



NETZSCH

Polymererkennung mittels KIMW-Datenbank und *Identify*

Dr. Alexander Schindler und Dr. Tobias Pflock, NETZSCH-Gerätebau GmbH, Selb
Martin Doedt, KIMW Prüf- und Analyse GmbH, Lüdenscheld

Einleitung

Das Kunststoff-Institut Lüdenscheld [1], ein erfahrener Ansprechpartner in allen Kunststoff-Fragestellungen, hat über Jahre hinweg eine Materialdatenbank mit inzwischen mehr als 600 DSC-Kurven von handelsüblichen Polymeren aufgebaut. Dank einer Kooperation zwischen dem Kunststoff-Institut und NETZSCH-Gerätebau GmbH kann diese umfangreiche Datenbank jetzt in die Kurvenerkennungs-Software *Identify* innerhalb der *Proteus*[®]-Analyse eingebunden werden. Zusammen mit der automatischen, benutzerunabhängigen Auswertung von DSC-Messungen mittels *AutoEvaluation* wird dadurch Polymeranalytik, z.B. zur Identifizierung, Schadensanalyse und Qualitätskontrolle, nicht nur einfacher, sondern auch aussagekräftiger [2].

Was bietet *Identify*?

Das Datenbanksystem *Identify* wurde zum direkten Abgleich und damit zur Zuordnung und Interpretation von DSC-Kurven eingeführt, kann aber inzwischen auch für $\Delta L/L_0$ -Messungen, die von DIL und TMA-Geräten stammen), für c_p -Daten von DSC-Geräten und seit Kurzem für TG-Messungen verwendet werden [3]. Ist *Identify* einmal innerhalb *Proteus*[®] verfügbar, kann es automatisch für alle Signaltypen der unterstützten Geräte genutzt werden und der Anwender hat immer Zugriff auf die gesamte Datenbank mit all ihren Möglichkeiten, wie z.B. die Überlagerung der aktuellen Messkurve mit beliebigen Datenbankkurven – auch von unterschiedlichem Daten-Typ.

Der gesamte NETZSCH-Teil der Datenbank umfasst bereits mehr als 1100 Einträge aus den Feldern Polymere, Organik, Nahrungsmittel und Pharma, Keramik und Anorganik, Metalle und Legierungen, sowie chemische Elemente (siehe Abbildung 1). Diese Einträge setzen sich aus Messungen und Literaturdaten zusammen, welche von unterschiedlichem Daten-Typ sind (DSC, TG, DIL/TMA und c_p). Anwender können selbstverständlich Bibliotheken mit eigenen Messungen und Literaturdaten anlegen bzw. erweitern und über das Computer-Netzwerk zusammen mit anderen Anwendern gleichzeitig nutzen.

Grundsätzlich bietet *Identify* verschiedene Such-Algorithmen, die Datenbanksuche lässt sich auf bestimmte Temperaturbereiche einschränken und die Ergebnisse lassen sich nach verschiedenen Kriterien, wie z.B. den Messbedingungen, filtern.

Search Libraries:	
Library	Entries
<input checked="" type="checkbox"/> Alloys Poster NETZSCH	42
<input checked="" type="checkbox"/> Ceramics Poster NETZSCH	32
<input checked="" type="checkbox"/> Ceramics_Inorganics NETZSCH	255
<input checked="" type="checkbox"/> Elements Poster NETZSCH	104
<input checked="" type="checkbox"/> Metals_Alloys NETZSCH	135
<input checked="" type="checkbox"/> Organics_Food_Pharma NETZSCH	309
<input checked="" type="checkbox"/> Polymers DSC KIMW	600
<input checked="" type="checkbox"/> Polymers NETZSCH	176
<input checked="" type="checkbox"/> Polymers Poster NETZSCH	70

1 Bibliotheken innerhalb von *Identify* (Stand: 12/2016)

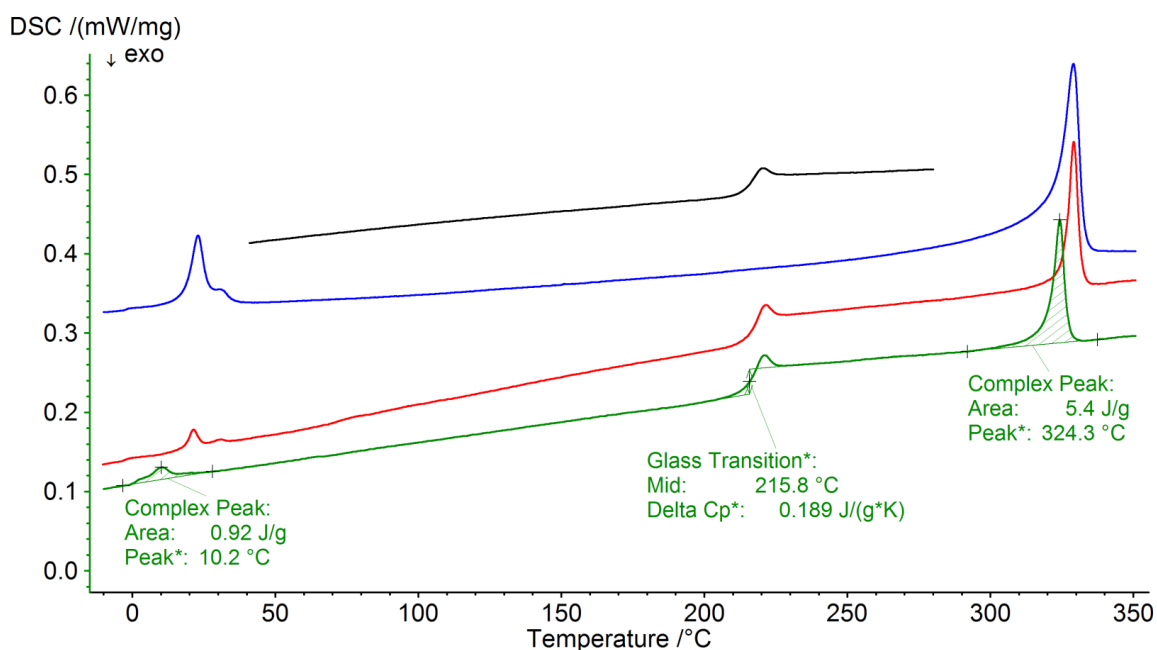
Die Vorteile der KIMW-Datenbank

Während der NETZSCH-Teil der *Identify*-Datenbank vor allem durch seine Material- und Methodenvielfalt überzeugt, bringt der optionale KIMW-Teil zusätzlich eine bisher unerreichte Tiefe im Bereich DSC an Polymeren: Er beinhaltet 600 DSC-Messungen, die etwa 130 verschiedene Polymertypen und Blends widerspiegeln. Das heißt, zu vielen Polymertypen liegen Messungen an verschiedenen Produkten desselben Typs vor, die durchaus signifikant unterschiedliche DSC-Profile aufweisen können. Zu der Fülle an DSC-Kurven kommt der Vorteil hinzu, dass zu jedem der 600 Polymere der genaue Handels- und Herstellername sowie die Farbe und der Füllstoffgehalt hinterlegt sind.

In der Summe werden die 600 DSC-Kurven der KIMW-Datenbank durch die Integration in *Identify* direkt und intelligent nutzbar – entweder durch rein visuellen Vergleich oder zur automatischen Erkennung eines Polymers, wie im folgenden Beispiel gezeigt.

Erkennung eines Polymerblends

Die Abbildungen 2 und 3 illustrieren eine exemplarische Datenbanksuche, wobei als Input-Kurve eine in der KIMW-Datenbank bereits hinterlegte Messung am Polymerblend „PEI-PTFE Ultem 4001“ dient. Die Ergebnisse von *AutoEvaluation* und *Identify* erscheinen nach nur einem Klick: Zunächst erfolgt eine automatische Detektion und Auswertung der Effekte, wobei in diesem Fall ein endothermer Effekt im Temperaturbereich zwischen etwa 0 °C und 30 °C, ein Glasübergang bei etwa 216 °C und ein weiterer endothermer (Schmelz-)Effekt bei 324 °C Peak-Temperatur gefunden wurden. Die Datenbanksuche ergab als ähnlichste Treffer dieselbe Kurve sowie ein weiteres PEI-PTFE-Blend, aber auch Messungen an reinem PTFE bzw. PEI (siehe Abbildung 3). Im Gegensatz dazu wurden die DSC-Kurven der meisten anderen Polymertypen wegen sehr viel geringerer Ähnlichkeit diskriminiert, d.h. sie wurden ausgeschlossen. Für weitere Details wie Messbedingungen oder Interpretation der Effekte sei auf Referenz [2] verwiesen.



2 Vergleich der DSC-Kurven des Polymerblends „PEI-PTFE Ultem 4001“ (grün) mit der Datenbankkurve für „PEI-PTFE Luvocom 11067223“ (rot) und mit typischen Datenbankkurven für PTFE (blau) und PEI (schwarz). Die Kurven wurden zur besseren Darstellung in y-Richtung gegeneinander verschoben.

Measurement/Literature Data		Similarity [%]	Class		Similarity [%]
PEI-PTFE_Ultem_4001_DSC		100,00	+ PEI-PTFE (2)		83,15
PEI-PTFE_Luvocom_1106-72...		66,31	+ PTFE (3)		50,90
PTFE_5-15G_DSC		54,09	+ PESU-PTFE (1)		48,40
PTFE_1-24G_DSC		53,74	+ PEBA (2)		37,98
PESU-PTFE_Ultrason_KR_41...		48,40	+ PPA-PTFE (1)		35,00
PTFE_Algoflon_L203_DSC		44,88	+ LCP-PTFE (1)		30,40
PEI_Ultem_1000_DSC		43,74	+ EVM (1)		29,95
PEI_Ultem_2312_GP30_DSC		43,68	+ PEEK-PTFE (1)		29,37
			+ PEI (14)		27,92

3 Ergebnisse der *Identify*-Datenbanksuche bzgl. der Probe „PEI-PTFE Ultem 4001“. Die linke Trefferliste bezieht sich auf den Vergleich mit Einzelmessungen, die rechte Trefferliste auf Klassen, d.h. definierte Gruppierungen (die Zahl in Klammern gibt jeweils die Anzahl der Messungen in der Klasse an).

Zusammenfassung

Die in *Identify* integrierte KIMW-Datenbank ermöglicht den direkten Abgleich einer Messung mit vielen Hundert DSC-Kurven der meisten handelsüblichen Polymere. Dadurch wird Polymer-Erkennung sowohl einfacher als auch zuverlässiger!

Literatur

- [1] <http://kunststoff-institut-luedenscheid.de/>
 - [2] M. Doedt, A. Schindler, T. Pflock. DSC-Auswertung mit einem Klick – Datenbank-Integration und Evaluationssoftware vereinfachen Polymeridentifizierung. *Kunststoffe* 10/2016. S.189-191
 - [3] A. Schindler, C. Strasser, S. Schmolzer, M. Bodek, R. Seniuta, X. Wang. Database-Supported Thermal Analysis Involving Automatic Evaluation, Identification and Classification of Measurement Curves. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, DOI 10.1007/s10973-015-5026-x
- [Zum Artikel](#)