

# Über die Anwendung von *Identify*, einer thermoanalytischen Datenbank

Ekkehard Füglein

NETZSCH-Gerätebau GmbH, Wittelsbacherstraße 42, 95100 Selb

Eine für Analytiker etablierte und immer schon essentielle Vorgehensweise ist der Vergleich eigener Messergebnisse mit Referenzwerten und Literaturdaten. Bei einigen gängigen spektroskopischen Verfahren wie der Massenspektrometrie (MS) oder der Fourier-Transform Infrarotspektroskopie (FT-IR) haben sich softwaregestützte Bibliotheken bewährt. Mit deren Hilfe können eigene Messergebnisse mit in Datenbanken archivierten Spektrensammlungen in der identischen graphischen Darstellung verglichen und hinsichtlich ihrer Unterschiede bewertet werden.

Für die Methoden der Thermischen Analyse waren solche softwarebasierten Bibliotheksvergleiche bislang nicht verfügbar. G. Liptay et al. erstellten in den 1970er Jahren einen fünfbändigen Atlas, in dem über 400 anorganische und organische Substanzen untersucht und deren Ergebnisse inklusive der Messbedingungen und einer knappen Interpretation der veröffentlicht wurden [1]. Es folgten weitere Ergebnissammlungen mit den Schwerpunkten Polymere [2] und Kopplungstechniken [3]. Jedoch stehen naturgemäß alle gedruckten Werken für Ähnlichkeitsvergleiche und Suchroutinen durch eine Auswertesoftware nicht zur Verfügung, weshalb ein zeitgemäßes Werkzeug für die Auswertung thermoanalytischer Daten bislang schmerzlich vermisst wurde.

Mit der Datenbank *Identify* besteht nun erstmals auch in der Thermischen Analyse die Möglichkeit solcher softwarebasierten Bibliotheksvergleiche [4]. Diese eignen sich nicht nur für die Identifizierung von unbekanntem Proben, sondern auch zur Erkennung von Mischungsverhältnissen [5]. An mehreren Proben wird gezeigt, dass mit Hilfe von *Identify* neben der eigentlichen Erkennung von Polymertypen auch die Charakterisierung von Polymergemischen sowie deren Klassifizierung möglich ist.

Literatur:

- [1] G. Liptay, "Atlas of Thermoanalytical Curves" (TG-, DTG-, DTA-Curves measured simultaneously), Akadémiai Kiadó, Budapest, **1976**
- [2] E. Kaisersberger, H. Möhler, „DSC on Polymeric Materials“, NETZSCH Annual for Science and Industry, Volume 1, ©NETZSCH-Gerätebau GmbH, D-8672 Selb, **1991**
- [3] R. Schönherr, "TGA-FTIR Atlas Elastomere", Verlag W.K. Schönherr, D-Burgdorf, **1996**
- [4] A. Schindler, Automatic evaluation and identification of DSC Curves, Plastics engineering. 2014. [www.plasticsengineering.org/node/8443](http://www.plasticsengineering.org/node/8443)
- [5] E. Füglein, E. Kaisersberger, „About the development of databases in thermal analysis“, *J Therm Anal Calorim* 1, **2015**, 32 (DOI: 10.1007/s10973-014-4381-3)