

Erweiterung der digitalen FT-IR-Spektrenbibliothek – anhand einer Kalk-Gips- Putz-Reihe

Henry Wagner

Einleitung

Die IR-Spektroskopie zählt, insbesondere seit Einführung der Fouriertransformations-IR-Spektrometer, zu den wichtigsten physikalisch-chemischen Analysemethoden, um Substanzen zu identifizieren. FT-IR-Spektrometer sind nicht nur in den Universitäten, Fachhochschule und größeren Unternehmen zu finden. Sie haben inzwischen auch ihren Platz in analytischen Laboratorien mittlerer und kleinerer Unternehmen. Die weite Verbreitung der computergestützten FT-IR-Spektrometer ist nicht nur auf ihre Leistungsfähigkeit zurückzuführen, sondern auch auf die Wirtschaftlichkeit.

Die Hardware liefert IR-Spektren mit guter spektraler Reproduzierbarkeit (Bandenlage, absolute und relative Intensitäten, Kurvenverlauf). Die kommerziell verfügbare Software ermöglicht es, dass die digitalisierten Spektren mittels IR-Programmen korrigiert, intensitätsnormiert und von Fremdbanden befreit werden können. Geräte, in Verbindung mit leistungsfähigen IR- und Auswertungsprogrammen (Bio-Rad, Bruker, Galactic-Industries, LabControl, Nicolet, Perkin-Elmer und Sadtler) ermöglichen eine weitgehend automatisierte (Online) Analyse.

Steht somit einer schnellen und zuverlässigen Analyse – bei guter Probenpräparation – nichts mehr im Wege? Dies ist nicht der Fall. Es fehlen, speziell bei entnommenen Proben bei Konservierungs- und Restaurierungsarbeiten, Vergleichsspektren.

In der Konservierung und Restaurierung trifft man auf eine große Bandbreite von verwendeten Materialien, wie Firnisse, Klebe- und Bindemittel, zahlreiche Pigmente, Salze und viele Andere. Einem Analytiker, der mit diesen Stoffen arbeitet, stehen meist keine umfangreichen, aktuellen und digitalisierten FT-IR-Spektrenbibliotheken zur Verfügung.

Die Bibliotheken sind leider immer noch gegenwärtig ein schwaches Glied in der computergestützten IR-Analytik. Es besteht ein Bedarf an digitalisierten Spektrenbibliotheken.

Dem Analytiker, der eine schnelle und verlässliche Analyse durchführen muss, ist mit der digitalen Speicherung der analytischen Daten (Spektren und Zusatzinformationen) nur zum Teil geholfen. Für eine schnelle Auswertung bieten die oben genannten Hersteller in ihren IR-Programmen mehrere Peak-Suchalgorithmen und Vollspektrum-Algorithmen an, die auf unterschiedlichen mathematischen Strategien basieren. Die Suchergebnisse sind eine Funktion der Vergleichsstrategie und der spektralen Qualitäten.

Diese Belegarbeit soll eine Erweiterung der digitalisierten Spektrenbibliotheken in den Stoffgruppen Kalk und Gips sein. Des Weiteren regt die Arbeit hoffentlich an weitere Arbeiten folgen zu lassen, die die Erweiterung der digitalisierten Spektrenbibliotheken vorantreibt und damit dem Analytiker behilflich sind.