometro	nm	λ	UV, visibile, vicino infrarosso
Ångström (**)	Å	λ	Raggi X, UV-visibile (nella letteratura più datata)
Millimicron (**)	m μ	λ	Visibile (nella letteratura più datata)
Micron, micrometro	μm	λ	Infrarosso (comune nelle riviste di fisica)
Numero d'onda (reciproco di cm)	cm ⁻¹ , $\bar{\nu}$	ν/c	Infrarosso, UV-visibile (meno comune)
Elettronvolt (**)	eV	E	Raggi X, raggi γ
Hertz	Hz	ν	Radiofrequenze, microonde
= cicli al secondo	cps	ν	Radiofrequenze (meno comune nella letteratura attuale)

GRANDEZZE IMPORTANTI IN SPETTROMETRIA

λ lunghezza d'onda

ν frequenza

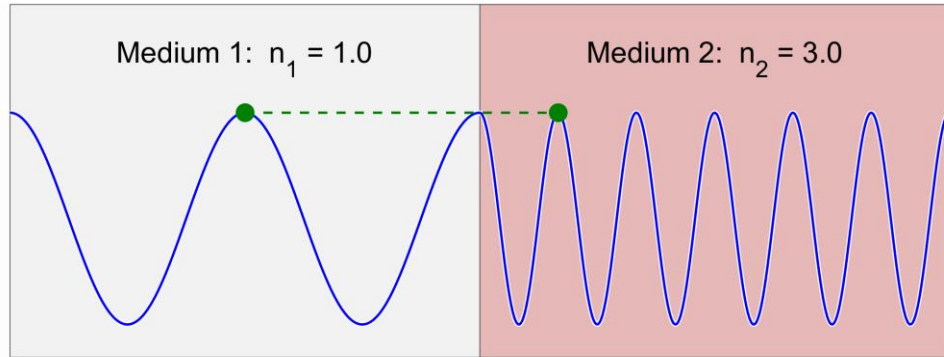
E energia

h costante di Planck

c velocità della luce attraverso il vuoto

v velocità della luce attraverso un mezzo

Quando una radiazione attraversa un mezzo diverso dall'aria cambia la sua lunghezza d'onda



Le interazioni di interesse tra radiazione elettromagnetica e materia sono quelle che coinvolgono transizioni tra i livelli energetici.

Ovvero quelle che dipendono dalla configurazione elettronica delle specie con cui interagisce la radiazione.

Tipo di variazione	Tipo di spettroscopia
Cambio di configurazione	Infrarossa
Variazione della distribuzione elettronica	Visibile e ultravioletta

LO SPETTRO ELETTROMAGNETICO

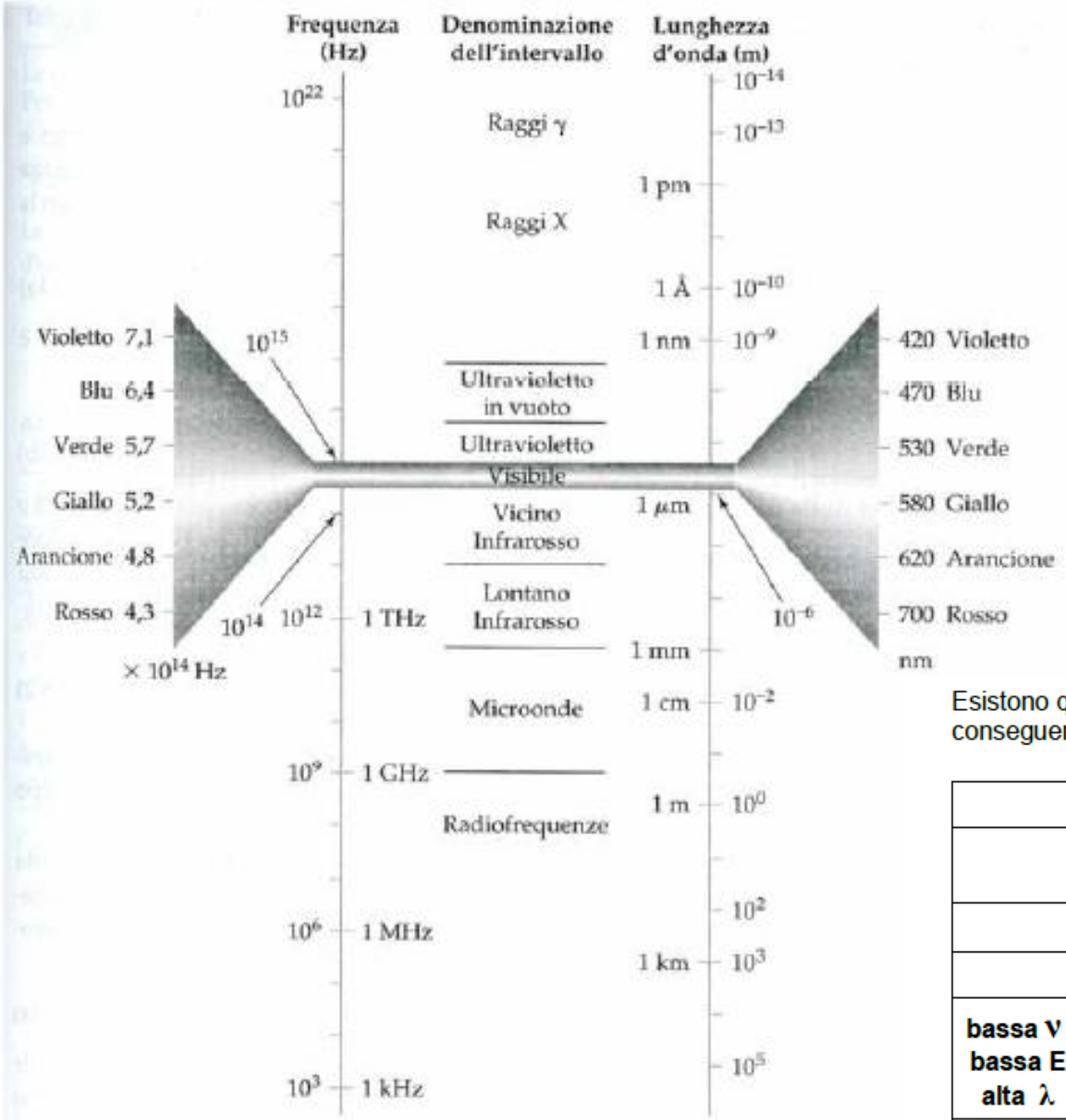


TABELLA 24-2
Regioni dello spettro UV, visibile e IR

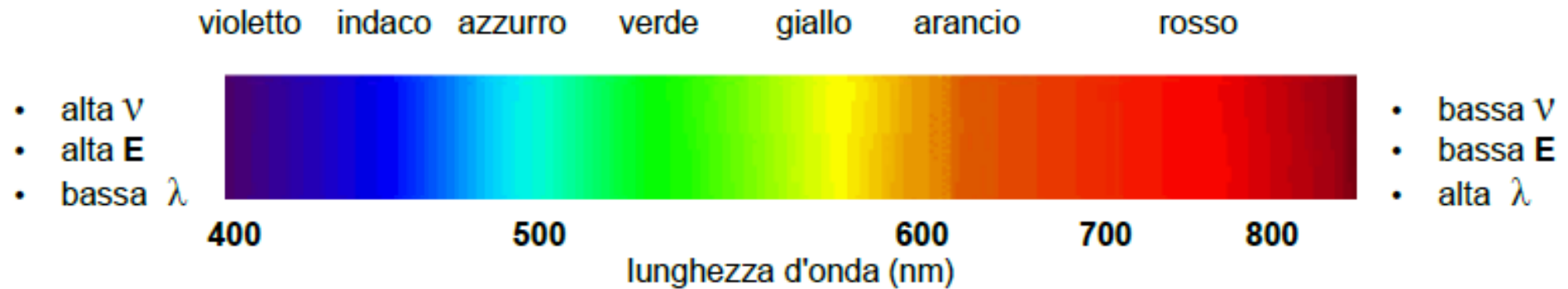
Regione	Intervallo di lunghezza d'onda
UV	180–380 nm
Visibile	380–780 nm
Vicino-IR	0,78–2,5 μm
Medio-IR	2,5–50 μm

Esistono quindi vari tipi di radiazione elettromagnetica, che differiscono per la loro lunghezza d'onda (e di conseguenza per la loro frequenza ed energia); sono riassunti nello spettro delle radiazioni elettromagnetiche:

Tipi di radiazione						
onde radio	micro-onde	raggi IR	luce visibile	raggi UV	raggi X	raggi gamma
10^7	10^{10}	10^{12}	10^{14}	10^{15}	10^{17}	10^{20}
ordini di grandezza (in Hz) delle FREQUENZE						
bassa V bassa E alta λ						alta V alta E bassa λ
ordini di grandezza (in cm) delle LUNGHEZZE D'ONDA						
10^3	1	10^{-3}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-8}	10^{-11}

LA RADIAZIONE VISIBILE

Come appena visto, la radiazione visibile rappresenta solo una piccola parte dello spettro elettromagnetico:



Alle diverse radiazioni visibili, che differiscono per la loro lunghezza d'onda (e di conseguenza per la loro frequenza ed energia) corrispondono i diversi colori.

Misure Spettroscopiche

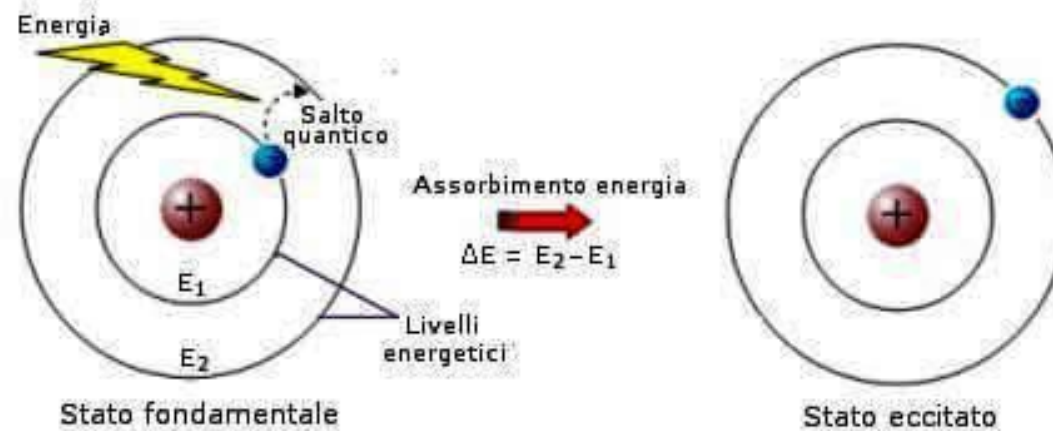
Passaggi base:

1) ECCITAZIONE

- Un campione viene stimolato con l'uso di una forma di energia (in questa fase l'analita è allo stato fondamentale)
- Lo stimolo determina il passaggio allo stato eccitato (stato energetico più alto)

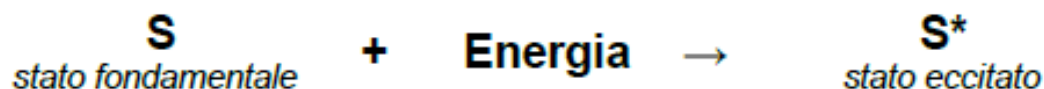
2) MISURA:

- Misuro la radiazione elettromagnetica emessa per ritornare allo stato fondamentale
- Misuro la quantità di radiazione elettromagnetica assorbita durante l'eccitazione



- il PRINCIPIO -

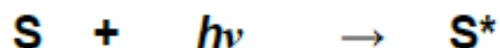
Atomi o molecole, trovandosi in campi energetici (calorifici, elettrici, elettro-magnetici,...) possono assorbire quantità definite e caratteristiche di energia e passare a stati energetici più alti.



Su questo principio si basano sia la spettroscopia di assorbimento sia quella di emissione.

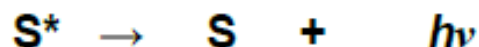
- spettroscopia di ASSORBIMENTO -

Quando atomi o molecole vengono eccitati da adatte radiazioni elettromagnetiche (" $h\nu$ "), passando a stati energetici maggiori, si ha il fenomeno di ASSORBIMENTO



- spettroscopia di EMISSIONE -

Dagli stati eccitati, ritornando allo stato fondamentale, gli atomi e le molecole emettono quanti di energia sotto forma di radiazioni elettromagnetiche (" $h\nu$ "): fenomeno di EMISSIONE

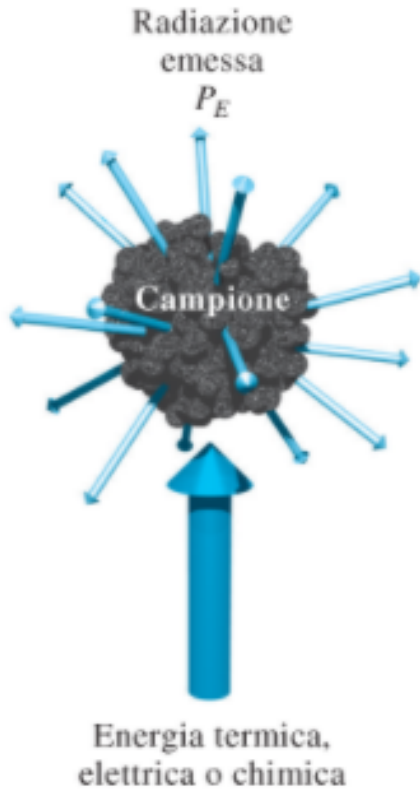


- le applicazioni analitiche -

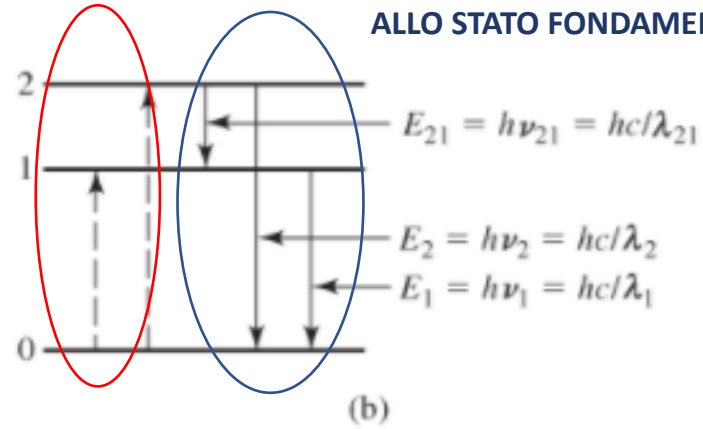
- La **lunghezza d'onda** delle radiazioni emesse o assorbite sono caratteristiche delle varie sostanze: ciò consente di effettuare analisi **QUALITATIVE**
- L'**intensità** delle radiazioni emesse o assorbite dipendono dalla quantità di sostanza: ciò consente di effettuare analisi **QUANTITATIVE**

SPETTROSCOPIA DI EMISSIONE

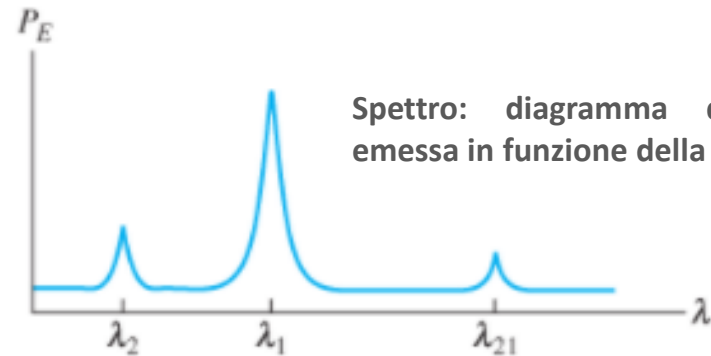
ECCITAZIONE, ACQUISTO DI ENERGIA



EMISSIONE DI UN FOTONE PER TORNARE ALLO STATO FONDAMENTALE



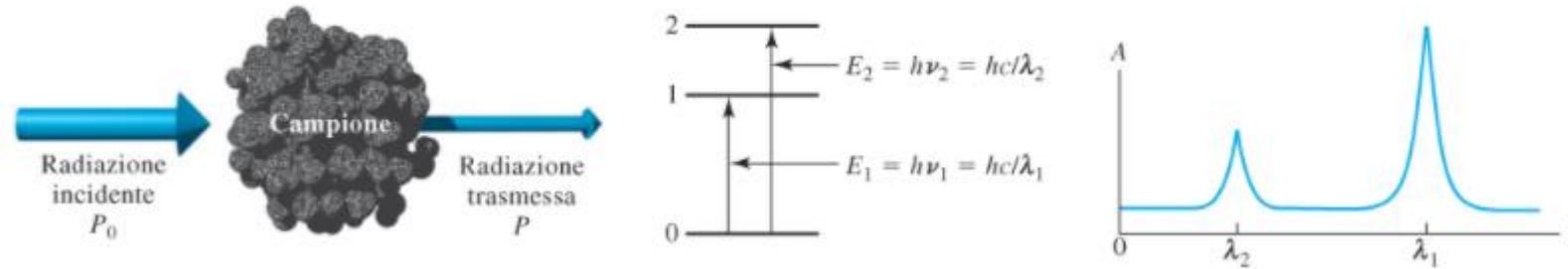
Un fotone è una particella di radiazione elettromagnetica che ha massa zero ed energia $h\nu$.



Spettro: diagramma della radiazione emessa in funzione della lunghezza d'onda

SPETTROSCOPIA DI ASSORBIMENTO

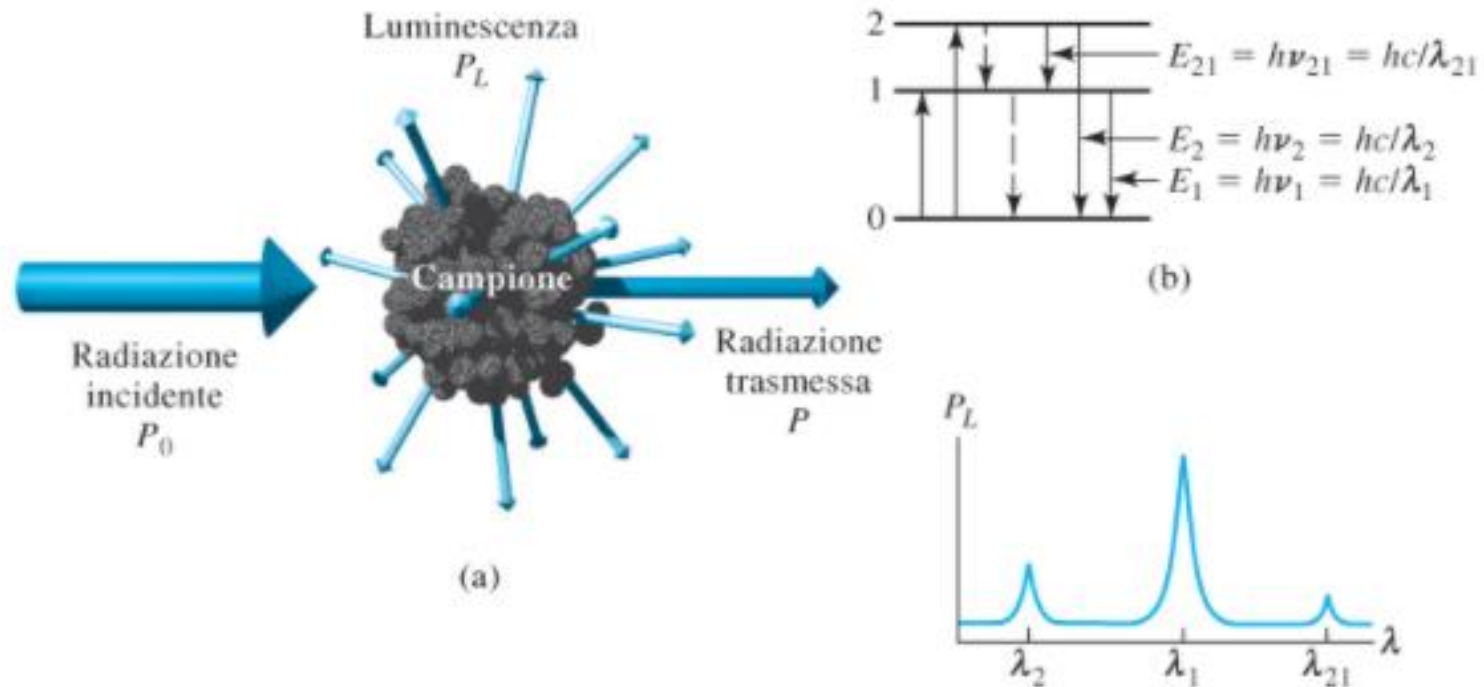
La radiazione elettromagnetica incidente può essere assorbita, l'assorbimento della radiazione comporta il passaggio ad uno stato energetico superiore per l'energia ceduta dalla radiazione



La radiazione elettromagnetica trasmessa avrà quindi una intensità minore di quella incidente

SPETTROSCOPIA DI FLUORESCENZA

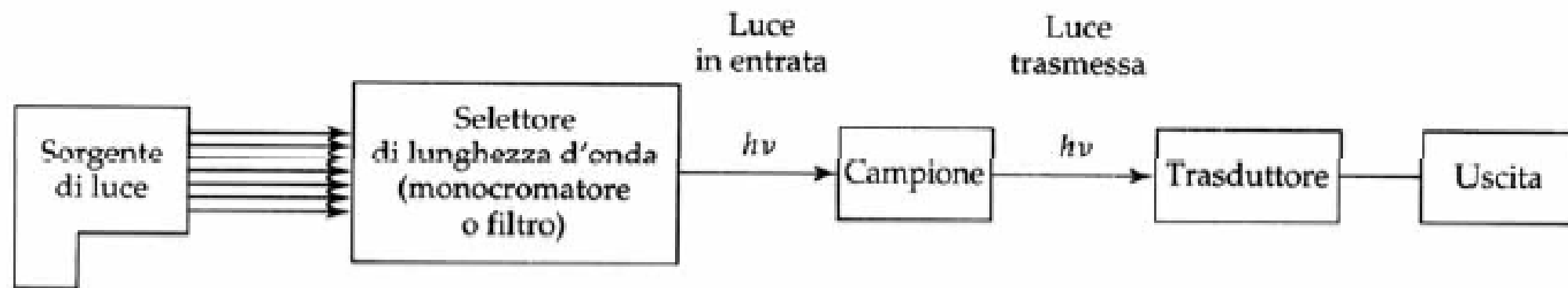
La radiazione elettromagnetica incidente può essere assorbita, l'assorbimento della radiazione comporta un salto quantico con passaggio ad una forma instabile.



La specie torna allo stato fondamentale attraverso l'emissione di fotoni

SPETTROMETRIA DI ASSORBIMENTO

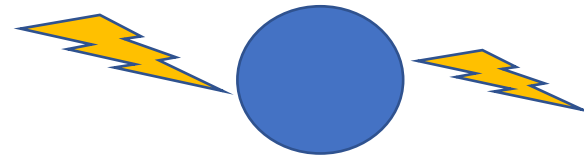
La spettrometria di assorbimento consiste nella misurazione della quantità di luce di una data lunghezza d'onda che ha attraversato un certo campione.



L'assorbimento della radiazione

Ogni specie chimica è in grado di interagire con la radiazione elettromagnetica se di opportuna frequenza e lunghezza d'onda

Quando una specie assorbe la radiazione, la radiazione stessa si attenua (cioè ha una intensità minore)



Concentrazione e assorbimento

Maggiore concentrazione → maggiore numero di molecole → maggiore assorbimento → maggiore attenuazione

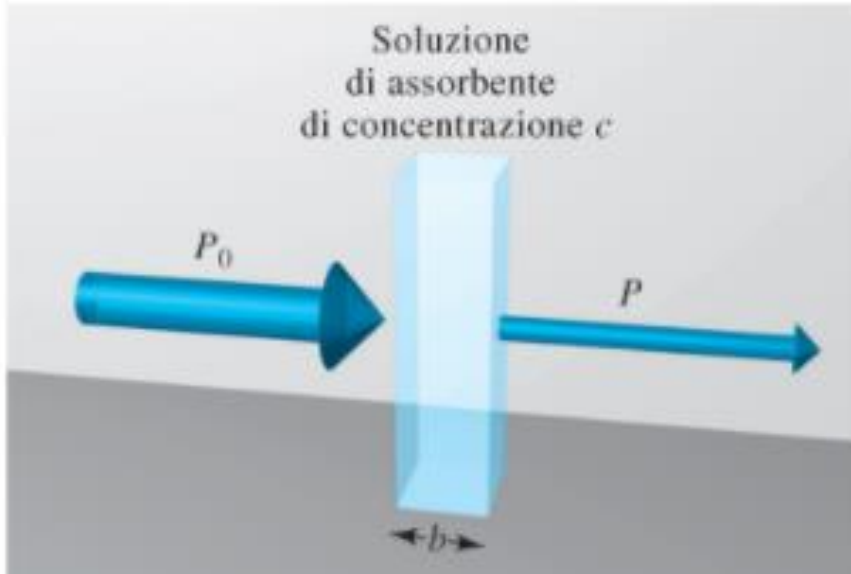
Cammino ottico e assorbimento

a parità di concentrazione → maggiore cammino → maggiore numero di molecole → maggiore assorbimento → maggiore attenuazione

Trasmittanza e Assorbanza

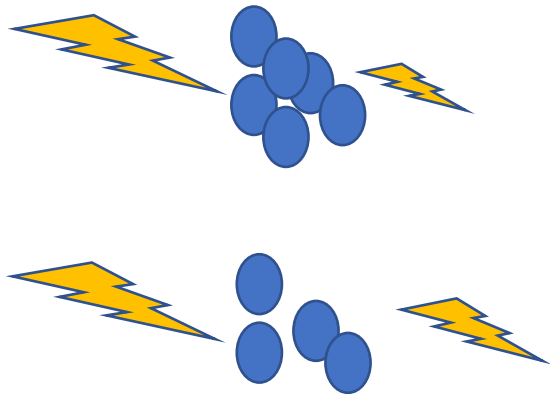
La **trasmittanza** della soluzione è data dalla frazione della radiazione incidente trasmessa dalla soluzione

L'**assorbanza** è legata alla trasmittanza mediante logaritmo

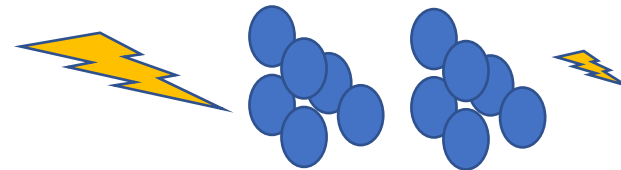


$$T = \frac{P}{P_0}$$
$$A = \log \frac{P_0}{P}$$

Attenuazione e concentrazione



Attenuazione e cammino ottico



Lambert-Beer

La legge dell'assorbimento, (Lambert-Beer) ci dice in maniera quantitativa come la quantità di radiazione attenuata dipende:

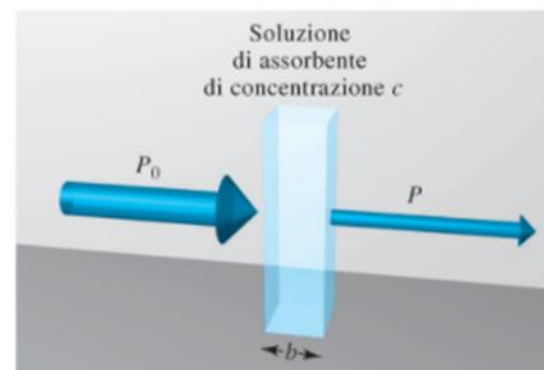
concentrazione delle molecole che assorbono

cammino ottico nel quale avviene l'assorbimento.

Quando la luce (radiazione monocromatica) attraversa un mezzo contenente un analita che assorbe si ha una diminuzione di energia e l'analita passa in uno stato eccitato.

Per una soluzione di un'analita con una determinata concentrazione, maggiore è la distanza che la luce percorre nel mezzo (cammino ottico della luce) maggiore sarà la luce assorbita e quindi maggiore sarà l'attenuazione.

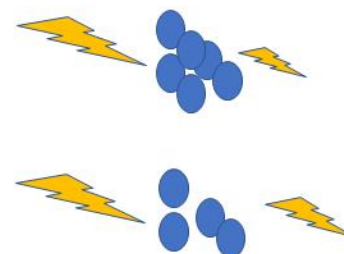
A parità di lunghezza del cammino della luce, più è elevata la concentrazione delle particelle che assorbono, maggiore sarà l'attenuazione.



$$T = \frac{P}{P_0}$$
$$A = \log \frac{P_0}{P}$$

Il termine **radiazione monocromatica** si riferisce ad una radiazione di un singolo colore, cioè con una sola lunghezza d'onda o frequenza.

Attenuazione e concentrazione



Attenuazione e cammino ottico



TRASMITTANZA E ASSORBANZA

La trasmittanza T della soluzione è la frazione di radiazione incidente trasmessa dalla soluzione

$$T = P/P_0$$

La trasmittanza viene spesso espressa come percentuale, chiamata trasmittanza percentuale.

$$T = P/P_0\%$$

L'assorbanza, A , di una soluzione è legata alla trasmittanza da una relazione logaritmica

$$A = -\log T$$

$$A = \log P_0/P$$

Sperimentalmente la potenza del fascio trasmesso da una celletta contenente la soluzione dell'analita è comparata con la potenza di un fascio trasmesso da una celletta identica contenente soltanto il solvente o il bianco del reagente.

Legge di Lambert-Beer

$$A = \epsilon b C$$

ϵ = coefficiente di assorbività molare ($\text{L mol}^{-1} \text{cm}^{-1}$)

b = cammino ottico (cm)

C = concentrazione (M)

Assorbanza è una grandezza adimensionale come evidente da

$$A = \log P_0/P$$

Termini impiegati in spettrometria di assorbimento

Termini e simboli*	Definizione	Nome alternativo e simbolo
Potenza radiante incidente, P_0	Potenza radiante incidente sul campione in watt	Intensità incidente, I_0
Potenza radiante trasmessa, P	Potenza radiante trasmessa dal campione	Intensità trasmessa, I
Assorbanza, A	$\log(P_0/P)$	Densità ottica, D ; estinzione, E
Trasmittanza, T	P/P_0	Trasmissione, T
Cammino ottico del campione, b	Lunghezza attraverso la quale si ha l'attenuazione	l, d
Assorbività [†] , a	$A/(bc)$	Coefficiente di estinzione α, k
Assorbività [‡] , ϵ	$A/(bc)$	Coefficiente di estinzione molare

Uso della legge di Beer

Calcolare le assorbività molari delle specie conoscendo la loro concentrazione

Possiamo usare il valore dell'assorbanza misurata per ottenere la concentrazione

Assorbività variano con il solvente, la composizione della soluzione e la temperatura si utilizza una soluzione standard dell'analita nello stesso solvente e alla stessa temperatura per costruire una curva di calibrazione

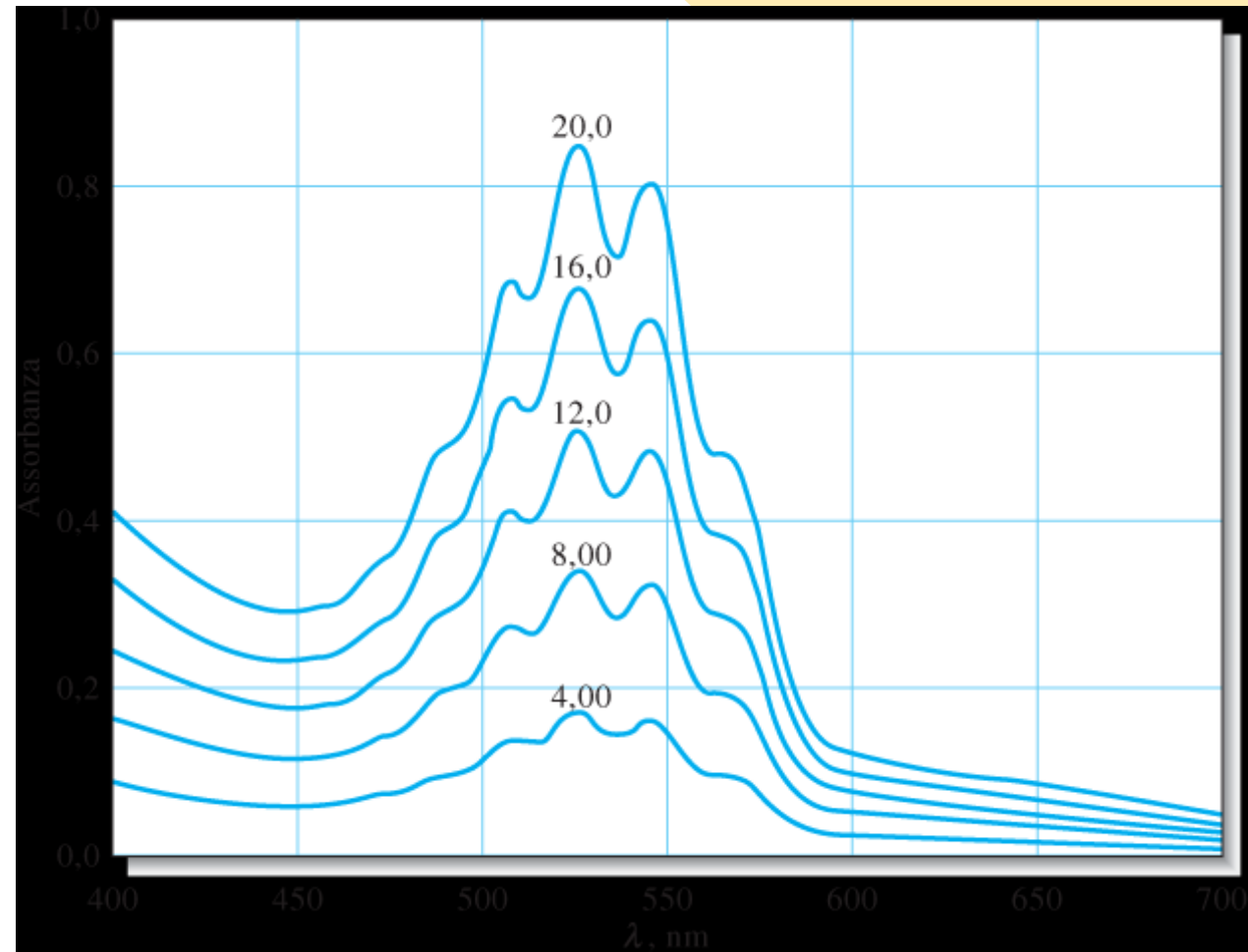
Spettri di assorbimento

Lo spettro di assorbimento mostra l'andamento dell'assorbanza in funzione della lunghezza d'onda

L'andamento dell'assorbività molare ϵ in funzione della lunghezza d'onda è indipendente dalla concentrazione.

Questo tipo di andamento spettrale è caratteristico per una determinata molecola e alcune volte viene usato per identificare o confermare l'identità di una particolare specie.

Il colore di una soluzione è legato al suo spettro di assorbimento



ASSORBIMENTO ATOMICO

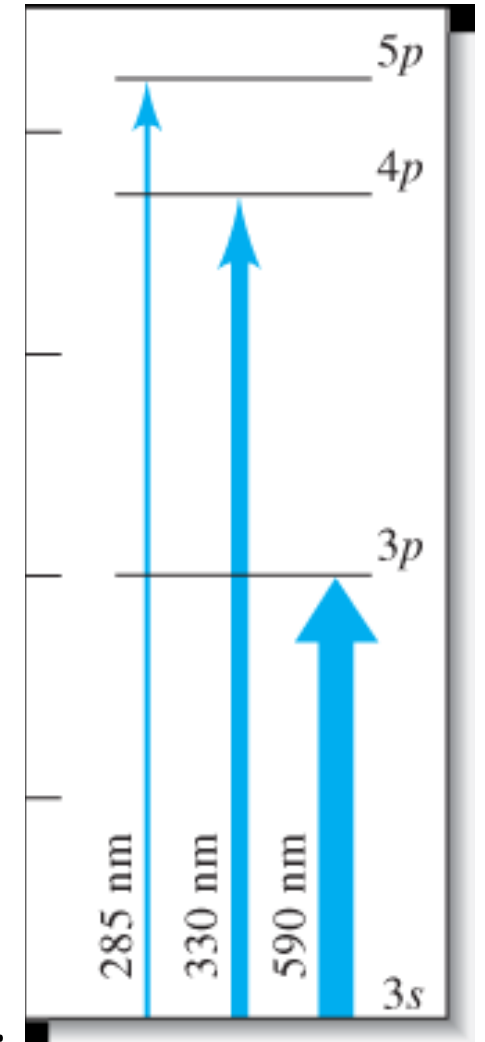
Quando un fascio di radiazione attraversa un mezzo contenente **atomi gassosi**, solo poche frequenze sono attenuate dall'assorbimento.

lo spettro registrato con uno spettrometro ad alta risoluzione consiste di un numero di righe di assorbimento molto strette.

Ad esempio: le transizioni, (freccie blu tra i livelli, coinvolgono l'eccitazione di un singolo elettrone esterno del sodio dall'orbitale 3s dello stato fondamentale, a temperatura ambiente, agli orbitali 3p, 4p, e 5p)

Queste eccitazioni sono provocate dall'assorbimento di fotoni di radiazione la cui energia è esattamente pari alla differenza in energia fra gli stati eccitati e lo stato fondamentale 3s.

Le transizioni tra due diversi orbitali vengono chiamate **transizioni elettroniche**. Si misura l'assorbimento atomico ad una singola lunghezza d'onda usando una sorgente monocromatica con una riga molto stretta



Assorbimento molecolare

Le molecole subiscono tre tipi di transizioni quantizzate quando **eccitate dall'assorbimento di radiazione ultravioletta, visibile e infrarossa.**

Per la radiazione ultravioletta e visibile:

Transizioni di elettroni residenti in orbitali atomici o molecolari a bassa energia su orbitali ad energia più alta. (energia del fotone ($h\nu$) deve essere **uguale** alla differenza di energia fra i due orbitali)

Altri due tipi di transizioni indotte da radiazioni, e precisamente le **transizioni vibrazionali** e le **transizioni rotazionali.**

La transizione elettronica

trasferimento di un elettrone da un orbitale elettronico ad un altro

La transizione può avvenire sia negli atomi (orbitali atomici) che nelle molecole (orbitali molecolari)

Assorbimento molecolare

Le molecole subiscono tre tipi di transizioni quantizzate quando **eccitate dall'assorbimento di radiazione ultravioletta, visibile e infrarossa.**

Per la radiazione ultravioletta e visibile:

Transizioni di elettroni residenti in orbitali atomici o molecolari a bassa energia su orbitali ad energia più alta. (energia del fotone ($h\nu$) deve essere **uguale** alla differenza di energia fra i due orbitali)

Altri due tipi di transizioni indotte da radiazioni, e precisamente le **transizioni vibrazionali** e le **transizioni rotazionali.**

Assorbimento infrarosso (IR)

La radiazione infrarossa generalmente non è sufficiente a provocare transizioni elettroniche, ma può indurre transizioni negli stati vibrazionali e rotazionali dello stato elettronico fondamentale della molecola.

Perché si abbia assorbimento, occorre che la sorgente emetta radiazioni con frequenze corrispondenti esattamente alle energie corrispondenti allo stato elettronico fondamentale

Assorbimento di radiazione ultravioletta e visibile (UV/VIS)

L'assorbimento molecolare nelle regioni del visibile e dell'ultravioletto consiste di bande di assorbimento costituite da linee strettamente ravvicinate.

La tipica banda di assorbimento consiste di un numero molto elevato di linee che portano ad uno spettro continuo.

In soluzione le specie assorbenti sono circondate dal solvente e la natura a banda dell'assorbimento molecolare spesso diventa slargata → picchi di assorbimento arrotondati e continui.

Limitazioni alla legge di Beer

La relazione lineare fra l'assorbanza e il cammino ottico ad una concentrazione fissa è una generalizzazione per la quale esistono poche eccezioni. Tuttavia, si osservano frequentemente deviazioni dalla proporzionalità diretta fra assorbanza e concentrazione quando il cammino ottico b è costante.

Deviazioni reali

Legate a concentrazione di analita $>0,01M$ per la troppa vicinanza intermolecolare

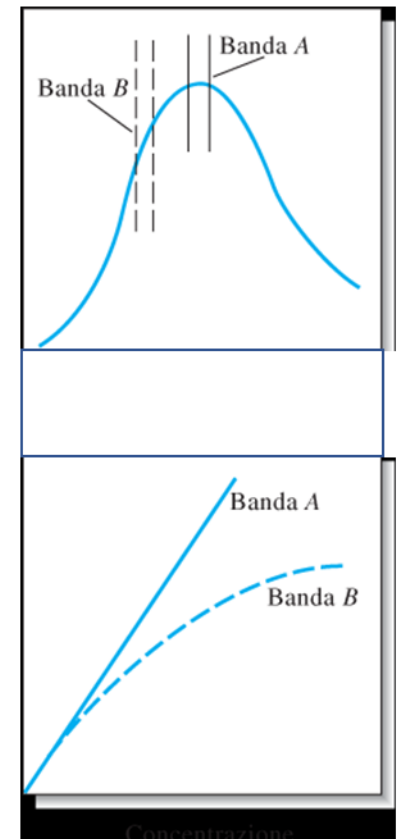
Deviazioni strumentali

Legate a luce non monocromatica

Deviazioni chimiche

Legate a associazione o dissociazione della specie in esame o a reazione con solvente, (prodotti che assorbono in modo diverso dall'analita)

Deviazione strumentale



Spettri di emissione

- La materia (atomi, molecole, ioni) possono essere eccitati ad uno o più livelli energetici superiori mediante bombardamento con elettroni
- l'esposizione al plasma ad elevata temperatura
- alla fiamma
- l'esposizione ad una sorgente di radiazione elettromagnetica

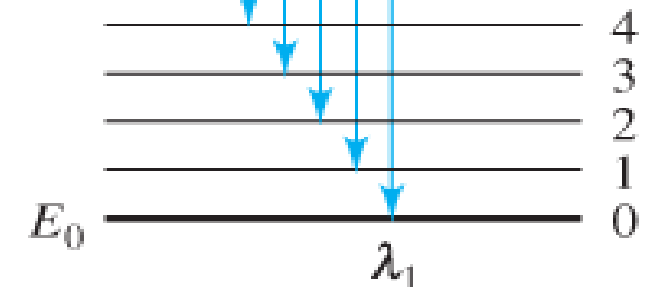
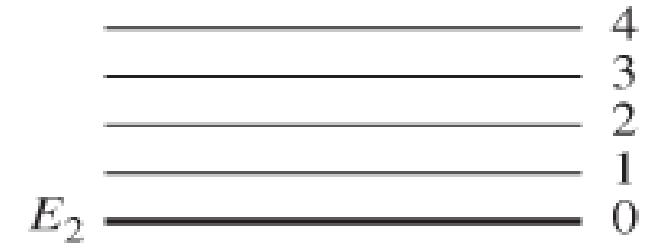
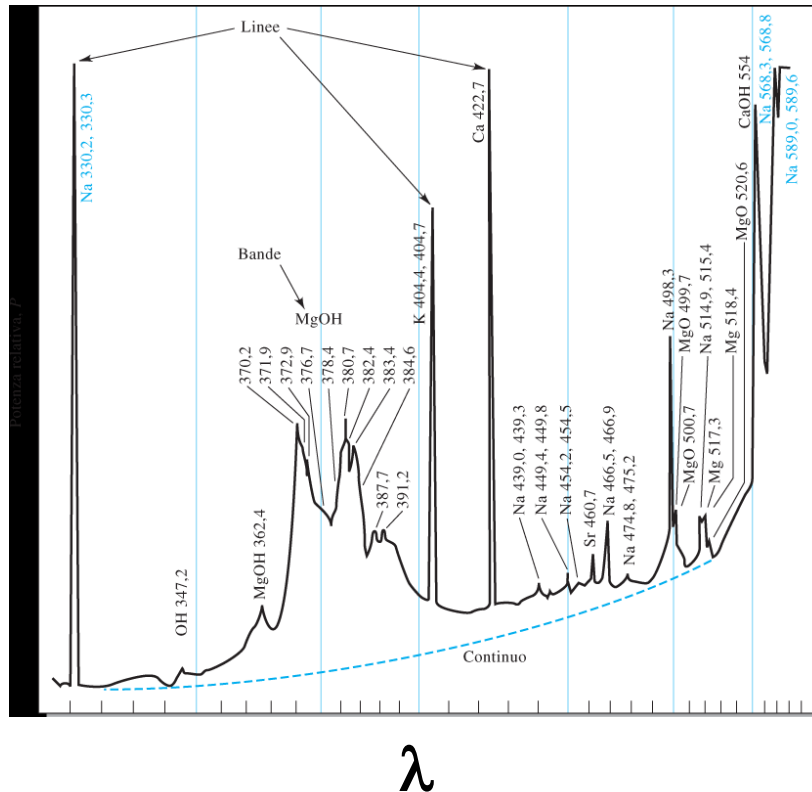
La vita media di una specie eccitata è generalmente estremamente breve (10^{-9} fino a 10^{-6} s)

Per tornare allo stato fondamentale la specie rilascia l'energia in eccesso nella forma di radiazione elettromagnetica

EMISSIONE DI UNA RADIAZIONE ELETTROMAGNETICA=grandezza misurabile (λ e intensità)

Caratteristiche dello spettro di emissione

La radiazione di una sorgente è descritta dallo spettro di emissione, (grafico in cui la potenza della radiazione emessa è espressa in funzione della lunghezza d'onda)

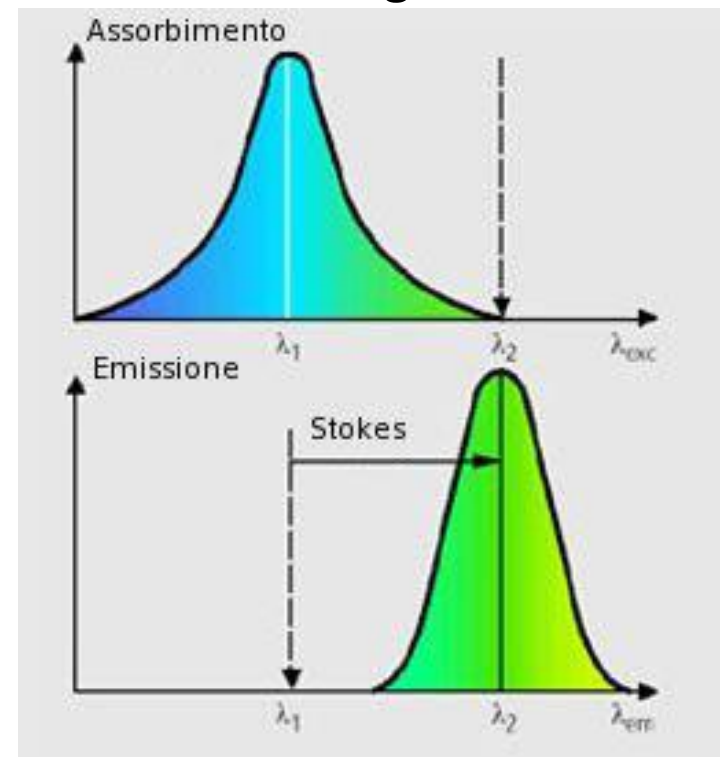


Emissione mediante fluorescenza e fosforescenza

La fluorescenza è un processo di emissione analiticamente importante in cui gli atomi o le molecole sono eccitati mediante l'assorbimento di un fascio di radiazione elettromagnetica.

Le specie eccitate poi rilassano allo stato fondamentale, cedendo il loro eccesso di energia come fotoni.

La **fluorescenza** ha luogo molto più rapidamente della fosforescenza ed è generalmente completa in circa 10^{-5} s (o meno) dal momento dell'eccitazione.



Fluorescenza atomica

Atomi gassosi possono fluorescere quando sono esposti ad una radiazione che ha una lunghezza d'onda uguale ad una delle linee di assorbimento (o emissione) dell'elemento in questione.

Il rilassamento può quindi aver luogo mediante riemissione fluorescente di radiazione di identica lunghezza d'onda. Quando le lunghezze d'onda di eccitazione e di emissione sono le stesse, la risultante emissione è chiamata **fluorescenza di risonanza**.

Fluorescenza molecolare

La fluorescenza è un processo di fotoluminescenza nel quale le molecole vengono eccitate mediante assorbimento di radiazione elettromagnetica.

Le specie eccitate quindi possono subire rilassamento ritornando nello stato fondamentale e cedendo il loro eccesso di energia sotto forma di fotoni.

Spettroscopia IR

Tutte le molecole organiche e inorganiche assorbono radiazione infrarossa

Eccezioni: composti omonucleari es. O₂, N₂, e Cl₂

La spettroscopia infrarossa → identificazione qualitativa

Minore efficienza di S. assorbimento UV/VIS per determinazioni quantitative (minore sensibilità e maggiori deviazioni dalla legge di Beer)

Il numero d'onda è il numero di oscillazioni di un'onda nell'unità di lunghezza, e corrisponde quindi al reciproco della lunghezza d'onda

L'energia della radiazione infrarossa genera transizioni vibrazionali e rotazionali, ma non è sufficiente ad eccitare transizioni elettroniche.

I modi in cui una molecola può vibrare dipende dal **numero di legami** e dal **numero di atomi** della molecola

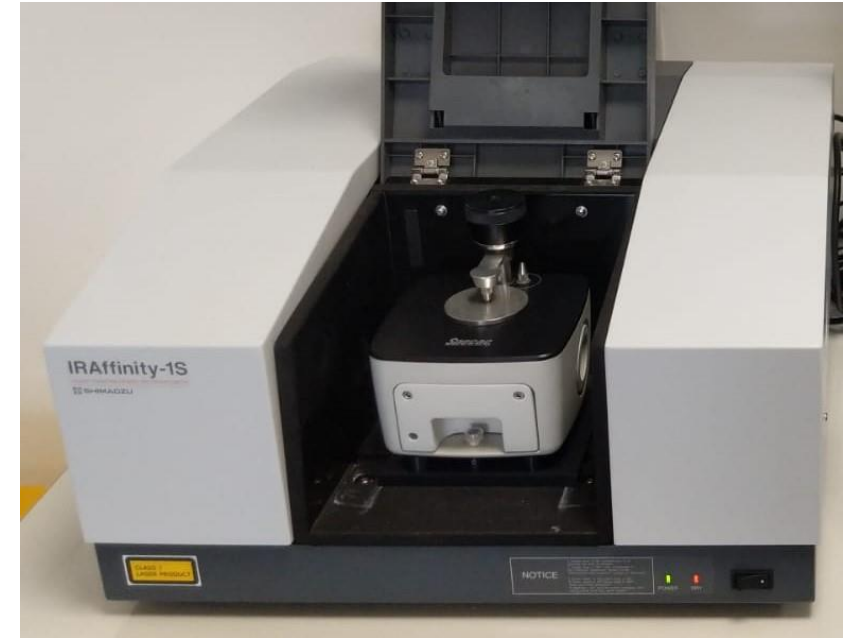
Il numero delle vibrazioni è elevato anche per molecole molto semplici

Gruppo funzionale		Picchi di assorbimento	
		Numero d'onda, cm ⁻¹	Lunghezza d'onda, μm
O—H	Alifatico ed aromatico	3600–3000	2,8–3,3
NH ₂	Anche secondario e terziario	3600–3100	2,8–3,2
C—H	Aromatico	3150–3000	3,2–3,3
C—H	Alifatico	3000–2850	3,3–3,5
C≡N	Nitrile	2400–2200	4,2–4,6
C≡C—	Alchino	2260–2100	4,4–4,8
COOR	Estere	1750–1700	5,7–5,9
COOH	Acido carbossilico	1740–1670	5,7–6,0
C=O	Aldeidi e chetoni	1740–1660	5,7–6,0
CONH ₂	Ammidi	1720–1640	5,8–6,1
C=C—	Alchene	1670–1610	6,0–6,2
φ—O—R	Aromatico	1300–1180	7,7–8,5
R—O—R	Alifatico	1160–1060	8,6–9,4

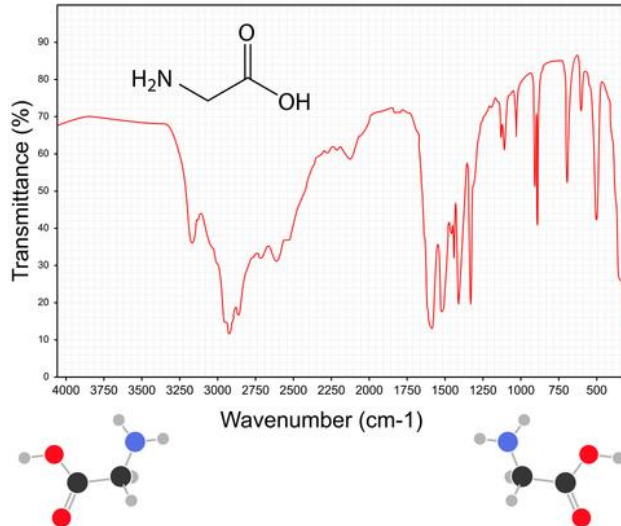
Spettroscopia IR

Tre tipi di strumenti IR:
spettrometri dispersivi (o spettrofotometri)
spettrometri in trasformata di Fourier (FTIR)
fotometri a filtro

Lo spettrometro FTIR è il tipo più comune di spettrometro infrarosso.
Oggi la maggior parte di strumenti infrarossi venduti sono sistemi FTIR.



Glycine - Infrared Spectrum



Gli strumenti in trasformata di Fourier non contengono elementi dispersivi e tutte le lunghezze d'onda sono rivelate e misurate contemporaneamente usando un interferometro.

COMPONENTI STRUMENTALI

La maggior parte degli strumenti spettroscopici per le regioni UV/visibile e IR consiste di:

una sorgente stabile di energia radiante

un selettore di lunghezze d'onda che isola una regione limitata dello spettro per la misura

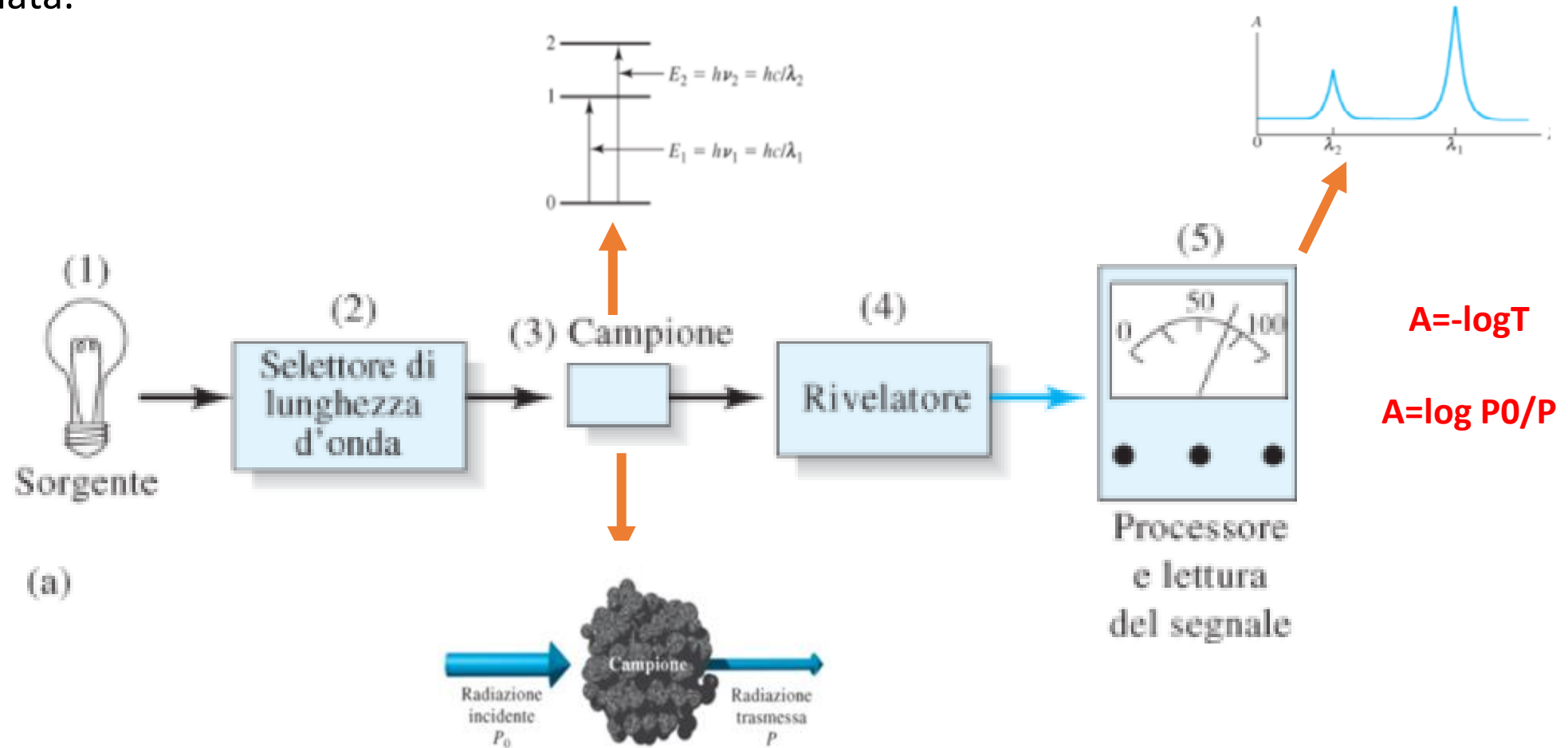
uno o più contenitori per il campione

un rivelatore di radiazione che converte l'energia radiante in un segnale elettrico misurabile

un processore e un registratore del segnale, normalmente costituito da un hardware elettronico e, nei moderni strumenti, da un computer.

spettroscopia di assorbimento

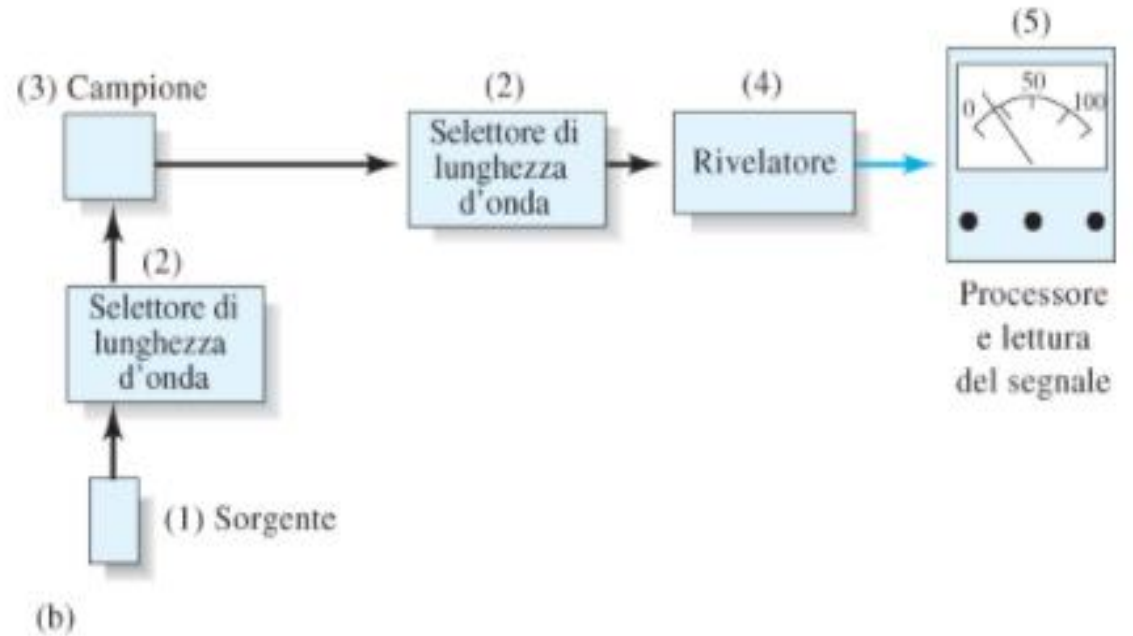
- sorgente di radiazione esterna.
- l'attenuazione della radiazione proveniente dalla sorgente viene misurata ad una lunghezza d'onda selezionata.



Spettroscopia di fluorescenza e emissione

Nelle misure di fluorescenza

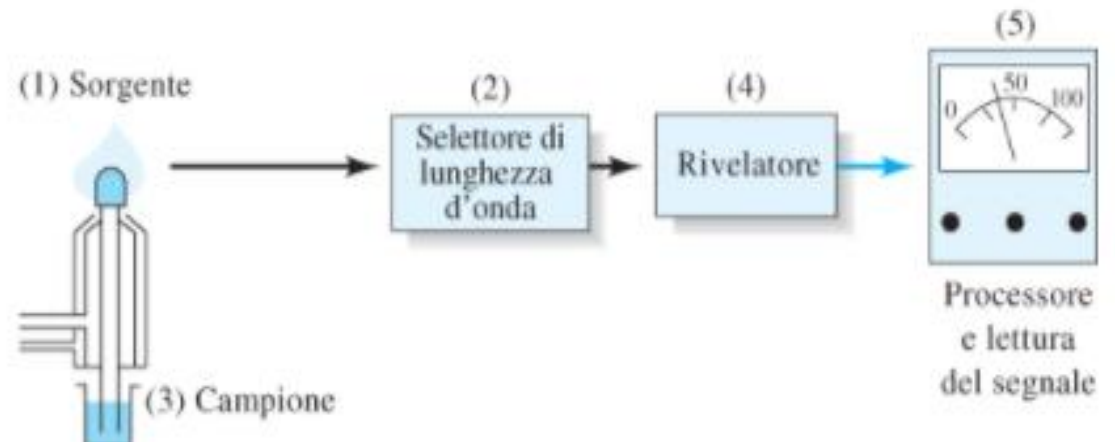
sorgente eccita l'analita e causa l'emissione della radiazione caratteristica (misurata a 90 gradi rispetto alla direzione della radiazione incidente della sorgente)



Nella spettroscopia di emissione è lo stesso campione che funge da emettitore.

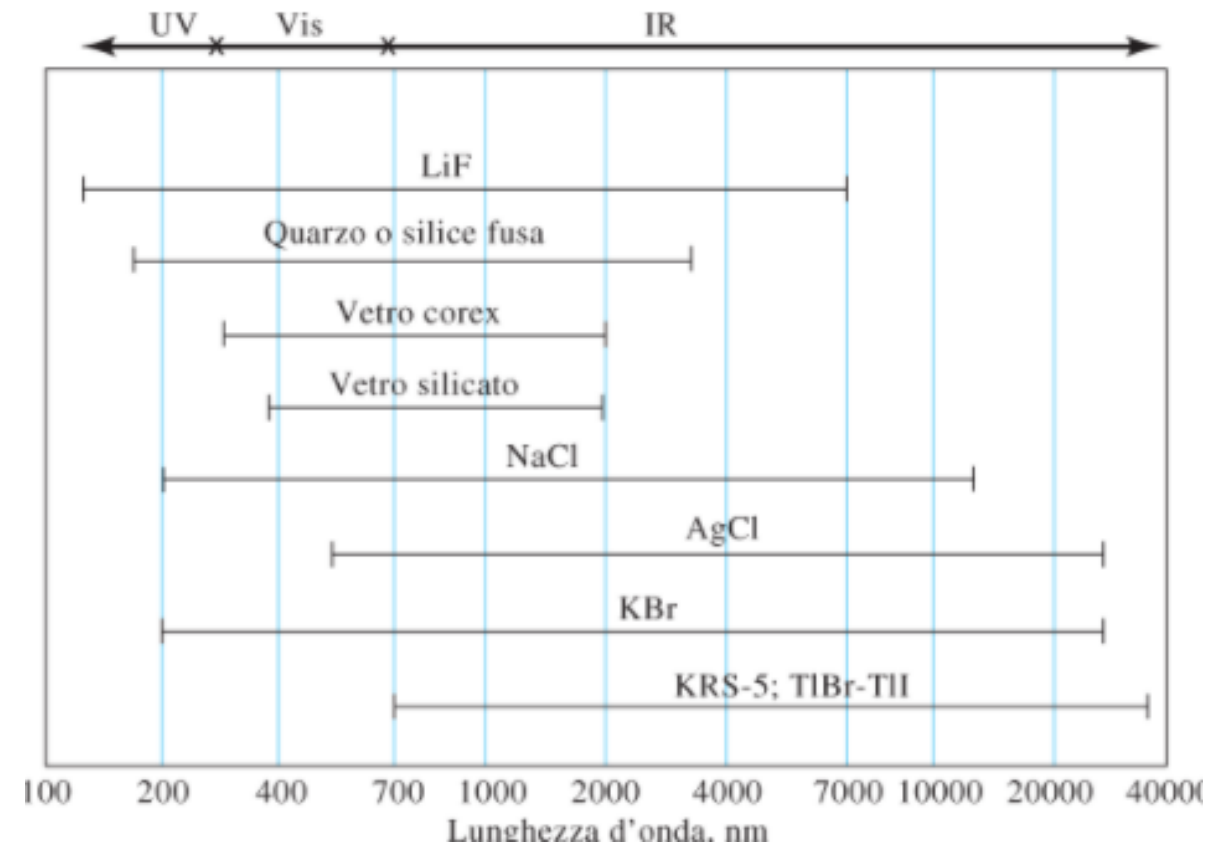
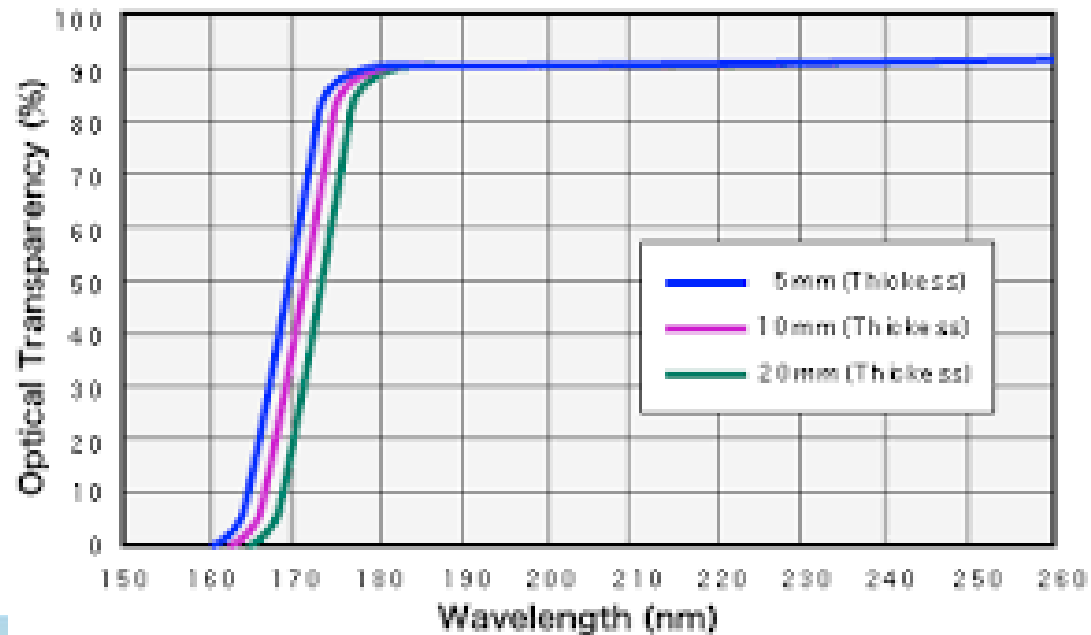
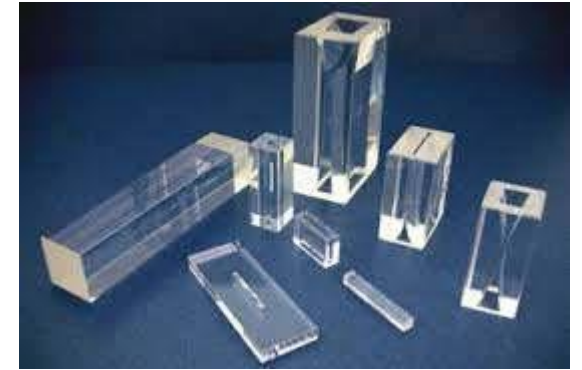
Plasma o fiamma (energia per l'emissione)

Emissione a λ caratteristica e potenza proporzionale a concentrazione



Materiali ottici – concetto di trasparenza ottica

Le celle, le finestre, le lenti, gli specchi e gli elementi dispersivi delle lunghezze d'onda in uno strumento di spettroscopia ottica **devono essere trasparenti** nella regione di lunghezze d'onda che è stata selezionata per l'analisi.



Sorgenti spettroscopiche

La sorgente → fascio di radiazione di potenza utile per rivelazione e misura

TABELLA 25-1

Sorgenti continue per la spettroscopia ottica		
Sorgente	Regione della lunghezza d'onda, nm	Tipo di spettroscopia
Lampada ad arco di xenon	250-600	Fluorescenza molecolare
Lampade ad H ₂ e D ₂	160-380	Assorbimento molecolare UV
Lampada a tungsteno/ alogeno	240-2500	Assorbimento molecolare UV/visibile/vicino-IR
Lampada a tungsteno	350-2200	Assorbimento molecolare visibile/vicino IRR
Sorgente di Nernst	400-20000	Assorbimento molecolare IR
Filo di nicromo	750-20000	Assorbimento molecolare IR
Globar	1200-40000	Assorbimento molecolare IR

La radiazione elettromagnetica emessa dalla sorgente deve essere stabile (come λ e P)

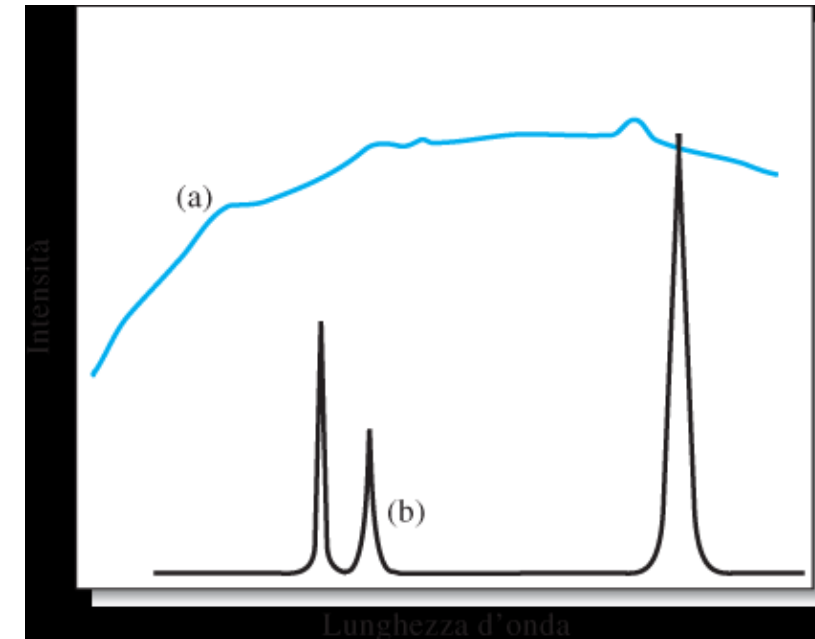
Sorgenti continue

Emettono radiazioni la cui intensità varia poco con la lunghezza d'onda

Radiazione ininterrotta nel tempo

Sorgenti a righe

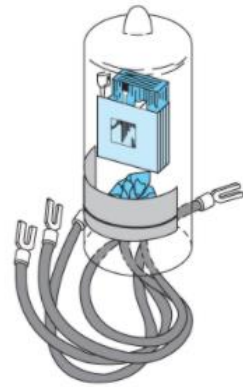
emettono un numero limitato di righe spettrali con intervallo di lunghezza d'onda molto ristretto



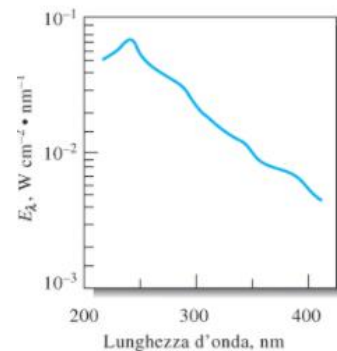
Sorgenti continue nella regione ultravioletto/visibile

Le lampade al deuterio usate per fornire una radiazione continua nella regione UV.

tubo cilindrico contenente deuterio a bassa pressione, con una finestra di quarzo dalla quale fuoriesce la radiazione.



(a)

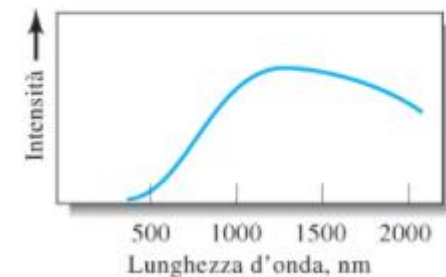


Lampada a filamento di tungsteno

funzionano ad una temperatura di circa 2900 K, che produce una radiazione utile fra 350 e 2200 nm.



(a)



(a)

Selettori della lunghezza d'onda

Gli strumenti spettroscopici nelle regioni UV e visibile normalmente possiedono uno o più dispositivi per **limitare la radiazione (assorbita o emessa dall'analita) da misurare a una banda stretta**

Banda stretta = incremento di selettività e sensibilità

Misure di assorbimento → bande strette limitano la deviazione dalla legge di Beer per radiazione policromatica

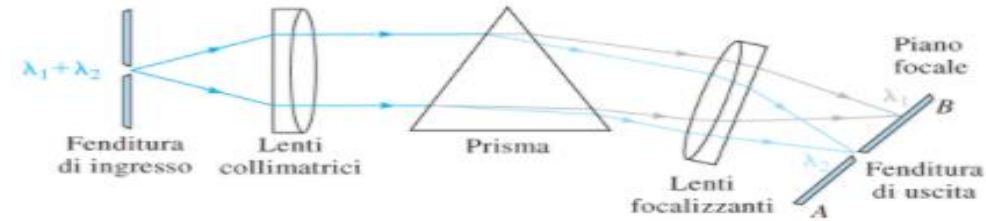
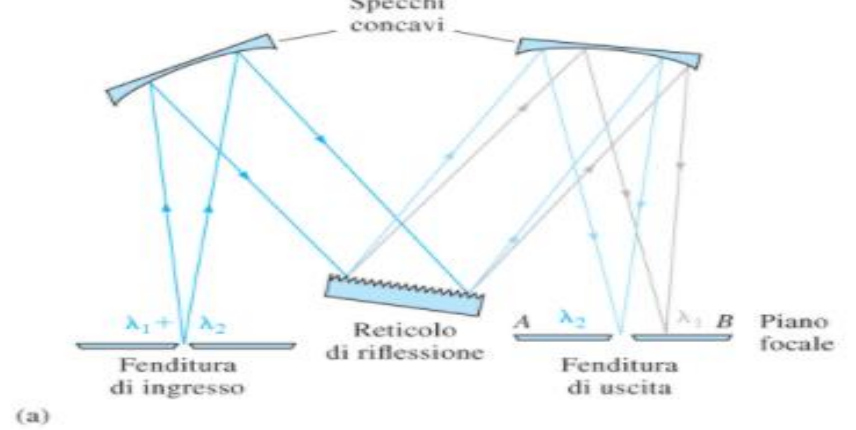
Dispositivi per isolare la lunghezza d'onda desiderata :

- **monocromatore o filtro**
- **policromatore**

MONOCROMATORI

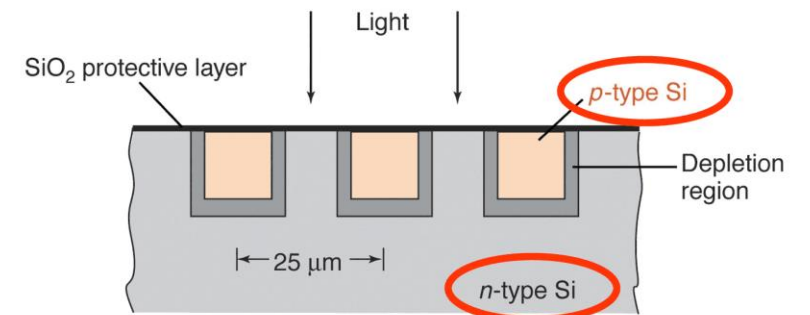
I monocromatori hanno un reticolo di diffrazione per disperdere la radiazione nelle lunghezze d'onda che la compongono

Ruotando il reticolo, le diverse lunghezze d'onda possono essere fatte passare attraverso la fenditura di uscita



Rivelatore a serie di fotodiodi

Diversamente dai spettrofotometri convenzionali, a scansione lenta e progressiva, quelli a serie di fotodiodi registrano lo spettro completo in una frazione di secondo



(a) Barre di silicio di tipo p sono poste su un supporto di silicio di tipo n, creando una serie di diodi a giunzione p-n

POLICROMATORI

I policromatori hanno un reticolo di diffrazione per disperdere radiazione nelle lunghezze d'onda che la compongono.

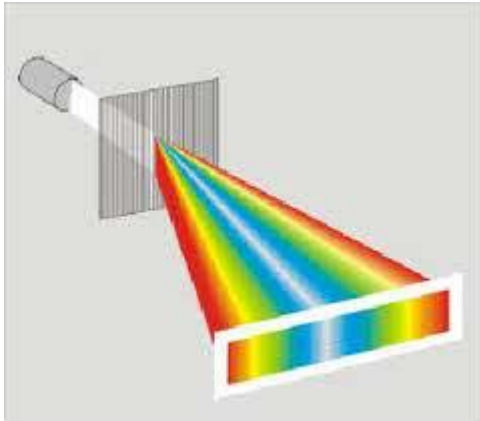
contiene diverse fenditure di uscita, in modo tale da poter isolare simultaneamente varie bande di lunghezze d'onda che colpiscono un rivelatore multi-lunghezze d'onda (es. DAD)

RETICOLO DI DIFFRAZIONE

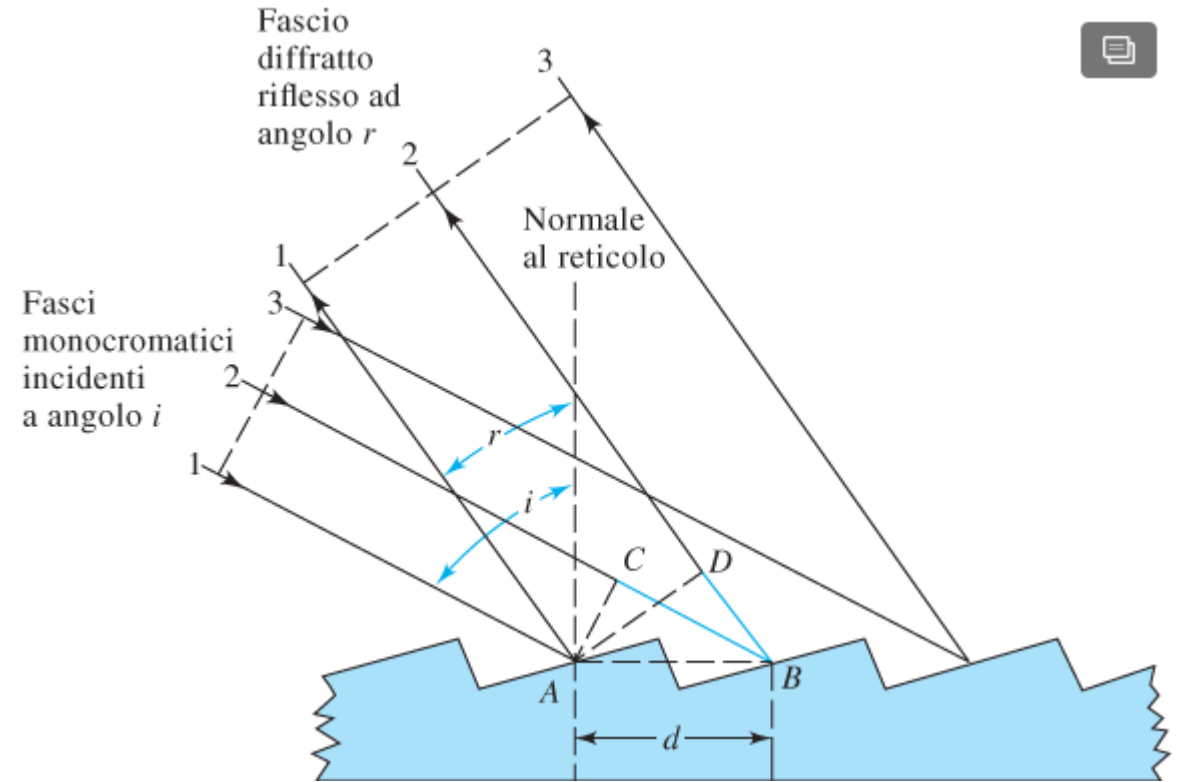
RETICOLO consiste di una superficie dura otticamente piana e levigata con elevato numero di solchi paralleli e strettamente spaziati

reticolo per UV/VIS contiene tipicamente da 1200 e 2400 solchi/mm

diffrazione altamente efficiente della radiazione



monocromatore con reticolo a gradini genera una dispersione lineare della radiazione lungo il piano focale



MONOCROMATORE

L'ampiezza di banda di un monocromatore dipende da:

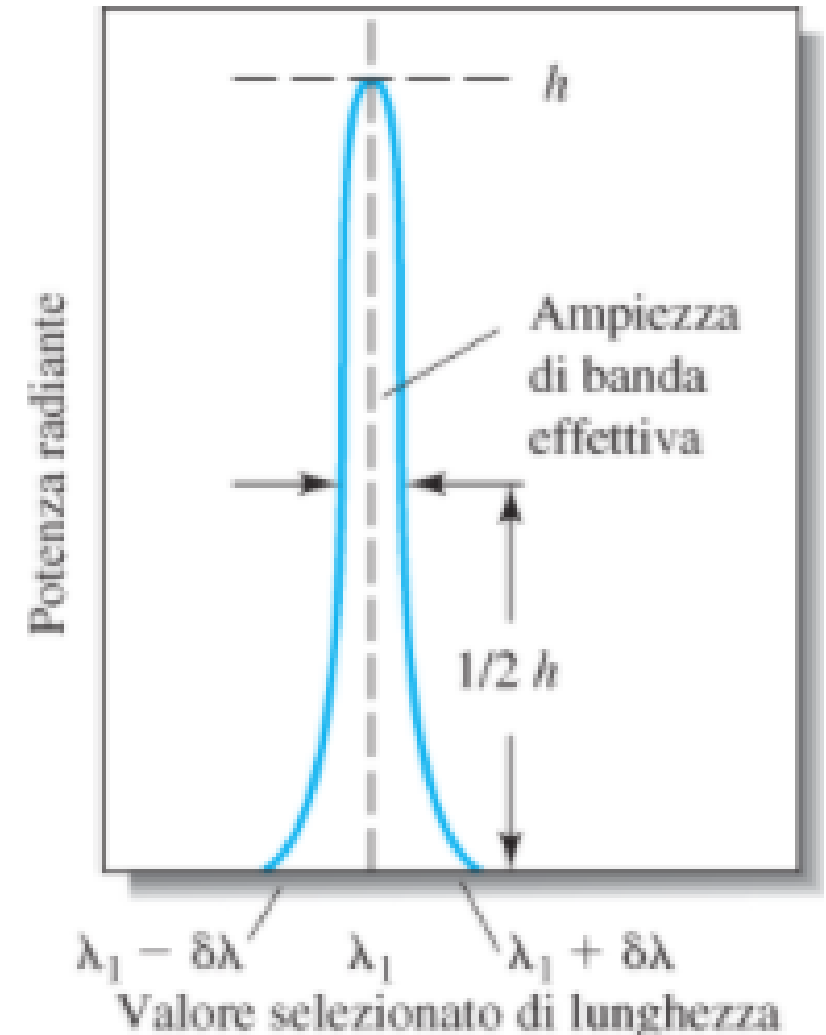
dimensioni e dalla qualità dell'elemento dispersivo,

larghezza della fenditura

lunghezza focale del monocromatore

AMPIEZZA DI BANDA

Intervallo in nm della lunghezza d'onda selezionata varia da 1 a 20 nm



Filtri di radiazione

I filtri bloccano tutte le lunghezze d'onda ad eccezione di una banda ristretta di radiazione, da una sorgente continua.

- **filtri ad interferenza**
- **filtri ad assorbimento.**

filtri ad interferenza

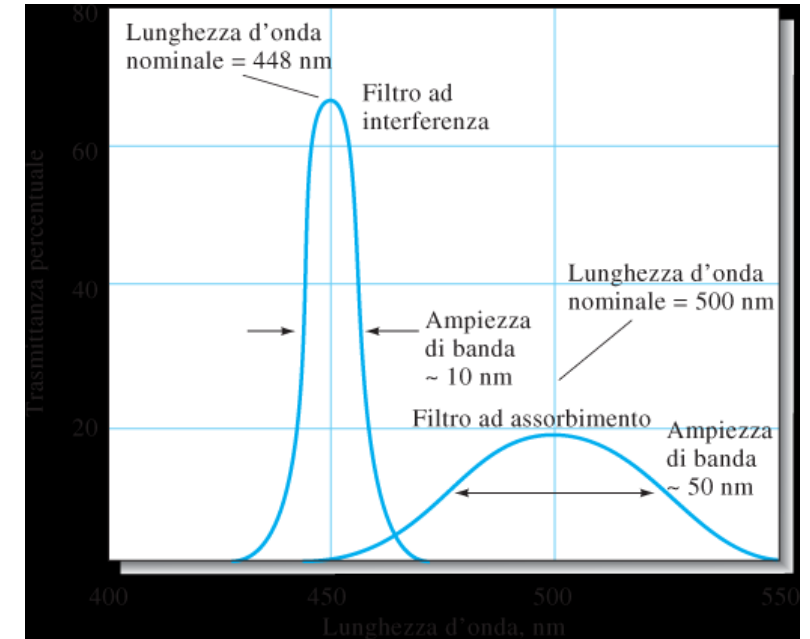
trasmettono una percentuale di radiazione molto grande

Banda più stretta

filtri di assorbimento

trasmettono una percentuale di radiazione piccola

Banda più larga



Rivelazione e misura dell'energia radiante

Le informazioni spettroscopiche analiticamente utili devono contenere una quantità di segnale proporzionale alla quantità di materia che la ha prodotta.

La potenza radiante trasmessa, fluorescente, o emessa deve essere rivelata in qualche modo e convertita in una quantità misurabile.

Il rivelatore

L'informazione di interesse viene codificata e trattata come un segnale elettrico da un **trasduttore di radiazioni**

Perché trasduttore?

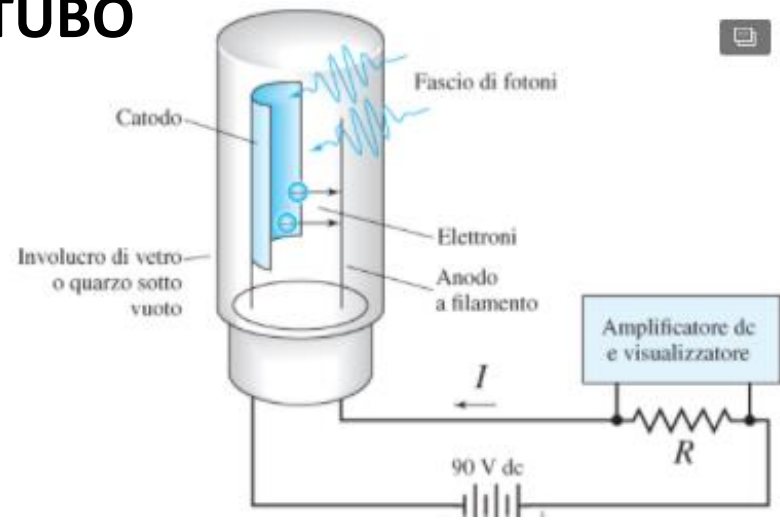
Converte un segnale ottico (fotoni) in un segnale elettrico

TABELLA 25-2

Rivelatori comuni per la spettroscopia di assorbimento

Tipo	Intervallo di lunghezze d'onda, nm
Rivelatori fotonici	
Fototubi	150–1000
Tubi fotomoltiplicatori	150–1000
Fotodiodi al silicio	350–1100
Celle fotoconduttrici	1000–50000
Rivelatori termici	
Termocoppie	600–20000
Bolometri	600–20000
Celle pneumatiche	600–40000
Celle piroelettriche	1000–20000

FOTOTUBO



La risposta è basata sull'effetto fotoelettrico

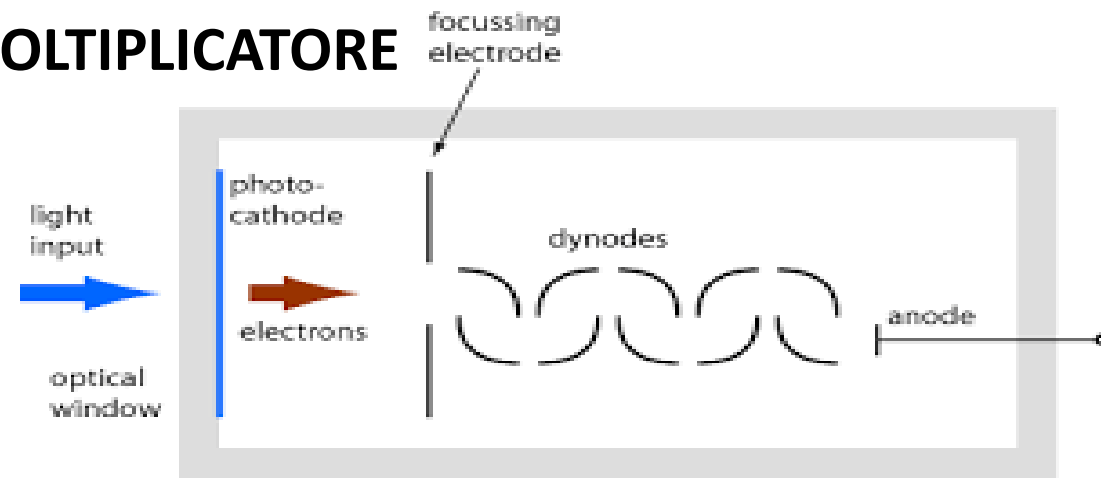
fotocatodo e anodo a filamento saldati in un contenitore trasparente di vetro o di quarzo.

La superficie del catodo supporta uno strato di materiale fotoemissivo (**emette elettroni quando è irradiato**)

Applicando un potenziale tra gli elettrodi, i **fotoelettroni** emessi sono attratti dall'anodo a filamento carico positivamente (**fotocorrente**)

FOTOCORRENTE PROPORZIONALE AL FASCIO DI FOTONI

FOTOMOLTIPLICATORE



Simile al fototubo

Amplificazione → sensibilità maggiore

Superficie catodica (emette elettroni per esposizione a radiazione)

Ha una serie di DINODI

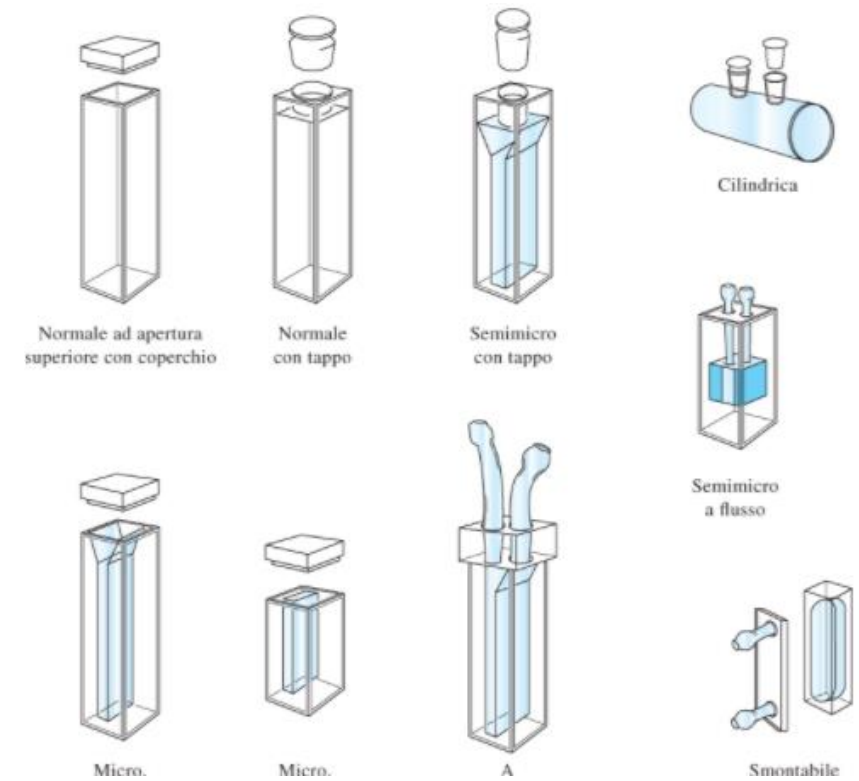
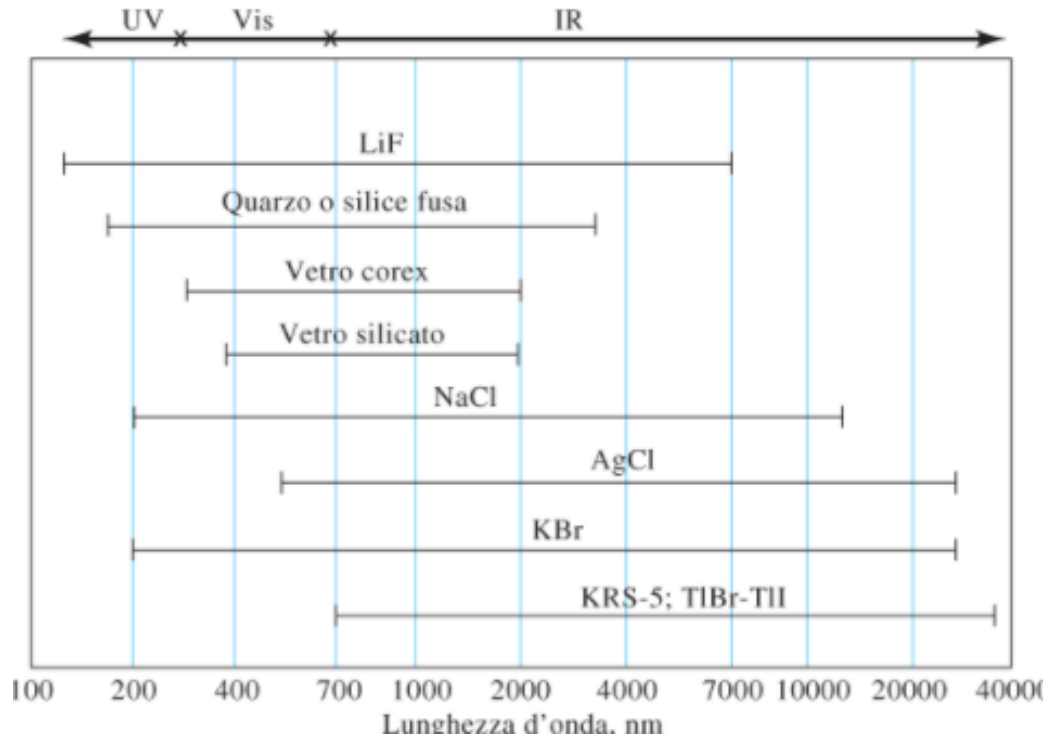
Gli elettroni emessi dal catodo vengono accelerati verso il primo dinodo.

Ciascun fotoelettrone che colpisce la superficie del dinodo produce elettroni secondari, che vengono accelerati al dinodo 2, da qui dinodo 3 Etc fino all'anodo che genera fotocorrente

Contenitori per il campione

CUVETTE

costruite con un materiale trasparente nella regione spettrale di interesse.



CUVETTE di plastica hanno trovato applicazione nella regione visibile. Il più comune materiale trasparente per gli studi nell'infrarosso è il cloruro di sodio cristallino.

Le migliori cellette hanno finestre che sono normali alla direzione del raggio per minimizzare le perdite dovute alla riflessione. La lunghezza di celletta più comune per gli studi nelle regioni ultravioletta e visibile è 1 cm.

SPETTROSCOPIA MOLECOLARE DI ASSORBIMENTO

La spettroscopia molecolare basata sulla radiazione ultravioletta, visibile e infrarossa è ampiamente usata per l'identificazione e la determinazione di molte specie inorganiche, organiche e biochimiche.

La spettroscopia molecolare di assorbimento nell'ultravioletto/visibile è utilizzata soprattutto per l'analisi quantitativa.

La spettroscopia di assorbimento nell'infrarosso è uno strumento potente per la determinazione della struttura di composti sia inorganici che organici.

La spettroscopia di assorbimento nell'infrarosso (combinata con tecniche di calibrazione multivariata) è alla base di strumentazione di notevole importanza nel settore alimentare (WineScan – MilkScan – OilScan)

Specie assorbenti

Assorbimento di radiazioni ultraviolette e visibili da parte di molecole è dato da:

assorbimento elettronico di una o più bande (costituite da molte linee strettamente spaziate ma discrete)

Ogni linea nasce dalla transizione di un elettrone dallo stato fondamentale ad uno dei molti stati energetici vibrazionali e rotazionali associati ad ogni stato energetico elettronico eccitato

Assorbimento da parte di composti organici (UV-VIS)

A lunghezze d'onda fra 180 e 780 nm è dovuto a:

interazioni fra i fotoni e elettroni che partecipano direttamente alla formazione del legame

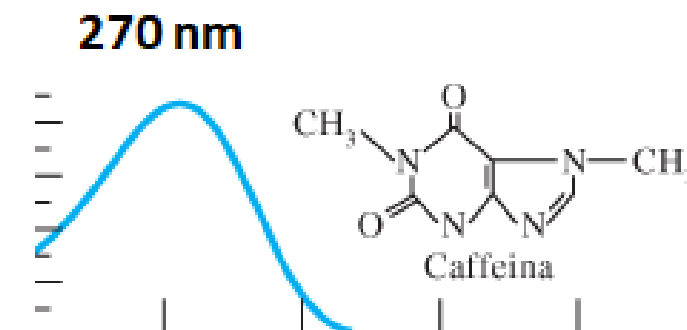
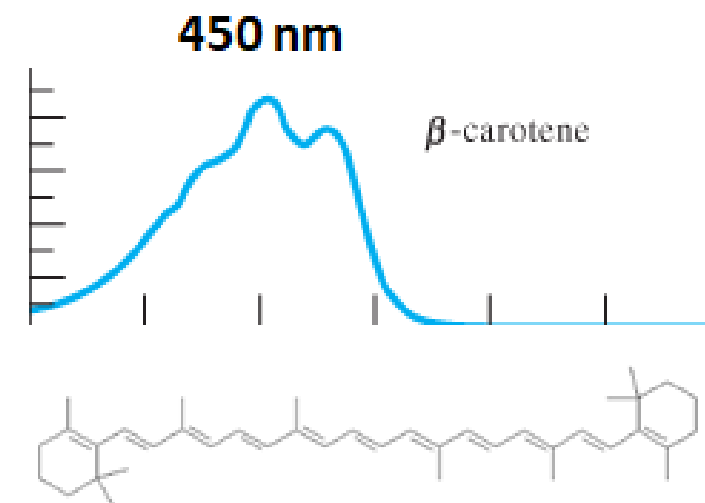
elettroni orbitali esterni di atomi come ossigeno, zolfo, azoto ed alogeni

ESEMPIO: elettroni coinvolti in legami doppi e tripli di molecole organiche sono legati debolmente quindi facilmente eccitati dalla radiazione → specie con legami insaturi generalmente mostrano picchi di assorbimento utili.

Gruppi funzionali organici **insaturi** che assorbono nelle regioni ultravioletta e visibile sono noti come **cromofori**

TABELLA 26-1

Caratteristiche di assorbimento di alcuni comuni cromofori organici				
Cromoforo	Esempio	Solvente	λ_{\max} , nm	ϵ_{\max}
Alchene	$C_6H_{13}CH=CH_2$	<i>n</i> -Eptano	177	13000
Alchene coniugato	$CH_2=CHCH=CH_2$	<i>n</i> -Eptano	217	21000
Alchino	$C_5H_{11}C\equiv C-CH_3$	<i>n</i> -Eptano	178	10000
			196	2000
			225	160
Carbonile	$\begin{array}{c} O \\ \\ CH_3CCH_3 \end{array}$	<i>n</i> -Esano	186	1000
			280	16
Carbossile	$\begin{array}{c} O \\ \\ CH_3COH \end{array}$	Etanolo	180	Grande
			293	12
Ammide	$\begin{array}{c} O \\ \\ CH_3CNH_2 \end{array}$	Acqua	204	41
			214	60
Azo	$CH_3N=NCH_3$	Etanolo	339	5
Nitro	CH_3NO_2	Isoottano	280	22
Nitroso	C_4H_9NO	Etere etilico	300	100
			665	20
Nitrato	$C_2H_5ONO_2$	Diossano	270	12
Aromatico	Benzene	<i>n</i> -Esano	204	7900
			256	200



Applicazioni quantitative

Ampia applicabilità: specie inorganiche, organiche e biochimiche assorbono radiazione visibile o ultravioletta
- specie non assorbenti possono essere determinate dopo conversione chimica a derivatizzazione con cromofori

Sensibilità: I limiti di rilevabilità tipici per la spettroscopia di assorbimento variano da 10^{-4} a 10^{-5} M. Questo intervallo può spesso essere esteso a 10^{-6} o anche 10^{-7} M con alcune modifiche procedurali.

Selettività: da moderata ad alta nei casi dove è possibile trovare una lunghezza d'onda alla quale soltanto l'analita assorbe e ciò rende le separazioni preliminari non necessarie (dipende da matrice)

Buona accuratezza: errori relativi in concentrazione incontrati con una tipica procedura spettrofotometrica o fotometrica usando la radiazione ultravioletta e visibile giacciono nell'intervallo dall'1% al 5%

Facilità e convenienza: misure spettrofotometriche e fotometriche sono facilmente e rapidamente eseguite

PROCEDURA

Selezione della lunghezza d'onda (come si individua?)

→ Per la sensibilità massima, le misure di assorbanza spettrofotometriche sono eseguite ad una lunghezza d'onda corrispondente al picco di massimo assorbimento (quale è? Che prova preliminare deve essere condotta?)

Variabili che influenzano l'assorbanza (quali sono/come individuarle/limitarle – cfr deviazioni «reali/strumentali/chimiche»)

Variabili comuni che influenzano lo spettro di assorbimento di una sostanza includono il tipo di solvente, il pH della soluzione, la temperatura, l'alta concentrazione di elettrolita e la presenza di sostanze interferenti.

Determinazione della relazione fra assorbanza e concentrazione (come si determina?)

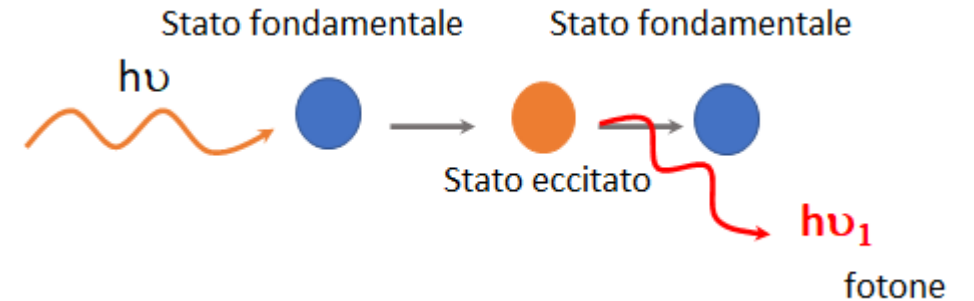
Curva di calibrazione (lineare – legge di Lambert-Beer)

Metodo dell'aggiunta standard (come si esegue? Che vantaggi offre rispetto a curva di calibrazione?)

Minimizza interazioni spurie della matrice

Spettroscopia di fluorescenza molecolare

La fluorescenza è un processo di fotoluminescenza nel quale gli atomi o le molecole vengono eccitate dall'assorbimento di un fascio di radiazione elettromagnetica



Le specie eccitate poi rilassano allo stato fondamentale → eccesso di energia ceduto come fotoni

Una delle particolarità più attraenti della fluorescenza molecolare è la sua sensibilità intrinseca, che spesso è da uno a tre ordini di grandezza maggiore di quella della spettroscopia di assorbimento.

Altro vantaggio dei metodi di fotoluminescenza è la linearità della risposta in un esteso intervallo di concentrazioni, che è significativamente più ampio di quello dei metodi di assorbimento.

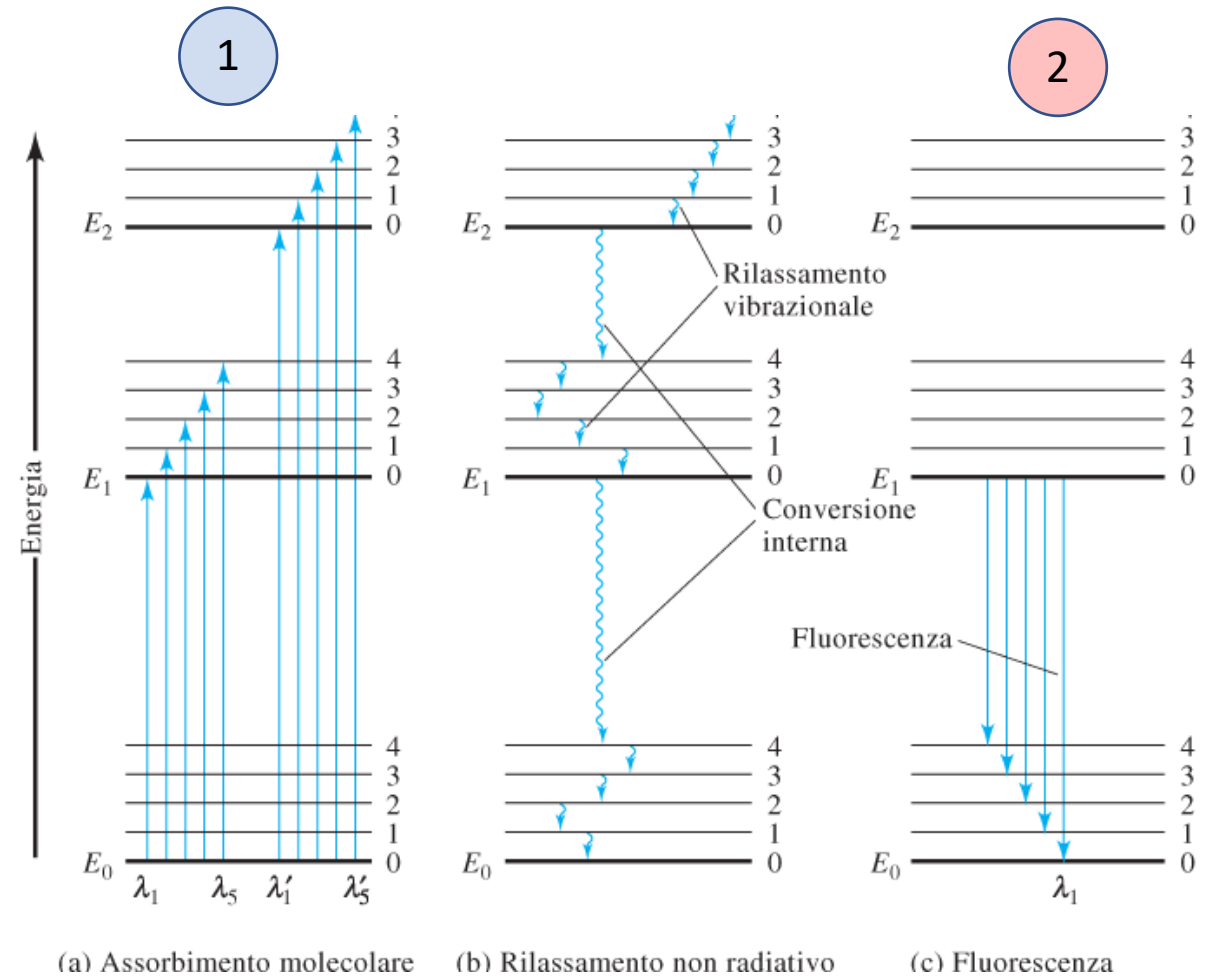
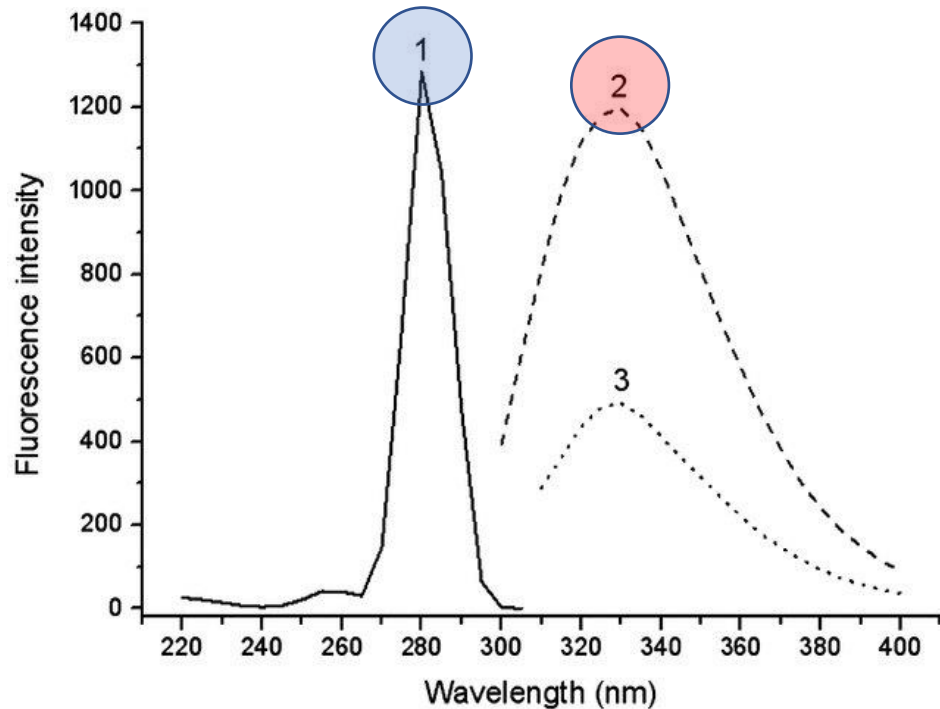
Tuttavia, i metodi di fluorescenza sono di applicabilità più ristretta di quelli di assorbimento a causa del numero relativamente limitato dei sistemi chimici che mostrano una apprezzabile fluorescenza.

TEORIA DELLA FLUORESCENZA MOLECOLARE

La fluorescenza molecolare viene misurata eccitando il campione alla lunghezza d'onda di assorbimento, chiamata anche lunghezza d'onda di eccitazione, e misurando l'emissione ad una lunghezza d'onda maggiore, chiamata lunghezza d'onda di emissione o di fluorescenza.

L'emissione di fluorescenza termina in $< 10^{-5}$ s

Eccitazione ed emissione della LECITINA



Specie fluorescenti e rendimento quantico

la fluorescenza è radiazione elettromagnetica emessa da una molecola allo stato eccitato per tornare allo stato fondamentale

→ tutte le molecole assorbenti **potenzialmente** possono fluorescere ma la maggior parte dei composti non fluoresce → la propria struttura prevede cammini per i quali il rilassamento può avvenire ad una velocità maggiore dell'emissione fluorescente

Rendimento quantico della fluorescenza molecolare è il rapporto tra numero di molecole che fluoresce e le molecole eccitate totali → ovvero il rapporto dei fotoni emessi rispetto ai fotoni assorbiti

→ molecole **altamente fluorescenti** hanno efficienze quantiche circa uno

Le molecole **non fluorescenti** hanno efficienza che tende a zero

Relazione tra fluorescenza e struttura

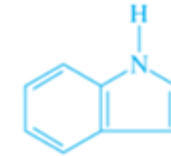
Anelli aromatici → emissione di fluorescenza molecolare più intensa e più utile

Composti carbonilici alifatici ed aliciclici, strutture aventi doppi legami altamente coniugati → fluorescenza

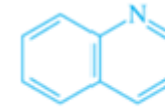
Fluorescenza e struttura

Strutture che fluorescono:

- Anelli aromatici non sostituiti (efficienza quantica aumenta con il numero di anelli e il loro grado di condensazione)
- Anelli aromatici sostituiti (la sostituzione causa spostamenti nella lunghezza d'onda dei massimi di assorbimento e cambiamenti nei picchi di fluorescenza)
- Composti carbonilici alifatici ed aliciclici, con doppi legami altamente coniugati possono fluorescere
- Strutture ad anelli condensati contenenti eterociclici semplici



indolo



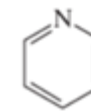
chinolina



isochinolina

Strutture che non fluorescono:

Eterocicli semplici, come la piridina, il furano, il tiofene ed il pirrolo



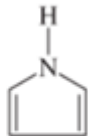
piridina



furano



tiofene

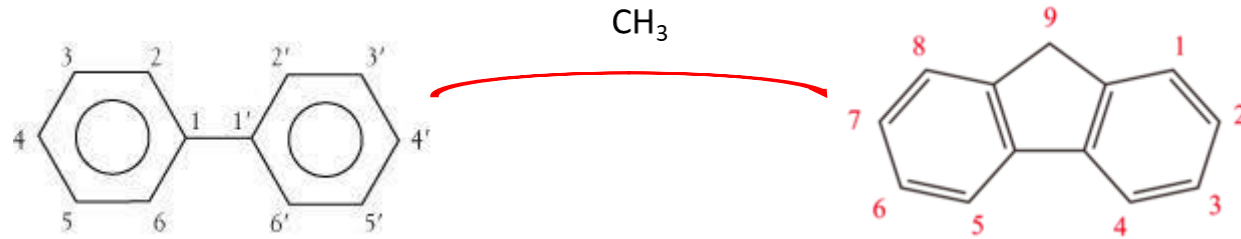


pirrolo

L'effetto della rigidità strutturale

La fluorescenza è collegata alla **rigidità** della molecola

Esempio: l'efficienza quantica del **bifenile** è di circa 0,2 mentre quella del **fluorene** è quasi 1,0



Questa rigidità abbassa la velocità di rilassamento non radiativo al punto in cui il rilassamento per fluorescenza ha tempo sufficiente per avvenire.

SPETTROSCOPIA ATOMICA

Permette determinazione qualitativa e quantitativa di più di 70 elementi intervallo ppm-ppb

I metodi di spettroscopia atomica sono rapidi, convenienti e solitamente di elevata selettività.

Spettrometria ottica

Può essere eseguita in fase gas dove atomi o ioni sono ben separati e non aggregati.

FASE 1: ATOMIZZAZIONE: il campione viene volatilizzato e decomposto in modo da produrre atomi e ioni in fase gassosa

L'efficienza e la riproducibilità della fase di atomizzazione possono avere grande influenza sulla sensibilità, precisione, e accuratezza del metodo (fase critica della spettroscopia atomica)

Metodi per atomizzazione:

- Plasmi ad accoppiamento induttivo
 - Fiamma
 - Atomizzatori termoelettrici
- } **Emissione ottica**
- } **spettrometria di assorbimento atomico (AA)**

SPETTRI DI EMISSIONE

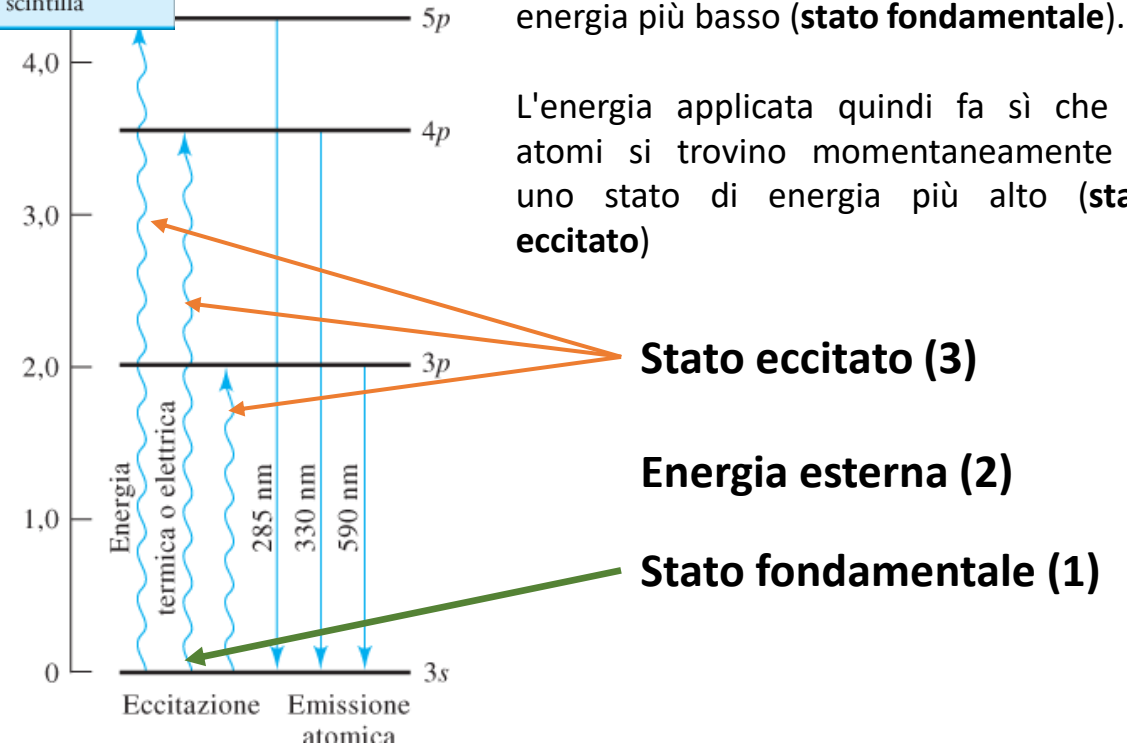
TABELLA 28-1

Classificazione dei metodi di spettroscopia atomica			
Metodo di atomizzazione	Temperatura tipica di atomizzazione, °C	Tipi di spettroscopia	Nome comune ed abbreviazione
Plasma ad accoppiamento induttivo	6000–8000	Emissione	Spettroscopia di emissione atomica in plasma ad accoppiamento induttivo, ICP-AES
		Massa	Spettrometria di massa con plasma ad accoppiamento induttivo, ICP-MS (si veda Capitolo 29)
Fiamma	1700–3150	Assorbimento	Spettroscopia di assorbimento atomico, AAS
		Emissione	Spettroscopia di emissione atomica, AES
		Fluorescenza	Spettroscopia di fluorescenza atomica, AFS
Elettrotermico	1200–3000	Assorbimento	AAS elettrotermica
		Fluorescenza	AFS elettrotermica
Plasma di argon a corrente diretta	5000–10000	Emissione	Spettroscopia in plasma DC, DCP
Arco elettrico	3000–8000	Emissione	Spettroscopia di emissione con sorgente ad arco
Scintilla	Varia con il tempo e la posizione	Emissione	Spettroscopia di emissione con sorgente a scintilla
		Massa	Spettrometria di massa con sorgente a scintilla



Prima che la sorgente di energia esterna venga applicata, gli atomi di sodio si trovano solitamente nel loro stato di energia più basso (**stato fondamentale**).

L'energia applicata quindi fa sì che gli atomi si trovino momentaneamente in uno stato di energia più alto (**stato eccitato**).



Una volta che il campione è stato convertito negli atomi gassosi o negli ioni elementari:

- non possono esistere stati di energia vibrazionale o rotazionale (non esistono legami)
- possono esistere solo transizioni elettroniche

Gli spettri atomici (emissione/assorbimento/fluorescenza) presentano numero limitato di **righe spettrali strette**

SPETTRI DI ASSORBIMENTO

Spettroscopia di assorbimento atomico.

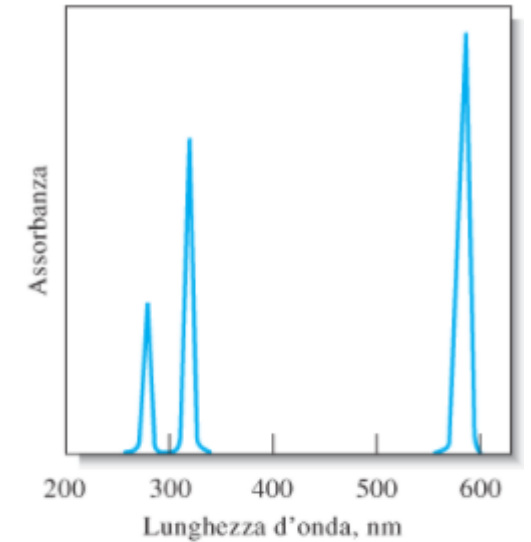
la radiazione da sorgente esterna colpisce il vapore dell'analita.

Se la radiazione della sorgente esterna è di opportuna frequenza (lunghezza d'onda) può essere assorbita dagli atomi dell'analita che passano agli stati eccitati.

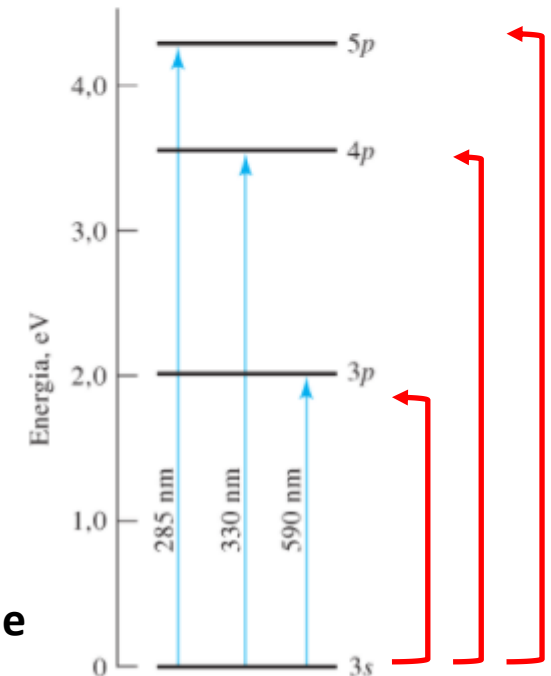
Il vapore contenente sodio assorbe le radiazioni a 285, 330 e 590 nm e eccita elettrone ai 3 livelli energetici superiori

Dopo pochi nanosecondi gli atomi eccitati ritornano al loro stato fondamentale

NOTA: Le lunghezze d'onda delle linee di **assorbimento** e di **emissione** per il sodio sono identiche.



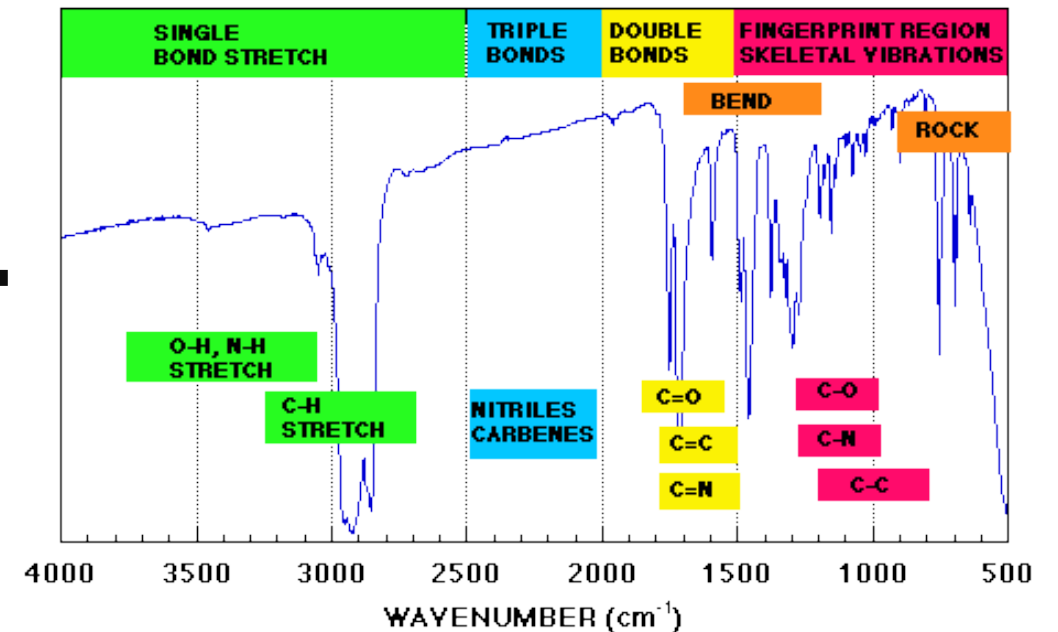
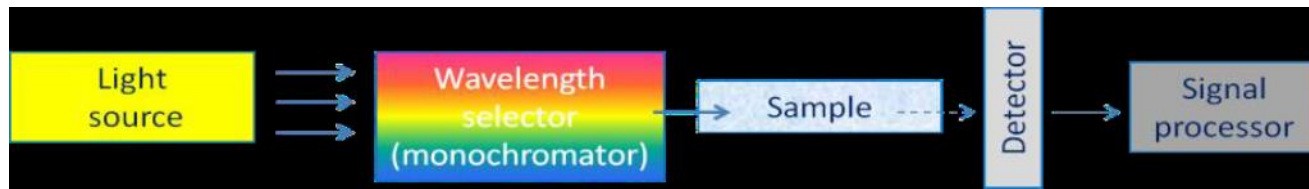
(a)



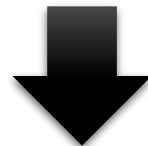
3- Transizione

2- Assorbimento

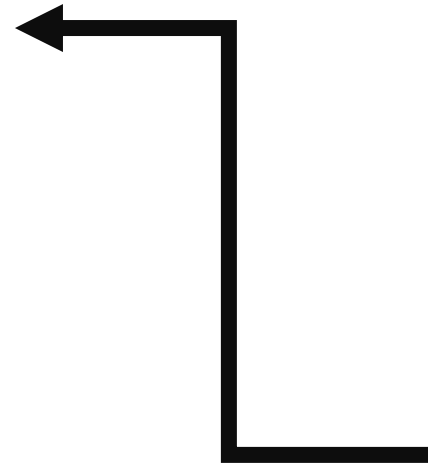
1- Stato fondamentale



Utilizzo della chemiometria per matrici complesse come quella degli alimenti!!



Si possono seguire due approcci generali: analisi multivariata **senza supervisione** e **con supervisione**.



Guidance for Industry PAT — A Framework for Innovative Pharmaceutical Development, Manufacturing, and Quality Assurance

Additional copies are available from:

*Office of Training and Communication
Division of Drug Information, HFD-240
Center for Drug Evaluation and Research
Food and Drug Administration
5600 Fishers Lane
Rockville, MD 20857
(Tel) 301-827-4573*

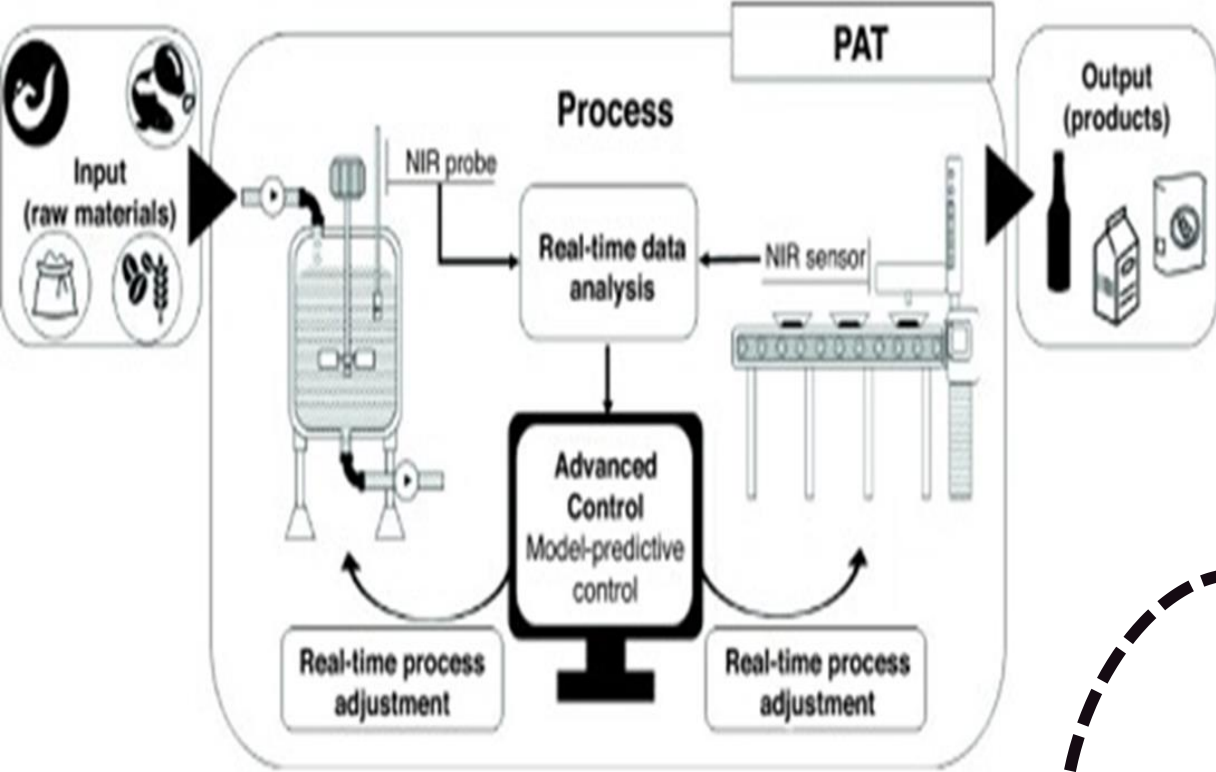
*<http://www.fda.gov/cder/guidance/index.htm>
and/or
Communications Staff, HFV-12
Center for Veterinary Medicine
Food and Drug Administration
7519 Standish Place,
Rockville, MD 20855
(Tel) 301-827-3800
<http://www.fda.gov/cvm/guidance/published.html>*

**U.S. Department of Health and Human Services
Food and Drug Administration
Center for Drug Evaluation and Research (CDER)
Center for Veterinary Medicine (CVM)
Office of Regulatory Affairs (ORA)
September 2004
Pharmaceutical CGMPs**

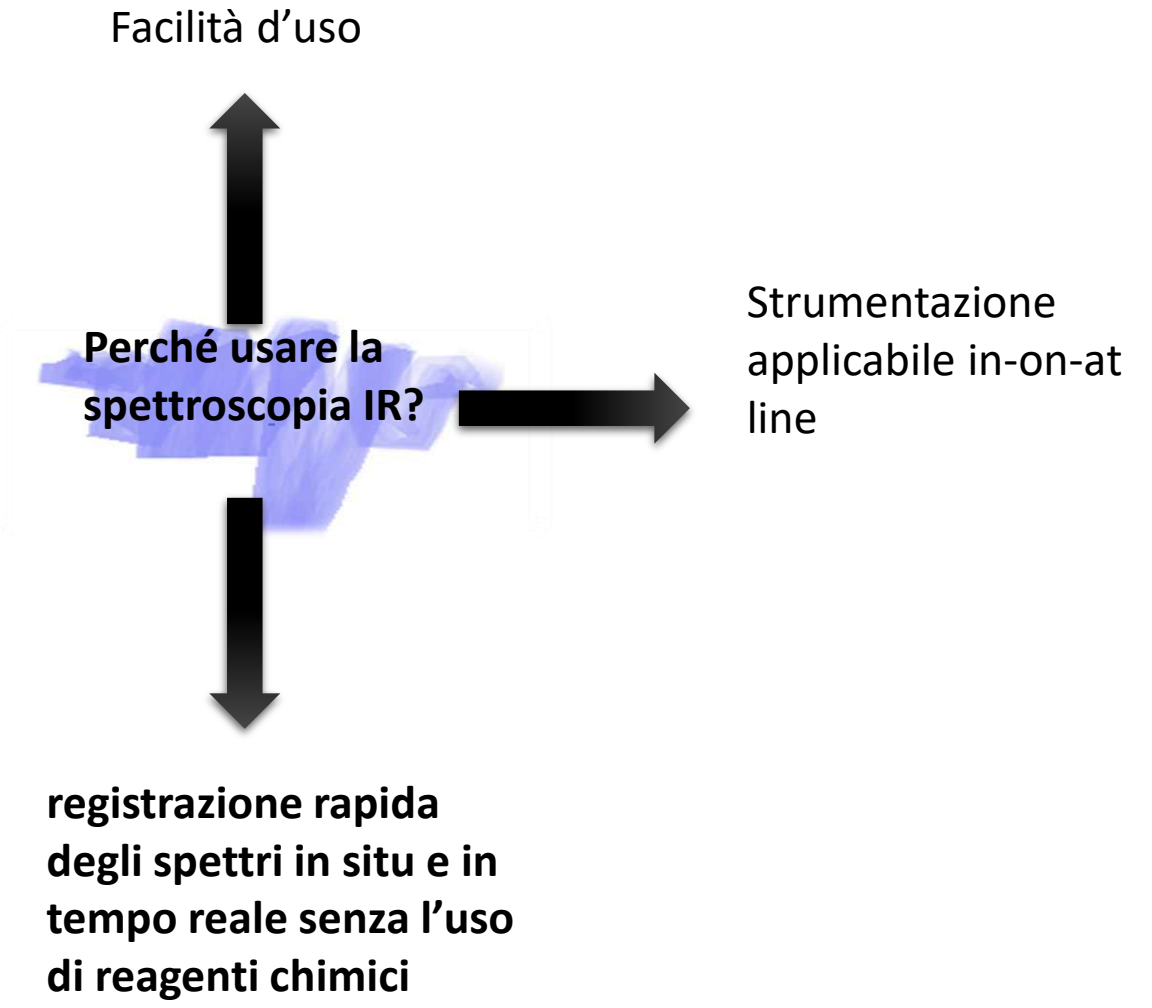
Il guadagno in termini di qualità, sicurezza e/o efficienza variano a seconda del prodotto, ed è dato dalla:

- Riduzione dei tempi di ciclo della produzione mediante misurazioni e controlli on-, in- e/o at-line
- Prevenzione di scarti e rilavorazioni
- Continua assicurazione della qualità in tempo reale
- Incremento del livello di automazione per migliorare la sicurezza degli operatori e ridurre gli errori umani
- Miglioramento dell'utilizzo di energia e materie prime e aumento della capacità produttiva
- Facilitare la continuità del processo per migliorare l'efficienza e gestire la variabilità

(da [FDA](#))



In particolare la NIR





Smart



Allergeni !!

Apprezzati
nel globo

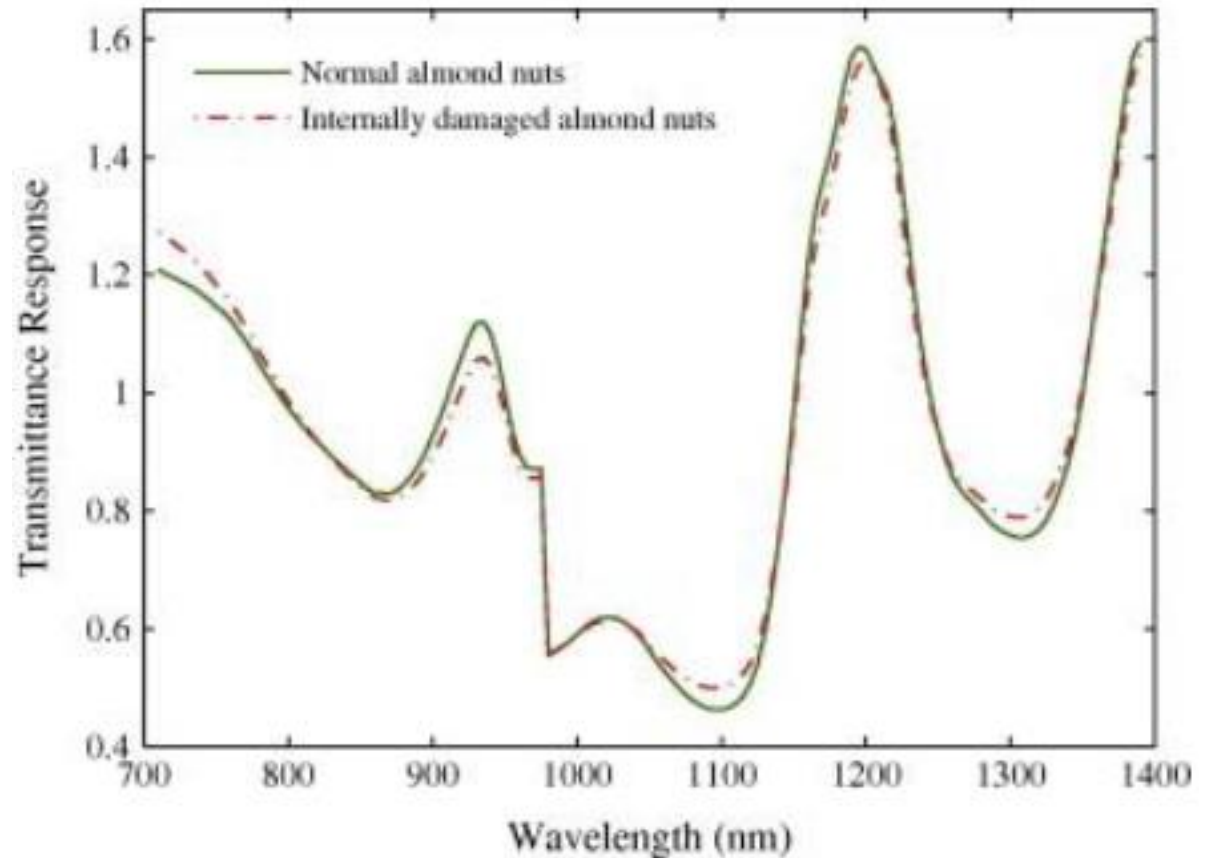
Specific Food Allergy	Prevalence, % (95% CI)
	All Ages
Any food allergy	10.8 (10.4-11.1)
Peanut	1.8 (1.7-1.9)
Tree nut	1.2 (1.1-1.3)
Walnut	0.6 (0.6-0.7)
Almond	0.7 (0.6-0.8)
Hazelnut	0.6 (0.5-0.7)
Pecan	0.5 (0.5-0.6)
Cashew	0.5 (0.5-0.6)
Pistachio	0.4 (0.3-0.5)
Other tree nut	0.2 (0.1-0.2)

(GUPTA, Ruchi S et al.,
[2019](#))

Internal damage inspection of almond nuts using optimal near-infrared waveband selection technique

Songyot Nakariyakul  

- Percentuale di mandorle normali e danneggiate internamente, correttamente classificate, varia dall'83 al 94%.
- L'autore rivendica l'utilità del suo modello per uso commerciale visto che richiede solo poche bande d'onda (760; 920; 935 e 970 nm).



Full Length Research Paper

Nondestructive detection of moldy chestnut based on near infrared spectroscopy

J. Liu¹, X. Y. Li^{1*}, P. W. Li², W. Wang¹, J. Zhang^{1,3}, R. Zhang¹ and P. Liu¹

¹College of Engineering, Huazhong Agricultural University, Wuhan, 430070, China.

²Oil Crops Research Institute, Chinese Academy of Agricultural Sciences, Wuhan, 430062, China.

³Key Laboratory for Highway Construction Technology and Equipment of Ministry of Education, Chang'an University, Xi'an, 710064, China.

Accepted 26 October, 2010

- È stata utilizzata una raccolta di 109 castagne gravemente ammuffite, non ammuffite e moderatamente ammuffite.
- La migliore regione spettrale per l'identificazione della muffa è tra 1818-2085 nm.
- Il tasso di classificazioni corrette è: 100, 93 e 100% rispettivamente per i campioni non ammuffiti, leggermente ammuffiti e gravemente ammuffiti.



Figure 1. The photographs of three group samples: a) sound chestnut sample, b) slightly moldy chestnut sample and c) severely moldy chestnut sample.

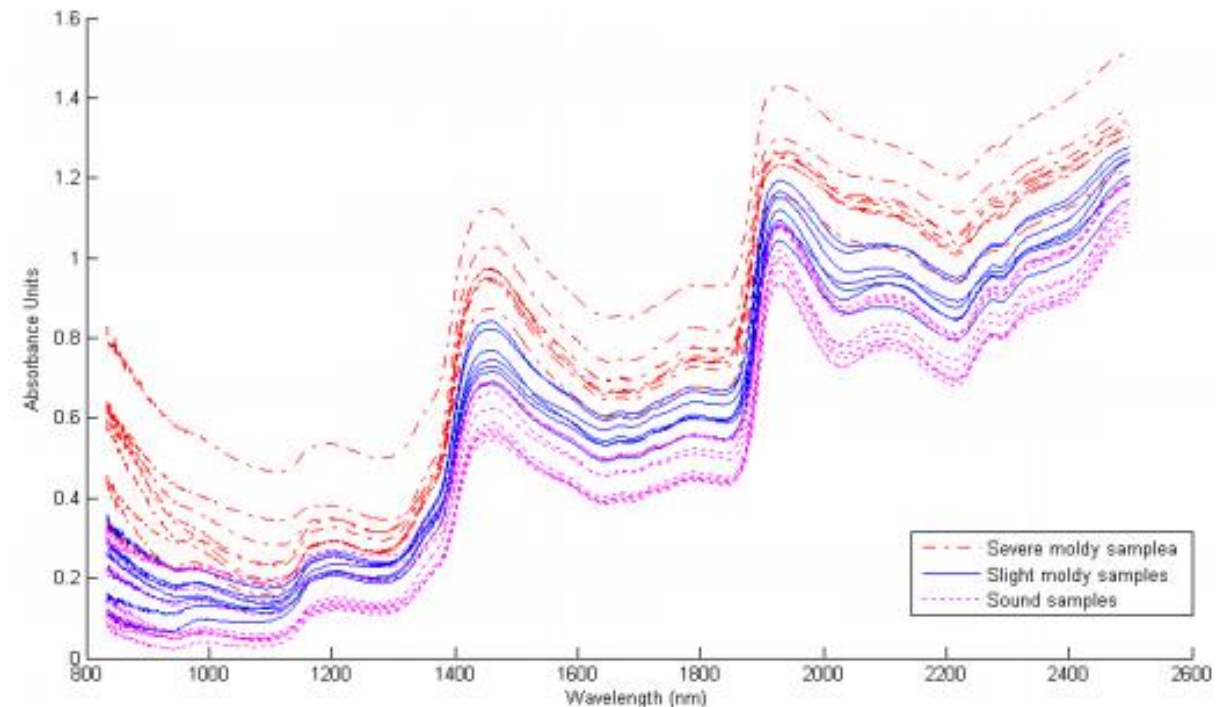
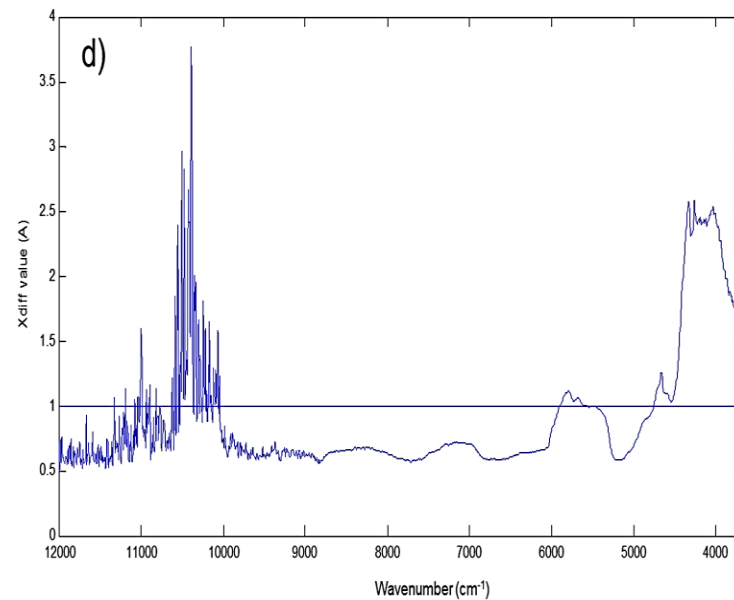
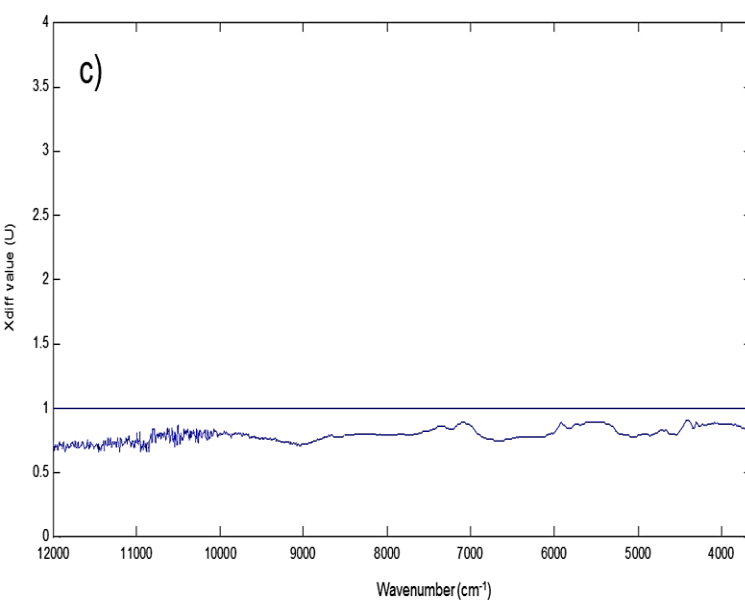
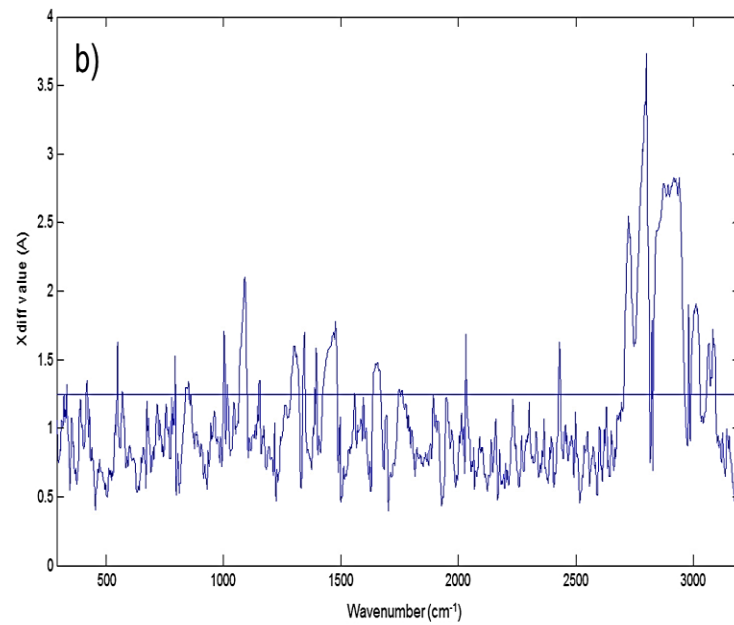
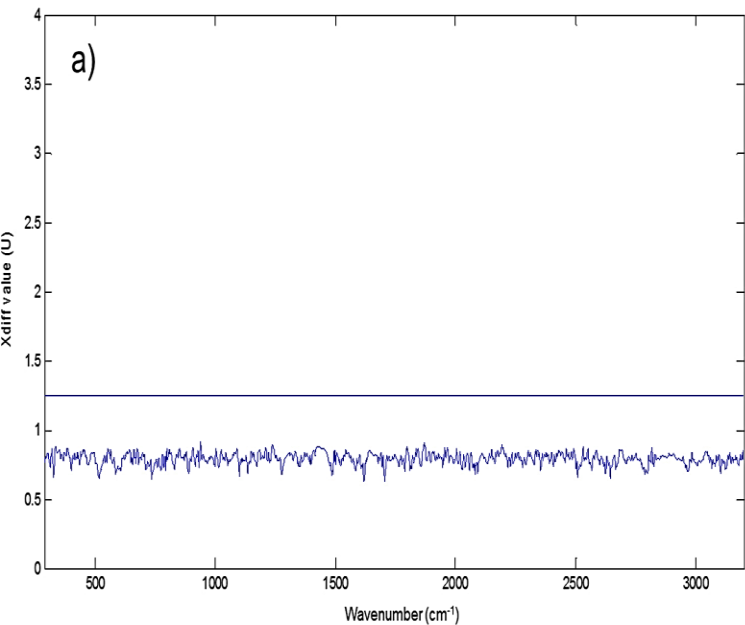


Figure 2. The typical NIR spectral of three kinds of samples.



FT-Raman and NIR spectroscopy data fusion strategy for multivariate qualitative analysis of food fraud



Cristina Márquez, M. Isabel López, Itziar Ruisánchez*, M. Pilar Callao

Chemometrics, Qualimetric and Nanosensors Grup, Department of Analytical and Organic Chemistry, Rovira i Virgili University, Marcel·lí Domingo s/n, Tarragona, 43007 Spain

- I campioni sono stati classificati in due classi, non adulterati e adulterati.
- Sono state applicate strategie di fusione dei dati di medio e alto livello con una sensibilità compresa rispettivamente tra il 96-100% e l'88-100%.

Fig. 3. x_{diff} values: (a) unadulterated FT-Raman spectra, (b) adulterated FT-Raman spectra, (c) unadulterated NIR spectra and (d) adulterated NIR spectra.

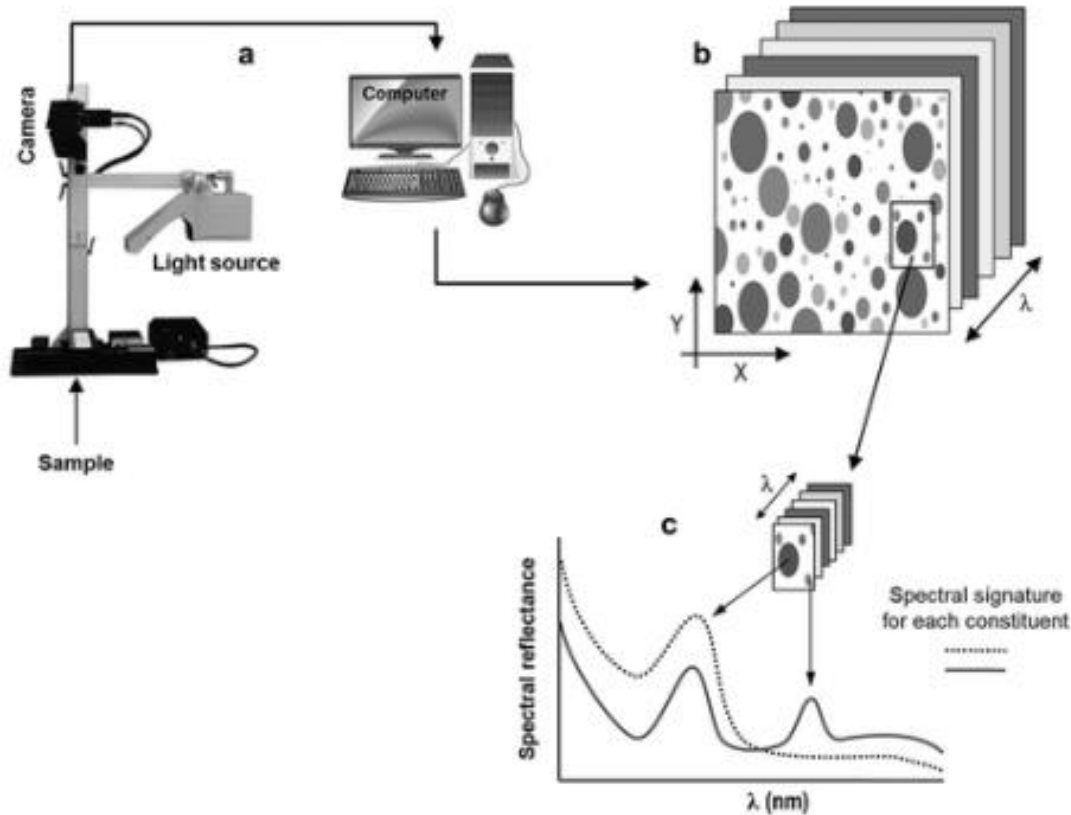
Come **ottimizzare** l'utilizzo della spettroscopia **IR** in-on line?



Implementazione tecnologica: **HIS**




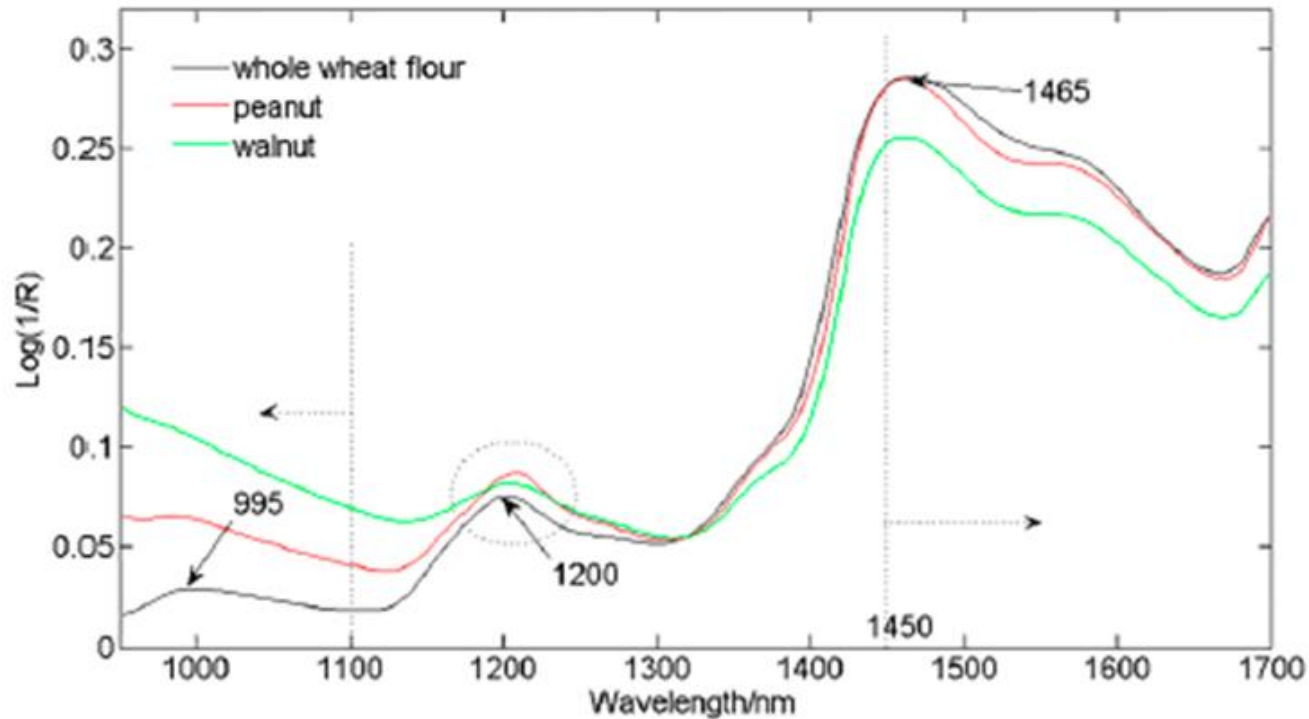
Ogni elemento dell'immagine (pixel) non è costituito da un semplice valore monocromatico, o da una terna di valori (immagini a colori RGB), ma da un insieme di valori appartenenti allo **spettro elettromagnetico**.



([Da VEJARANO, Ricardo et al., 2017](#))

Evaluation of Near-Infrared Hyperspectral Imaging for Detection of Peanut and Walnut Powders in Whole Wheat Flour

Xin Zhao ¹, Wei Wang ^{1,*} , Xinzhi Ni ², Xuan Chu ¹, Yu-Feng Li ^{3,*} and Changpo Sun ⁴



- La differenza più evidente tra i tre tipi di polveri è stata osservata nell'intervallo spettrale da 950 nm a 1100 nm.
- Altre variazioni significative dei tre profili spettrali sono state presentate al picco di assorbimento di 1200 nm e alla regione spettrale dopo 1450 nm.
- Determinazione della contaminazione con una concentrazione maggiore dello 0,5%.

Detection and quantification of peanut traces in wheat flour by near infrared hyperspectral imaging spectroscopy using principal-component analysis

Puneet Mishra,^{a*} Ana Herrero-Langreo,^b Pilar Barreiro,^a Jean Michel Roger,^b Belén Diezma,^a Nathalie Gorretta^b and Lourdes Lleó^a

La PCA applicata su immagini iperspettrali NIR (1000–2200 nm) ha consentito il rilevamento di tracce di arachidi fino a percentuali di adulterazione dello 0,01% in campioni di farina di grano tenero.

VIS/NIR spectral signature for the identification of peanut contamination of powder foods

Satyabrata Ghosh^{*1}, Teresa R. Cuadrado Domínguez¹, Belén Diezma^{*1}, Lourdes Lleó¹, Pilar Barreiro^{1*}, Teresa García Lacarra², Jean-Michel Roger³

Una banda specifica per l'identificazione delle arachidi per quanto riguarda la polvere di farina di frumento, latte scremato in polvere e cacao in polvere, è stata trovata a 1200 nm che corrisponde ad una banda di assorbimento dei lipidi.

CONCLUSIONE

Diversi strumenti emergenti e / o la combinazione di quelli esistenti, possono dare un sostanziale sviluppo alla tecnologia vibrazionale.

Si può affermare il potenziale della spettroscopia IR nel campo alimentare, con una buona presenza della NIRS per la sua insuperabile combinazione di velocità, accuratezza e semplicità.

Ottimi risultati dell'applicazione della HIS NIR per il rilevamento della contaminazione da parte delle arachidi.

ATTUALI DIFFICOLTÀ PER LA RICERCA

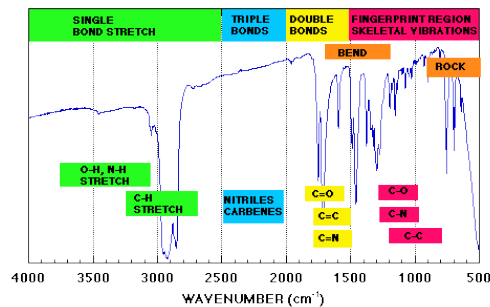
La complessità di un processo alimentare rappresenta una sfida per l'implementazione della PAT, ma il NIRS può essere sfruttato con successo in questo campo, tuttavia, la letteratura scientifica recente è ancora troppo focalizzata sugli studi condotti a livello di laboratorio e si dovrebbe spronare sempre di più l'industria alimentare ad applicare la PAT.

STRUMENTAZIONE COMMERCIALE BASATA SU IR PER APPLICAZIONI FOOD

BASATI SU DUE COMPONENTI:

1- STRUMENTAZIONE IR PER ACQUISIZIONE DI SPETTRI

2- CALIBRAZIONE MULTIVARIATA PER ESTRAPOLAZIONE VALORI PARAMETRI



CALIBRAZIONE MULTIVARIATA

- PARAMETRO 1
- PARAMETRO 2
- PARAMETRO 3
- PARAMETRO 4
- PARAMETRO 5
- PARAMETRO 6
-
-
- PARAMETRO n



WineScan™

WineScan™ è uno strumento molto affidabile in termini di accuratezza ed efficienza, da impiegare quotidianamente in cantina o laboratorio enologico.

La capacità di WineScan di elaborare più di 20 parametri chiave rende possibile prendere decisioni all'istante che permettono di migliorare i risultati a lungo termine. Sono disponibili modelli di strumento diversi per ogni applicazione che comprendono funzioni di campionamento automatico e opzione per la determinazione del colore e altri parametri chiave. Uno di questi parametri è la Sanità delle Uve (pacchetto Grape Soundness) che consente di segregare le uve all'arrivo in base alla qualità.

Olivia™

Get more oil from your olive paste and pomace

Sample type

Olive paste, olive pomace

Parameters

Fat and moisture

Technology

NIR transmittance



Vino finito

SO₂ Libera
SO₂ Totale
A420***
A520***
A620***
Acido citrico
CO₂
Densità
Etanolo
Fruttosio
Acido gluconico
Glucosio
Glucosio/fruttosio
Glicerolo
Acido lattico
Acido malico
pH
Zuccheri riducenti
Acido sorbico
Acido tartarico
Acidità totale
Polifenoli Totali (metodo Folin C)
Acidità volatile**