

„NIR-Spektroskopie und Chemometrie“

am 21./22. September 2010 in Essen

Zielgruppe

Neu eingestiegene und zukünftige Anwender der NIR-Spektroskopie, die NIR-Systeme betreuen und später auch NIR-Methoden entwickeln wollen. Grundkenntnisse der (instrumentellen) analytischen Chemie sind von Vorteil, aber nicht Bedingung

Physikalische Grundlagen der NIR-Spektroskopie

- Was ist Spektroskopie und was ist das Besondere an der Nahinfrarot-Spektroskopie?
- Wie entsteht ein NIR-Spektrum, warum sieht es so ungewohnt aus und welche Informationen enthält es?
- Wie wirken sich physikalische und chemische Eigenschaften der Probe aus?
- Was kann man überhaupt mit NIR messen und was nicht?
- Was sind die Unterschiede und Gemeinsamkeiten im Vergleich zum visuellen Spektralbereich und zur Spektroskopie im mittleren Infrarot?

NIR-Spektrometer: Funktionsweise der verschiedenen Typen

- Systematische Klassifizierung aller wichtigen Typen von NIR-Spektrometern
- Prinzipielle Funktionsweise der einzelnen Bauarten von NIR-Spektrometern
- Neue Entwicklungen auf dem Gebiet der NIR-Spektrometertechnik
- Vergleich der Leistungsfähigkeit und Anwendungsgebiete der wichtigsten Bauformen

Außerdem: Wie kommt die Probe zum Spektrometer? Übersicht der verschiedenen Meßverfahren und Sonden sowie praktische Demonstration des Meßvorgangs an verschiedenen Probenformen.

Chemometrie: Nicht so schwer, wie es sich anhört!

NIR-Spektroskopie und chemometrische Auswertung gehören untrennbar zusammen. Wichtiger, als die zugegebenermaßen nicht ganz einfache Mathematik zu verstehen, ist es, sich an die chemometrisch/statistische Denkweise zu gewöhnen. Dieser Abschnitt des Kurses zeigt, warum Chemometrie notwendig ist und was hier anders ist, als in der klassischen Analytik.

Datenvorbehandlung

Die verschiedenen Methoden zur mathematischen Vorbehandlung von NIR-Spektren sind unverzichtbar bei der Erstellung robuster, industrietauglicher Kalibrierungen. Leider werden sie oft falsch angewendet. Sehen Sie im Grundkurs, welche Methode für welche Pro-

blemstellung angemessen ist und wie Sie häufige Fehler vermeiden.

Quantitative Auswertung

Von der analytischen Aufgabe zur NIR-Methode: Ohne die Mathematik zu sehr zu bemühen, zeigt dieser Kursteil, wie eine quantitative, chemometrische Methoden für die NIR-Spektroskopie erstellt wird. Dabei werden auch folgende Fragen beantwortet:

- Wie fängt man überhaupt an?
- Welche und wieviel Proben braucht man zur Kalibrierung?
- Wann ist eine Methode gut, wann ist sie schlecht?
- Welche Probleme können auftauchen, wie werden sie gelöst und wie beugt man vor?
- Welche Algorithmen gibt es, wo werden sie eingesetzt?
- Was ist Methodvalidierung, welche Verfahren gibt es?

Grafische Interpretation bei der Methodenentwicklung und -validierung

Auch wenn hinter den chemometrischen Methoden für die NIR-Spektroskopie sehr viel Mathematik steckt: Im Wesentlichen müssen bei der Methodenentwicklung eine ganze Reihe von Grafiken ausgewertet werden. Im Grundkurs erlernen Sie die Interpretation der wichtigsten Standardgrafiken, wie Sie von spezieller Chemometriesoftware und den meisten Programmen der Spektrometerhersteller erzeugt werden.

Qualitative Auswertung / Identitätsbibliotheken

Im Grundkurs wird die häufigste qualitative Anwendung, die Erstellung von Identitätsbibliotheken, behandelt. Die Eigenschaften, Vor- und Nachteile der verschiedenen Algorithmen werden diskutiert, ohne die zugrundeliegende Mathematik im Detail zu betrachten. Thema ist die grundsätzliche Vorgehensweise bei der Erstellung von NIR-Bibliotheken und es werden häufige Fehler und Problemstellen diskutiert.