

# CHIMIA REPORT/COMPANY NEWS

Firmen stellen sich und ihre Produkte vor  
Companies present themselves and their products

Interested in a contribution? Please contact  
Swiss Chemical Society, info@scg.ch, +41 31 306 92 92

## NIR-Spektroskopie mit Spassfaktor

**OMNIS NIRS räumt mit althergebrachten Ansichten über die Nahinfrarot-Spektroskopie auf, denn es ist einfach zu bedienen, braucht kaum Kenntnisse in Chemometrie und macht die Modellerstellung zum Kinderspiel.**

### Mehrere Parameter gleichzeitig bestimmen

Die NIR-Spektroskopie gehört zu den Methoden der Schwingungsspektroskopie und untersucht die Schwingungsmuster von Molekülen. Diese hinterlassen einen einzigartigen «Fingerabdruck», der im Gerät automatisch in ein lesbares Ergebnis umgewandelt wird. Je nach Aufgabe kann man die Identität einer Substanz bestätigen oder Mengenanteile von Inhaltsstoffen bestimmen – bei der Quantifizierung oft auch mehrere Parameter gleichzeitig. Häufig lassen sich sogar physikalische Eigenschaften molekularer Ursprünge messen.

### Vereinfachte Routineanalysen

Die Anwendung ist unkompliziert und erfordert nur geringe Vorkenntnisse. Es werden keine Chemikalien oder Lösemittel verwendet, was Abfall vermeidet. Die Messung dauert dank neuer Technologie meist weniger als eine Minute. Die Probenvorbereitung ist minimal, die Geräte sind kompakt. Alle Aspekte, die in der Routineanalytik üblicherweise Schwierigkeiten bereiten und teuer sind, entfallen. Das ist ein grosser Vorteil, insbesondere wenn Kosten gesenkt werden müssen.

### NIR-Spektroskopie – aufwändige Modellerstellung

Und wo ist dann also der Haken? NIR-Spektroskopie ist eine Sekundärmethode. Man muss dem System vorgängig beibringen, welchem Spektrum ein bestimmtes Ergebnis entspricht. Zum Erarbeiten eines Modells braucht man einen Satz Trainingsspektren mit bekannten Referenzwerten. Auf dieser Basis kann man ein Modell errechnen, was bislang gute Kenntnisse in Chemometrie erforderte.



Schnell, kompakt und mit anderen Methoden kombinierbar: Das sind einige der Vorzüge von OMNIS NIRS.

### Neue Technik – weniger Hürden

Vorkenntnisse in Chemometrie sind mit dem neuen OMNIS NIRS nicht mehr zwingend erforderlich. Geeignete Primärmethoden wie beispielsweise die Titration können mit der NIR-Spektroskopie verbunden werden und das integrierte Methoden-Erstellungstool OMD (OMNIS Model Developer), berechnet die Modelle vollautomatisch. Erfahrene NIR-Spezialisten haben versucht, die Ergebnisse von OMD manuell zu verbessern und sind daran gescheitert. Dieser Punkt geht an den Algorithmus!



«Good vibrations» in Ihrem Labor mit dem neuen OMNIS NIR-Spektrometer.

Selbstverständlich können auch andere Methoden genutzt werden, um geeignete Referenzproben zu erzeugen, beispielsweise das gesamte Spektrum der Chromatografie.

Wer nicht die Zeit und Kapazität für die Erstellung eines eigenen Kalibrationsmodells hat, kann mit bestehenden, käuflichen Vorkalibrierungen arbeiten. Die Anzahl verfügbarer Vorkalibrierungen wächst kontinuierlich. Diese können als Einstieg genutzt oder mit eigenen Spektren ergänzt werden, um die Genauigkeit zu erhöhen. Je nach Anspruch ist dies der Königsweg.

Das Arbeiten mit dem neuen OMNIS NIRS Spektrometer ist einfach, schnell und bringt «Good Vibrations» auch in Ihr Labor.

### Contact

Metrohm Schweiz AG  
Industriestrasse 13  
4800 Zofingen  
Schweiz  
Phone: +41 62 745 28 28  
Email: info@metrohm.ch  
Website: www.metrohm.ch

