

Fragen zur Arbeitsweise von nicht-hochauflösenden FT-IR Analysatoren bei der quantitativen Messung von Gasgemischen

1. Wofür soll das Spektrometer verwendet werden ? Gasmessung oder Forschung ?

Dies ist die wichtigste Frage für den Benutzer. Die gesamte analytische Genauigkeit bei der quantitativen Gasmessung sollte einer der wichtigsten Gesichtspunkte bei der Auswahl des Analysators sein. Aber auch Faktoren wie Bedienung und Kalibrierung sollten eine Rolle spielen. Laborgeräte bieten zwar Vorteile hinsichtlich der Auflösung, wie sie zu Forschungszwecken benötigt wird. Jedoch eignet sich der GASMET für die industrielle Gasanalytik wesentlich besser, da er speziell dafür entwickelt wurde. Er liefert schnell Meßresultate und ist bei Bedarf leicht an jede Meßstelle zu transportieren. Transport und Inbetriebnahme von Laborsystemen sind aufwendiger.

2. Braucht mein Analysator eine hohe Auflösung ?

Hohe Auflösung bietet bei der quantitativen Gasmessung keine wirklichen Vorteile. Die IR- Spektren z.B. von organischen Gasen und Dämpfen zeigen oft nur breite, meist auch mit Laborspektrometern nicht auflösbare Banden.

3. Wie ist das Signal/Rausch- Verhältnis ?

Hochauflösende Spektrometer besitzen ein schlechteres Signal/Rausch- Verhältnis als solche mit geringerer Auflösung. Und das Signal/ Rausch- Verhältnis bestimmt die Genauigkeit der quantitativen Messung, nicht die Auflösung. Der GASMET besitzt deshalb kleinere Nachweisgrenzen bei hoher Genauigkeit der Ergebnisse. Das bessere Signal/Rausch- Verhältnis des GASMET wird durch eine größeren Energiedurchsatz sowie durch kürzere Interferogramme erreicht. Der Energiedurchsatz ist optimiert, um alle Vorteile der geringeren Auflösung zu erhalten. Bei der Standardauflösung von 8 cm^{-1} resultiert ein Signal/Rausch- Verhältnis, welches um den Faktor 700 besser ist als bei $0,1 \text{ cm}^{-1}$ Auflösung. Ein hochauflösendes Spektrometer kann nicht die Eigenschaften des GASMET erreichen, selbst wenn dessen Auflösung variabel ist. Hochauflösende Spektrometer benötigen z.B. kleine Detektoren. Auch beim Arbeiten mit geringerer Auflösung würde die kleine Detektorfläche nicht ausreichen, um den gesamten Lichtstrahl zu erfassen. Der Energiedurchsatz bliebe unverändert kleiner.

4. Welcher Detektor wird verwendet ?

Der GASMET arbeitet mit einem thermoelektrisch (Peltier) gekühlten MCT-Detektor. Der Detektor ist schnell und bietet die gleichen Vorteile wie ein mit flüssigem Stickstoff gekühlter Laborgeräte- Detektor. Typische hochauflösende Spektrometer benötigen zur Kühlung des MCT-Detektors flüssigen Stickstoff. Der Umgang damit ist umständlich und auf das Labor begrenzt. Außerdem verursacht flüssiger Stickstoff Kosten. Alternative DTGS- Detektoren in Laborgeräten sind langsamer und benötigen längere Meßzeiten. Sollten bestimmte Eigenschaften wie ein erweiterter Wellenlängenbereich benötigt werden, kann auch der GASMET mit einem DTGS-Detektor oder mit Stickstoff- gekühltem MCT-Detektor ausgestattet werden.

5. Wie ist die Scan-Zeit ?

Der GASMET mißt 10 Spektren in der Sekunde. Diese Schnelligkeit hat Vorteile, denn akustische Frequenzen werden eliminiert und die Messung wird zuverlässiger. Wird in einem hochauflösenden Laborgerät ein DTGS-Detektor verwendet, ist die Meßzeit länger. Unter Umständen verändert sich die Gaszusammensetzung und die Ergebnisse sind nicht reproduzierbar. Der Gasfluß muß während der Messung gestoppt werden. Die Meßzeit des GASMET ist kurz. Der Anwender bestimmt die Meßzeit und damit die gemittelten Ergebnisse der Scans.

6. Wie ist der Einfluß von Temperatur und Druck?

Änderungen von Temperatur und Druck des Meßgases beeinflussen das Spektrum. Typischerweise werden diese Effekte in gering auflösenden Spektrometers wenig sichtbar.

In hochauflösenden Spektrometers können diese Effekte sogar die Kalibrierung verändern.

Besonders dann, wenn anorganische Gase wie z.B. Wasser in höherer Konzentration vorhanden sind. Geringer auflösende Spektrometer sind wesentlich robuster. Der GASMET arbeitet äußerst stabil, auch bei Vibrationen, Schocks und Temperaturänderungen. Hochauflösende Spektrometer neigen aufgrund der komplexeren Bauweise zu aufwendiger und teurer Wartung oder Reparatur.

7. Wie verhält es sich mit dem dynamischen Meßbereich ?

Der große dynamische Meßbereich von gering auflösenden Spektrometern beruht auf dem nicht-linearen Verhalten der Absorptionssignale und dem besserem Signal/Rausch- Verhältnis.

Einfache Moleküle wie z.B. CO, NO, HCN, HCl verhalten sich im Spektrum nicht linear, wenn die Konzentration ansteigt. Durch eine einfache Mehrpunkt- Kalibrierung innerhalb der CALCMET- Software kann dieser Effekt ausgeglichen und ein großer dynamischer Meßbereich erreicht werden. Aufgrund des guten Signal/Rausch- Verhältnisses sind auch Messungen im Spurenbereich möglich. Der große dynamische Meßbereich erlaubt Messungen mit unterschiedlichen Konzentrationen. Sonderzubehör ist nicht unbedingt notwendig. Die Entwicklung der Anwendung ist wesentlich einfacher.

8. Was soll die Software tun ?

Die Software von Laborgeräten ist für Molekularforschung und wissenschaftliche Labors entwickelt. Bei den meisten Spektrometern müssen hingegen eine Reihe von Gemischen hergestellt werden. Dies ist ein aufwendiger Vorgang, dem jeder Anwender begegnen wird. Hinzu würden noch kundenseitige PLS- Rechnungen kommen. Die GASMET Software ist hinsichtlich der einfachen Quantifizierung von Gasgemischen jeder Laborsoftware überlegen. Der Algorithmus der GASMET- Software kommt bei der Kalibrierung mit den Spektren der einzelnen Komponenten aus. Die CALCMET- Software ist als einzige für die besonders einfache quantitative IR- Spektrenauswertung patentiert.

9. Wie ist die Rolle von käuflichen Spektrensammlungen ?

Die Genauigkeit der Ergebnisse wird schlechter, wenn käufliche Spektrensammlungen verwendet werden. IR- Spektren lassen sich nicht ohne weiteres von einem Instrument zum anderen übertragen. Jeder GASMET- Analysator wird für die optimale Genauigkeit individuell kalibriert. Dies ist einfach durch die Aufnahme von Einzelspektren. Die vorhandene GASMET- Spektrensammlung ist auf GASMET- Analysatoren erstellt worden und erlaubt Messungen mit hinreichender Genauigkeit.

10. Wieviel Speicherplatz wird benötigt ?

Ein GASMET- Spektrum benötigt 5 KB Speicher. Auf einer 2 GB Festplatte könnten demnach ca. 400 000 Spektren gespeichert werden (fast 1 Spektrum pro min pro Jahr).

11. Wie ist der praktische Einsatz ?

Die Software von Laborsystemen ist schwieriger in der Bedienung und enthält Funktionen, die bei der realen quantitativen Gasanalyse nicht benötigt werden. Laborsysteme sind meist für Personen mit spektroskopischem Fachwissen erstellt.

Der GASMET ist für Ingenieure und für den praktischen Einsatz entwickelt. Dies gilt für die Hardware und besonders für die Software.