NETZSCH

Identify 原理与应用

文件编号: cPH60-DSC-36

目录

Identify 原理 Identify 原理及适应范围 Identify 算法及其与常规查询的区别 Identify 应用 单一成分/效应 曲线识别 多成分/效应 曲线识别 质量控制

一、Identify 原理

1. Identify 原理及适用范围

Identify 是耐驰公司最新款差示扫描量热仪 DSC 214 Polyma 配备的软件功能,适用于 Proteus 软件版本 7.0 以上。该分析功能除了用于分析 DSC214 所测数据外,也可对 DSC 200 F3 Maia, DSC 204 F1 Phoenix 等其他 DSC 仪器上获得的 DSC 曲线进行分析。目前的版本,主要针对 DSC 曲线上的玻璃 化转变、熔融、结晶等热效应。

因为 DSC 曲线上的玻璃化转变或者峰的位置具有准指纹效应,即特定材料的玻璃化温度和特征峰温 度在一定范围内是固定的,所以可以通过这些效应对材料进行识别。



DSC /(mW/mg)

2. Identify 算法及其与常规查询的区别

将一条未知 DSC 曲线进行标注后,通过点击 Identify 按钮,进行一定的算法运算,与数据库中的标准曲线/数据进行对比分析,即可给出关于未知样品成分的相关建议。



对于这类查询匹配算法, 传统的有如下两种方式:

- 逐一比较:将未知曲线/数据与数据库中离散的各曲线/数据逐一进行比较。客户可以没有任何背景知识,软件自动识别(如下图 A)。
- 分类比较:数据库中的标准曲线按一定规则进行归类。软件将未知曲线与这些类(class)进行比较,判断未知曲线属于哪一类(如下图 B)。







对于一般的查询软件,这两种查询方式通常是分开单独进行的。

而 Netzsch Identify 软件的查询方式则如图 C 所示,针对未知测量,既可与数据库中的曲线/数据逐一比较,也可与预定义的分类文件进行比较,两种比较方式同时进行,这样可以大大提高效率。



database measurements (.), literature data (O) and classes

Identify 数据库可以是默认预安装的,也可以是用户自定义的。数据库中的曲线既可以是文献中查到的,也可以是测量获得的标准品曲线。

用户可随时将实测曲线添加到数据库中,也可自由地在数据库中创建分类。

二、Identify 应用

1. 单一成分/效应 曲线识别

例 1: 下图中对某一橡胶样品的实测 DSC 曲线(绿线)进行识别,从相似度来看最有可能的是 SBR (丁苯橡胶)。





例 2: ABS 塑料样品的识别

在样品包含多个玻璃化转变台阶的情况下,曲线仍能得到很好的识别。





E	🔤 NETZSCH P	roteus Thermal Ar	alysis - [DDDD U-13-fig1_P	BT.ngb-taa*]					
	Ele Edit View jnest Settings Bringe Balguton Editas Window 1910								
	AL AA E	□●のmm、を見てはながく、このである。また、「●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●							
	Temperature-Ranse			People			Consels Burndons		
	MC:	Ma <u>k</u> :	MeasurementjLiterature	Confunda (m.)	Class	Smilarity [%]	Library	Entries Mean Mutual Similarity within	
	16,4 🔅	246,8 🔅	Data	Smarty [56]	PA	20,55	Pt I_meas_user_b	y selected ibraries:	
	Eul range	Lockrange	P0T-X1_7_7_70	68,61	PET	9,68	Pulymerblends_Ceuile	12 5,53%.	
		Arriv	PA6-GF30-01_7_7_70	65,00	PVC	1,66	Polymerposter_NET2SCH	70	
	Abortho Ture		PRT	55, 18	PE	0,25	Polymers_Stefan_Juni_2013	65 Add Circent Circe	
Algorithm Type (T) Scole-Rb		whiComponent	TPC E72D-M - 01_7_7_73	52,82	POM	0,03	Polymers_Stefan_September_2013	65 Manage Libraries/Classes	
			P40	52,19				Export Results	
OMult-Drec		decomponence.	DA612-01_7_7_70	44.62					
Search Parameter		eters	PVA-02 7 7 70	41.75					
				· ×				Gose	
Data Data	re	Similarity [%]						0	
PET-X1_7_7_70 68,61									
PA6-GF30-01_7_7_70		65	,00		Λ				
PET		55,18						Λ	
TPC E72D-M - 01_7_7_70		52,82							
PA6		52	,19		Sample: PBT GF30				
PA610-03_7_7_70		48,58						~ 1	
PA612-01_7_7_70		44,63							
PVA-02_7_7_70		41,75 🗸							
1	0,4							217.5 °C	
	0,2					- +			
	0,0 Glass T Mid		ransition: 41.0 °C	isition: 410 °C				Area: 39,64 J/g	
		Dolta C	рт: 0,050 J/(gтК)					Fear 220,1 C	
	-0.2								
		• •	50	100 150 Temperature /°C			2	200	
📓 (17) 41-13-41.agb-sd3 PBT GF38 Hinkstand 41.13-84 14.03.2413 1533-87 📓 (37) PBT-81 PBT-81 PBT-81 PBT-81 11 DS 20								PBT-X1 11.05 2012 10:57:37	
	For Help, press F	1						DSC	

例 3: 下图样品为 PBT+玻纤样品。使用 Identify 软件成功地识别出了其中的 PBT 成分。

例 4: 下图样品为 PP+CNT,使用 Identify 软件成功地识别出了其中的 PP 组分。但因其升温速率为 40K/min,故图形稍有不同(数据库中曲线常用升温速率为 10K/min)。



2. 多成分/效应 曲线识别

例:聚乙烯/聚酰胺(PE/PA)混合物

曲线上有两个热效应峰,从相似度结果看,两个峰的最有可能为PE-LD和PA,其相似度分别为65.94%和 52.79%。



3. 质量控制

例:不合格 PA6 产品检测

下图红色曲线为不合格的 PA6 产品,与数据库中的标准品曲线(绿线)相比,不合格 PA6 产品的熔 融峰温度偏低,且在 239℃附近有一个小的杂质峰:



从对比结果来看,不合格产品不是纯的 PA,而有可能是 PA 系列的混合物如 PA6 和 PA66。这是质量控制和失效分析的典型案例。借助 Identify 的识别功能可以对原材料和最终产品进行分析,使损失最小化。

耐驰科学仪器商贸(上海)有限公司 应用实验室
高星,徐梁
初稿: 2015.6.
最后修订于: 2015.7.
技术支持邮箱: <u>nsi-lab@netzsch.com</u>
www.ngb-netzsch.com.cn