

# Chemosensoren

## Vergleich zweier Sensorsysteme in der optischen Sensorik zur Quantifizierung ternärer Gemische mit chemometrischen Methoden

Georg Belge, Frank Dieterle, Günter Gauglitz

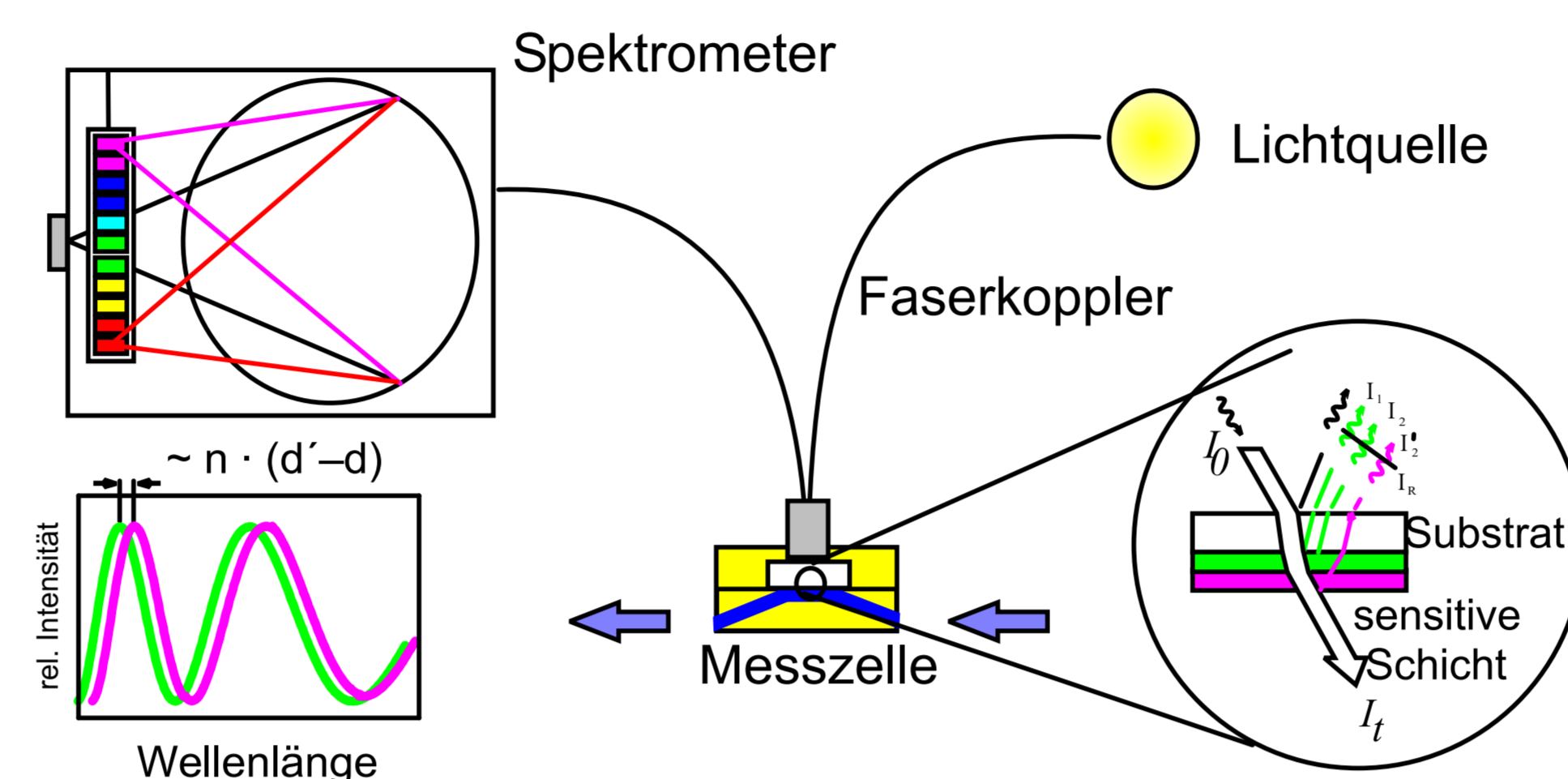
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Auf der Morgenstelle 8, D-72076 Tübingen, F.R.G.

### Motivation

- Untersuchung des Ansprechverhaltens des mikroporösen Polymers **Makrolon**
- Vergleich der Ergebnisse des Weißlicht-Set-ups mit denen des 4 Lambda-Set-ups:
  - Schichtdickenabhängigkeit
  - Vergleich der Sensoransprechzeiten
  - Vergleich Sorption/Desorption
- Polymerfilmdicken:
  - Sensorarray: Makrolon 80, 120 und 160 nm sowie PUT 250 nm
  - 4 Lambda-Set-up: Makrolon 325 nm
- Glätten der Sensorsignale zur Verbesserung der Kalibration
- Auswertung mit Neuronalen Netzen (ANN)

### Messprinzipien: RfS-Reflektometrische Interferenzspektroskopie

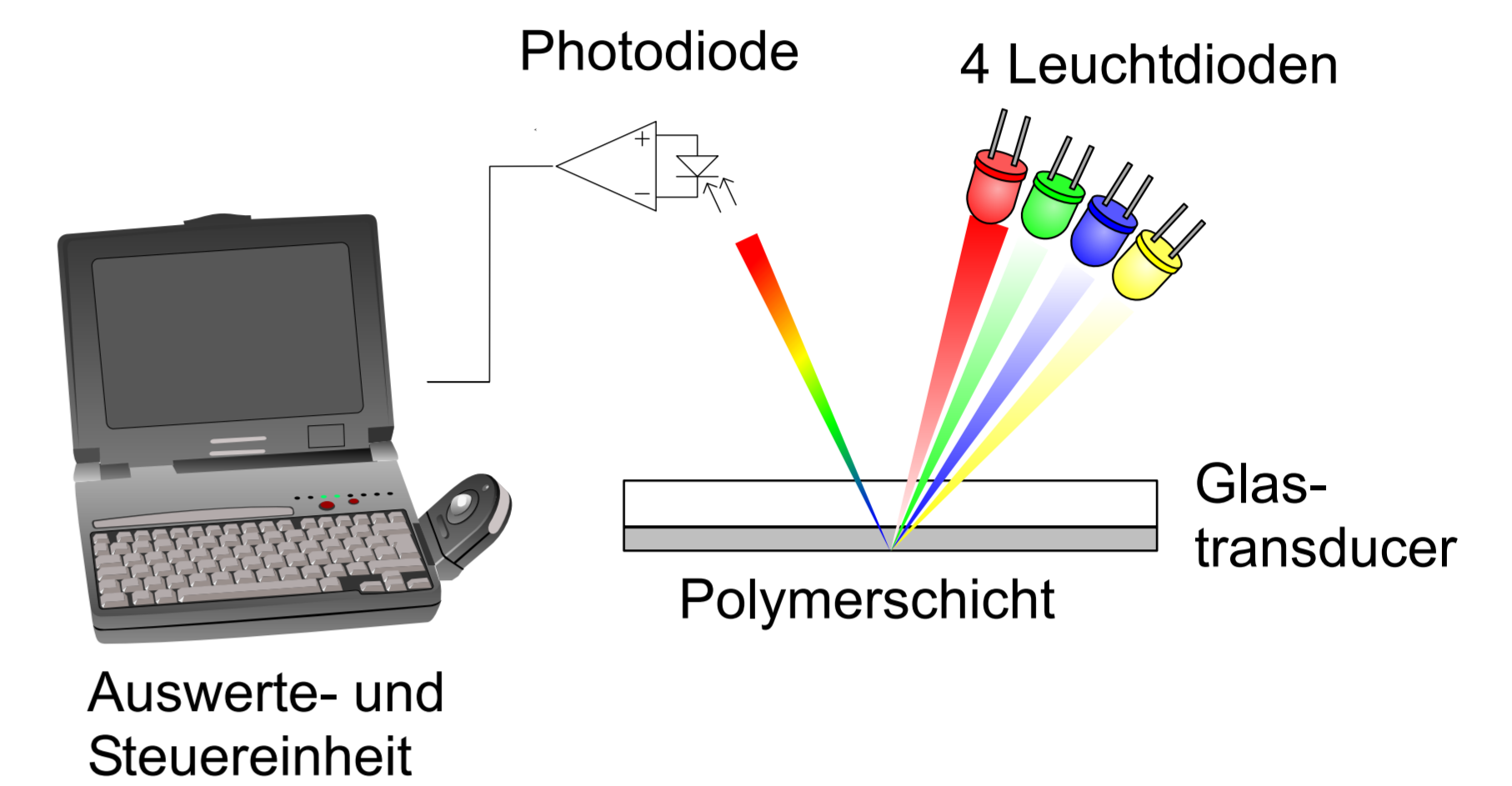
#### Weißlicht-Set-up



#### Auswertung der RfS - Messungen

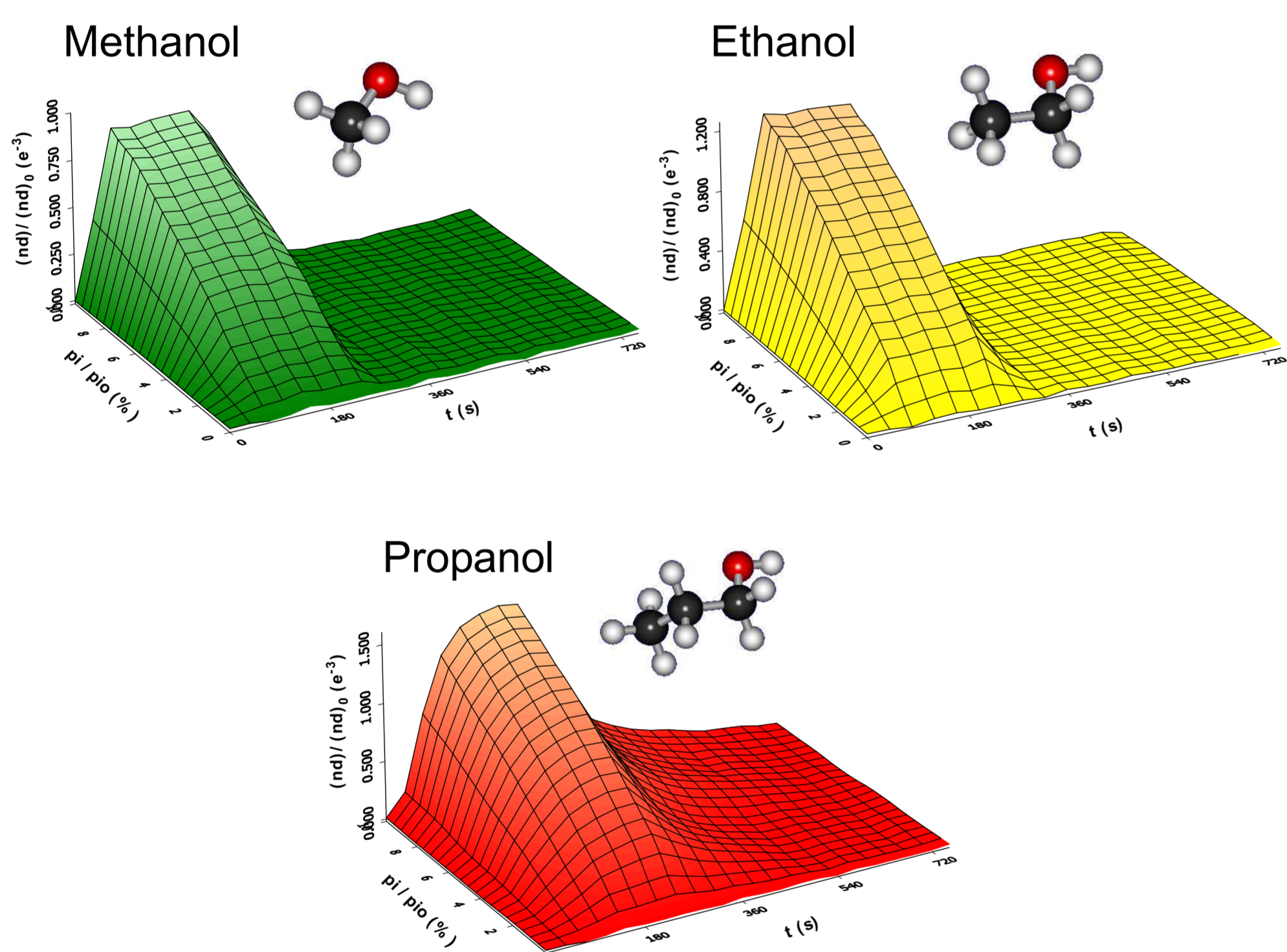
- Kontinuierliche Messung des Produktes aus Schichtdicke  $d$  und Brechungsindex  $n$  optischer Schichtsysteme
- Schichtdickenänderung durch molekulare Wechselwirkungen
- Quellung sensitiver Polymere
- zeitaufgelöstes Messverfahren: 50 Messzeitpunkte pro Sensor

#### 4 Lambda-Set-up

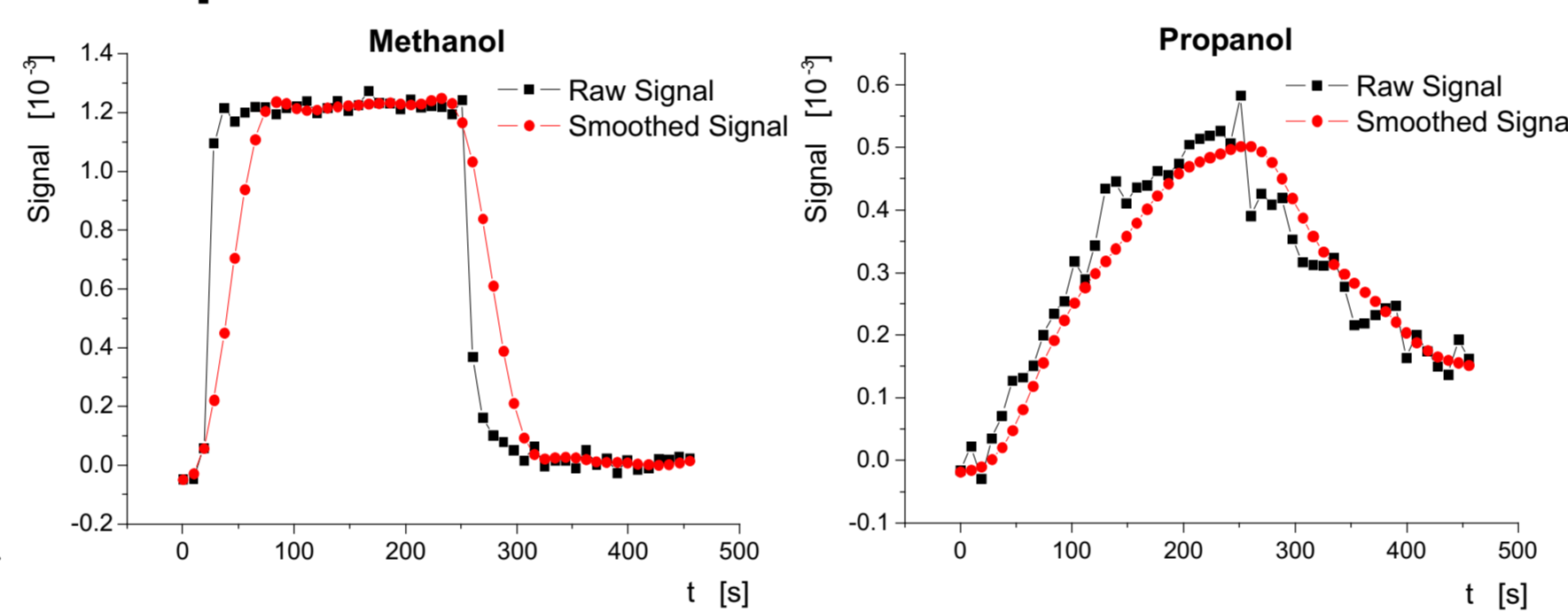


### Zeitaufgelöste Messungen

#### Messkurvenprofil am Beispiel der Einzelanalyten

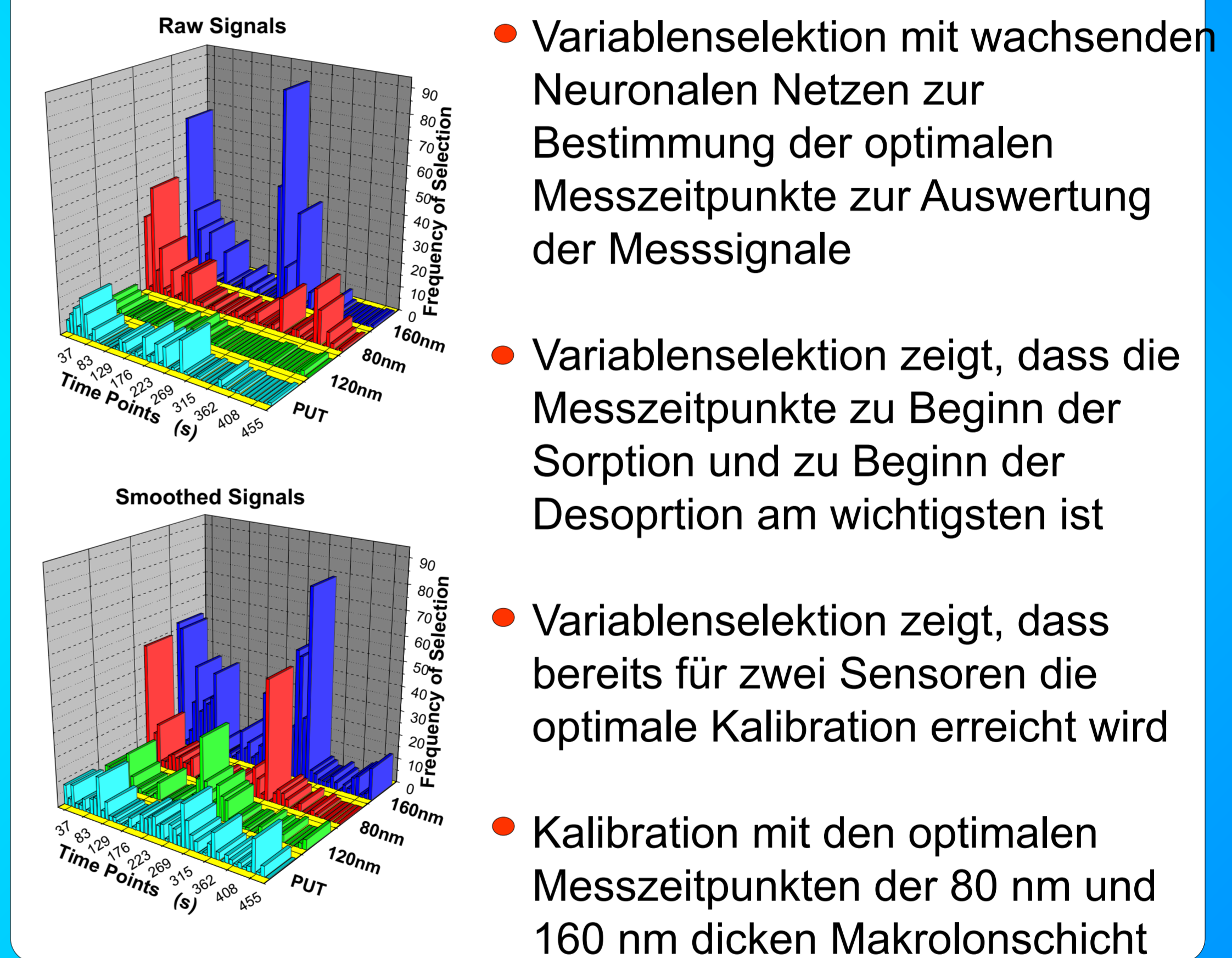


#### Ansprechverhalten



- Sensorantwort vor und nach der Glättung (raw/smoothed), Beispiel 80 nm Schichtdicke des Makrolons
- Das Glätten verursacht eine Veränderung der effektive Sensorantwort
- Konzentrationsbereich von 0 bis 10 Vol.-%

### Variablenselektion:



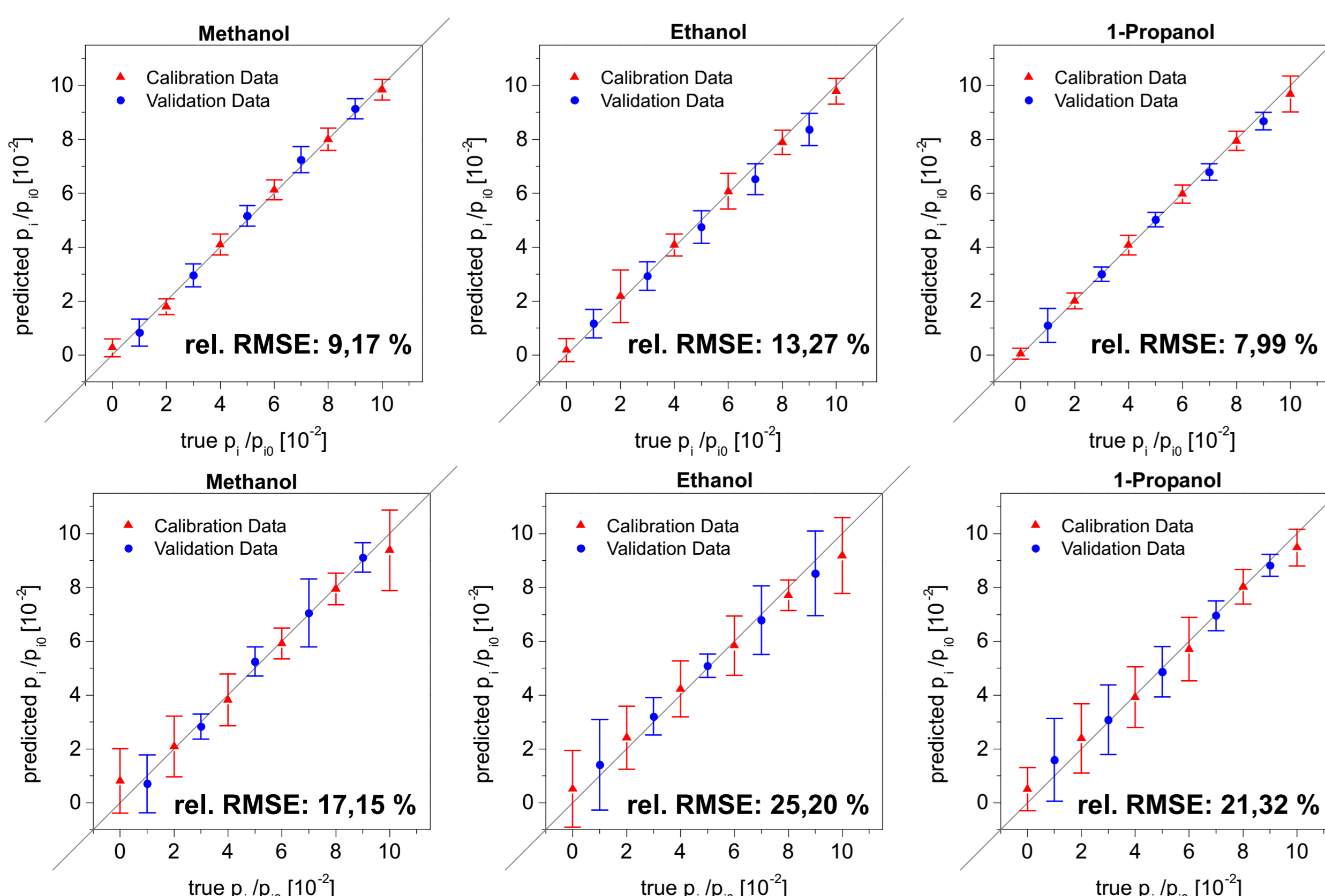
- Variablenselektion mit wachsenden Neuronalen Netzen zur Bestimmung der optimalen Messzeitpunkte zur Auswertung der Messsignale
- Variablenselektion zeigt, dass die Messzeitpunkte zu Beginn der Sorption und zu Beginn der Desorption am wichtigsten ist
- Variablenselektion zeigt, dass bereits für zwei Sensoren die optimale Kalibration erreicht wird
- Kalibration mit den optimalen Messzeitpunkten der 80 nm und 160 nm dicken Makrolonschicht

### Multivariate Datenanalyse der ternären Analytgemische

Gegenüberstellung der Ergebnisse der einzelnen Sensoren beider Sensor-Set-ups

Sensorarray	Validierdaten					
	ungeglättet			geglättet		
80 nm Makrolon	28.05	31.24	19.65	25.86	22.09	10.58
160 nm Makrolon	9.81	13.77	11.79	9.91	14.44	14.45
250 nm PUT	34.49	43.55	12.53	45.67	42.39	23.89
4 Lambda-Set-up	22.43	24.77	20.87	17.15	25.2	21.32

- Der Kalibrationsdatensatz bestand aus 216 Messungen von 36 verschiedenen Gemischzusammensetzungen
- Der Testdatensatz bestand aus 125 Messungen und war **unabhängig** vom Kalibrationsdatensatz
- Vorhersage der Testdaten mit einem optimierten Netzwerk, gleichzusetzen mit Realmessungen
- Der rel. RMSE gibt den tatsächlichen Vorhersagefehler bezogen auf die Konzentration der Testdaten an



#### Sensorarray:

- optimiertes Netzwerk bestehend aus 7 Input, 5 Hidden und 1 Output Neuron
- Evaluierung von 2 Sensorsignalen, die der 80 und 160 nm Schichtdicke
- gezeigte Ergebnisse stammen aus den ungeglätteten Daten

#### 4 Lambda-Set-up:

- optimiertes Netzwerk bestehend aus 13 Input-, 5 Hidden- und 1 Output-Neuron
- dickere Polymerschicht benötigt längere Zeit zur Desorption, dies führt zu größeren Fehlern
- gezeigte Ergebnisse stammen aus den ungeglätteten Daten

### Zusammenfassung

- Glätten der Sensorsignale führt für dünne Schichten zur Verbesserung der Sensorantwort
- Variablenselektion zeigt, dass eine kürzere Exposition der Analyten möglich ist
- Die Zeit der Sorption und Desorption sowie die Zeit zwischen den Messsignalen wird kürzer
- Mehr Messungen möglich und damit bessere Kalibrierung
- Ergebnisse des Einkanal-4 Lambda-Set-ups sind vergleichbar mit den einzelnen Sensoren des Weißlicht-Set-up

EBERHARD KARLS

UNIVERSITÄT  
TÜBINGEN

