

ATR-Probenzubehör für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer

Eine einfache und vielseitige Möglichkeit, FTIR-Messungen durchzuführen

Einleitung

Die abgeschwächte Totalreflexion (ATR) ist die am häufigsten eingesetzte Probenerfassungsmethode für die Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIR). Diese Beliebtheit beruht auf ihrer Fähigkeit, schnell und einfach eine große Bandbreite an Probentypen untersuchen zu können, darunter Flüssigkeiten, Feststoffe, Pulver, halbfeste Stoffe und Pasten. Das **Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer** verwendet ein vielseitiges modulares Konzept, bei dem präzise optimierte Probenzubehörmodule einfach an der Vorderseite des Cary 635 FTIR-Kernmoduls angebracht werden. Abhängig von der spezifischen Anwendung oder Probe werden unterschiedliche ATR-Sensoren verwendet. Das permanent ausgerichtete Optiksystème ermöglicht den Austausch einer breiten Palette an Modulen innerhalb von Sekunden, ganz ohne Ausrichtung durch den Anwender. Das Cary 635 FTIR unterstützt eine breite Auswahl an ATR-Sensoren und bietet die Möglichkeit, einen ATR-Sensor mit wenigen Handgriffen gegen einen anderen auszutauschen.

Für die meisten Anwendungen sind Einfachreflexions-Zink-Selenid (ZnSe)-, Diamant- und Germanium (Ge)-ATR-Probenzubehörmodule für das Cary 635 FTIR verfügbar. Diese Module werden mit einer Probenpresse verwendet und eignen sich ausgezeichnet für die Analyse von Feststoffen sowie von Flüssigkeiten, Pasten und Gelen. Der äußerst langlebige Diamantsensor ist die beste Wahl für härtere Materialien. Der ZnSe-Sensor eignet sich gut für weichere Feststoffe. Der Ge-Sensor mit einer geringeren Weglänge ist die beste Wahl für stark absorbierende Proben. Darüber hinaus ist das Mehrfachreflexions-ZnSe-ATR-Modul eine hervorragende Option für die Analyse von Flüssigkeiten, Pasten und Gelen, wenn eine höhere Empfindlichkeit benötigt wird.

Da diese Probenerfassungstechniken speziell für das Cary 635 FTIR entwickelt wurden, können sich Analytiker stets auf die Zuverlässigkeit der Ergebnisse verlassen – ganz gleich, welchen ATR-Sensor sie für ihre Anwendung wählen. Diese spezifische Auslegung sorgt für eine höhere Leistung, Empfindlichkeit und Benutzerfreundlichkeit als bei jedem anderen FTIR-Spektrometer dieser Klasse.

Diese technische Übersicht erläutert die für das Cary 635 FTIR-Spektrometer verfügbaren ATR-Sensoren (Abbildung 1). Sie beschreibt, welcher Sensor für einen spezifischen Probentyp ausgewählt werden kann, und fasst typische Anwendungsmöglichkeiten für die ATR-FTIR-Spektroskopie mit dem Cary 635 FTIR zusammen.



Abbildung 1. Das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer kann mit den passenden Probenzubehörmodulen ausgerüstet werden, um alle analytischen Anforderungen zu erfüllen. Das Diamant-ATR-Modul ist ideal für die FTIR-Analyse von Feststoffen, Flüssigkeiten, Gelen und Pulvern.

Betrieb

Bei der ATR-Probenerfassung wird das Infrarot (IR)-Licht durch einen Kristall geschickt und an der Kristall-Probe-Schnittstelle mindestens einmal vollständig intern reflektiert. Das reflektierte Licht wird von dem FTIR-Detektor empfangen. Während der internen Reflexion gelangt ein Teil des IR-Lichts in die Probe, wo es absorbiert werden kann. Der Anteil des Lichts, der in die Probe eindringt, wird als evaneszente Welle bezeichnet. Die Eindringtiefe der evaneszenten Welle wird durch die Differenz zwischen dem Brechungsindex der Probe und dem des ATR-Kristalls definiert. Um unterschiedlichen Probentypen und Anforderungen an die Weglänge zu entsprechen, werden als ATR-Sensoren mehrere Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes verwendet.

ATR mit Einfachreflexion

Bei Einfachreflexionsmessungen wird der Lichtstrahl im Kristall ein Mal reflektiert (Abbildung 2).

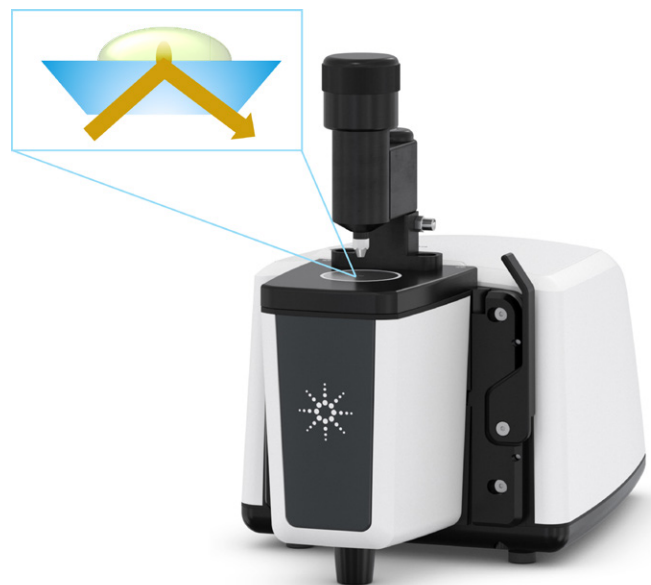


Abbildung 2. Einfachreflexions-ATR-Zubehör für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer.

Mehrfachreflexions-ATR

Mehrfachreflexions-ATR-Sensoren hingegen verwenden einen längeren Kristall, der es ermöglicht, dass der Lichtstrahl vor der Detektion von der Probenoberfläche mehrmals vollständig reflektiert wird (Abbildung 3). Als Ergebnis interagiert das IR-Licht mit der Probe an jedem der Reflexionspunkte, was für eine größere effektive Weglänge sorgt. Dies erhöht die Empfindlichkeit der Messung, was ideal für anspruchsvolle Anwendungen ist, die eine niedrigere Nachweisgrenze und schnellere Datenerfassung erfordern.

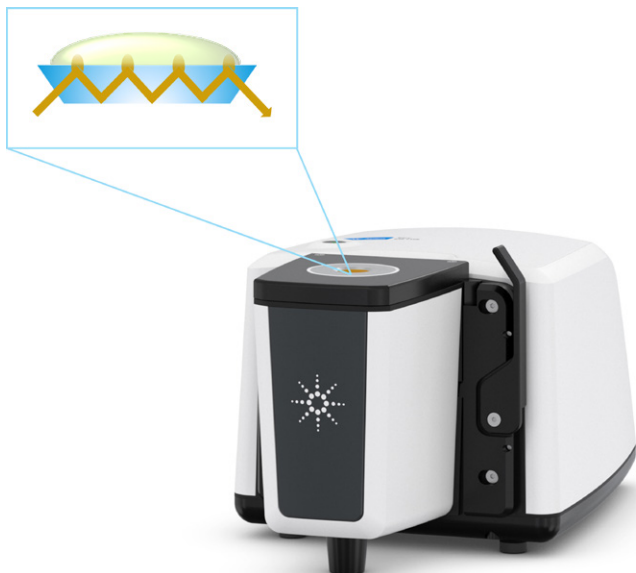


Abbildung 3. Mehrfachreflexions-ATR-Zubehör für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer.

Probenmessungen

Um flüssige Proben oder Pasten mit den ATR-Modulen zu analysieren, wird ein kleiner Tropfen der Probe auf den ATR-Kristall gegeben. Die Messung wird durchgeführt, und danach kann der Kristall bei Bedarf mit einem schwachen Lösungsmittel saubergewischt werden.

Für die Analyse von Pulvern, Dünnschichten oder anderen festen Proben wird die Probe auf dem ATR-Kristall platziert und mit der Proben-Anpressvorrichtung niedergedrückt, um einen optimalen Kontakt zwischen Probe und Kristall sicherzustellen. Nach der Messung kann die Probe wieder entnommen werden, was ideal für geringe Probenmengen oder teure Proben ist. Der Kristall kann anschließend bei Bedarf mit einem schwachen Lösungsmittel saubergewischt werden.

Die Proben-Anpressvorrichtung an den Einfachreflexions-ATR-Modulen wendet den optimalen Druck für das jeweilige Material des ATR-Sensors an. Die Proben-Anpressvorrichtung kann für einen einfachen Zugang zum ATR-Kristall bei der Probenaufgabe oder Reinigung um 360 Grad gedreht werden. Die Vorrichtung lässt sich auch abnehmen, wenn sie nicht benötigt wird (z. B. wenn nur flüssige Proben analysiert werden). Das Mehrfachreflexions-ATR-Modul wird ausschließlich für flüssige Proben verwendet und erfordert daher keine Anpressvorrichtung.

ATR-Sensoren für das Cary 635 FTIR

Ganz gleich, ob Ihre Anwendungen die Einfachreflexions-Zink-ZnSe-, Diamant-, GE- oder Mehrfachreflexions-ZnSe-Technik erfordern, das Cary 635 FTIR bietet die beste Leistung seiner Klasse. Im Gegensatz zu anderen FTIR-Spektrometern, die Zubehör von Drittanbietern verwenden, wurde die Probenzubehortechnik für das Cary 635 FTIR von Agilent Ingenieuren speziell entwickelt und perfekt auf die optischen Eigenschaften des Spektrometers abgestimmt. Das robuste Design erfordert keine Ausrichtung und ermöglicht einen direkten Wechsel zwischen diesen ATR-Probenezubehortechniken ohne Zeitverlust, sodass jeder Probentyp, der in Ihrem Labor anfällt, einfach bearbeitet werden kann. Die verschiedenen ATR-Module für das Cary 635 FTIR-Spektrometer sind in Tabelle 1 aufgeführt.

Tabelle 1. ATR-Module für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer.

ATR-Modul	Wellenlängenbereich	Effektive Weglänge	Probentyp	Proben-Anpressvorrichtung
Einfachreflexions-ZnSe-ATR-Modul	5100 bis 600 cm^{-1}	1,1 μm bei 4000 cm^{-1} 2,6 μm bei 1700 cm^{-1} 7,3 μm bei 600 cm^{-1}	Unverdünnte oder konzentrierte; weiche Feststoffe, Pasten, Gele, Flüssigkeiten; nicht starke Säuren oder Basen	Ja
Mehrfachreflexions-ZnSe-ATR-Modul	5100 bis 600 cm^{-1}	5,5 μm bei 4000 cm^{-1} 13,0 μm bei 1700 cm^{-1} 36,5 μm bei 600 cm^{-1}	Komponenten mit geringer Konzentration, verdünnte Lösungen; Pasten, Gele, Flüssigkeiten; nicht starke Säuren oder Basen	Nein
Einfachreflexions-Di-ATR-Modul	6300 bis 350 cm^{-1} ^a 5100 bis 600 cm^{-1} ^b	1,1 μm bei 4000 cm^{-1} 2,6 μm bei 1700 cm^{-1} 7,3 μm bei 600 cm^{-1}	Harte Feststoffe, Partikel, Polymere, Pasten, Flüssigkeiten; alle pH-Bereiche	Ja
Einfachreflexions-Ge-ATR-Modul	5100 bis 600 cm^{-1}	0,15 μm bei 4000 cm^{-1} 0,36 μm bei 1700 cm^{-1} 1,02 μm bei 600 cm^{-1}	Rußgefüllte Polymere	Ja

^a Cary 635 FTIR-Kernmodul mit KBr-Optiksystem

^b Cary 635 FTIR-Kernmodul mit ZnSe-Optiksystem

Zink-Selenit (ZnSe)-ATR-Module

ZnSe ist ein Halbleitermaterial, das seit vielen Jahren in ATR-Messzellen verwendet wird. Es ist relativ hart, bietet einen weiten Wellenlängenbereich und ist in Wasser nicht löslich. Aus diesem Grund ist es eine ausgezeichnete Wahl für biegsame Feststoffe, Pasten, Gele und Flüssigkeiten. ZnSe kann verwendet werden, um wässrige Lösungen im pH-Bereich von 5 bis 9 zu analysieren. Für das Cary 635 FTIR sind zwei Varianten der ZnSe-Probenerfassungstechnik verfügbar: Multi- und Einfachreflexionssensoren.

Einfachreflexions-ZnSe-ATR-Modul

Aufgrund der relativ kurzen Weglänge des Infrarotlichts in der Probe ist dieser Sensor ideal für unverdünnte Proben, die relativ konzentriert oder rein sind. Das ZnSe-Modul mit Einfachreflexion ist eine gute Wahl für die Identifizierung weicherer Materialien sowie für viskose Flüssigkeiten. Es kann mit dem Cary 635 FTIR auch für die Messung von Feststoffen wie Polymerfilmen verwendet werden. Das ZnSe-ATR-Modul ist in Abbildung 4 dargestellt.



Abbildung 4. Zink-Selenid-ATR-Modul für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer.

Mehrfachreflexions-ZnSe-ATR-Modul

Die außergewöhnliche Leistung des Cary 635 FTIR in Verbindung mit der höheren Weglänge des Mehrfachreflexions-ATR-Sensors ergibt ein Spektrometersystem mit unübertroffener Empfindlichkeit. Es ermöglicht die Messung von Bestandteilen mit niedrigen Konzentrationen in Pasten, Gelen und Flüssigkeiten. Gelöste Stoffe in verdünnten oder konzentrierten wässrigen Lösungen im pH-Bereich von 5 bis 9 können ebenfalls analysiert werden. Da der ZnSe-Kristall in diesem Modul in seiner Edelstahlhalterung leicht vertieft montiert ist, eignet er sich ideal für die Analyse von nicht viskosen Flüssigkeitsproben. Dieser Sensor ist die beste Wahl, wenn qualitative oder quantitative Messungen erforderlich sind. Die Nutzung für Feststoffe wird nicht empfohlen, da er nicht mit der Proben-Anpressvorrichtung verwendet wird. Das Mehrfachreflexions-ZnSe-ATR-Modul ist in Abbildung 5 dargestellt.



Abbildung 5. Mehrfachreflexions-Zink-Selenid-ATR-Zubehör für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer.

Einfachreflexions-Diamant (Di)-ATR-Modul

Die Verwendung von Diamanten als ATR-Material hat die FTIR-Probenerfassung revolutioniert. Härtere Proben wie Mineralien und harte Polymere können mit diesem Sensor problemlos analysiert werden, da er nicht zerkratzt werden kann. Der Diamant-ATR ist zudem gegen starke Säuren und Basen beständig und eine ausgezeichnete Wahl für die Messung von wässrigen Lösungen mit hohem oder niedrigem pH-Wert. Der Diamant-ATR für das Cary 635 FTIR ist ein Einfachreflexionssensor und wird mit der Proben-Anpressvorrichtung verwendet, um einen guten Kontakt zwischen dem zu analysierenden Material und der Diamantoberfläche sicherzustellen. Als Einfachreflexionssensor eignet er sich ideal für unverdünnte oder reine Substanzen wie Partikel, Pulver und andere harte Materialien. Das einzigartige Design des Diamant-ATR für das Cary 635 FTIR führt zu einem hohen Energiedurchsatz, und die Kombination aus dem Spektrometer und der Diamant-Probenerfassungstechnik ist anderen Routine-FTIR-Systemen meist überlegen. Das Einfachreflexions-Diamant-ATR-Modul ist in Abbildung 6 dargestellt.



Abbildung 6. Einfachreflexions-Diamant-ATR-Modul für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer.

Einfachreflexions-Germanium (Ge)-ATR-Modul

Germanium ist ein sprödes und hartes, halbmimetallisches Element mit einem hohen Brechungsindex, der zu einer geringeren Durchdringungstiefe von Infrarotstrahlung führt. Das Cary 635 FTIR verwendet ein Einfachreflexions-GE-ATR-Element, das eine ausgezeichnete Wahl für Materialien mit hohem Absorptionsvermögen oder stark streuenden Bestandteilen ist. So werden z. B. Proben wie Polymere, die Ruß enthalten, oft mit dem Ge-ATR analysiert. Beispiele für Materialien, die sich gut für die Analyse mit dem Cary 635 FTIR Ge-ATR-Probenzubehörmodul eignen, sind O-Ringe, Dichtungen und Kautschukreifen. Das Einfachreflexions-Germanium-ATR-Modul ist in Abbildung 7 dargestellt.



Abbildung 7. Einfachreflexions-Germanium-ATR-Modul für das Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer.

Anwendungsbeispiele

Die ATR-Analyse kommt in der Industrie und im Hochschulbereich weitflächig in zahlreichen Anwendungen zum Einsatz. Agilent bietet zahlreiche Application Notes, die die Nutzung der ATR-Module demonstrieren und Vergleiche mit anderen verfügbaren Probenerfassungstechniken bieten. Im Folgenden finden Sie eine Zusammenfassung der derzeit verfügbaren Application Notes. Eine umfassende Zusammenstellung von Anwendungen finden Sie auf der Agilent Website.

Pharmaceutical Packaging Materials Quality Control and USP Chapter <661.1> Compliance

Diese Studie widmet sich dem Einsatz der FTIR-Spektroskopie für die Analyse von Polymeren, die in pharmazeutischen Verpackungsmaterialien eingesetzt werden. Ein Diamant-ATR-Modul wurde verwendet, um die Unterschiede zwischen Marken- und generischen Verpackungen zu ermitteln, sowie die Erkennung von gefälschten pharmazeutischen Produkten zu demonstrieren. Die Eignung des FTIR-Spektrometers gemäß den USP-Vorschriften für pharmazeutische Verpackungen, wie in Chapter <661.1> Plastic Materials of Construction dargelegt, wurde ebenfalls nachgewiesen.

[Laden Sie sich die vollständige Application Note herunter.](#)

Determination of Sucrose Levels in Infant Cereals

In dieser Studie wurde der Zuckergehalt in zahlreichen Frühstückscerealien untersucht, die als Lebensmittel für Kinder vermarktet werden. Die Cerealienproben wurden zu einem Pulver gemahlen und direkt auf dem Diamant-ATR-Modul platziert, um die Saccharose-Konzentrationen zu quantifizieren. Die erzielten Ergebnisse zeigten eine gute Korrelation mit den HPLC-Daten für dieselben Proben.

[Laden Sie sich die vollständige Application Note herunter.](#)

Quick Identification and Qualification of Pharmaceuticals

Diese Studie stellt die Empfindlichkeit der ATR-FTIR-Analyse von pharmazeutischen Produkten bei der Klassifizierung und Beurteilung der Reinheit von spezifischen Roh-Inhaltsstoffen heraus. Ein Diamant-ATR-Probenzubehörmodul wurde verwendet, um Proben reiner und kontaminierter Acetylsalicylsäure zu analysieren. Die einzigartigen Logic-Setting-Funktionen in der Agilent MicroLab Software ermöglichen die Identifizierung, Qualifizierung und einfache Unterscheidung zwischen verschiedenen Qualitäten von Roh- und Inhaltsstoffen in pharmazeutischen Anwendungen.

[Laden Sie sich die vollständige Application Note herunter.](#)

Fuel Blend Analysis Using a 5 Bounce ZnSe ATR Accessory

In dieser Studie wurde die Zusammensetzung verschiedener Kraftstoffgemische bestimmt. Ein Mehrfachreflexions-ZnSe-ATR-Modul wurde verwendet, um Diesel-/Butanol-Gemische ohne jede Probenvorbereitung reproduzierbar zu analysieren. Dies ergab Informationen über die Mengen und Mischverhältnisse auf der Molekularebene.

[Laden Sie sich die vollständige Application Note herunter.](#)

Analyse des Alkoholgehalts von Handdesinfektionsmitteln

Ein Diamant-ATR-Modul wurde verwendet, um den Alkoholgehalt in Handdesinfektionsmitteln zu quantifizieren. Mit der MicroLab Software wurde eine Routine-Qualitätskontrollmethode (QC) entwickelt, die automatisch den Alkoholtyp identifizierte und die Alkoholkonzentration präzise bestimmte.



Abbildung 8. Das unverdünnte Handdesinfektionsmittel wird auf das ATR-Zubehör gegeben. Die Agilent MicroLab Software leitet den Anwender anhand bildgeführter Arbeitsabläufe Schritt für Schritt durch die Messung, Reinigung und Probenerfassung.

[Laden Sie sich den Anwendungsflyer herunter.](#)

Detection of Counterfeit Pharmaceuticals

In dieser Studie wurde ein Diamant-ATR-Modul eingesetzt, um IR-Spektren von authentischen pharmazeutischen Tabletten und Placebo-Proben zu bestimmen. Die Spektren wurden mithilfe der MicroLab Software gegen eine umfangreiche IR-Bibliothek abgeglichen. Für die wichtigen und häufig gefälschten Pharmazeutika Ethambutol-Hydrochlorid und Cefuroximaxetil konnte das FTIR-Spektrometer authentische Proben von gefälschten Proben zuverlässig unterscheiden.



[Laden Sie sich die vollständige Application Note herunter.](#)

Automated FT-IR Screening Method for Cocaine Identification in Seized Drug Samples

Ein Diamant-ATR-Modul wurde verwendet, um IR-Spektren von Proben aus beschlagnahmtem Kokain aufzunehmen. Zusammen mit einer automatisierten Methode in der MicroLab Software konnte das FTIR-Spektrometer das Vorhandensein von Kokain nachweisen und zeigte eine gute Korrelation mit den mittels HPLC bestimmten Kokainkonzentrationen. Die Geräte-Software-Konfiguration hat sich als geeignete zerstörungsfreie Methode für das Vorscreening von beschlagnahmten Drogen erwiesen, die mutmaßlich Kokain enthalten.

[Laden Sie sich die vollständige Application Note herunter.](#)

Weitere Informationen

- [Agilent Cary 635 FTIR-Spektrometer](#)
- [MicroLab FTIR Software](#)
- [MicroLab Expert](#)
- [FTIR-Analysen- und Applikationshandbuch](#)
- [Grundlagen der FTIR-Spektroskopie – FAQs](#)
- [Überblick über die ATR-FTIR-Spektroskopie](#)

www.agilent.com/chem/cary635

DE-011798

Änderungen vorbehalten.

© Agilent Technologies, Inc. 2022, 2026
Gedruckt in den USA, 28. August 2026
5991-6858DEE