

# Flexibel, platzsparend und leistungsfähig

## Schwingungsspektrometer im Mini-Format zur mobilen Qualitäts- und Prozesskontrolle

In den letzten zehn Jahren hat die Miniaturisierung von Spektrometern für die Raman-, Infrarot- und Nahinfrarot-Technik große Fortschritte erzielt. Die anfängliche Triebfeder für diese Entwicklung war dabei die in USA massiv geförderte Homeland-Security zur Vor-Ort-Detektion von Explosivstoffen oder toxischen Materialien in Krisengebieten.

Gerätetechnisch basiert ein Großteil der Bauteile dieser portablen Geräte auf der sog. MEMS (micro electro mechanical system)-Technologie. Die damit verbundene Miniaturisierung, robuste Konstruktion und der niedrige Energieverbrauch haben dazu geführt, dass heute ein mobiles Labor für die gesamte Palette von Schwingungsspektrometern problemlos in einer geräumigen Aktentasche transportiert werden kann (Abb. 1).

Dem bekannten Phänomen, dass fluoreszierende Substanzen die Aufnahme von Raman-Spektren empfindlich stören können, wurde kürzlich Rechnung getragen, indem zusätzlich zu dem in Abbildung 1 gezeigten Raman-Spektrometer mit 785 nm Laseranregung ein portables Gerät mit Anregung im nahen Infrarot (1.064 nm) entwickelt wurde (Abb. 2).

### Kleine Geräte mit großer Leistung

Die Leistungsfähigkeit dieser Geräte für analytische Fragestellungen aus den Bereichen Chemie, Pharmazie und Umwelt wurde in den letzten Jahren im Vergleich zu Laborspektrometern eingehend untersucht und nachgewiesen.

Die beschriebene Miniaturisierung wurde aber durch ein bei der Pittcon 2012 in Orlando, USA, erstmals vorgestelltes Nahinfrarot-Spektrometer auf Basis der Linear-Variable-Filter (LVF)-Technologie noch einmal um eine Größenordnung übertroffen (Abb. 3). Über die beiden Messmodi der diffusen Reflexion und der Transmission bietet dieses Gerät mit einem Gewicht von 60 g und ei-



Abb. 1: Miniaturisiertes Fourier-Transform-Infrarot (FT-IR)-Spektrometer auf Basis der abgeschwächten Totalreflexion (ATR), sowie portable Nahinfrarot- und Raman-Spektrometer (© Analytikon Instruments)

nem Durchmesser von 2,5 cm, das über ein USB-Kabel mit einem Laptop verbunden wird, ein extrem breites Einsatzgebiet zur Vor-Ort-Qualitätskontrolle von Flüssigkeiten und Feststoffen verschiedenster Morphologie. Der erfolgreiche Einsatz dieses Spektrometers für die Authentifizierung und Qualitätskontrolle pharmazeutischer Formulierungen sowie für die quantitative Analyse von Kohlenwasserstoffkontaminationen in Böden konnte ebenfalls schon demonstriert werden.

emplarisch eingesetzt. Die Auswertung der spektroskopischen Daten erfolgt dabei bevorzugt mit den multivariaten chemometrischen Methoden der Principal Component Analysis (PCA) oder Partial Least Squares (PLS) Regression und hat einerseits die qualitative Identifizierung oder Diskriminierung von Stoffen (z.B. im Wareneingang oder bei

der Erkennung von Fälschungen) und andererseits die Quantifizierung von Komponenten in Stoffgemischen (z.B. eines Wirkstoffes in einer pharmazeutischen Formulierung) zum Ziel.

Aus den Ergebnissen dieser Projektstudien sollen die Erfolgsaussichten für den zukünftigen Einsatz handgehaltener Schwingungsspektrometer für die nachfolgenden Anwendungsbereiche abgeleitet werden:

- Wareneingang und Qualitätssicherung (Materialidentifizierung und Prozesskontrolle)
- Exekutivorgane und Gewerbeaufsicht (Identifizierung von Nachahmerprodukten)
- Verbraucherschutz, Lebensmittelsicherheit und -fälschung
- Bewertung der Echtheit von Kunst- und Schmuckgegenständen
- Abfallverwertung (Kunststoff- und Teppich-Recycling)
- Umweltsicherheit (Vor-Ort-Detektion von Kontaminationen in Böden)
- Straßenbau (Vor-Ort-Prüfung von Bitumeneigenschaften)
- Qualitätsbeurteilung petrochemischer Produkte (Bestimmung der Oktanzahl oder des Alkoholgehaltes von Kraftstoffen)

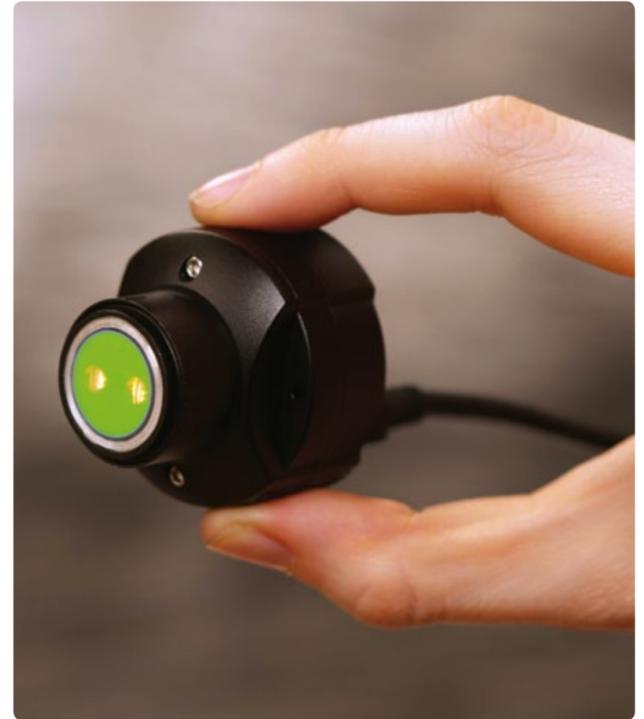


Abb. 3: MicroNIR-Spektrometer (© JDSU)

### Fortbildung

Ein in Kürze stattfindender Fortbildungskurs der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) soll u.a. die Erfolg versprechenden Anwendungsgebiete miniaturisierter Schwingungsspektrometer für die Qualitäts- und Prozesskontrolle aufzeigen und

das Know-how zu deren Einsatz einem breiteren Anwenderkreis zugänglich machen. Gerade im Hinblick auf kleine und mittlere Unternehmen (KMU) sind Mobilität, Flexibilität, Platzbedarf und Gerätekosten wesentliche Kriterien zur Einführung eines leistungsfähigen Qualitäts- und Prozesskontrollsystems.

### Schwingungsspektroskopie für die chemische Qualitäts- und Prozesskontrolle

18. bis 20. September 2012, Essen  
Kurs: 503/12  
Leitung: Prof. Dr. Heinz Wilhelm Siesler

■ Weitere Informationen und Anmeldung über:  
Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), Fortbildung  
Tel.: +49 69 7917 291/364  
Fax: +49 69 7917 475  
fb@gdch.de  
www.gdch.de/fortbildung

■ Kontakt:  
Prof. Dr. Heinz Wilhelm Siesler  
Universität Duisburg-Essen, Essen  
Institut für Physikalische Chemie  
Tel.: +49 201 183 2927  
hw.siesler@uni-due.de  
www.uni-due.de

www.chemanager-online.com/tags/spektroskopie



Abb. 2: Handgehaltene Raman-Spektrometer mit 1.064-nm Laseranregung (© Rigaku Raman Technologies)

## BUSINESSPARTNER CHEManager

### CHEMIKALIEN

Valsynthese – fokussiert auf Ihre Phosgen-Bedürfnisse.



Société Suisse des Explosifs Group  
VALSYNTHESE SA Fabrikstrasse 48 / 3900 Brig / Schweiz  
T +41 27 922 71 11 / info@valsynthese.ch / www.valsynthese.ch

VALSYNTHESE

### GASE



bromarmes Chlor und Chlorwasserstoffgas für Kampagnen in der chemischen und pharmazeutischen Industrie

Cl<sub>2</sub> in Sicherheitsfässern á 500 und 1.000 kg  
HCl in Gasflaschen á 40 kg und in Sicherheitsfässern á 660 kg

C+S Chlogas GmbH · www.chlogas.de · info@chlogas.de · Tel. 08547-914 99 26

### LOGISTIK

#### Energie-Transport

Lithium-Produkte sicher transportieren und lagern



► LSU Schäberle bietet einen 360°-Service für den Transport und die Lagerung von Lithium-Produkten



LSU Schäberle Logistik & Speditions-Union GmbH u. Co. KG  
Motorstrasse 9 · 70499 Stuttgart · Deutschland  
Tel.: +49 711 83009 50 · www.lsu-schaerberle.com

### LOGISTIK

Schnell und einfach  
Messwerte überwachen.



### Funk-Datenlogger für Feuchte und Temperatur

Die Logger bieten sich überall dort an, wo Daten an schwer zugänglichen Stellen gemessen werden müssen.

- Einsparung der Verdrahtungskosten
- Digitaler Fühlereingang für austauschbare HygroClip2-Fühler
- Batterieaufzeiten bis zu 6 Jahren
- Grosse Speicherkapazität von bis zu 500'000 Messwerten
- Bis zu 100 Meter Übertragungsdistanz

Alles Weitere über Feuchte- und Temperaturmessung auf [www.rotronic.de](http://www.rotronic.de) oder unter Telefon 07243 383 250.

ROTRONIC Messgeräte GmbH  
Einsteinstrasse 17-23, D-76275 Ettlingen  
Tel. +49 7243 383 250, info@rotronic.de

rotronic  
FÜHREND IN FEUCHTEMESSUNG

## MEHR ALS NUR EINE EINKAUFSRUBRIK! BusinessPartner

GROSSE WIRKUNG – KLEINER PREIS

262 Euro inkl. Farbe\*

\*pro Ausgabe bei Buchung von 20 Ausgaben

Bestellung an:  
chemanager@gitverlag.com

CHEManager