



Application Note AN-RS-001

Identifizierung von Polymeren mittels Raman-Spektroskopie

Schnelle, zerstörungsfreie Bestimmung eingefärbter Kunststoffe

Trotz ihrer Präzision bei der Analyse von Polymeren hat die Raman-Spektroskopie Schwierigkeiten, farbige Kunststoffe aufgrund von Fluoreszenzstörungen durch Pigmente und Zusatzstoffe genau zu identifizieren. Die Ergebnisse der Polymeridentifizierung können unter diesen Bedingungen weniger zuverlässig sein.

Die Verwendung mehrerer Anregungswellenlängen, umfassender Referenzbibliotheken und der Einsatz fortschrittlicher Techniken verbessern die Zuverlässigkeit der Raman-Analyse. Die Raman-Lösungen von Metrohm bieten alle diese

Möglichkeiten und ermöglichen eine schnelle und genaue Polymeridentifizierung. Diese Application Note konzentriert sich auf die fortschrittliche XTR®-Technologie von Metrohm, die die Identifizierung von Substanzen verbessert, indem sie das Raman-Signal aus Spektren mit starker, verdeckender Hintergrundfluoreszenz eXTRhiert. Es werden verschiedene Arten von farbigen Polymeren untersucht, um die Vorteile der 785-nm-Raman-Spektroskopie mit der neuartigen XTR-Fluoreszenzunterdrückungstechnik aufzuzeigen.

EINFÜHRUNG

Diese Application Note beschreibt die Identifizierung von Poly(ethylenvinylacetat) - auch bekannt als PEVA, Polystyrol (PS) und Polypropylen (PP) - in gefärbten Kunststoffen mittels Raman-Spektroskopie.

Die Messungen mit dem tragbaren Raman-Spektrometer MIRA XTR erfordern keine

Probenvorbereitung und liefern sofortige und eindeutige Ergebnisse. Die schnelle und zerstörungsfreie Bestimmung erfolgt durch Anwendung des XTR-Algorithmus, gefolgt von einer automatischen Bibliothekssuche.

DURCHFÜHRUNG

Alle Spektren wurden mit MIRA XTR bei einer Wellenlänge von 785 nm und mit Orbital Raster Scan (ORSTM) im automatischen Erfassungsmodus gemessen. Durch das Auftreten von Fluoreszenz wird der XTR-Algorithmus automatisch ausgelöst und liefert ein hochauflösendes, Basislinien-korrigiertes Spektrum des Materials.

Bei allen Proben in dieser Studie handelte es sich um gängige Haushalts- und Büromaterialien, die durch direkten Kontakt mit dem intelligenten

Universalaufsatz (iUA) getestet wurden.

Die "Illicit and General Chemicals Library" von Metrohm ist eine umfassende Spektraldatenbank für gängige Materialien zur genauen Identifizierung von Mischproben. Jede Probe wurde mithilfe dieser Bibliothek in der Software MIRA Cal identifiziert. In **Abbildung 1** ist eine Reihe von Polymerstandards dargestellt, die im Raman-Spektrum deutliche Fingerabdrücke zeigen.

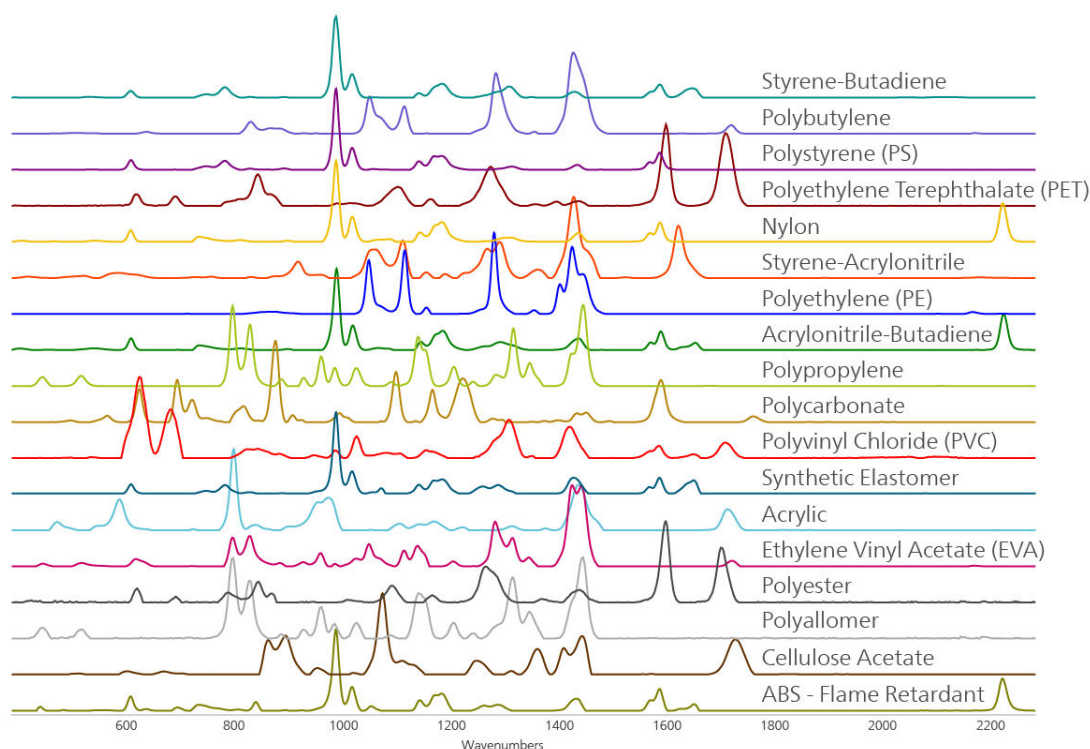


Abbildung 1. Gestapelte Raman-Bibliotheksspektren für eine breite Palette von Polymerproben zeigen, wie unterschiedlich die Raman-Fingerprint-Peaks der einzelnen Materialien sind.

Die Raman-Spektren verschiedener Gegenstände, die aus unbekannten Polymeren in unterschiedlichen Farben bestehen, wurden gesammelt (**Abbildung 2**)

und mit der MIRA-Bibliothek für illegale und allgemeine Chemikalien abgeglichen.

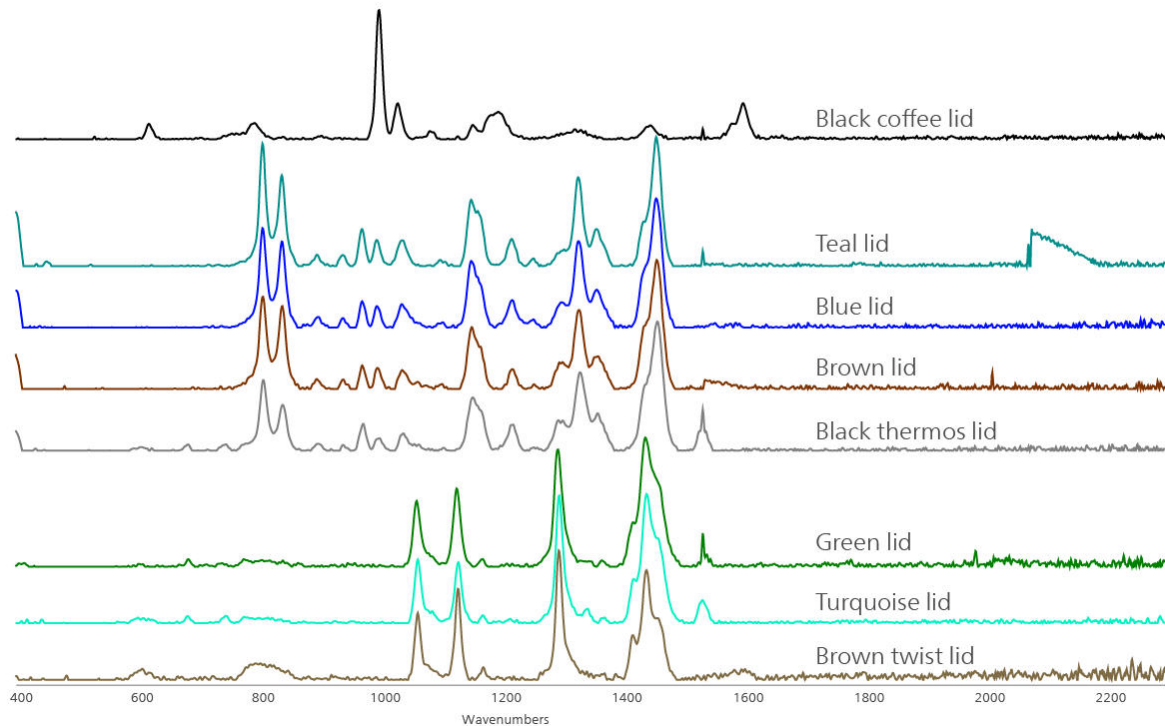


Abbildung 2. Aufgelöste, gestapelte Raman-Spektren von verschiedenen stark gefärbten Kunststoffen.

ERGEBNISSE

Die Ergebnisse werden innerhalb von Sekunden auf dem Gerät angezeigt und enthalten den Namen, die CAS-Nummer und den HQI (Hit Quality Index) - ein Maß für die Stärke der Korrelation zwischen Proben-

und Bibliotheksspektren. **Abbildung 3** veranschaulicht die Genauigkeit der Daten, die selbst bei stark gefärbten Proben durch den Vergleich von Proben- und Bibliotheksspektren erfasst werden.

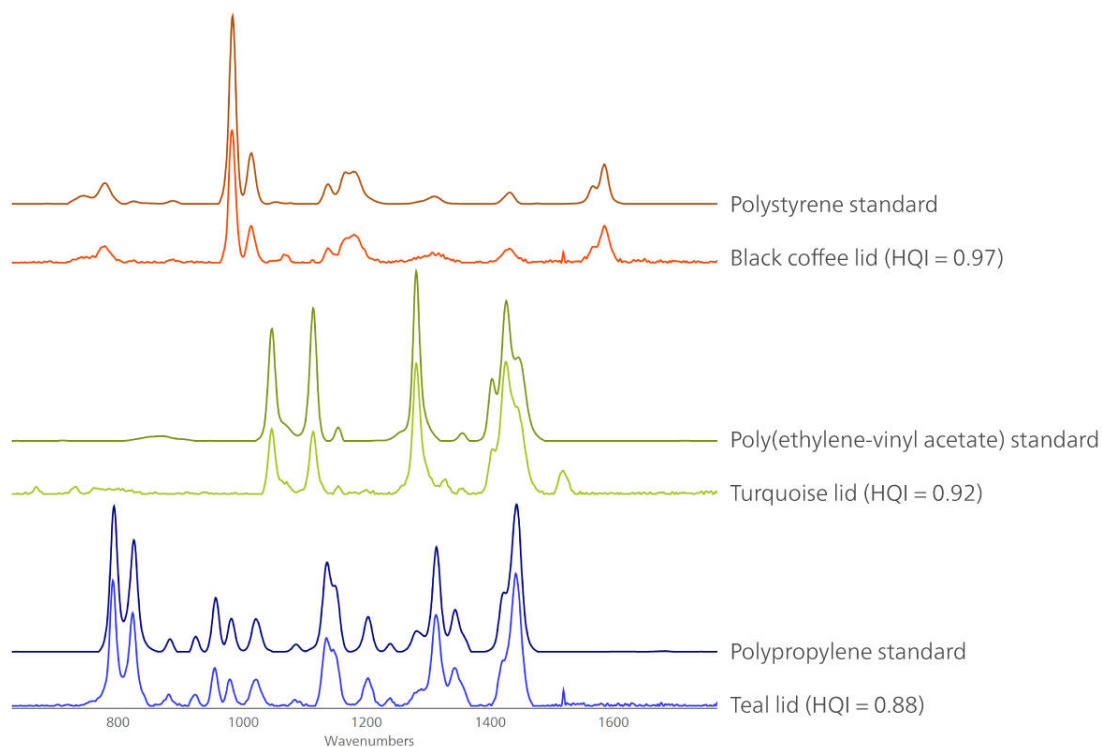


Abbildung 3. Ein direkter Vergleich von experimentellen und Bibliotheksspektren zeigt die Genauigkeit und Auflösung beider Spektren und Ergebnisse. Jede Kunststoffprobe wurde mit einem einzigen Bibliotheksspektrum mit hohen HQI-Werten verglichen.

FAZIT

Metrohm verfügt über einzigartige Lösungen, die das Problem der Fluoreszenz überwinden und gleichzeitig alle Vorteile der 785-nm-Abfrage beibehalten - eine

schnelle, genaue und zerstörungsfreie Identifizierung von farbigen Polymeren.

CONTACT

Metrohm Deutschland
In den Birken 3
70794 Filderstadt

info@metrohm.de

KONFIGURATION



MIRA XTR Advanced

MIRA XTR ist eine Alternative zu Hochleistungssystemen mit einer Laserwellenlänge von 1064 nm. MIRA XTR nutzt einen empfindlicheren Laser mit einer Wellenlänge von 785 nm und XTR-Algorithmen, um anhand fortschrittlicher rechnerischer Auswertungen die Raman-Daten aus der Probenfluoreszenz zu extrahieren. Zudem verfügt MIRA XTR über die Orbital-Raster-Scan-Technologie (ORS), um eine bessere Erfassung der Probe zu ermöglichen und die Genauigkeit der Resultate zu erhöhen.

Das MIRA XTR Advanced-Paket umfasst einen Kalibrierstandard, einen intelligenten Universalaufsatz, einen Winkelaufsatz, einen Vialaufsatz und einen MIRA SERS-Aufsatz. Ein Komplettpaket für jede Art von Analyse. Betrieb mit Klasse 3B. MIRA XTR unterstützt Bibliotheken für Raman-Handspektrometer von Metrohm.



Intelligenter Universalaufsatz (iUA)

Der iUA ist ein intelligentes Sammeloptikzubehör mit 3 Positionen für MIRA-Systeme. Der iUA bietet die Flexibilität eines Universalaufsatzes mit der intelligenten Funktionsweise der MIRA SmartTip-Aufsätze. Jede Position gibt den idealen Verwendungszweck dieser Position an, d. h. Oberfläche, Beutel oder Flasche.



MIRA Bibliothek verbotener und gängiger Chemikalien

MIRA (Metrohm Instant Raman Analyzer) Bibliothek verbotener Substanzen, einschliesslich Drogen, toxischer Industriechemikalien (TIC), toxischer Industriematerialien (TIM), Ausgangsstoffen und gängiger Chemikalien.