APPLICATION NOTE

Smarte thermische Analyse: Messungen gesucht?

Dr. Alexander Schindler



Einleitung

Stellen Sie sich die typische Situation im Laboralltag vor: Eine neue Probe soll analysiert werden, aber was sind die geeigneten Messbedingungen wie Temperaturprogramm, Probeneinwaage oder der richtige Tiegel? Und welche Messergebnisse sind zu erwarten? Aber vielleicht wurde eine solche Probe bereits in der Vergangenheit von Ihnen oder von NETZSCH gemessen. Wäre es nicht sehr hilfreich, eine Suche in einer Datenbank für thermische Analyse durchzuführen? *Identify*, Bestandteil der *Proteus*[®]-Analysesoftware, ist die Lösung!

Der ursprüngliche Zweck des *Identify*-Datenbanksystems ist die automatische Erkennung und der Vergleich von Messkurven. Dies dient beispielsweise der Qualitätskontrolle und Fehleranalyse. Reines Data-Mining (Speichern, Suchen und Finden von Daten) ist natürlich die zweite Hauptanwendung.



Wie funktioniert Data-Mining mittels Identify?

Ein Ansatz zur Verwendung von *Identify* ist die Suche nach ähnlichen Messkurven oder Literaturdaten auf Basis einer Messkurve. Dies ist in Abbildung 1 veranschaulicht, in der eine Messung mittels thermomechanischer Analyse (TMA) mit verschiedenen Datenbankkurven am gleichen Material verglichen wird. Die ähnliche TMA-Kurve wurde mittels *Identify* automatisch gefunden, die DSC- und TG-Kurven wurden in diesem Fall einfach durch alphabetisches Sortieren aller gezeigten Datenbankmessungen gefunden. Interessant zu sehen ist, dass der Glasübergang zwischen -70 °C und -60 °C auftritt (siehe auch die dynamische Differenzkurve, DSC) und dass die Zersetzung, die für gewöhnlich bei DSC- oder TMA-Messungen vermieden werden sollte, bei über 150 °C langsam einsetzt, was in der Thermogravimetrie (TG)-Kurve ersichtlich ist.



1 *Identify* -Datenbanksuche auf Basis einer TMA-Kurve an einer NR (Naturkautschuk)-Probe. Überlagert ist eine ähnlich TMA-Kurve, eine DSC- und eine TG-Kurve von NR, die in der Datenbank gefunden wurde.



Die zweite Herangehensweise zum Data-Mining, bei der keine ähnliche Eingabemessung benötigt wird, steht in Zusammenhang mit der Funktion "Manage Libraries/ Classes" (siehe Abbildung 2). In diesem Fall wurde "NR" manuell in das Suchfeld für Messungen und Literaturdaten eingegeben und folglich wurden die drei verschiedenen NR-Messungen gefunden. Durch das Wiederherstellen einer beliebigen Datenbankmessung, was einfach über die rechte Maustaste erfolgt, wird die Messung geöffnet, in der auch die Messbedingungen wie Temperaturprogramm, Probeneinwaage, Spülgase und Probentiegel im Detail zu sehen sind.

braries Folders Classes					
Libraries					
Name		Ent	ries	^	New
Pharma_Food_Cosmetics NETZSCH		239			Rename
Polymers DSC KIMW	1100				
Polymers NETZSCH		190			Delete
Folymers Foster NETZSCH			~		
Measurements/Literature Data					
NR					
			_		
Name	Effects	DIL	Ср		New
NR_DIL	0	x			Edit
NR_DSC NR_TGA Restore State					Delete
					201010
Fffects					
Name					View
Glass Transition at -61 71°C (Mid)				11	
Endothermic Effect at 24,17°C (Onset)					
DIL/TMA and Cp Data					
DIL/TMA and Cp Data					View
DIL/TMA and Cp Data					View
DIL/TMA and Cp Data					View
DIL/TMA and Cp Data Name					View
DIL/TMA and Cp Data Name					View

2 Suche innerhalb der *Identify*-Datenbank durch Verwendung des Namenfilters (siehe roter Kreis)



Nicht zuletzt bietet Identify auch die Möglichkeit, nach der Aufheizrate oder Probeneinwaage zu filtern und ob Glasübergänge oder endotherme und exotherme Effekte ausgewertet wurden. Ob eine Buchstabenfolge in einem Messnamen vorkommt oder nicht, kann ebenfalls ein Filterkriterium sein (siehe Abbildung 3).

Datenbankinhalt von Identify

In Abbildung 4 sind die NETZSCH-Bibliotheken mit derzeit 1294 Einträgen gezeigt, die unterschiedliche

Settings × Algorithm User Database General Quality Control Filtering Database entries are included in the search only when: 1.00 🜲 20.00 🖨 K/min Heating Rate is in the range of and 20,00 🖨 mg Sample Mass is in the range of 1,00 🜲 and Glass Transition Effects occur* Endo- or Exothermic Effects occur* *Select one of these filters to search for entries with only one type of caloric effect. Select both filters to search for entries with both effect types. The character string NR is part of its name The character string is not part of its name OK Cancel

3 Filtereinstellungen innerhalb von Identify

Search Libraries:		
Library	Entries	
🗉 Literature Data Poster NETZSCH	248	
Ceramics_Inorganics NETZSCH	302 🗸	
Metals_Alloys NETZSCH	143 🗸	NETZSCH
Organics NETZSCH	172 🗸	NET20011
Pharma_Food_Cosmetics NETZSCH	239 🗸	User
Phase Change Materials	14 🔽	
Polymers DSC KIMW	1000 🔽	KIMW
Polymers NETZSCH	190 🗸	

Inhalte der Identify-Datenbank: standardmäßig enthaltenen NETZSCH-Bibliotheken (1294 Einträge), die optionale KIMW-Bibliothek (1000 Einträge) und eine examplarische, vom Benutzer erstellte Bibliothek.

che Polymere, in der auch Informationen über den Polymerlieferanten, Farbe und Gehalt des Füllstoffmaterials verfügbar sind.

Applikationsbereiche (Keramiken, Anorganik, Metalle, Legierungen, Organik, Lebensmittel, Kosmetik und Poly-

mere) abdecken. Optional erhältlich ist die vom Kunst-

stoffinstitut Lüdenscheid entwickelte KIMW-Datenbank

mit DSC-Kurven für 1000 unterschiedliche handelsübli-

Zusammenfassung

Insgesamt lässt sich sagen, dass Messungen, zugehörige Messbedingungen und -auswertungen für alle in *Identify* gespeicherten Messungen einfach gefunden und abgerufen werden können. Dieser Wissensschatz kann vor und nach jeder Messung hilfreich sein.

Referenzen

Dieser Artikel ist auch als Blog vorhanden: https://ta-netzsch.com/smart-thermal-analysis-measurements-wanted

Diese verwandten Blogartikel könnten auch von Interesse für Sie sein:

<u>Smart Thermal Analysis (Part I)</u>: *AutoEvaluation* of DSC, TGA and STA curves

<u>Smart Thermal Analysis (Part II)</u>: Identification of Measurements via Database Search

<u>Smart Thermal Analysis (Part IIb)</u>: *Identify* ... the Most Comprehensive Database in Thermal Analysis

Smart Thermal Analysis (Part III): *AutoEvaluation* of DIL and TMA curves

<u>Smart Thermal Analysis (Part III)</u>: AutoEvaluation of DIL and TMA curves

