

说明书

一种手性化合物的检测系统

技术领域

本发明涉及一种手性化合物的检测系统。

5

背景技术

手性化合物是指分子结构相同，但构型上互为镜像的一类化合物。在医药化工领域中，互为镜像的一对手性化合物之间通常具有不同的特性，例如，沙利度胺具有 S 和 R 两种互为镜像的对映体构型，其中 R 型具有中枢镇静作用，S 型却具有强烈的致畸作用。因此，在涉及手性化合物的研发生产过程中，对映体之间的区分及含量检测是至关重要的步骤。

现有技术中，手性化合物的分析检测系统主要包括两类，即光谱类和色谱类。手性化合物的检测必须通过手性结构对手性结构的匹配来进行识别性区别。光谱法采用的是手性化合物对手性圆偏振光的识别，色谱法采用的是手性固定相对手性化合物的识别。光谱类检测系统多利用手性化合物的旋光性和圆二色性（即，分别为让偏振光发生偏转的特性和与左右圆偏振光发生不同的相互作用特性）实现，其无法检测外消旋体，且后者容易受到左右圆偏振光切换过程中所产生的线偏振光的干扰，无法检测无发色基团的分子。色谱类检测系统主要依赖于色谱柱填料对不同构型手性化合物吸附能力的不同而进行分离及含量检测，然而，色谱类系统能够应用的范围有限，常用的手性色谱柱仅能应用于一部分符合其吸附特性的手性化合物，对分子量过大、分子量过小或没有极性的化合物都无法进行检测。

另外，上述现有检测系统中，光谱类检测系统的设备较复杂，几乎不具便携性，而色谱类系统的设备需要包含流动相装置和检测装置等，也不具有便携性，因此，现有的手性化合物检测需要在实验室进行，无法实现待测样品的现场检测。

发明内容

为解决上述问题，本发明的发明人针对手性识别的特性进行了研究，发现手性识别和检测具有如下特性：具有手性特质的材料与手性化合物发生相互作用时，由于其电磁场具有的手性特质，单手性材料对不同对映异构体的手性化合物产生的相互作用具有不同的强度。不仅如此，发明人还发现，这种相互作用强度的不同可以通过材料和化合物的光学性质进行表征，并且其相互作用强度与被测手性化合物体系中对映异构体的含量比例（*ee* 值）线性相关。因此，根据手性材料与手性化合物的相互作用在光学性质上的表现即可推算出其含量比例，从而实现手性化合物的检测。

相应地，将具有手性特质的材料以及能够对该材料与手性化合物的相互作用进行测定的光谱仪组合，即可形成能够对手性化合物进行检测的检测系统。

说明书

基于上述发现，发明人提出了基于上述具有手性特质的材料的手性化合物检测系统，具体提出了如下技术方案。

作为第一种实施形态，本发明提供了一种手性化合物的检测系统，其特征在于，包括：基底材料；以及光谱仪，其中，基底材料由具有手性特质的材料构成，用于载置手性化合物的待测样品；光谱仪的光源和检测光均为非偏振光。

在上述第一种实施形态的手性化合物的检测系统中，还可以具有这样的技术特征，其中，具有手性特质的材料为具有手性结构的微纳米粉末或微纳米膜材料。

在上述第一种实施形态的手性化合物的检测系统中，还可以具有这样的技术特征，其中，具有手性特质的材料由无机材料、有机材料或有机-无机复合材料构成。

在上述第一种实施形态的手性化合物的检测系统中，还可以具有这样的技术特征，其中，无机材料为等离子体共振材料，该等离子体共振材料为金属、金属氧化物或二者的混合物，手性结构为螺旋纤维结构、花形结构、扇形结构、螺旋桨形结构中的任意一种，光谱仪为拉曼光谱仪。

在上述第一种实施形态的手性化合物的检测系统中，还可以具有这样的技术特征，其中，金属为金、银、铜、铂中的一种或几种的组合物，金属氧化物为氧化铜、氧化钛、氧化锌、氧化锡、氧化铁、氧化钴中的一种或几种的组合物。

在上述第一种实施形态的手性化合物的检测系统中，还可以具有这样的技术特征，其中，光谱仪具有：光源部，用于产生光源；样品放置部，用于放置载有样品的基底材料；检测光接收部，用于接收载有样品的基底材料被光源照射而形成的检测光并产生对应的电信号；以及光谱输出部，用于接收电信号并形成对应的特征光谱作为检测谱图。

在上述第一种实施形态的手性化合物的检测系统中，还可以具有这样的技术特征，还包括数据分析装置，与拉曼光谱仪通信连接，用于接收检测谱图并对检测谱图进行数据分析得到待测样品中的手性化合物的对映体含量比例。

作为第二种实施形态，本发明提供了另一种手性化合物的检测系统，用于对手性化合物进行定性定量以及对映体含量比例检测，其特征在于，包括：第一基底材料，用于在对手性化合物进行定性定量时作为基底材料载置手性化合物的待测样品；第二基底材料，用于在对手性化合物进行含量比例检测时作为基底材料载置待测样品；以及光谱仪，用于对载置了待测样品的第一基底材料进行检测从而得到用于进行定性定量的第一检测谱图，以及对载置了待测样品的第二基底材料进行检测从而得到用于进行对映体含量比例检测的第二检测谱图，其中，第一基底材料由不具有手性特质的材料构成，第二基底材料由具有手性特质的材料构成。

在上述第一种实施形态的手性化合物的检测系统中，还可以具有这样的技术特征，还包括：数据分析装置，具有：第一谱图存储部，用于存储多个第一标准谱图，该第一标准谱

说明书

图是采用光谱仪以及第一基底材料对手性化合物的标准品分别进行检测而得到的光谱图；第二谱图存储部，用于存储多个第二标准谱图，该第二标准谱图是采用光谱仪以及第二基底材料对手性化合物的标准品分别进行检测而得到的光谱图；谱图匹配部，用于根据第一检测谱图从第一谱图存储部中匹配出对应的第一标准谱图作为第一匹配谱图，以及根据第二检测谱图从第二谱图存储部中匹配出对应的第二标准谱图作为第二匹配谱图；以及谱图分析部，用于根据第一检测谱图及第一匹配谱图对待测样品进行定性定量分析，并根据第二检测谱图及第二匹配谱图对待测样品进行对映体含量比例分析。

发明作用与效果

10 根据本发明提供的手性化合物的检测系统，由于采用具有手性特质的材料作为基底材料与光谱仪配合使用，该具有手性特质的材料能够对手性化合物的不同对映体产生不同强度的相互作用，因此，通过光谱仪对这种作用效果进行检测即可得出对映体的含量比例从而实现手性化合物的检测。与现有技术中的手性化合物检测系统相比，本发明的检测系统具有操作简单、结果准确等优点。

15

附图说明

图 1 为本发明实施例一的检测系统的构成示意图；

图 2 是采用本发明实施例一的检测系统对 R-柠檬烯和 S-柠檬烯混合的样品进行检测的拉曼光谱图；

20 图 3 是采用本发明实施例一的检测系统对 R-柠檬烯和 S-柠檬烯的混合物进行检测得到的特征峰强度与手性分子含量百分比的线性拟合图；

图 4 是采用本发明实施例一的检测系统对 L-环己基甘氨酸和 D-环己基甘氨酸的混合物进行检测得到的特征光谱图；

25 图 5 是采用本发明实施例一的检测系统对 L-环己基甘氨酸和 D-环己基甘氨酸的混合物进行特征光谱检测得到的特征峰强度与手性对映体含量百分比的线性拟合图；

图 6 是本发明实施例三的采用花形纳米氧化钛粉末作为基底材料的检测系统对相同浓度的 N-乙酰-L-半胱氨酸和 N-乙酰-D-半胱氨酸分别进行检测得到的特征光谱图；

图 7 是本发明实施例三的采用扇形纳米银粉末作为基底材料的检测系统对相同浓度的 N-乙酰-L-半胱氨酸和 N-乙酰-D-半胱氨酸分别进行检测得到的特征光谱图；

30 图 8 是本发明实施例四的检测系统的构成示意图。

具体实施方式

以下结合附图来说明本发明的具体实施方式。

说明书

<实施例一>

图 1 为本发明实施例一的检测系统的构成示意图。

如图 1 所示, 本实施例的检测系统 100 包括基底材料 10、光谱仪 20 以及数据分析装置 30。其中, 基底材料 10 为具有手性特质的材料。

5 具体地, 基底材料 10 为金纳米螺旋纤维阵列, 该金纳米螺旋纤维阵列具有这样的特点:
1) 金是一种金属类的等离子体共振材料, 其在拉曼光谱检测过程中作为基底材料时能够对样品的拉曼信号进行增强; 2) 金纳米螺旋纤维阵列是一种经由生长方法形成在硅基板上的膜材料, 由多根整齐排列的单股金螺旋纤维构成, 该螺旋纤维结构是一种单手性结构, 相应地, 这种金纳米螺旋纤维阵列是具有手性特质的材料。

10 本实施例的检测系统 100 基于拉曼光谱检测实现手性化合物的检测。

具体地, 本实施例中, 光谱仪 20 为普通拉曼光谱仪, 其光源和检测光均为非偏振光。即, 该光谱仪 20 具有用于作为光源的光源部 21、用于放置载有样品的基底材料 10 的样品放置部 22、用于接收载有样品的基底材料 10 经光源照射而产生的拉曼散射光并产生对应的电信号的检测光接收部 23 以及用于接收电信号并形成对应的拉曼光谱作为检测谱图的光谱输出部 24, 其中光源部 21 所产生的光为非偏振光, 并且检测光接收部 23 也是针对非偏振光的普通的光电探测器。

另外, 数据分析装置 30 为具有数据存储和数据分析计算功能的计算机, 该计算机与光谱仪 20 通信连接(例如通过数据线缆连接), 能够接收光谱输出部输出的谱图并对该谱图进行存储及分析。

20 图 2 是采用本发明实施例一的检测系统对 R-柠檬烯和 S-柠檬烯混合的样品进行检测的拉曼光谱图。

图 2 中, 各个样品中的对映体含量比例已知, 其中-100%是仅含有 R-柠檬烯的样品, 100%是仅含有 S-柠檬烯的样品, -50%是 R-柠檬烯与 S-柠檬烯的含量比为 75 : 25 的样品, 0%是 R-柠檬烯与 S-柠檬烯的含量比为 50 : 50 的样品, 50%是 R-柠檬烯与 S-柠檬烯的含量比为 25: 25 的样品。

图 3 是采用本发明实施例一的检测系统对 R-柠檬烯和 S-柠檬烯的混合物进行检测得到的特征峰强度与手性分子含量百分比的线性拟合图。图 3 中, 横坐标为手性分子含量百分比 (ee 值), 纵坐标为特征峰强度。

30 如图 2 和图 3 所示, 当采用本实施例的检测系统 100 对柠檬烯这种手性化合物样品进行检测时, 其信号强度(即拉曼信号强度)与样品中的手性对映体比例呈线性关系。也就是说, 当需要对两种对映体含量未知的柠檬烯样品进行检测时, 采用本实施例的检测系统 100 进行特征光谱检测, 然后将待测样品检测结果与标准品检测结果进行对比(例如将待测样品的特征峰强度与各个标准品特征峰强度与含量比例之间的拟合曲线进行对比), 即可计算得到待

说明书

测样品中 S-柠檬烯和 R-柠檬烯的含量比例。

也就是说,本实施例中的检测系统 100 对手性对映体的含量比例进行检测的具体操作如下:

5 首先,配制多个手性化合物的标准品,每个标准品中含有不同比例的手性化合物的对映体;

然后,分别将标准品载置在基底材料 10 上,采用光谱仪 20 依次对载置有各个标准品的基底材料 10 进行检测从而得到各个标准品的特征光谱作为标准谱图,并利用数据分析装置 30 对这些标准谱图进行暂存以及特征峰强度分析,进而得到各个标准品的特征峰强度与手性分子含量百分比的线性拟合图;

10 最后,将待测样品载置在相同的基底材料 10 上,采用光谱仪 20 对待测样品进行检测从而得到其特征光谱作为样品谱图,并利用数据分析装置 30 对样品谱图进行特征峰强度分析,将该特征峰强度值代入上述线性拟合图,即可计算得到待测样品中的手性化合物的对映体含量比例。

15 <实施例二>

本实施例采用与实施例一相同的检测系统 100 对环己基甘氨酸这种手性化合物进行检测。其中,环己基甘氨酸具有两种构型,即 L-环己基甘氨酸和 D-环己基甘氨酸。

图 4 是采用本发明实施例一的检测系统对 L-环己基甘氨酸和 D-环己基甘氨酸的混合物进行检测得到的特征光谱图。

20 图 4 中,-100%是仅含有 L-环己基甘氨酸的样品,100%是仅含有 D-环己基甘氨酸的样品,-50%是 L-环己基甘氨酸与 D-环己基甘氨酸的含量比为 75 : 25 的样品,0%是 L-环己基甘氨酸与 D-环己基甘氨酸的含量比为 50 :50 的样品,50%是 L-环己基甘氨酸与 D-环己基甘氨酸的含量比为 25 : 75 的样品。

25 图 5 是采用本发明实施例一的检测系统对 L-环己基甘氨酸和 D-环己基甘氨酸的混合物进行特征光谱检测得到的特征峰强度与手性对映体含量百分比的线性拟合图。图 5 中,横坐标为手性分子含量百分比 (*ee* 值),纵坐标为特征峰强度。

30 如图 4 和图 5 所示,当采用实施例一的检测系统 100 对环己基甘氨酸这种手性化合物进行检测时,其也能够达到与实施例一的柠檬烯相同的检测效果。也就是说,采用该检测系统 100,按照与实施例一相同的操作步骤进行操作,即可实现环己基甘氨酸的待测样品的对映体含量比例检测。

另外,发明人还采用实施例一的检测系统 100 对其他多种手性化合物进行了检测,发现这种检测系统 100 能够实现不同手性化合物的对映体含量比例检测,并且检测过程中,样品

说 明 书

的 *ee* 值和其特征峰强度均呈现线性关系。发明人验证过的手性化合物如下表 1 所示：

表 1 经验证能够通过本发明实施例一的检测系统 100 进行手性对映体比例检测的手性化合物

序号	手性化合物 (一对)	序号	手性化合物 (一对)	序号	手性化合物 (一对)
1	(R)-(-)-2,2,2-三氟-1-(9-蒎基)乙醇	32	D-(+)-3-苯基乳酸	63	S-2-丁醇
	(S)-(+)-2,2,2-三氟-1-(9-蒎基)乙醇		L-(-)-3-苯基乳酸		R-2-丁醇
2	(R)-(-)-1,2,3,4-四氢-1-萘酚	33	(S,S)-(-)-双(α -甲苄基)胺盐酸盐	64	L-苹果酸
	(S)-(+)-1,2,3,4-四氢-1-萘酚		(R,R)-(+)-双(α -甲苄基)胺盐酸盐		D-苹果酸
3	(R)-(+)-柠檬烯	34	S-(-)-4-吡啶-1-乙醇	65	R-1-吡啶-4-乙醇
	(S)-(-)-柠檬烯		R-(+)-4-吡啶-1-乙醇		S-1-吡啶-4-乙醇
4	L-(+)-环己基甘氨酸	35	(S)-1-氨基茛满盐酸盐	66	R-缩水甘油丁脂
	D-(-)-环己基甘氨酸		(R)-1-氨基茛满盐酸盐		S-缩水甘油丁脂
5	L-(+)- α -苯基甘氨酸	36	R-1,2-丁二醇	67	R-环氧氯丙烷
	D-(-)- α -苯基甘氨酸		S-1,2-丁二醇		S-环氧氯丙烷
6	(R)-(+)- α -甲基卞胺	37	R-沙利度安	68	(1R,2R)-N,N'-二甲基环己烷-1,2-二胺
	(S)-(-)- α -甲基卞胺		S-沙利度安		(1S,2S)-N,N'-二甲基环己烷-1,2-二胺
7	(R)-(+)-1-苯基乙醇	38	(S)-1,1,1-三氟异丙胺盐酸盐	69	S-1,2,3,4-四氢-1-萘胺
	(S)-(-)-1-苯基乙醇		(R)-1,1,1-三氟异丙胺盐酸盐		R-1,2,3,4-四氢-1-萘胺
8	(R)-(-)-1-苯基 1,2-乙二醇	39	L-酒石酸	70	L-脯氨酸
	(S)-(+)-1-苯基 1,2-乙		D-酒石酸		D-脯氨酸

说 明 书

	二 醇				
9	(R)-(-)-1,2-丙二醇	40	L-蛋氨酸	71	L-亮氨酸
	(S)-(+)-1,2-丙二醇		D-蛋氨酸		D-亮氨酸
10	(R)-(-)-3-氯-1,2-丙二醇	41	L-酪氨酸	72	L-哌啶酸
	(S)-(+)-3-氯-1,2-丙二醇		D-酪氨酸		D-哌啶酸
11	(1S,2S)-(+)-1,2-环己二胺	42	L-苏氨酸	73	L-甲氧基苯乙酸
	(1R,2R)-(-)-1,2-环己二胺		D-苏氨酸		D-甲氧基苯乙酸
12	R-联萘酚	43	L-谷氨酸	74	L-焦谷氨酸
	S-联萘酚		D-谷氨酸		D-焦谷氨酸
13	L-天冬酰胺	44	L-赖氨酸	75	S-1-(1-萘基)乙胺
	D-天冬酰胺		D-赖氨酸		R-1-(1-萘基)乙胺
14	右旋香芹酮	45	L-组氨酸	76	S-二苯基脯氨酸
	左旋香芹酮		D-组氨酸		R-二苯基脯氨酸
15	(R)-(+)-2-氯丙酸	46	L-胱氨酸	77	S-苯基丙酸
	(S)-(-)-2-氯丙酸		D-胱氨酸		R-苯基丙酸
16	(R)-(+)-N-苄基-1-苯乙胺	47	L-色氨酸	78	(S)-2-氨基-2-苯基乙酰胺
	(S)-(-)-N-苄基-1-苯乙胺		D-色氨酸		(R)-2-氨基-2-苯基乙酰胺
17	L-缬氨酸	48	L-半胱氨酸	79	左旋肉碱
	D-缬氨酸		D-半胱氨酸		右旋肉碱
18	L-缬氨酸醇	49	L-苯丙氨酸醇	80	L-甘露醇
	D-缬氨酸醇		D-苯丙氨酸醇		D-甘露醇
19	D-谷氨酰胺	50	L-青霉胺	81	L-山梨糖醇
	L-谷氨酰胺		D-青霉胺		D-山里糖醇
20	D-叔亮氨酸	51	L-葡萄糖	82	L-塔罗糖醇
	L-叔亮氨酸		D-葡萄糖		D-塔罗糖醇

说明书

21	L-苯甘氨酸	52	L-丙氨酸	83	L-艾杜糖醇
	D-苯甘氨酸		D-丙氨酸		D-艾杜糖醇
22	L-苯甘氨酸	53	L-脯氨酸	84	S-1,2-环氧丁烷
	D-苯甘氨酸		D-脯氨酸		R-1,2-环氧丁烷
23	R-3-氨基-3-苯基丙醇	54	L-樟脑磺酸	85	L-苯甘氨酸
	S-3-氨基-3-苯基丙醇		D-樟脑磺酸		D-苯甘氨酸
24	D-脯氨酸	55	L-苯丙氨酸	86	S-丁酸缩水甘油酯
	L-脯氨酸		D-苯丙氨酸		R-丁酸缩水甘油酯
25	D-亮氨酸	56	L-亮氨酸	87	S-N-甲基-1-苯基乙胺
	L-亮氨酸		D-亮氨酸		R-N-甲基-1-苯基乙胺
26	S-氨基丙醇	57	L-异亮氨酸	88	R-碳酸丙烯酯
	D-氨基丙醇		D-异亮氨酸		S-碳酸丙烯酯
27	R-3-氨基-1,2-丙二醇	58	L-精氨酸	89	R-1,1,1-三氟异丙胺盐酸盐
	S-3-氨基-1,2-丙二醇		D-精氨酸		S-1,1,1-三氟异丙胺盐酸盐
28	D-(-)-酒石酸二乙酯	59	L-丝氨酸	90	R-缩水甘油
	L-(+)-酒石酸二乙酯		D-丝氨酸		S-缩水甘油
29	D-(+)-乳酸甲酯	60	N-乙酰-L-半胱氨酸	91	D-安息香
	L-(-)-乳酸甲酯		N-乙酰-D-半胱氨酸		L-安息香
30	R-(-)-2-萘扁桃酸	61	L-天冬氨酸	92	反-均二苯乙烯氧化物
	S-(+)-2-萘扁桃酸		D-天冬氨酸		顺-均二苯乙烯氧化物
31	R-(-)-扁桃酸甲酯	62	L-扁桃酸		
	S-(+)-扁桃酸甲酯		D-扁桃酸		

根据表 1 可知,能够通过本发明的检测系统 100 进行对映体含量比例检测的手性化合物接近百对,并且这些手性化合物特性各异。例如,以手性中心数量分类,表 1 中包含了单手性中心化合物和多手性中心化合物;以极性分类,表 1 中包含了极性化合物和非极性化合物;另外,表 1 中还包含了有发色基团分子、无发色基团分子、大分子、小分子和生物分子等多种不同种类的手性化合物。可见,只要是具有拉曼散射特性的化合物,均可通过实施例一的含有基底材料 10、光谱仪 20 以及数据分析装置 30 的检测系统 100 来进行对映体含量比例检测。

<实施例三>

为验证其他具有手性特质的材料是否也能用于手性化合物检测,本实施例将实施例一中的基底材料 10 用其他种类的具有手性特质的材料替换,并用替换后得到的检测系统 100 对手性化合物样品进行了检测。

5 本实施例中,用于替换基底材料 10 的材料包括这几种:金-银纳米螺旋线阵列、花形纳米氧化钛粉末以及扇形纳米银粉末。

其中,金-银纳米螺旋纤维阵列是在实施例一的金纳米螺旋纤维阵列的基础上再次进行银附着而形成的。由此,该金-银纳米螺旋纤维阵列由多根整齐排列的单股金-银复合螺旋纤维构成,其特性与实施例一的金纳米螺旋纤维阵列类似,也属于等离子体共振材料,并且也具有手性特质。

10 花形纳米氧化钛粉末是一种由具有花形结构的纳米氧化钛颗粒构成的材料。氧化钛是与金和银类似的等离子体共振材料,花形结构也是一种手性结构。由此,花形纳米氧化钛粉末也具有手性特质。

类似地,扇形纳米银粉末是由具有扇形结构的纳米银颗粒构成的材料,其也是一种具有手性特质的材料。

15 经试验,当基底材料 10 采用金-银纳米螺旋纤维阵列时,对 ee 值不同的手性化合物样品进行检测得到的特征光谱中,特征峰强度也表现出了与 ee 值呈线性关系的特性。可见,金-银纳米螺旋纤维阵列与金纳米螺旋纤维阵列在本发明的检测系统 100 中具有相同的作用。

20 另外两种材料的检测结果如下:

图 6 是本发明实施例三的采用花形纳米氧化钛粉末作为基底材料的检测系统对相同浓度的 N-乙酰-L-半胱氨酸和 N-乙酰-D-半胱氨酸分别进行检测得到的特征光谱图,图 7 是本发明实施例三的采用扇形纳米银粉末作为基底材料的检测系统对相同浓度的 N-乙酰-L-半胱氨酸和 N-乙酰-D-半胱氨酸分别进行检测得到的特征光谱图。

25 如图 6 及图 7 所示,当 N-乙酰-L-半胱氨酸和 N-乙酰-D-半胱氨酸的浓度相同时,采用花形纳米氧化钛粉末或扇形纳米银粉末作为基底材料 10 的检测系统 100 均能够让该两种样品呈现出不同的信号强度。显然,与前述实施例一类似,这样的信号强度差异证明本实施例的检测系统 100 也能够检测出手性化合物样品中的对映体含量比例。

30 实施例的作用与效果

从实施例一~实施例三中可以看出,当采用具有手性特质的材料作为基底材料对手性化合物进行拉曼光谱检测时,其对手性化合物不同对映体的表面增强作用有明显区别,这样的区别反映到光谱图上就使得不同对映体的特征峰强度有明显差异。因此,通过特征峰强度即

可推算得出对映体含量比例。

另外，从上述实施例还可以得出如下结果：1、本发明的具有手性特质的材料和拉曼光谱仪的检测系统能够对上百种手性化合物实现检测；2、即使更换其他种类的具有手性特质的材料，本发明的检测系统也能够实现手性化合物的检测。

5 结合检测原理方面的推断可以得知，只要基底材料是具有手性特质的材料（尤其是具有手性结构的等离子体共振材料），其都能够或多或少地对手性化合物的拉曼信号进行特异性增强，因而也能够结合拉曼光谱仪来实现手性化合物的对映体含量比例检测。

10 进一步，通过上述各实施例的检测过程可以得知，上述具有手性特质的材料与手性化合物发生相互作用时，其对不同对映异构体的手性化合物产生的信号增强作用不同，这种相互作用的不同可以通过材料和化合物的光学性质（在上述实施例中为拉曼检测）进行表征。

显然，当这类具有手性特质的材料与手性化合物发生其他相互作用时，其所产生的相互作用强度也将有所不同，并且能够被相应的光学检测手段表征（即，被相应的光谱仪检测时体现出信号强度等方面的差异）。所以，本发明的含有具有手性特质的材料、光谱仪和数据分析装置的检测系统可以对手性化合物进行含量比例检测，与现有技术中的检测手段相比，
15 本发明的检测系统具有结构简单、操作简单、干扰小、结果准确且应用广泛等优点。

<实施例四>

本实施例中，对于与实施例一相同的结构，给与相同的标号并省略相同的说明。

图 8 是本发明实施例四的检测系统的构成示意图。

20 如图 8 所示，实施例四的检测系统 200 包括光谱仪 20、第一基底材料 40、第二基底材料 50 以及数据分析装置 60。其中，光谱仪 20 与数据分析装置 60 可以通过数据线缆或通信网络通信连接，图 8 中省略了光谱仪 20 和数据分析装置 60 中的通信单元。

第二基底材料 50 与实施例一~实施例三所描述的基底材料 10 相同，由具有手性特质的材料构成，在此不再赘述。

25 第一基底材料 40 为不具有手性特质的表面等离子体材料，这类材料在常规的表面增强拉曼光谱检测中作为基底使用，例如不具有手性结构的圆形纳米金粉末（即由圆形纳米金颗粒构成的粉末材料）等。

30 采用本实施例的检测系统 200 对手性化合物待测样品进行检测的过程主要包括：采用第一基底材料 40 和光谱仪 20 对待测样品进行检测，得到第一检测谱图；采用第二基底材料 50 和光谱仪 20 对待测样品进行检测，得到第二检测谱图；采用数据分析装置 60 对第一检测谱图和第二检测谱图进行分析，利用第一检测谱图进行定性和定量，同时利用第二检测谱图确定对映体含量比例，即可得到待测样品的手性化合物结构、总含量及对映体含量比例。

数据分析装置 60 包括第一谱图存储部 61、第二谱图存储部 62、谱图匹配部 63 以及

说明书

谱图分析部 64。

第一谱图存储部 61 用于存储多个第一标准谱图，该第一标准谱图是采用光谱仪 20 或其他相同的光谱仪以及第一基底材料 40 对手性化合物的标准品分别进行检测而得到的拉曼光谱图。即，采用第一基底材料 40 结合光谱仪 20 对一定含量的多个手性化合物进行检测，从而得到这些手性化合物的拉曼光谱图作为第一标准谱图。由于第一基底材料 40 为不具有手性特性的等离子体共振材料，因此这些第一标准谱图中的指纹特征能够反映手性化合物的结构，同时，特征峰的强度对应于手性化合物的含量。

第二谱图存储部 62 用于存储多个第二标准谱图，该第二标准谱图是采用光谱仪 20 以及第二基底材料 50 对手性化合物的对映体含量标准品分别进行检测而得到的拉曼光谱图。也就是说，第二标准谱图能够用于反映含量确定的某种手性化合物样品中的对映体含量比例。

谱图匹配部 63 用于根据第一检测谱图从第一谱图存储部 61 中匹配出对应的第一标准谱图作为第一匹配谱图，以及根据第二检测谱图从第二谱图存储部 62 中匹配出对应的第二标准谱图作为第二匹配谱图。

谱图分析部 64 用于根据第一检测谱图及第一匹配谱图对待测样品进行定性定量分析，并根据第二检测谱图及第二匹配谱图对待测样品进行对映体含量比例分析。

具体地，由于第一基底材料 40 和第二基底材料 50 均对于待测样品中的手性化合物具有拉曼信号增强的作用，因此实际上第一检测谱图和第二检测谱图的指纹特征是相同的，谱图匹配部 53 综合该两个检测谱图的指纹特征，从而分别从第一谱图存储部 61 和第二谱图存储部 62 中找出指纹特征匹配的标准谱图。

一些情况下（例如待测样品中某种对映体的含量较少而第二基底材料 50 刚好对该种对映体的作用较弱），第二检测谱图中可能因信号强度低而不具有清晰的指纹特征，此时，谱图匹配部 53 根据第二检测谱图无法匹配出对应的第二标准谱图时，则利用第一检测谱图来匹配第二标准谱图。

上述匹配过程中，谱图匹配部 53 可以采用现有技术中的一些谱图匹配手段，将匹配程度最高的标准谱图作为匹配结果。由于化合物的结构与其指纹特征是一一对应的，因此得出的第一标准谱图和第二标准谱图应当对应于同一种手性化合物，该种手性化合物也正是待测样品中的手性化合物。由此，谱图匹配部 63 的匹配过程就实现了对待测样品中手性化合物的定性分析。

匹配得到第一标准谱图和第二标准谱图后，谱图分析部 64 基于第一检测谱图和第一标准谱图之间的特征峰强度比例以及第一检测谱图对应的标准品含量进行分析计算，从而得到待测样品中的手性化合物的总含量。

然后，谱图分析部 64 根据待测样品中的手性化合物总含量以及第二标准谱图所对应的

说明书

手性化合物总含量的比例对第二检测谱图进行适应性调整（即，按照二者的总含量比例对第二检测谱图中的特征峰强度进行调整，使得第二检测谱图调整后所反映的手性化合物总含量能够与第二标准谱图所对应的标准品总含量相同），再将调整后的第二检测谱图与第二标准谱图进行比对分析，从而得到待测样品中的对映体含量比例（*ee* 值）。由于谱图分析部 64
5 先按含量比例调整了第二检测谱图的特征峰强度值，因此，与第二标准谱图进行对比时，调整后的第二检测谱图中的特征峰强度就能够直接反映出待测样品的对映体含量比例了。

实施例作用与效果

根据实施例四提供的检测系统，当需要进行待测样品检测时，检测人员只需要用两种基底材料分别检测得到待测样品的两种拉曼光谱图，即可让数据分析装置进行匹配和分析，
10 从而同时完成定性定量检测以及含量比例检测。

进一步，本实施例的检测系统中，光谱仪可以采用手持型拉曼光谱仪的形式，数据分析装置可以采用云端服务器的形式，检测人员携带手持型拉曼光谱仪和两种基底材料即可现场对待测样品完成检测并得到分析结果，操作更为简单，并且可以很容易地实现复杂环境下的手性化合物的现场检测。

15

上述实施例仅用于举例说明本发明的具体实施方式，本发明的手性化合物检测系统不限于上述实施例的描述范围。

实施例中，具有手性特质的材料为具有单手性结构的纳米金属膜材料、纳米金属粉末材料、纳米金属氧化物粉末材料等。然而，在本发明中，具有手性特质的材料还可以是其他种类的材料，包括由其他种类的有机物、无机物或有机物-无机物混合物所构成的具有手性结构的微纳米材料粉末或微纳米膜材料。其中，无机物可以包含金属和金属氧化物，金属可以是金、银、铜、铂中的一种或几种的组合物，金属氧化物可以是氧化铜、氧化钛、氧化锌、氧化锡、氧化铁、氧化钴中的一种或几种的组合物；手性结构除了实施例的螺旋纤维结构、花形结构、扇形结构以外，还可以是螺旋桨形结构等多种手性结构。

20 另外，实施例中所用的光谱仪为拉曼光谱仪，然而在本发明中，其还可以是其他种类的光谱仪，只要能够检测基底材料与待测化合物的相互作用即可。进一步，若该其他种类的光谱仪对化合物的检测结果具有定性特征（例如与拉曼光谱相似的指纹特征）和定量特征（例如特征峰强度与含量呈线性关系），则可以参照实施例四的形式，数据分析装置中设置对应的标准谱图存储部、谱图匹配部和谱图分析部等，从而实现对待测样品的定性定量分析和对
30 映体含量比例分析。

权利要求书

1. 一种手性化合物的检测系统，其特征在于，包括：
基底材料；以及
光谱仪，
其中，基底材料由具有手性特质的材料构成，用于载置手性化合物的待测样品；
5 所述光谱仪的光源和检测光均为非偏振光。
2. 根据权利要求 1 所述的手性化合物的检测系统，其特征在于：
其中，所述具有手性特质的材料为具有手性结构的微纳米粉末或微纳米膜材料。
- 10 3. 根据权利要求 2 所述的手性化合物的检测系统，其特征在于：
其中，所述具有手性特质的材料由无机材料、有机材料或有机-无机复合材料构成。
4. 根据权利要求 3 所述的手性化合物的检测系统，其特征在于：
其中，所述无机材料为等离子体共振材料，该等离子体共振材料为金属、金属氧化物或
15 二者的混合物，
所述手性结构为螺旋纤维结构、花形结构、扇形结构、螺旋桨形结构中的任意一种，
所述光谱仪为拉曼光谱仪。
5. 根据权利要求 4 所述的手性化合物的检测系统，其特征在于：
20 其中，所述金属为金、银、铜、铂中的一种或几种的组合物，
所述金属氧化物为氧化铜、氧化钛、氧化锌、氧化锡、氧化铁、氧化钴中的一种或几种
的组合物。
6. 根据权利要求 1 所述的手性化合物的检测系统，其特征在于：
25 其中，所述光谱仪具有：
光源部，用于产生所述光源；
样品放置部，用于放置载有所述样品的所述基底材料；
检测光接收部，用于接收载有所述样品的所述基底材料被所述光源照射而形成的检测
光并产生对应的电信号；以及
30 光谱输出部，用于接收所述电信号并形成对应的特征光谱作为检测谱图。
7. 根据权利要求 6 所述的手性化合物的检测系统，其特征在于，还包括：
数据分析装置，与所述拉曼光谱仪通信连接，用于接收所述检测谱图并对所述检测谱

权 利 要 求 书

图进行数据分析得到所述待测样品中的所述手性化合物的对映体含量比例。

8. 一种手性化合物的检测系统,用于对所述手性化合物进行定性定量以及对映体含量比例检测,其特征在于,包括:

5 第一基底材料,用于在对所述手性化合物进行定性定量时作为基底材料载置所述手性化合物的待测样品;

 第二基底材料,用于在对所述手性化合物进行含量比例检测时作为基底材料载置所述待测样品; 以及

10 光谱仪,用于对载置了所述待测样品的所述第一基底材料进行检测从而得到用于进行所述定性定量的第一检测谱图,以及对载置了所述待测样品的所述第二基底材料进行检测从而得到用于进行所述对映体含量比例检测的第二检测谱图,

 其中,所述第一基底材料由不具有手性特质的材料构成,

 所述第二基底材料由具有手性特质的材料构成。

15 9. 根据权利要求8所述的手性化合物的检测系统,其特征在于,还包括:

 数据分析装置,具有:

 第一谱图存储部,用于存储多个第一标准谱图,该第一标准谱图是采用所述光谱仪以及所述第一基底材料对所述手性化合物的标准品分别进行检测而得到的光谱图;

20 第二谱图存储部,用于存储多个第二标准谱图,该第二标准谱图是采用所述光谱仪以及所述第二基底材料对所述手性化合物的标准品分别进行检测而得到的光谱图;

 谱图匹配部,用于根据所述第一检测谱图从所述第一谱图存储部中匹配出对应的所述第一标准谱图作为第一匹配谱图,以及根据所述第二检测谱图从所述第二谱图存储部中匹配出对应的所述第二标准谱图作为第二匹配谱图; 以及

25 谱图分析部,用于根据所述第一检测谱图及所述第一匹配谱图对所述待测样品进行定性定量分析,并根据所述第二检测谱图及所述第二匹配谱图对所述待测样品进行对映体含量比例分析。

说明书摘要

发明人提出了一种基于具有手性特质的材料的手性化合物检测系统，包括：基底材料；以及光谱仪，其中，基底材料由具有手性特质的材料构成，用于载置手性化合物的待测样品；光谱仪的光源和检测光均为非偏振光。发明人还提出了另一种同样基于具有手性特质的

5 材料的手性化合物检测系统，包括：第一基底材料，用于进行定性定量时作为基底材料；第二基底材料，用于进行含量比例检测时作为基底材料；以及光谱仪，用于对载置了待测样品的第一基底材料进行检测从而得到用于进行定性定量的第一检测谱图，以及对载置了待测样品的第二基底材料进行检测从而得到用于进行对映体含量比例检测

10 的第二检测谱图，其中，第二基底材料由具有手性特质的材料构成。

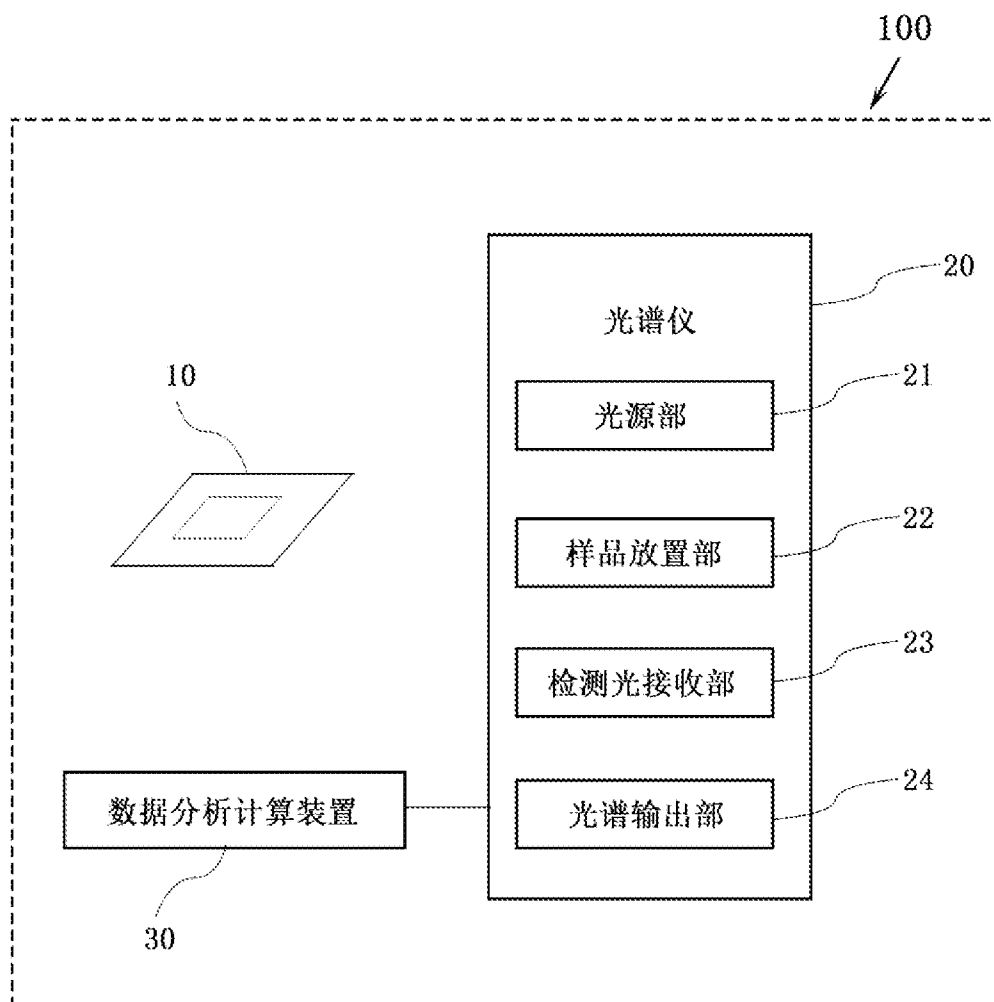


图 1

说明书附图

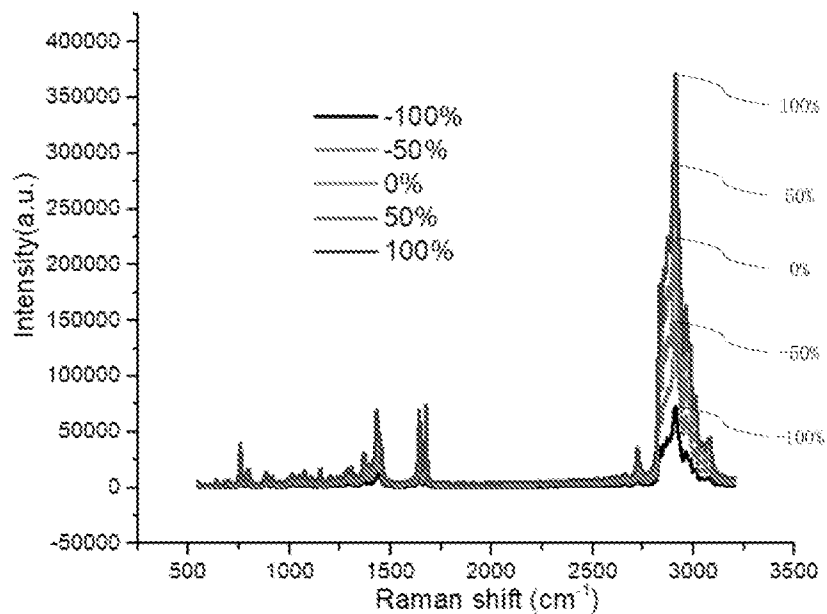


图 2

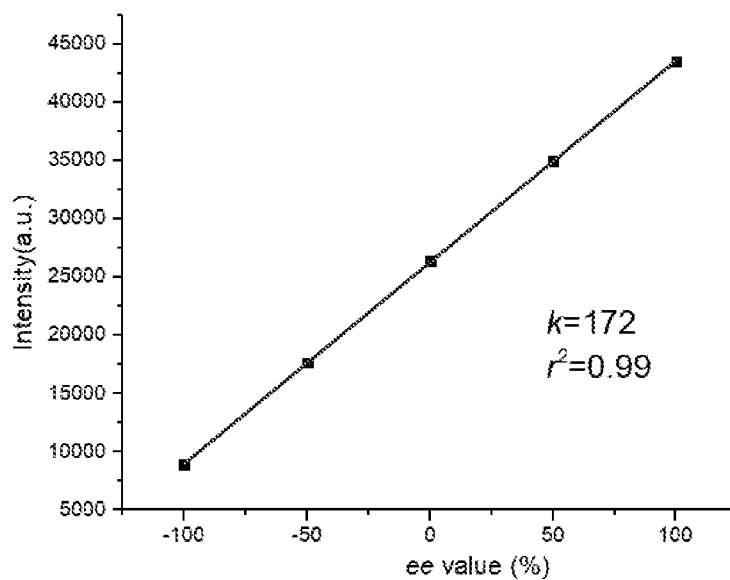


图 3

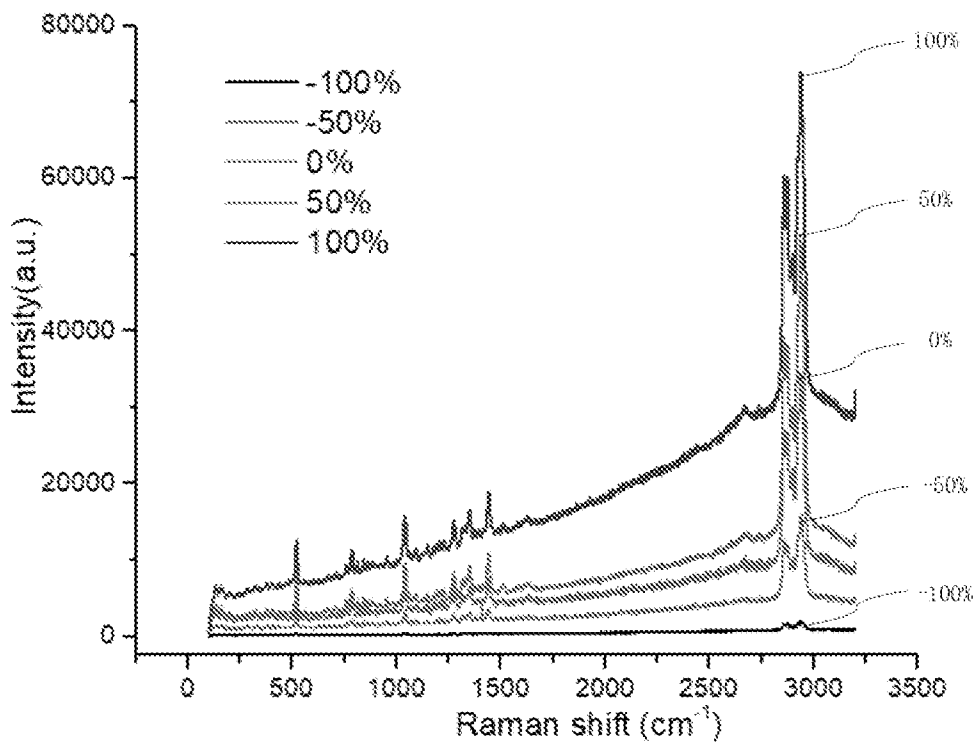


图 4

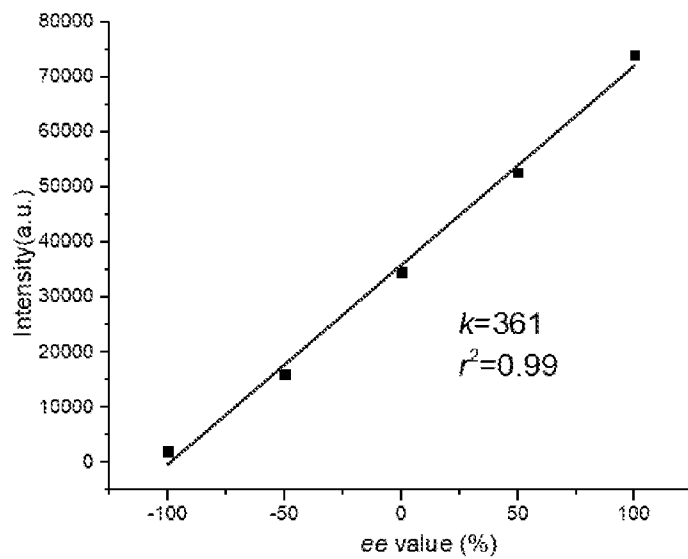


图 5

说明书附图

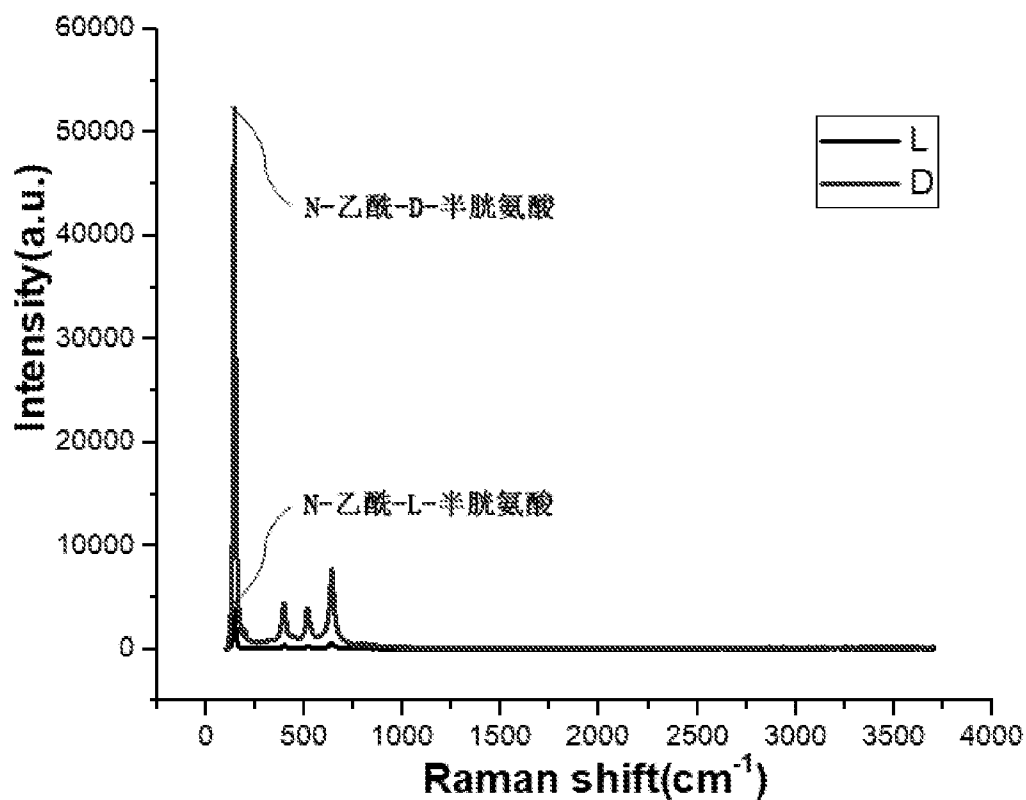


图 6

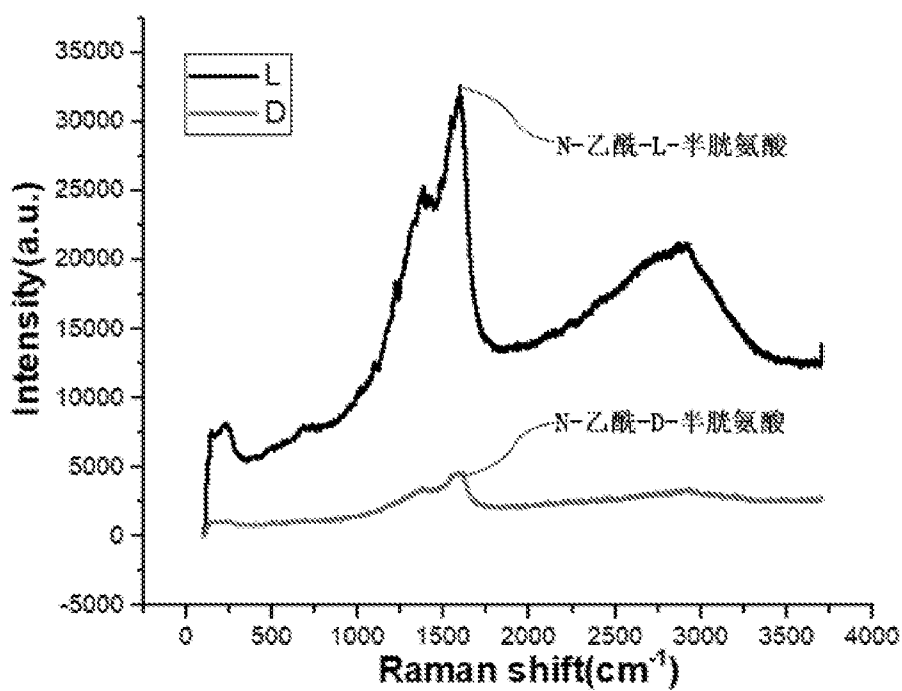


图 7

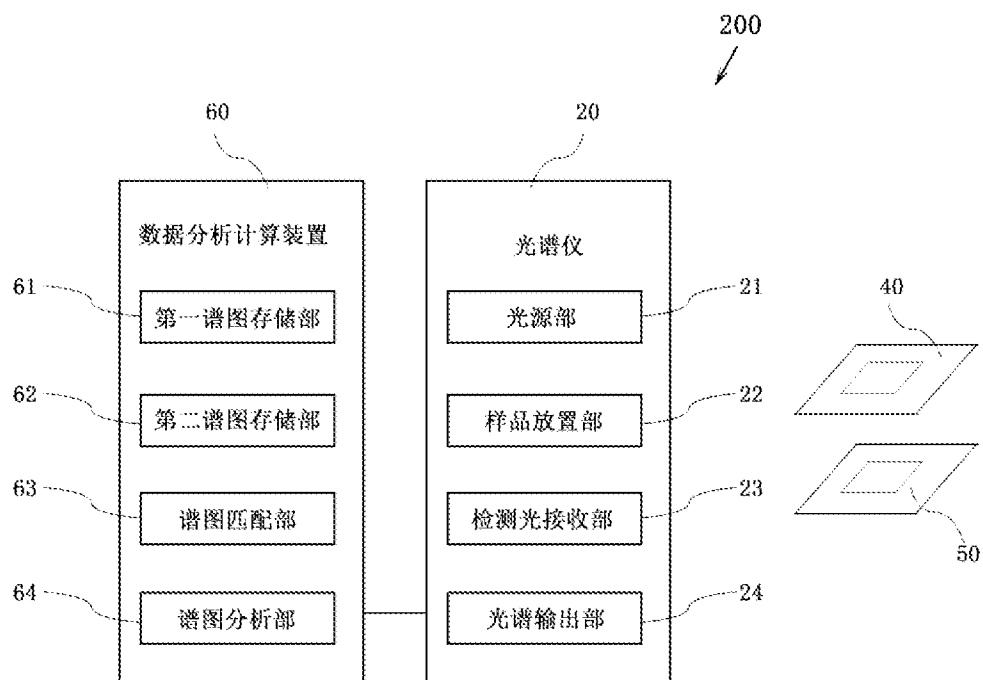


图 8