

Project 505.6050

Ontwikkeling methoden van onderzoek voor voedings- en voedermiddelen
met behulp van NIRS (R. Frankhuizen)

Rapport 87.65

Oktober 1987

Inventarisatie van commercieel verkrijg-
bare Nabij Infrarood Transmissie Spectro-
meters.

R. Frankhuizen

Afdeling: Algemene Chemie

Goedgekeurd door: dr H. Herstel

Rijks-Kwaliteitsinstituut voor land- en tuinbouwprodukten (RIKILT)
Bornsesteeg 45, 6708 PD Wageningen
Postbus 230, 6700 AE Wageningen
Telefoon 08370-19110
Telex 75180 RIKIL

8765

VERZENDLIJST

INTERN:

directeur,
sectorhoofden
projectbeheer
afd. Algemene Chemie (3x)
Cramwinckel
Oortwijn
Langerak
bibliotheek

EXTERN:

directie CBT
directie VKA
directie DLO
- sector Plantaardige Productie
- sector Algemeen en Management
directie AT
directie PAGV
directie IBVL
directie Sprenger Instituut
dr K. Schuren (TFDL)
ir M. Miedema (CAD/KB)

INHOUD	<u>blz</u>
SAMENVATTING	II
1 INLEIDING	1
2 CRITERIA	2
3 IR/NIR/NIT SPECTROMETERS	2
3.1 Infrarood Transmissie Spectrometers	2
3.2 Fourier (Nabij) Infrarood Spectrometers	3
3.3 UV/VIS/NIR Spectrometers algemeen	3
4 FABRIKANTEN VAN SPECIFIEKE NIRS/NIT APPARATUUR	4
4.1 Algemeen	4
4.2 Technicon	5
4.3 Pacific Scientific Corp	6
4.4 Dickey John	7
4.5 Percon	8
4.6 L.T. Industries	9
4.7 Trebor Industries	10
5 CONCLUSIE	12
BIJLAGEN	
A BRIEF EN ADRESSEN VIS/NIR/IR LEVERANCIERS	
B INFORMATIE QUANTUM-1200 ANALYZER VAN L.T. INDUSTRIES	
C INFORMATIE TREBOR-70 ANALYZER VAN TREBOR-INDUSTRIES	
D INFORMATIE PSCO-6250 ANALYZER VAN PACIFIC SCIENTIFIC/GARDNER/ NEOTEC DIVISION	

SAMENVATTING

Er is een toenemende behoefte aan niet-destructieve methoden voor de bepaling van kwaliteitskenmerkende parameters van land- en tuinbouwprodukten.

Eerder uitgevoerd literatuuronderzoek laat zien dat Nabij Infrarood Transmissie Spectroscopie (NITS) - in het golflengtegebied van 500-1000 nm - goede mogelijkheden biedt om niet-destructief kwaliteitskenmerkende parameters van onder andere groenten en fruit te bepalen. Als vervolg op dit onderzoek is een inventarisatie uitgevoerd van commercieel leverbare NITS-apparatuur.

Hiervoor zijn een aantal leveranciers van VIS/NIR/IR-spectrometers aangeschreven (totaal 19) met het verzoek informatie te verstrekken met betrekking tot commercieel leverbare NITS-apparatuur.

Uit deze inventarisatie blijkt dat een drietal fabrikanten van NIRS-apparatuur apparaten levert waarmee naast de gangbare reflectiemeting in het gebied van 1100-2500 nm ook transmissiemetingen uitgevoerd kunnen worden in het gebied van 600-1100 nm.

Deze fabrikanten zijn:

- L.T. Industries Inc. (Quantum-1200)
- Trebor Industries Inc. (Trebor-70 research analyzer)
- Pacific Scientific/Gardner/Neotec division (PSCO) (PSCO-6250 research analyzer).

De Quantum-1200 van L.T. Industries en het 6250 systeem van PSCO kunnen worden uitgerust met "fiber optics" waarmee ook aan grote monsters zoals tomaten en appels niet-destructief gemeten kan worden. Het 6250 systeem van PSCO is het meest geavanceerde NIRS/NITS systeem dat momenteel verkrijgbaar is.

De aanschafprijs van het 6250-systeem is, inclusief een groot aantal accessoires, computer en software ca. fl. 260.000,--, die van de Quantum-1200 analyzer van L.T. Industries ca. fl. 135.000,-- en die van de Trebor-70 research analyzer ca. fl. 110.000,--.

1 INLEIDING

Sinds de introductie in de zestiger jaren van NIRS-instrumenten heeft een aantal technologische verbeteringen en ontwikkelingen - met name op het gebied van de micro-elektronica - de huidige NIRS-instrumenten vormgegeven. Aanvankelijk waren alle NITS-instrumenten van het reflectie type, waarbij nabij infraroodlicht wordt gereflecteerd van het oppervlak van (uniform) gemalen monsters. In het begin van de tachtiger jaren werd een alternatieve meettoepassing geïntroduceerd; het gebruik van nabij infrarood transmissiemetingen voor kwantitatieve bepalingen. Bij deze nieuwe toepassing dringt nabij infrarood licht door een redelijk dik monster heen, waardoor malen van de monsters overbodig wordt. De toepassing van transmissiemetingen is enerzijds een uitvloeisel van het voorafgaande werk aan reflectie-apparatuur, anderzijds heeft de sterk toenemende behoefte aan niet-destructieve metingen van land- en tuinbouwprodukten de ontwikkelingen van apparatuur waar dit mee mogelijk is sterk gestimuleerd.

Hoewel er in Nederland relatief veel NIR-instrumenten in gebruik zijn (ca. 200 eind 1986) betreft het hier in alle gevallen reflectie-apparatuur en in praktisch alle gevallen routine-apparatuur van één leverancier.

Ook het merendeel van de NIR-publicaties (ca. 600) heeft betrekking op reflectiemetingen, terwijl de resultaten beschreven in de artikelen waaraan wordt gerefereerd in het eerder beschreven literatuuronderzoek naar "niet-destructieve metingen bij het kwaliteitsonderzoek van fruit en groenten" met behulp van lichttransmissie (Rapport 87.54), op een enkele uitzondering na verkregen zijn met door de onderzoekers zelfgebouwde c.q. omgebouwde apparatuur.

Nagegaan is dan ook wat de stand van zaken is van commercieel leverbare nabij infrarood transmissie apparatuur (NITS). Hiervoor zijn een aantal producenten en leveranciers van VIS/NIR/IR spectrometers aangeschreven (totaal 19, zie bijlage A) met het verzoek informatie te verstrekken met betrekking tot commercieel verkrijgbare NITS-apparatuur.

2 CRITERIA

Voor het welslagen en accepteren van nabij infrarood spectroscopie als techniek voor het niet-destructief bepalen van kwaliteitskenmerkende parameters van onder andere groenten en fruit is het belangrijk dat de hiervoor aan te schaffen apparatuur aan een aantal criteria voldoet. In de hierna beschreven inventarisatie en conclusie is dan ook in het bijzonder aandacht geschonken aan de volgende punten:

- De apparatuur moet plaatsbaar zijn zonder noemenswaardige bouwkundige of technische aanpassingen.
- De bediening van de apparatuur moet relatief eenvoudig zijn.
- De monstervoorbereiding moet minimaal en niet-destructief zijn.
- De meting moet zoveel mogelijk representatief en niet-destructief zijn.
- De maximale ruis van het systeem mag niet groter zijn dan $50 \times 10^{-6} \log^1/R$ bij $0,0 \log^1/R$ eenheden S.D.
- Flexibiliteit in meetopstelling als ook het gebruik van "fiber-optics" is zeer wenselijk.
- Aansluiting op een externe computer en het beschikbaar zijn van voldoende software voor data acquisitie is noodzakelijk.
- Een nederlandse danwel europese vertegenwoordiging is zeer wenselijk.

3 IR/NIR/NIT SPECTROMETERS

3.1 Infrarood Transmissie Spectrometers

De Milcoscan en Multispec infrarood apparatuur van Foss Electrix zijn on-line multicomponent analysesystemen speciaal ontwikkeld voor analyses van melk en andere vloeibare zuivelprodukten. De systemen zijn onder andere inzetbaar voor volledig automatische standaardisatie van het vet- en eiwitgehalte van kaasmelk. De systemen leveren daarmee een positieve bijdrage aan zowel de kwaliteit als de opbrengst van de verschillende kaassoorten. Ook is de apparatuur inzetbaar bij de bereiding van volle melkpoeder en gecondenseerde melk.

De meting berust op het infrarood transmissie principe. Daar enerzijds een dergelijk apparaat op het RIKILT aanwezig is en anderzijds met het systeem niet, niet-destructief gemeten kan worden aan vaste produkten (het te meten produkt moet in oplossing gebracht worden) zal verder niet ingegaan worden op de werking en het toepassingsgebied van deze apparatuur.

3.2 Fourier (Nabij) Infrarood Spectrometers

FT-IR wordt veelal toegepast voor identificatie en confirmatie van stoffen. Het aantonen van functionele groepen in een molecuul en kwantitatieve bepaling van stoffen zijn andere toepassingsmogelijkheden van FT-IR spectrometers.

Een aantal fabrikanten levert zeer geavanceerde FT-IR spectrometers met toepassingsgebieden in onder andere het nabij infrarood gebied. Te noemen zijn:

- De 60 SXB FT-IR spectrometer van Nicolet. Een research systeem met verwijderbaar monstercompartiment voor het uitvoeren van verschillende experimenten.
- De FT-600 spectrometer van Lloyd Instruments. Een "low cost" spectrometer.
- De infrarood Fourier spectrometers van Bruker. Zeer uitgebreide systemen met onder andere koppelingsmogelijkheden met GS- en LC-apparatuur (een FS-88 spectrometer is op het RIKILT aanwezig).

Ook kan door middel van modulen en onderdelen zelf apparatuur samengesteld worden. In verband hiermee zijn te noemen Spectra Techn. Inc., een fabrikant van IR-FTIR onderdelen en Applied Photophysics, die modulair spectrometers levert waaronder systemen uitgerust met grating-, laser- en fiber optieken.

Hoewel het principe van Fourier transformatie onder andere vanwege de rekentechnische voordelen ook bij nabij infraroodspectrometers steeds vaker toegepast wordt en genoemde spectrometers voor fundamenteel onderzoek zeer geschikt zijn voldoen ze niet aan alle eerder gestelde criteria.

Met name de monstervoorbehandeling en de zeer kleine hoeveelheden monstermateriaal waaraan de meting wordt uitgevoerd maken de techniek ongeschikt voor het niet-destructief bepalen van parameters in groenten en fruit.

3.3 UV/VIS/NIR spectrometers algemeen

Oorspronkelijk ontwikkeld voor concentratiemetingen van vloeistoffen is de huidige generatie "klassieke" spectrometers inzetbaar in zowel het UV, VIS als NIR golflengtegebied voor metingen aan zowel vloeibare, vaste als gasvormige produkten en componenten.

Een tweetal fabrikanten levert voor dit toepassingsgebied spectrometers welke praktisch en niet te specialistisch in gebruik zijn. Dit zijn de Lambda UV/VIS/NIR spectrometers van Perkin Elmer en de Carry 2200/2300 spectrometers van Varian.

Genoemde apparaten zijn uit te breiden c.q. te combineren met een al dan niet extern geplaatste "integrating sphere" waarmee onder andere aan het oppervlak van fruit gemeten kan worden.

Voor deze apparatuur is professionele hard- en software beschikbaar waarmee multicomponent analyse aan complexe produkten uitgevoerd kan worden.

Voor algemeen fundamenteel laboratoriumonderzoek zijn deze spectrometers zonder meer geschikt. Voor de meer praktische toepassing op het gebied van niet-destructieve metingen aan groenten en fruit zijn deze spectrometers vooralsnog minder geschikt.

Met name het niet-destructief meten van inwendige eigenschappen van grote monsters als tomaten, appels e.d. behoort niet tot de mogelijkheden terwijl de fotometrische ruis van ca. 0,0001 A in het NIR golflengtegebied te hoog is voor kwantitatieve analyse.

4 FABRIKANTEN VAN SPECIFIEKE NIRS/NITS APPARATUUR

4.1 Algemeen

Al sinds het begin van de zeventiger jaren zijn er commercieel verkrijgbare NIRS-analyzers te koop. Door technische verbeteringen en de snelle ontwikkeling van de micro-elektronica kwam de verkoop echter pas goed op gang in het begin van de tachtiger jaren.

Eind 1986 waren er ca. 8000 NIRS-analyzers wereldwijd in gebruik waarvan ca. 3000 in de voedings- en voedermiddelenindustrie. Waren het in het begin van de tachtiger jaren nog een drietal firma's die deze markt beheersten, in het begin van 1987 zijn er ca. tien. De belangrijkste hiervan zijn:

- Technicon Instruments Company Limited
- Pacific Scientific/Gardner/Neotec Division
- Dickey-John Corporation
- Percon Prüfgeräte GmbH
- L.T. Industries Inc.
- Trebor Industries Inc.

Nagegaan is wat deze fabrikanten momenteel te bieden hebben op het gebied van NIRS/NITS-analyzers. Naast deze inventarisatie is gevraagd naar de te verwachte ontwikkelingen, prijs van de systemen en of deze firma's een nederlandse dan wel een europese vertegenwoordiging hebben.

4.2 Technicon

Technicon is in Nederland de bekendste en met een marktaandeel van 95% ook de grootste leverancier van NIRS-apparatuur. De routine systemen zijn uitgerust met interferentiefilters en een "integrating sphere". Ze zijn zowel als "stand alone" unit te gebruiken als aansluitbaar op een externe computer (onder andere HP-85, HP-86 en IBM PC). De systemen zijn geschikt voor het analyseren van zowel vaste, pasteuze, als vloeibare produkten zowel in laboratoria als praktijkruimten. Principe van de meting is reflectie. Standaard wordt een groot aantal programma's geleverd voor het berekenen van ijklijnen, het analyseren van monsters, kwaliteitscontrole e.d.

Het research systeem, de Infra Alyzer-500, is uitgerust met een monochromator waarmee infraroodspectra opgenomen kunnen worden van 1100 tot 2500 nm in 4 nm increments of over een kleiner golflengtegebied in 1 mm increments (max. 350 golflengten). Als data systeem kan gekozen worden uit een HP-1000 of IBM computer. Ook dit systeem is gebaseerd op reflectiemeting. Het RIKILT beschikt zowel over een Infra Alyzer-400 uitgerust met 19 interferentiefilters als over een Infra Alyzer-500.

Het meten van de transmissie behoort bij zowel de routine als het reseach systeem niet tot de mogelijkheden.

Technicon levert geen automatische monstername apparatuur en on-line systemen. Naar de toepassing van fiber-optics is enig onderzoek verricht.

De verwachting is dat door de verkoop van Technicon Industrial Division aan Bran + Luebbe in de toekomst ontwikkelingen op het gebied van on-line en transmissiemetingen te verwachten zijn.

Bran + Luebbe heeft een produktenpakket dat onder andere bestaat uit doseerpompen en on-line analyse-apparatuur. In Nederland neemt Alfa-Laval de activiteiten van Technicon Instruments BV over. Alfa-Laval is onder andere actief in de voedingsmiddelenindustrie.

De naam van het bedrijf wordt Bran + Luebbe BV. De apparatuur zal op de markt worden gebracht onder de naam Technicon Industrial Systems.

4.3 Pacific scientific corp.

Pacific Scientific Corp. (PSCO) heeft ruime ervaring op het gebied van NIRS en levert zeer complete en geavanceerde systemen. De routine apparatuur onderscheidt zich van andere NIRS routine apparaten op het gebied van de golflengteselectie. Deze vindt plaats door de hoek van een interferentiefilter ten opzichte van de invallende lichtstraal te veranderen waardoor de uittredende lichtstraal van golflengte verandert. Hierdoor kan een groot aantal golflengten geselecteerd worden met één filter. Door het plaatsen van meerdere filters kan desgewenst een "scan" worden opgenomen.

De modellen 101S en Compscan 3000 zijn uitgerust met 3 filters waarmee het golflengtegebied van 1910-2320 nm bestreken kan worden. De scan snelheid is zeer groot (0,2 sec.). Voor een nauwkeurige analyse zijn echter een groot aantal scans nodig (analysetijd min. 15 sec.).

Hoewel PSCO claimt ook niet-destructief met deze apparaten te kunnen meten betreft het hier reflectiemetingen aan bijvoorbeeld granen. De apparaten zijn zowel als stand-alone apparaat inzetbaar als aansluitbaar op een externe computer (IBM-XT of AT).

Het 7000 type is uitgerust met 7 filters waarmee het golflengtegebied van 800-2380 nm bestreken kan worden. Voor de metingen aan zowel vaste, pasteuse als vloeibare produkten zijn een groot aantal monstercups en meetcellen beschikbaar. Naast reflectiemetingen kunnen transmissiemetingen uitgevoerd worden aan vloeistoffen, slurries en vaste produkten tot een korrelgrootte van ca. 3 mm. De monstervolumes zijn instelbaar en bedragen voor reflectiemetingen 15 tot 60 cm² en voor transmissiemetingen 30 tot 120 cm³. Voor transmissiemetingen in het gebied beneden de 1100 nm is optional een silicon diode detector leverbaar. De Compscan wordt standaard geleverd met een IBM-XT of AT computer. Koppeling met een automatische monsterwisselaar voor vloeistoffen is mogelijk.

Het topmodel van PSCO is het 6250 systeem. Het hart van deze scannende spectrometer is een "cam-driven F2 concave holographic grating" (scansnelheid 2,5 scan's/sec.).

Spectra kunnen opgenomen worden over een golflengte van 600-2500 nm waarbij automatisch wordt overgeschakeld bij 1100 nm van silicon naar loodsulfide detectoren. Naast de al eerder genoemde uitgebreide set monsterscups en meetcellen is er ook een speciale monsterunit voor fruit- en groentemetingen beschikbaar. Hiermee kunnen monsters met een doorsnede tot 6 inches gemeten worden. Om de monsterfout te verkleinen is een monstertransportmodule leverbaar waarmee verschillende keren aan bijvoorbeeld een intact monster gemeten kan worden waardoor een meer representatief meetresultaat wordt verkregen. Nieuw is de introductie van de "fiber optical bench". Met behulp van vezeloptiek en bijpassende optische componenten en speciale "probes" kan vrijwel iedere belichtings- en meetconfiguratie worden opgesteld. Evenals bij de andere systemen kan met de bijgeleverde IBM-XT of AT computer gebruik gemaakt worden van de uitgebreide Scientific's Near Infrared Spectral Analysis Software (NSAS-PC). Deze software bevat onder andere programma's voor multiterm log I/R, I/T en afgeleide regressie, discriminant analyse, Norris optimization regression, spectral matching, sample selection, Savitsky Colay, Kubelka Munk, FT NIR, statistical quality control en calibration transfer. Tevens bevat NSAS-PC een uitgebreide spectral library.

PSCO levert verschillende NIRS apparaten waarmee on-line gemeten kan worden. Dit kan zowel continue, bijvoorbeeld boven een produktielijn, als discontinu, via een bypass in een hoofdproduktiekanaal. De systemen zijn speciaal ontwikkeld voor industriële toepassing. Naast reflectiemetingen behoren ook transmissiemetingen van vloeistoffen, slurries en pasta's tot de mogelijkheden. Ook de on-line systemen zijn aansluitbaar op een IBM-XT en AT computer. Voor speciale applicaties bijvoorbeeld het meten van de kleur van fruit, zijn "fiber optic probes" aansluitbaar.

4.4 Dickey-John

Hoewel Dickey-John tot één van de pioniers op het gebied van NIRS gerekend kan worden is het aantal te leveren type NIRS-apparaten beperkt gebleven tot twee routine apparaten.

Oorspronkelijk ontwikkeld voor graananalyses zijn de apparaten nu op een breed gebied inzetbaar voor metingen van zowel vaste als pasteuze produkten.

De Instalab-800 kan afhankelijk van het toepassingsgebied worden voorzien van 4 tot 10 interferentiefilters. Een aantal specifieke door Dickey-John toegepaste technieken maken de Instalab-800 tot een betrouwbaar en eenvoudig te gebruiken apparaat. Genoemd kunnen worden:

- een roterende monstercup voor een meer representatieve meting
- toepassing van Instaref waarmee de analysetijd gereduceerd wordt tot 5 sec.
- toepassing van Optigain waarmee ook van produkten met lage reflectie-karakteristieken de meest optimale karakteristiek geselecteerd kan worden.

Software voor het berekenen van ijklijnen is beschikbaar voor een HP-86, Epson HX-20 en IBM-XT computer.

De instalab-600 is speciaal ontwikkeld voor metingen dichtbij de produktielijn. De bediening is uiterst eenvoudig. Het apparaat heeft een opslagcapaciteit voor 4 componenten in 4 produkten. Aansluiting van een computer is niet mogelijk, wel van een printer.

Standaard worden de apparaten voorzien van een aantal ijklijnen, terwijl Dickey-John op haar eigen applicatie-laboratorium tegen betaling (600 dollar) ijklijnen opstelt voor Instalab gebruikers.

On-line en transmissie-apparatuur worden niet door Dickey-John geproduceerd.

4.5 Percon

De Inframatic van de firma Percon vertoont veel overeenkomsten met de Infra Alyzer apparatuur van de firma Technicon. De systemen zijn uitgerust met interferentiefilters en een integratie sphere. Ook de golflengten van de filters van beide systemen komen overeen waardoor in principe ijklijnen van beide systemen overzetbaar zijn. Het eenvoudigste model, de Inframatic-8100, is evenals de Inframatic-9111 een stand alone apparaat voorzien van 6 filters en met name geschikt voor de bepaling van de samenstelling van granen. Maximaal kunnen 18 ijklijnen in het apparaat worden opgeslagen. De Inframatic-8120 is met 20 filters het meest uitgebreide apparaat. De voor dit apparaat benodigde software omvat een groot aantal programma's onder andere voor het berekenen van ijklijnen en analyseren van monsters en is geschikt voor een Epson HX-20 en een IBM-computer.

De filterwielen van de apparaten zijn uitwisselbaar en uit te breiden met filters met andere golflengten. De vloeistofcel waarmee in de transreflectievorm wordt gemeten heeft een instelbare weglengte. Een automatisch monsternamesysteem is beschikbaar voor poedervormige produkten. Deze wordt via een bypass in een hoofdkanaal aangesloten en kan discontinu tot maximaal één meting per minuut uitvoeren. Op het zelfde principe gebaseerd is er een automatisch monsternamesysteem voor vloeistoffen beschikbaar.

Met behulp van de Inframatic-8300 is het mogelijk om on-line metingen te doen aan vaste-, vloeibare- en pasteuze produkten.

Percon heeft geen NIT in zijn programma. Wel wordt momenteel een haalbaarheidsonderzoek gedaan voor wat betreft marketing en technische mogelijkheden hiervan.

4.6 L.T. Industries

L.T. Industries is een vrij nieuwe firma die zich specifiek bezig houdt met het ontwikkelen van NIR/VIS analyzers. De directeur van L.T. Industries, dr A.M. Landa, is een NIR-onderzoeker vanaf het eerste moment. De kennis opgedaan tijdens jarenlange research heeft de firma nu gecombineerd met de allermooiste materialen en technieken, hetgeen heeft geresulteerd in de Quantum 1200 NIR/VIS Analyzer.

Hart van de Quantum Analyzer is de "high intensity light source holographic grating" monochromator. Hiermee kan zeer snel een scan worden gemaakt over het golflengte gebied van 400-2400 nm (5 scan's/sec.). Er kan gemeten worden in zowel de reflectie- als de transmissievorm. Het systeem bezit een automatische temperatuur- en achtergrondcompensatie alsook een flexibel monstercompartiment. Met behulp van fiber optics kan on-line gemeten worden zowel in de reflectie- als in de transmissievorm. De LTI SpectraMetrix software is zeer uitgebreid en bevat naast de gebruikelijke data acquisition-, graphics-, statistical analysis- en utility programma's, mathematische programma's voor afgeleide, Kubelka-Munk, logaritmische- en factoranalyse berekeningen. Als computer is gekozen voor de IBM-XT of AT. De Quantum 1200 analyzer kan zondermeer geplaatst worden in bedrijfsruimten.

4.7 Trebor Industries

Ook Trebor Industries is een vrij jonge firma die zich specialiseert in NIRS apparatuur. Dr R.D. Rosenthal, directeur van deze firma is een bekende NIR-specialist. Trebor onderscheidt zich van de andere firma's doordat ze zich geheel concentreert op nabij infrarood transmissie, met als uitgangspunt niet-destructief meten. Om dit te bereiken wordt gemeten in het zeer nabij infrarood golflengtegebied (700-1100 nm). Circa 10% van de energie met een golflengte uit dit gebied blijkt een laag van 2 cm graan te kunnen doordringen. Door gebruik te maken van silicon detectors (10.000 maal zo gevoelig als loodsulfide!) kan de relatief zwakke absorptie in dit gebied van organische componenten als eiwit, vet, zetmeel, e.d. met voldoende nauwkeurigheid geregistreerd worden. Hiervan maken ook andere firma's die apparatuur maken voor transmissiemetingen gebruik. Het unieke van de apparatuur van Trebor is echter het gebruik van "infrared emitting diodes" ("IRED"). IRED's zenden optische energie uit met een specifieke golflengte. IRED's hebben een aantal voordelen ten opzichte van het gebruik van een klassieke lichtbron zoals de wolfram halogeen lamp, omdat ze:

- weinig warmte produceren
- zeer snel aan en uit geschakeld kunnen worden (in minder dan 0,001 sec.)
- een zeer lange levensduur hebben (min. 50 jaar)
- zeer goedkoop zijn.

Omdat het technisch moeilijk is IRED's te produceren met de gewenste golflengte vindt er een selectie op specifieke golflengte plaats. Daarnaast wordt achter iedere afzonderlijke IRED een "narrow bandpass filter" geplaatst om de gewenste golflengtenauwkeurigheid te bereiken. Omdat temperatuurverschillen in het zeer nabije infrarood golflengtegebied niet alleen een verschuiving van de specifieke waterabsorptie-golflengte veroorzaken maar ook de mate van absorptie beïnvloeden, past Trebor in al zijn apparatuur een temperatuur correctiesysteem toe. Deze bestaat uit twee "thermistors" die zowel de temperatuur van het monster als die van de omgeving registreren waardoor het mogelijk is voor temperatuurverschillen over een grote range (-65°C tot +95°C) te corrigeren. De combinatie van het gebruik van IRED's, bandpass filters, thermistors en een silicon detector levert een optimum aan gevoeligheid tegen een minimum aan kosten.

Het eenvoudigste model, de Trebor 30 A, is een apparaat dat ontwikkeld is voor de bepaling van vocht in granen, poeders, vloeistoffen en pasta's. Een groot aantal monsterhouders is leverbaar. Maximaal 12 calibraties kunnen in het apparaat opgeslagen worden. Aansluiting op een Kaypro-11 of IBM-PC is mogelijk terwijl voldoende software aanwezig is voor databerekeningen.

De Trebor-62 is specifiek voor de bepaling van olie/vet in gemalen produkten. De hele optiek is geplaatst in de monsterhouder die via een kabel aangesloten is op het apparaat. Het apparaat is "voor"-gecalibreerd en is niet aansluitbaar op een PC.

De Trebor-80 is speciaal ontwikkeld voor het bepalen van het eiwit, vet en vochtgehalte in kleine hoeveelheden graan (3 à 5 g). Monsters met een temperatuur van 15 tot 30°C kunnen geanalyseerd worden met behulp van twee bijgeleverde ijklijnen (graan en tarwe).

Ook het Trebor-90 model is speciaal ontwikkeld voor graancontrole. Het apparaat is voorzien van een "doorval" monsterhouder en is met de bijgeleverde ijklijnen in zeven landen geaccepteerd als officiële methode voor de bepaling van eiwit, vocht en vet in graan.

De Trebor-99 is het meest geavanceerde routinemodel. Het apparaat is geschikt voor het bepalen van organische componenten zoals eiwit, vet, suikers, zetmeel, vezel e.d. in vaste, pasteuze en vloeibare produkten. Ook in dit model kunnen produkten met zowel extreem lage als hoge temperatuur direct gemeten worden. Ijklijnen voor de bepaling van maximaal 3 componenten in 6 produkten kunnen in het apparaat opgeslagen worden. Aansluiting op de Kaypro-11 microcomputer of IBM-PC is mogelijk.

Het topmodel van Trebor is het Trebor-70 systeem. Deze "high energy holographic grating spectrophotometer" is inzetbaar in het golflengtegebied van 600-2500 nm. Zowel reflectie als transmissiemetingen kunnen verricht worden zonder aanpassingen in de hard- of software. Het hart van het optisch systeem, is een 90 mm \emptyset holographic concave grating (F 3.0) met 570 groeven/mm. Als lichtbron is een 150 watt wolfram-halogen lamp gebruikt. Als detector voor transmissiemetingen wordt in het gebied van 600-1100 nm gebruik gemaakt van een z.g. "large area" silicon detector terwijl voor reflectiemetingen en vier "large area" loodsulfide detectoren worden gebruikt die onder een hoek van 45° ten opzichte van de lichtstraal zijn geplaatst.

In het monsterhoudersysteem kunnen monstercups geplaatst worden met verschillende diameters (5, 10, 16 en 25 mm) voor zowel reflectie- als transmissiemetingen.

De Trebor-70 wordt geleverd met een z.g. "build-in" computersysteem inclusief een 14 inch monitor en een 80 koloms printer. Software voor het sturen van het systeem, het berekenen en opslaan van ijklijnen en het analyseren van onbekende monsters wordt meegeleverd. Voor research doeleinden is een RS-232c uitgang aanwezig voor koppeling met een IBM PC-XT of AT waarmee de gebruiker de beschikking krijgt over het uitgebreide Trebor NITS-software pakket.

Ook op het gebied van on-line metingen levert Trebor een aantal systemen, te weten het Trebor-1000 systeem voor het continu meten van eiwit, vocht en vetgehalten in granen en oliehoudende zaden en het Trebor-2200 systeem die met hoge snelheid produkten kan sorteren op interne karakteristieken. Laatstgenoemd systeem vertoont veel overeenkomsten met de "Sortex" sorteermachines met dat verschil dat Trebor lichttransmissie gebruikt waardoor interne verschillen gemeten kunnen worden terwijl de "Sortex" apparaten gebaseerd zijn op het meten van externe reflectie. Het systeem zou geschikt zijn voor het sorteren van noten op ziekte en/of bijprodukten, aardappels op droge stofgehalte of inwendige bruinkleuring, appels op rijpheid of inwendige bruinkleurig, pruimen op de aanwezigheid van pitten etc. Maximaal 10 metingen/sorteringen per seconde kunnen uitgevoerd worden per unit tot 160 metingen/sorteringen per seconde per installatie. Naast deze on-line en sorteer systemen levert Trebor portable units voor onder andere het meten van rot in appels, rijpheid van advocado's en zoetheid van meloenen.

5 CONCLUSIE

Een drietal fabrikanten van NIRS-apparatuur produceert apparaten waarmee naast de gangbare reflectiemeting in het gebied van 1100-2500 nm ook transmissiemetingen uitgevoerd kunnen worden in het gebied van 600-1100 nm.

Deze fabrikanten zijn:

- L.T. Industries Inc. (Quantum-1200)
- Trebor Industries Inc. (Trebor-70 research analyzer)
- Pacific Scientific/Gardner/Neotec division (PSCO) (PSCO-6250 research analyzer).

De Quantum-1200 van L.T. Industries en het 6250 systeem van PSCO kunnen worden uitgerust met "fiber optics" waarmee ook aan grote monsters zoals tomaten en appels niet-destructief gemeten kan worden.

Het 6250 systeem van PSCO is het meest geavanceerde NIRS/NITS systeem dat momenteel verkrijgbaar is.

Zowel qua systeemspecificaties als het aantal verkrijgbare accessoires steekt het systeem gunstig af ten opzichte van de systemen van L.T. en Trebor Industries.

Daarnaast beschikt PSCO over de meeste contacten met universiteiten en researchcentra hetgeen belangrijk is voor de fundamentele onderbouwing en verdere ontwikkeling van de techniek.

PSCO beschikt zowel over een Europese als Nederlandse vertegenwoordiging (Meyvis en Co BV) die garant staat voor voldoende supporting en technische service.

Trebor Industries wordt in Europa vertegenwoordigd door Brichart S.A. (België). Technische Service wordt vanuit Amerika gegeven.

L.T. Industries beschikt vooralsnog niet over een Europese vertegenwoordiging.

De aanschafprijs van het 6250-systeem is, inclusief een groot aantal accessoires, computer en software ca. fl. 260.000,-, die van de Quantum-1200 Analyzer van L.T. Industries ca. fl. 135.000,- en die van de Trebor-70 research analyzer ca. fl. 110.000,-.

Voor gedetailleerde informatie van de PSCO-6250, de Quantum-1200 en de Trebor-70 NIRS-NITS analyzers zie bijlagen A t/m D.

diverse adressen

0467

1987-02-12

Near Infrared Reflectance Spectroscopy. Pr.nr. 505.6050

Part of the activities of the State Institute for Quality Control of Agricultural Products consists of developing and promoting (automated) fast methods to measure quality defining parameters of foods and feeding-stuffs. Since 1980 we use within this framework near infrared reflectance instruments for compositional analysis of foods and feeding-stuffs and for research purposes. At this moment we investigate the possibility of nondestructive measurements by NIRS directly without any sample preparation. A part of this study is to make an inventory on all kinds of commercial available NIRS/NITS instruments. Therefore we ask you as well as all other producers of NIRS instruments for information about the following items:

- General information on your NIRS/NITS instruments, including prices of the different systems.
- Wavelength extension to the visible region.
- Available software.
- On-line measurements.
- Automatic sample introduction and measurements.
- Adaptable sample compartment to accomodate various forms of samples.
- Transmittance techniques (fruit-nondestructive).
- Your view on future applications, especially on NIT.
- Address of your representative in Holland or in Europe.
- References.

With kind regards,

R. Frankhuizen
NIR-Scientist



Fra/IH

Adressenlijst bij brief nr. 0467

Multilab b.v.
Postbus 1180
3430 BD NIEUWEGEIN

LT Industries, Inc.
6110 Excutive Boulevard
Rockvill, Maryland 20852
United States of America

Trebor Industries Inc.
P.O. Box 2159
Gaithersburg, Maryland 2087
United States of America

Dickey-John co.
P.O. Box 10
Auburn, IL 62615
United States of America

Technicon Instruments b.v.
Avelingen-West 5
4202 MS GORINCHEM

Meyvis en Co. b.v.
Postbus 265
4600 AG BERGEN OP ZOOM

Labor MJM
P.O. Box 73
Budapest H-1450
Hongarije

Moisture Systems Corp.
120 South Street
Hopkinton, MA 1748
United States of America

USDA, Russell Research Center
Dr. G.S. Birth
P.O. Box 5677
Athens, GA 30613
United States of America

Foss Electric Ltd.
The Chantry
Bishothorpe, York, YO2 1QF
Great-Britain

Bruker Instruments Inc.
Manning Park, Billerica
Mass 01821
United States of America

Varian Benelux B.V.
Jan Rebelstraat 21
1069 CA AMSTERDAM

Multispec Inc.
23560 Lyons Avenue
Suite 209 Newhall
California 91321
United States of America

Nicolet b.v.
Meidoornkade 19
3992 AG HOUTEN

Polaron Equipment Ltd.
Greenhill Crescent Watford Business Park
Watford Hertfordshire WD1 8QS
Great Britain

LLOYD Instruments PLC
Brook Avenue
Warsash, Southampton
Hampshire SO3 6HP
Great Britain

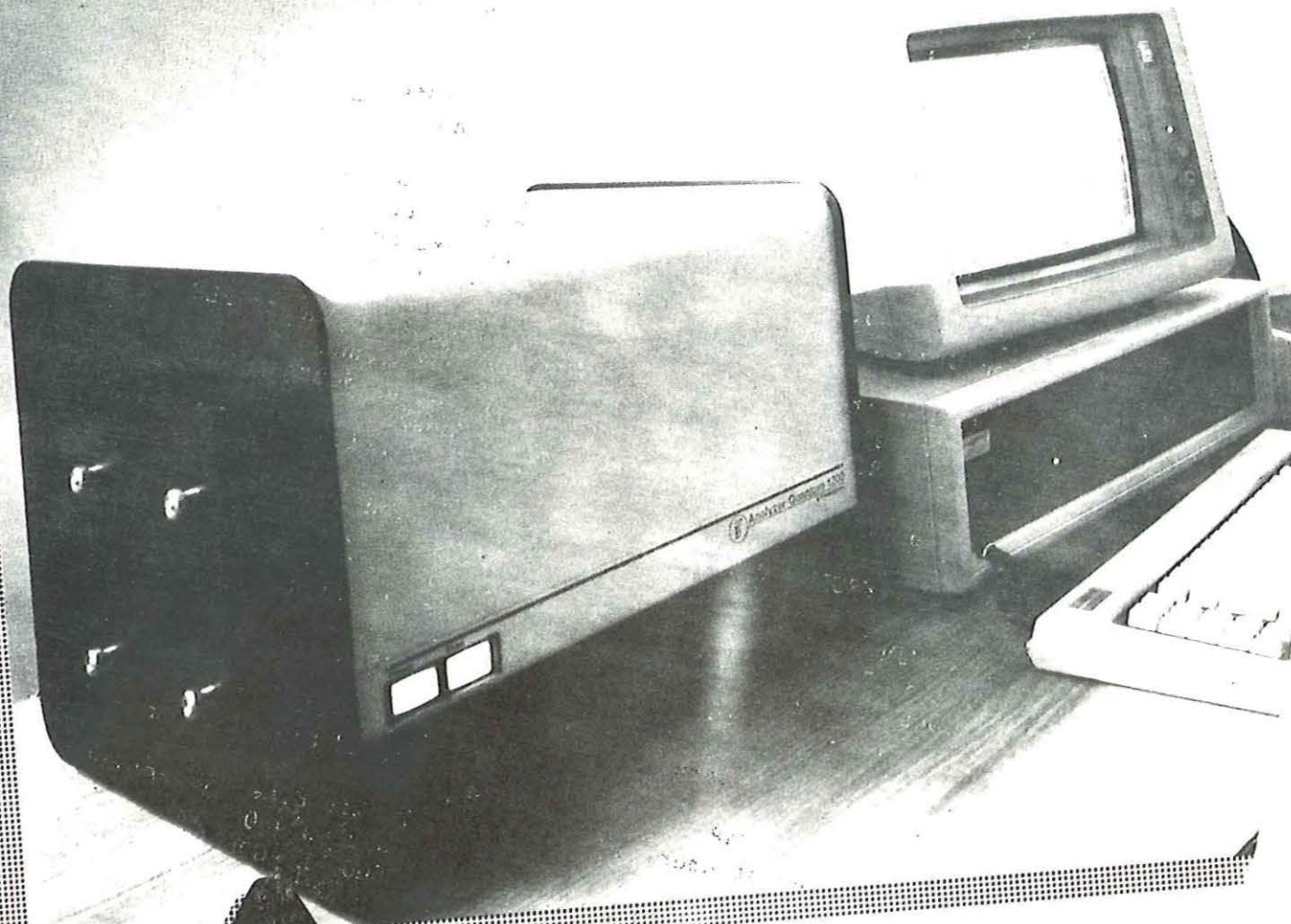
Applied photophysics Ltd.
18-21 Gorsham St.
Londen N1 6DR
Great Britain

Mattson Instruments, Inc.
1001 Eoarier Court
Modison W1 53717
United States of America

Perkin-Elmer Nederland b.v.
Postbus 490
2800 AL GOUDA

QUANTUM 1200

BIJLA



NIR/VIS

Analyzer

Rapid Scanner For
Constituent And
Physical Properties

FOR USE IN LABS AND ON-LINE APPLICATIONS

LT Industries, Inc.

SPECIFICATIONS

Reliability: Tested for around the clock uninterrupted operation for on-line and laboratory applications.

Spectral Response: 1200-2400 nm

Spectral Expansion: 400-2400 nm

Speed of Scan: 5 complete scans per second

Modes of Measurement: Reflectance and Transmittance

Remote Measurement: Fiber Optics Extension

Spectral Resolution: 1 nm data interval

Bandwidth: adjustable

Wavelength Accuracy: ± 0.5 nm in the NIR.

Wavelength Repeatability: 0.03 nm or better

Stray Light: 0.1% or better

Detection Configuration: Optimized for minimum specular reflectance

Measurement: 16 bit data conversion corresponds to 1 part in 65,000

Software: Complete package includes:

- Data collection programs
- Data transformation programs
- Regression analysis
- Statistical interpretation
- Measured quantity derivation
- Help routines
- Diagnostics
- Extensive graphics
- Utility programs

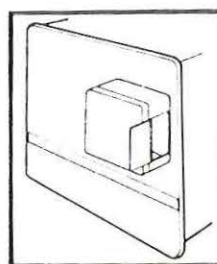
Computer Requirements: IBM PC, XT, AT and compatibles

Auxiliary Port: Computer controlled auxiliary port for closing a process loop and controlling accessories.

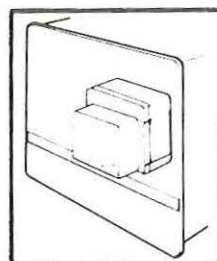
Power: 120V, 3.5 Amp, 60 Hz.
or 220V, 1.8 Amp, 50 Hz.

Power Transients: Filtered

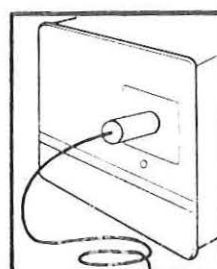
Dimensions: 12" x 15 $\frac{1}{4}$ " x 13 $\frac{1}{4}$ " (h,w,d)



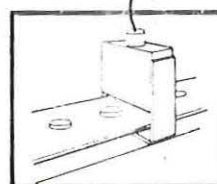
● Reflectance



● Transmittance



● Fiber optics remote measurement



OPTIONS AND ACCESSORIES:

- Fiber optics scanning capabilities to allow remote on-line measurements.
- Adaptable sample compartment module to accommodate various forms of samples.

SERVICE AND WARRANTY

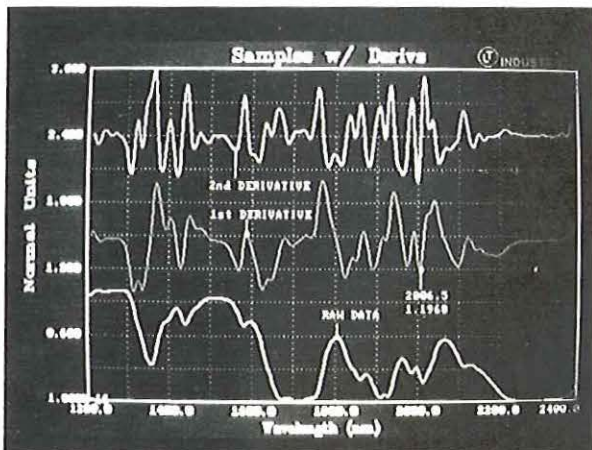
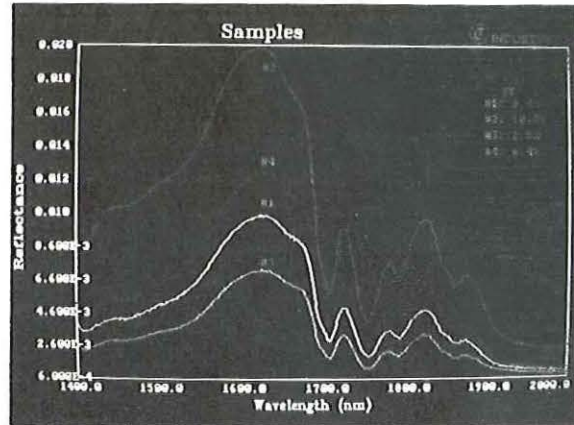
- One year warranty.
- Self diagnostic features to allow immediate response.
- Guaranteed rapid service and dedicated support.



SPECTRAMETRIX SOFTWARE

DATA ACQUISITION PROGRAMS—assure reliable data collection, flexibility in file and sample control, averages and ratios multiple scans.

GRAPHICS PROGRAMS—High resolution color graphics with multiple graphs display. Complete flexibility in examination of ranges, determination of points, text insertion and change of titles. Built in smoothing routines. Output compatible with graphics printers.



MATHEMATICAL PREPROCESSING PROGRAMS—Derivatives, normalization, ratioing, Kubelka-Munk, logarithms, smoothing, and more. Cascading of multiple math routines and flexible input/output file structures.

MODELING PROGRAMS—Complete package with the most advanced data analysis techniques including stepwise regression analysis, local minima multiple model generation, statistical factors and coefficient for optimization of selected model. Complete calibration and prediction results.

DIAGNOSTIC PROGRAMS—Instantaneous verification of system calibration, operation, and performance.

CUSTOM PROGRAMS—Customized programs for controlling accessories through the auxiliary port, closing a loop in a process control operation and other needs.

UTILITY PROGRAMS—Provides status and content of data files and processing history, at all levels.

```

L.T. Industries Composition Analysis
GRAPHING SUBSYSTEM (V1.28)

GRAPHING COMMANDS:      Range      Title      Y-Label      Grid
(ENTER) Draw            1200.0-2400.0nm  Samples     Reflectance  YES
(F1) Help
(F2) Samples
(F3) Range
(F4) Title
(F5) Y-Label
(F6) Grid
(F7) Exam/ins
(F8) Print
(F9) Save
(F10) QUIT

SAMPLES
1 SAMPLE 1 (211)
SAMPLE 5 (211)
3 SAMPLE 6 (211)
SAMPLE 21 (211)

GRAPHING SUBSYSTEM: Command Summary

For general operating instructions, press
(F1) again. Use the (F6) and (F8) keys on the
numeric keypad to scan the information.

(ENTER) DRAW THE GRAPH *****

Press the (Enter) key (sometimes called
(Return)) to draw the graph on the screen. Up to
four samples can be drawn. The (Enter) key is
located to the left of the numeric keypad (where the
arrows are) above the key labeled (F10).
    
```

FEATURES AND BENEFITS

- **A Turn Key System:** for instant and accurate measurement for cost savings.
- **Powerful Software:** exclusive SpectraMetrix software package.
- **Fiber Optics for Remote Measurements.**
- **Direct Modeling:** For maximum accuracy in transferring laboratory measurement to on-line.
- **Compact and Rugged Design:** Ideal for on-line process monitoring.
- **Flexible Sample Compartment Configuration:** to enable use of various sample sizes and shapes and accommodate liquid, solid, slurries, pastes and powders.
- **Wide Spectral Range:** Spectral range from VIS through NIR in reflectance and transmittance modes.
- **Computer Controlled Auxiliary Port:** for controlling accessories, or closing a loop in a process.
- **Extensive Diagnostic and Auto Calibration.**
- **Versatile Design:** Instrument can be used in any desired spatial orientation.
- **Continuous Operation and Analysis:** A unique design of the scanning mechanism provides continuous, reliable, high accuracy, and repeatability of scanning.
- **Rapid Analysis:** Scan rates 5 scans per second.
- **Superior Specifications:** high energy throughput, adjustable bandwidth, high sensitivity, and wide dynamic range.
- **Total Solution:** for your non-destructive, continuous and rapid monitoring, control and measurement needs

FEED, FORAGE AND FOOD ANALYZER

Measures Nutritional Properties of Complex Foods



TREBOR-70, THE MOST VERSATILE NEAR-IR INSTRUMENT

• Direct Measurement of Up to 12 Constituents Per Product:

- Protein
- Moisture
- Oil/Fat
- Crude Fiber
- ADF
- Heat Damaged Protein
- Ca, Mg, Ph
- Amino Acids including:
 - * Lysine, Methionine, Threonine, Tryptophan, Serine, Isoleucine, Glycine, Alanine, Valine, Proline, etc.
- Many Others

- Measures in Both Reflectance and Transmission
- Can Do Samples with High Moisture or High Oil/Fat (e.g. Liquids, Pastes)
- Can Do Dry Powders/Meals
- Can Do Whole, Unground Grains, Oilseeds, Snack Foods, Without Any Sample Preparation or Grinding
- Simple to Use, All Answers in 30 Seconds
- Delivered Factory Calibrated For Most Products (e.g., mixed feeds)
- Built-in Computer Also Allows User to Perform Calibrations

TREBOR-70 FEED, FORAGE AND FOOD ANALYZER

BACKGROUND

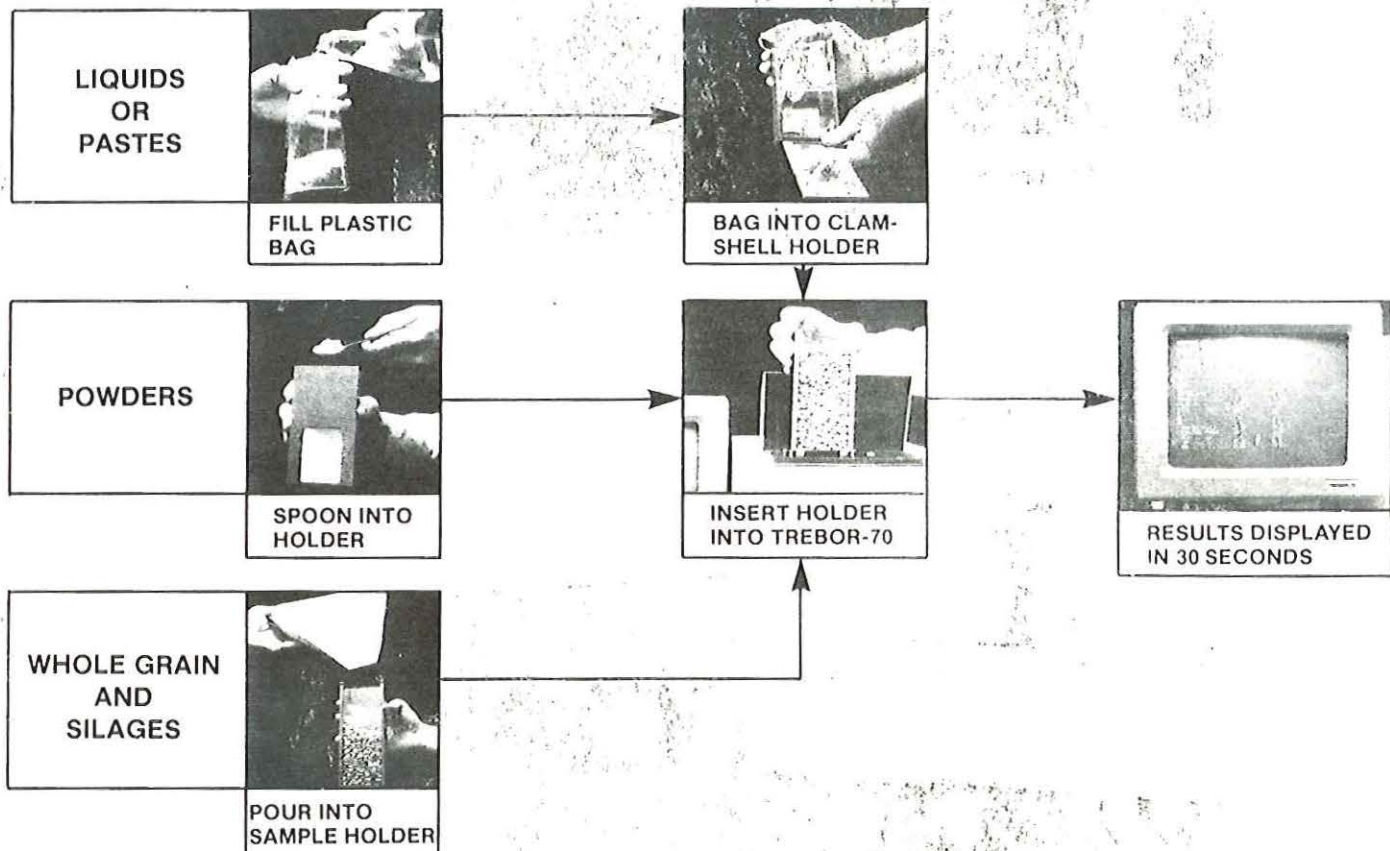
Near-IR instruments have become widely accepted in many industries. For example, wheat is routinely bought and sold based on its protein content, which is routinely measured by simple Near-IR instruments.

On "complex" products — e.g. mixed animal feeds, forages, prepared food products — where the recipe may change as ingredient prices and availability change, accurate measurement requires optical data at many wavelengths.

The TREBOR-70 is specifically designed to measure these complex products. It provides reflectance measurement of powdered products at every 1 nm between 1100 and 2500 nm. For high moisture products (e.g. milk, meat, silage) as well as large granular products such as whole grains and snack foods, the instrument performs transmission measurements between 600 and 1100 nm, also at every 1 nm.

This full spectrum capability is directly converted into "percent" by the TREBOR-70's powerful built-in computer.

SIMPLE TO USE



FOR NIR RESEARCHERS

The TREBOR-70 contains a precision high-energy spectrophotometer. The system provides transmission scans from 600 to 1100 nm with the data measured at every 1 nm. Reflectance scans are from 1100 to 2500 nm with data also measured at every 1 nm. Typical scan time is 20 seconds.

The TREBOR-70 can be coupled to any external computer thus allowing versatile NIR research. Research software is available for the various models of the IBM-PC and Kaypro computers.



Trebor Industries, Inc.

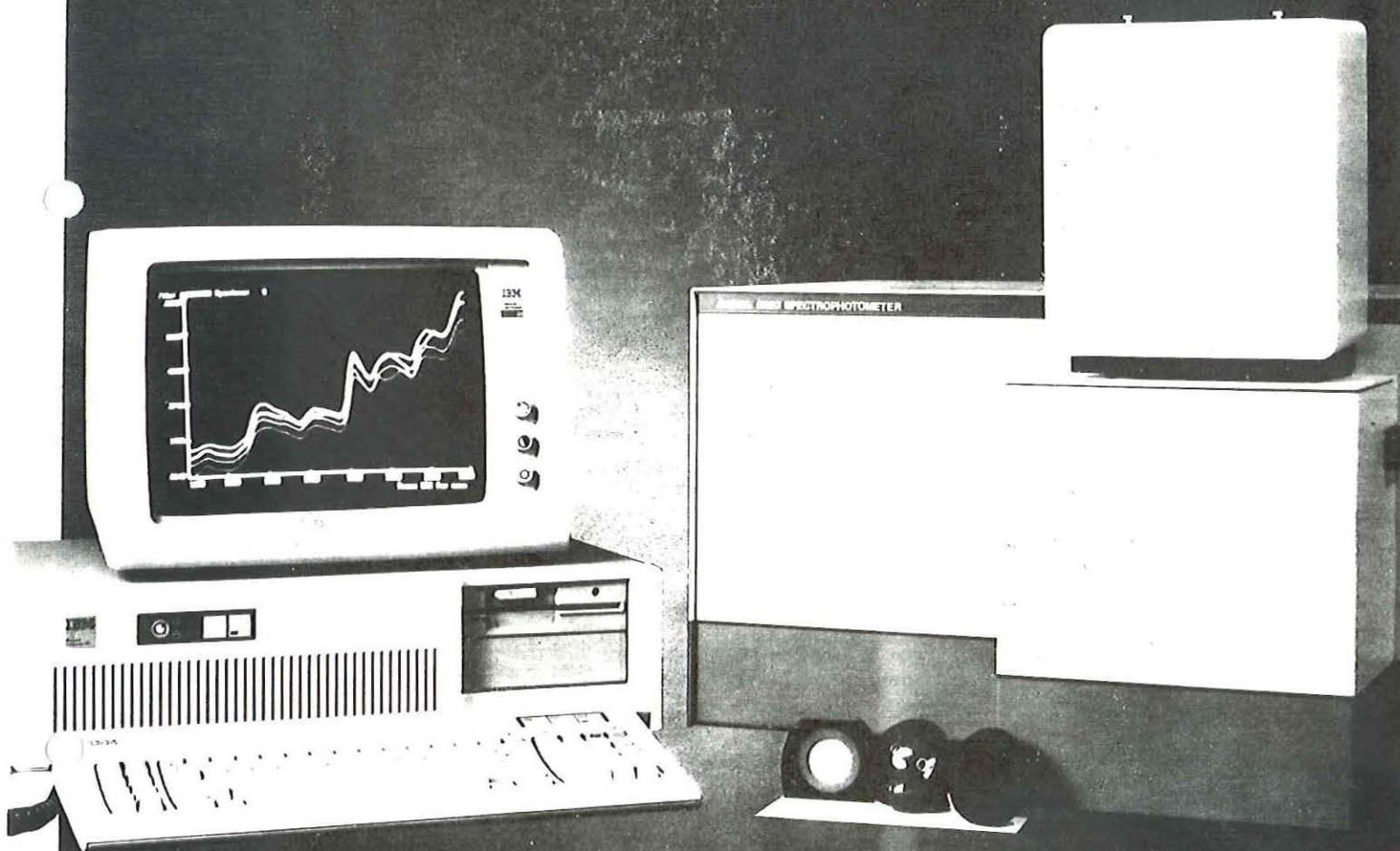
P.O. Box 2159, Gaithersburg, MD 20879

Telephone (301) 948-7650 TWX/TLX 710-828-9701

Model 6250 System

NEAR INFRARED SPECTROPHOTOMETER

NIR
THE NEW
SPECTROSCOPY



GARDNER
NEOTEC
Division  PACIFIC
SCIENTIFIC

THE
NEAR INFRARED
SPECTROSCOPY
SPECIALISTS

NEAR INFRARED (NIR) SPECTROSCOPY

In the laboratory, the mid-infrared (MIR) spectral region has traditionally been used for qualitative analysis of organic substances. It is in this portion of the IR spectrum that absorption bands arising from transitions involving vibrational energy states occur. These states correspond to specific bond deformations, either stretching or bending, within a molecule. In complex molecules, vibrational deformations of various functional groups—hydroxyl, methyl, carbonyl—often give rise to characteristic absorption bands whose wavelengths or frequencies usually do not vary significantly. This is due to the general insensitivity of localized functional groups to the much larger mass of the remainder of the molecule. Such characteristic absorption bands can rapidly provide direct qualitative information regarding the presence or absence of specific functional groups within a compound. The IR spectrum of a specific compound can also be considered as a "fingerprint" for that compound, and therefore, be used to either identify an unknown substance, or determine its presence in a mixture.

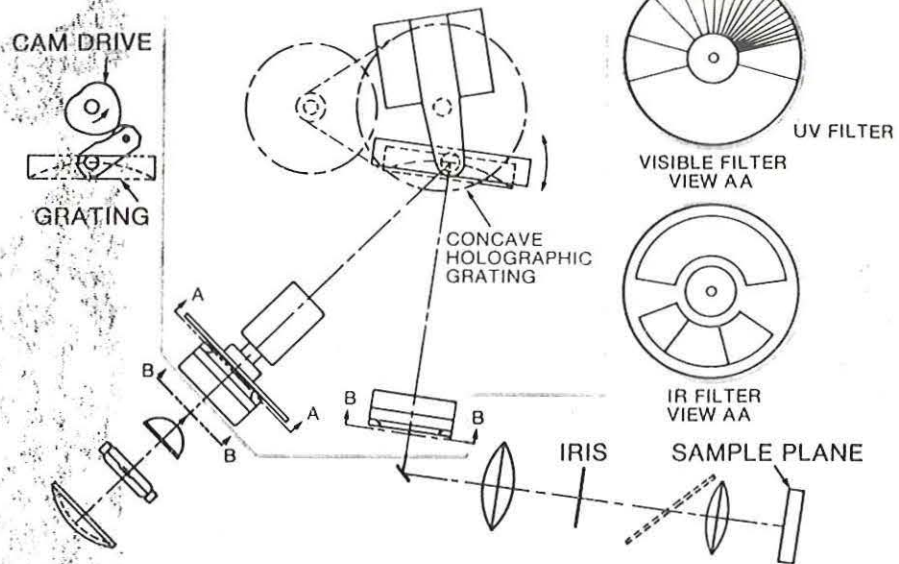
The widespread use of the MIR spectral region for qualitative analysis was carried over when IR techniques were later applied to quantitative analytical problems. Unfortunately, MIR analysis was somewhat of a disappointment when used quantitatively. This was primarily due to the experimental difficulties encountered in obtaining

reproducible results for most types of samples. MIR spectra of most liquids had to be recorded using extremely small pathlengths, typically much less than 0.1 mm. At such pathlengths, the tolerances required for good quantitative results are very difficult to achieve on a routine basis. It was possible to obtain transmittance spectra of solids by preparing KBr pellets or nujol mulls, or by casting thin films using a suitable solvent (if one could be found). Reflectance spectra were usually recorded using the attenuated total reflectance (ATR) technique.

The relative strength or intensity of the absorption bands in the MIR spectral region necessitated the use of such sample preparation techniques together with their subsequent problems. Absorption bands in the near-infrared region (NIR), however, are simply overtones and combinations of the bands occurring in the MIR, and as such, are much weaker than their MIR counterparts. Overtones can be best thought of as harmonics of the MIR fundamentals; they occur at near integral multiples of the fundamental absorption frequency and are often referred to as first, second, or higher order overtones. Since intensity decreases rapidly with increasing order, only the first through third overtones are generally observed

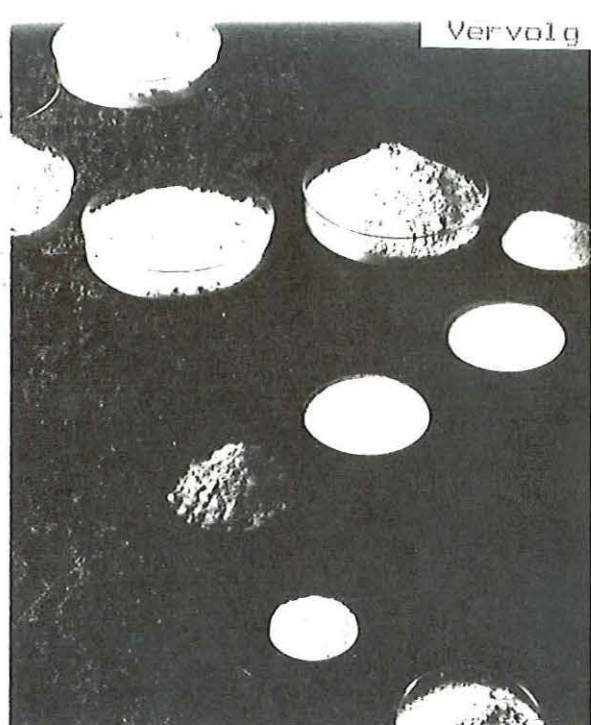
in the NIR. Combinations are bands occurring at frequencies equal to the sum or difference of two or more fundamental absorption frequencies, or an overtone and a fundamental. Due to the relative weakness of NIR absorption bands it is possible to use reasonable pathlengths (0.5mm–1.0cm) for transmittance measurements of liquids and solids, as well as the use of neat samples (often without any prior preparation) for diffuse reflectance measurements of intact solids. Simplicity of sample preparation techniques also results in good reproducibility of spectral data.

Unlike the MIR spectrum, which consists of absorption bands that are fairly well distinct from one another, the NIR spectrum of most compounds is one of overlapping bands. The overlap is compounded for spectra of complex mixtures, making it sometimes quite difficult to correlate specific bands to the components from which they arise. This is especially true when the concentration of the component to be measured is less than 10 percent. In such cases, moderate concentration variations may cause only very slight changes in the NIR spectrum.



ADVANCED MONOCHROMOTOR DESIGN

The heart of the Model 6250 System is its monochromator consisting of a cam-driven f2 concave holographic grating. This cam drive gives fast scan speeds of 2.5 scan/sec., thereby allowing averaging of multiple scans to improve precisions of both absorbance and wavelength. More importantly fast scanning allows moving the sample while measurement is being made to effectively increase sample size. The f2 grating provides high energy throughout, which greatly increases signal to noise ratios over conventional spectrophotometers.



Therefore, to effectively utilize the Near Infrared spectrum for qualitative and quantitative analysis, and take advantage of the ease of sample presentations afforded by this technique, the analyst will require: (1) a spectrophotometer—which generates spectra with extreme precision both in absorbance and wavelength, and (2) a computer—with advanced software to interpret the resulting complex spectra.

MODEL 6250 SYSTEM

The Model 6250 System incorporates the latest state-of-the-art computer hardware and software with a unique patented technology to meet the requirements of NIR quantitative analysis. This system features:

- Superior instrumental performance
- A flexible and versatile sample presentation system
- Broad software library
- True calibration transferability

SUPERIOR INSTRUMENTAL PERFORMANCE

Single Beam Operating Mode

Modern electronics achieves the spectroscopist's goal of true single beam operation which means:

■ **Low Photometric Noise**

Uniform noise levels of 25×10^{-4} log 1/R units S.D. are achieved in a total spectral scan time of 20 seconds. For those applications requiring lower noise levels, the scan time may be increased.

■ **High Wavelength Precision**

Wavelength precision is better than 0.015nm S.D. on repeat scans.

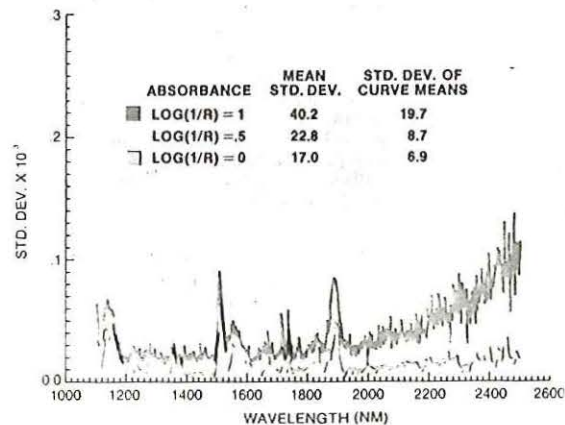
■ **Simultaneous Reflectance/Transmittance Measurement Modes**

The system operates in the reflectance mode for solid material and the transmittance mode for liquids and slurries. Lead sulfide or silicon detectors are automatically used depending on the measurement mode selected through the system's software.

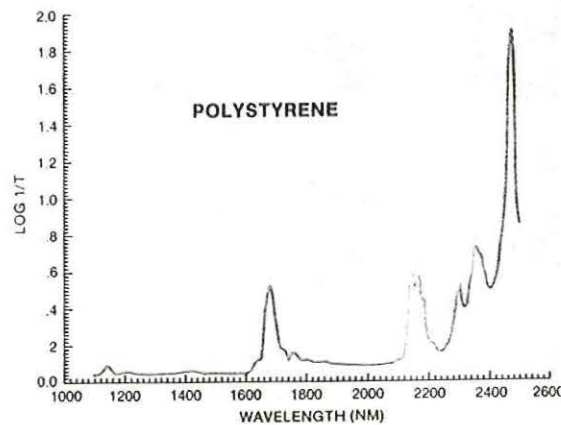
■ **Fast Scan**

One complete NIR spectrum is obtained in less than 0.4 seconds. Full performance is achieved by averaging over 600 A/D conversions per wavelength in 20 seconds for a complete spectral scan.

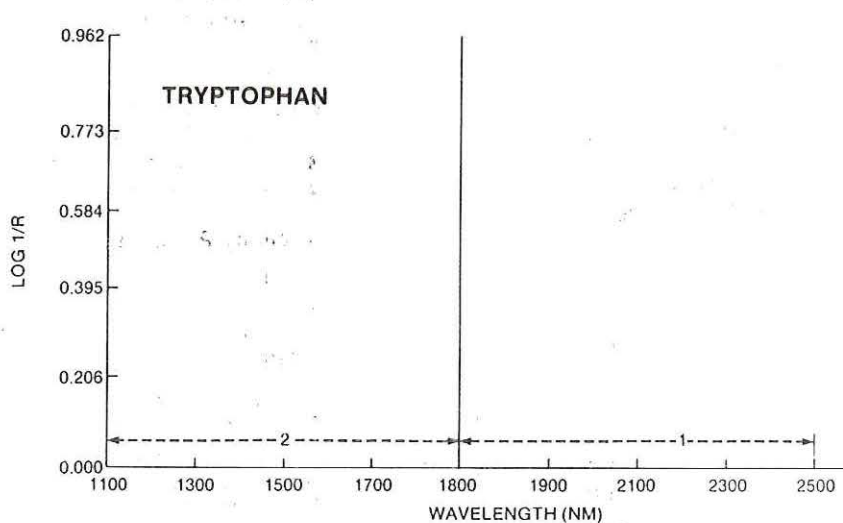
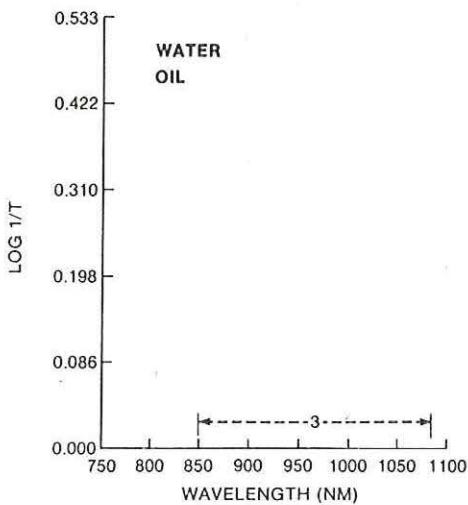
Noise as a Function of Wavelength



Wavelength Repeatability Using Polystyrene



FLEXIBILITY / VERSATILITY



SPECTRAL REGION 3

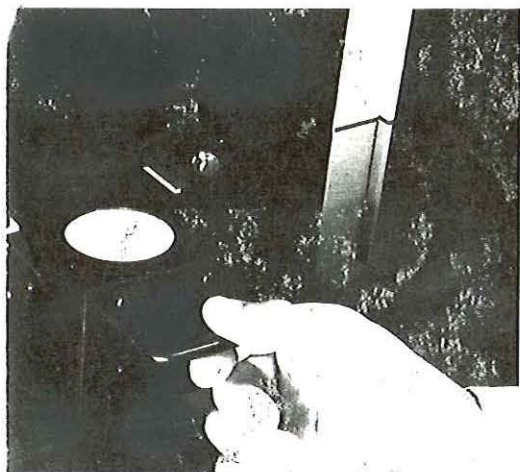
600–1100nm is a further overtone region where absorptions are extremely weak. It is a very useful region for analyzing slurries in the transmittance mode. Pathlengths of several centimeters are possible in this region making the analysis of such difficult products as processed meat, cheese, and butter extremely easy. This region is not used for diffuse reflectance measurements because the extremely weak absorptions do not provide sufficient information in this mode.

SPECTRAL REGION 2

1100–1800nm is an overtone region whose absorptions are much less absorbing than Spectral Region 1. This region is used for transparent films or for liquid analysis using pathlengths of up to 5mm in the transmittance mode. In the diffuse reflectance mode, it is ideal for the analysis of material with coarse particles or for highly absorbing material.

SPECTRAL REGION 1

1800–2500nm is the first combination tone region containing the sharpest and most intense spectral absorptions in the NIR spectrum. It is the best region for the analysis of liquids and transparent films in the transmittance mode where pathlengths of less than 2mm can be conveniently used. In the diffuse reflectance mode, this is an ideal region for analysis of uniform powdered materials or materials with smooth surfaces.



STATIONARY SAMPLE PRESENTATION SYSTEM

The standard sample presentation system is primarily used to analyze powdered material in the reflectance mode using Spectral Regions 1 and 2. With the addition of a transmittance detection, this system can be used to analyze liquids in Spectral Regions 1 and 2, and slurries in Spectral Region 3. The first major application that demonstrated the usefulness of the NIR spectrum was the

determination of the internal quality of fruits and vegetables. These tests were performed using Spectral Region 3 in the transmittance mode. The 6250 System can be adapted to perform these same measurements with the simple addition of the large object chamber which can accommodate samples up to 6 inches in diameter

BROAD SOFTWARE LIBRARY

The system software used to interpret NIR spectra is as critical to success as the spectrophotometer itself. Pacific Scientific's Near Infrared Spectral Analysis Software (NSAS-PC) is designed to offer total calibration flexibility in addition to a comprehensive range of ancillary programs.

The American Society of Testing and Measuring (ASTM) has proposed two calibration modes for use in NIR Spectroscopy:

Closed Population: To calibrate and predict on a closed sample population.

Open Population: To calibrate on a closed sample population in order to predict an open sample population.

NSAS-PC is a comprehensive software package with a selection of programs necessary to implement both closed and open population calibrations.

Closed Population Calibration Software

- 700 Log 1/R or 1/T Wavelength Selection
- Multiterm Log 1/R, 1/T and Derivative Log 1/R, 1/T Regression
- Best Pair/Best Triplet, All Possible Combinations
- Automatic Stepwise Fast Forward Regression
- Discriminant Analysis

Open Population Calibration Software

- 1st through 4th Derivative Log 1/R and 1/T
- Pacific Scientific Stepwise Regression
- Norris Optimization Regression
- Spectral Matching

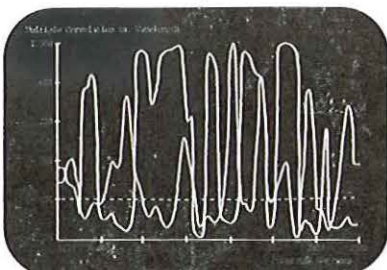
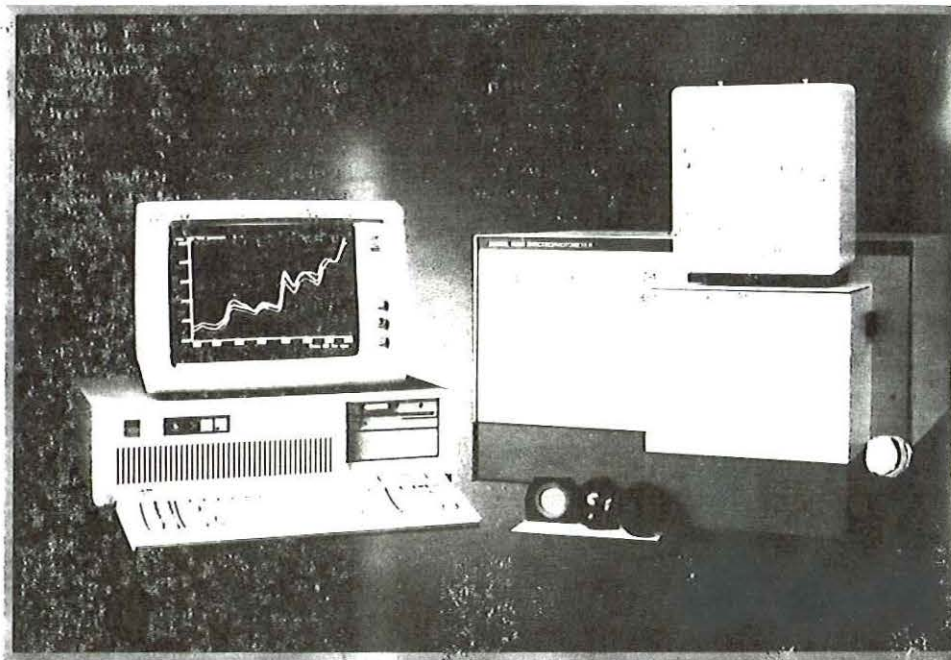
Ancillary Programs

- Sample Selection - Both Random and Greatest Spectral Variation methods are available to select the optimum calibration sample set.
- Advanced Spectral Transformations—The Log 1/R and Log 1/T spectra are quickly converted to one of several Advanced Spectral Transformations.

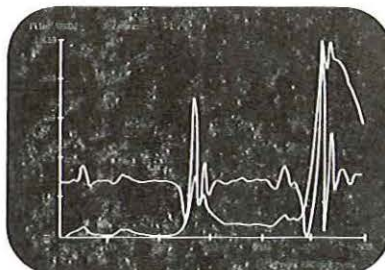
Reflectance R, Transmission T
 N-point Smooth Log 1/R, Log 1/T
 1st Derivative
 2nd Derivative
 3rd Derivative
 4th Derivative
 Savitsky Golay
 Kubelka Munk
 Division by Fixed Wavelength
 FTNIR

- Spectral Library—Provides a means of confirming the wavelengths chosen in calibration. User's library can be developed for raw materials and finished products.
- Statistical Quality Control—Charts are used to establish stable calibration equations and to implement SQC for routine analysis.

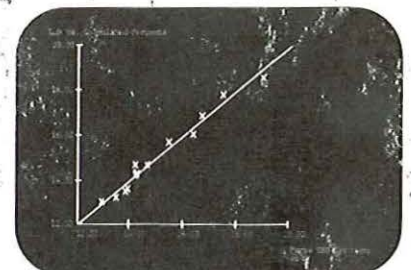
Master System



Correlation and Reconstructed Spectral Plots



Log 1/R and Derivative Spectral Plots



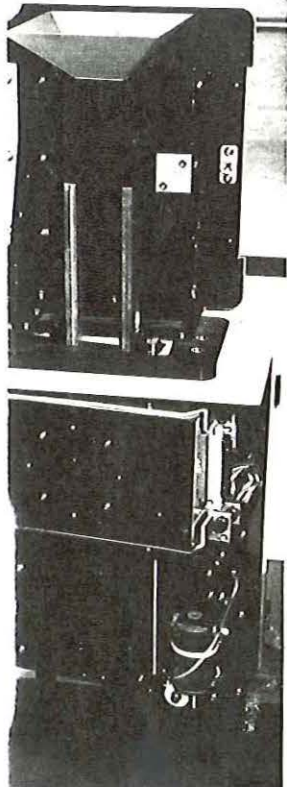
LAB vs. NIR

**MOVING
SAMPLE
PRESENTATION
SYSTEM**

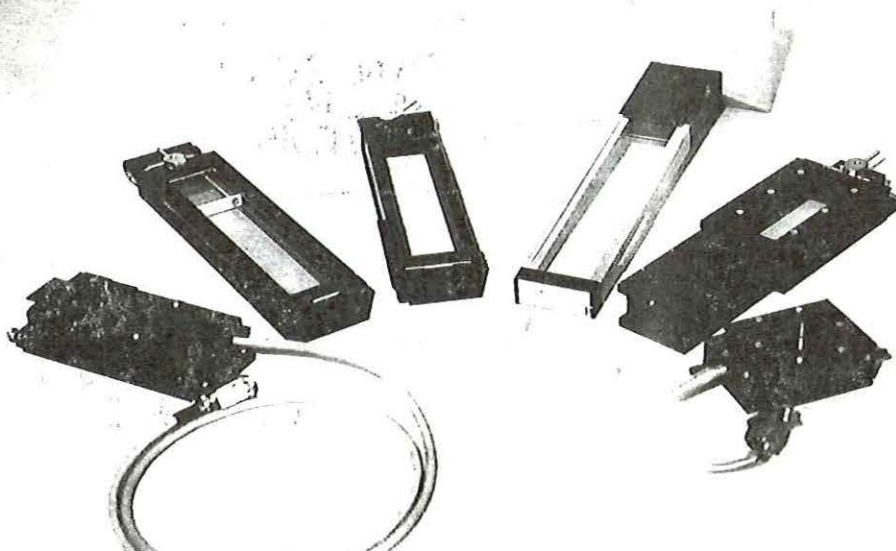
(Analyze samples from less than a gram to hundreds of a gram)

The largest error source in any analysis system is always sampling error. Intact samples are not completely homogeneous. Therefore, analyzing a small portion of a sample is not completely representative of the total. The only way to improve this situation is to average multiple analyses of the same sample. This is done in a unique way with the **6250 System** using the Sample Transport Module. The **6250 System** scans the complete NIR spectrum in less than 0.4 seconds. This means that samples can be moved past the

viewport while multiple scans are averaged. The resulting average scan will be the average spectrum of the sample that was moved past the viewport. This method virtually eliminates sampling error. Stationary and flowing liquids or slurries can be analyzed without limitation to the amount of flowing sample that is analyzed. Samples with large particles which are not homogeneous can be analyzed by simply analyzing large amounts of sample.



Sample	Sheet	Slurries	Small Sample Slurries	Coarse Powders	Flowing Liquids	Static Liquids
Sample Area(cm)	18.0-73.0	18.0-73.0	4.5-38.0	17-69	6.5	3.6
Sampling Method	1	2	3	4	5	6
Reflectance	X			X		
Transmittance	X	X	X	X	X	X
Pathlength(mm)	To 1	10-15	10-15	15	5-20	1-20
Temp. Control	—	—	—	—	Yes	Yes
Range °C	—	—	—	—	25-65	25-65
Typical Products	Plastics Films Textiles Paper Coatings	Cheese Margarine Meat Salad Dressing Dough	Same as Slurries where less sample is available	Soymeal Wheat Plastic Pellets Tobacco Soaps	Polyols Oils Detergents Petroleum Products Beverages Reagents	Viscous Polyols Heavy Oils Milk Cream



■ **Calibration Transfer**—The Pacific Scientific NIR spectrophotometers enable optimum calibrations to be developed and transferred between instruments. The Calibration Transfer program matches the wavelengths and optical responses between the MASTER and SLAVE instruments and then calculates the transfer equation for the SLAVE instruments.

■ **Spectral Matching**—A fast computation of the vector dot product of a sample spectrum against a reference library of spectra for identification of the unknown or simply against a single reference spectra for qualification or fingerprinting.

3rd Party Software

Pacific Scientific is the exclusive supplier of extensive 3rd party software from:

- Honig's Scientific Ltd.
- Infrasoft International
- N.C. State University

This software includes programs for:

- Interfacing to LOTUS 1-2-3, SAS Institute, etc.
- Partial Least Square Regression
- Forage and Mixed Feed and Feed Ingredient
- Calibration and Calibration Development Software
- Fourier Transform Regression

NIR Information Network
(PSCo Bulletin Board)

The PSCo NIR Information Network (Bulletin Board) can be accessed twenty-four hours a day with the simple addition of an inexpensive MODEM to the PC. Special access codes are provided which allow either confidential communications with Pacific Scientific or general communication with all users. This Network gives the user the ability to obtain general NIR information, application information, programs, updates, etc. Pacific Scientific will answer specific questions on a confidential basis or the user can share experience with the entire Network for general comment. New applications, calibrations, software and other information such as meetings, papers related to NIR spectroscopy are continually updated on the Network. Software is also available to operate local Networks within a user's own company.

TRUE CALIBRATION TRANSFERABILITY

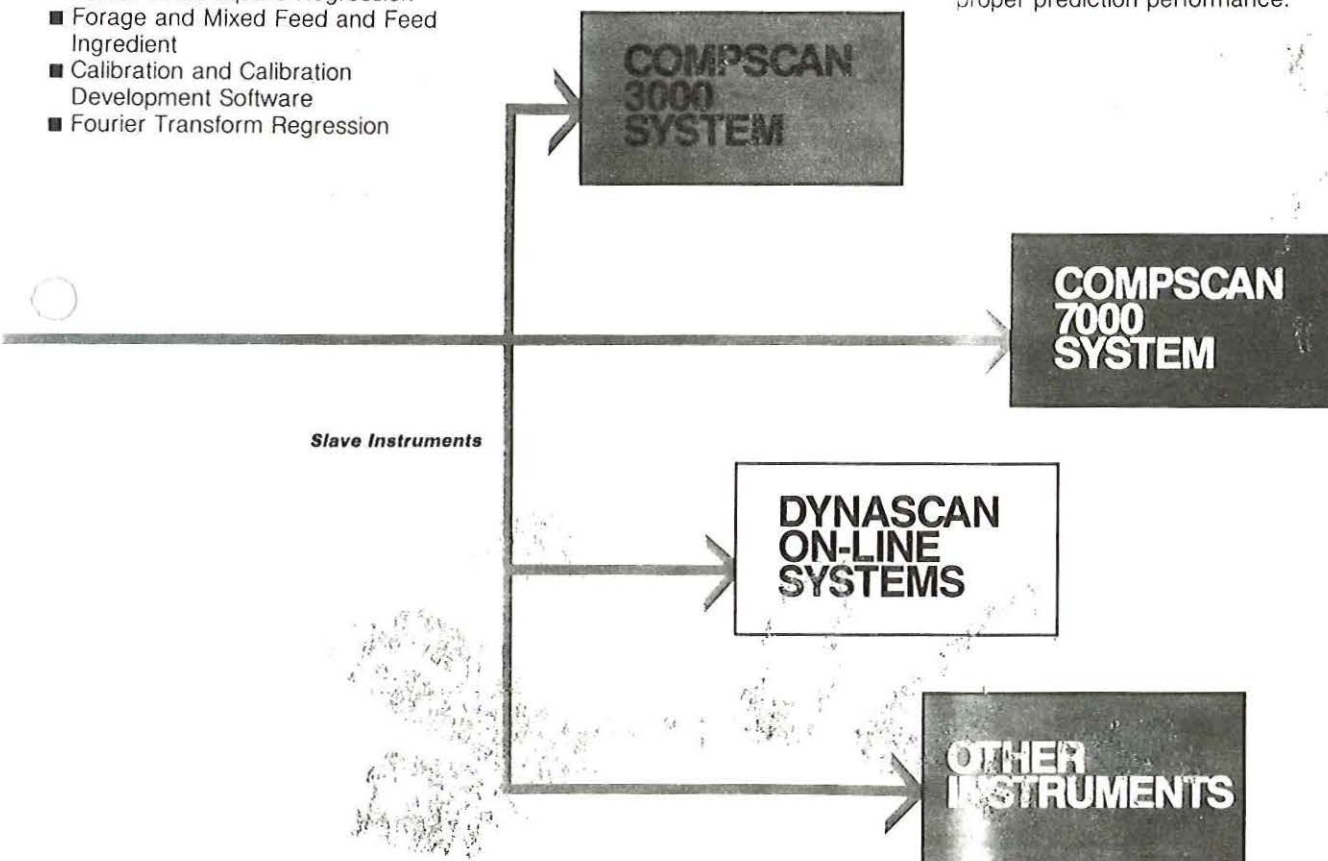
(To Low-cost Rugged Filter Instruments)

Prediction equations developed on the **6250 System** can be transferred to low cost, rugged filter instruments which may be located at distant experimental stations, quality control laboratories, or in industrial production environments.

Any equation defined with the **Model 6250** can be transferred directly to PSCo scanning filter instruments, including on-line instruments. The PSCo computer transfer network ensures that transfers are independent of wavelength used, transformation used, and number of terms used in the prediction equation.

Wavelengths and sensitivity at those wavelengths are matched. No slope or bias adjustment is required after transfer in this mode.

Traditional multiterm Log 1/R equations are transferred directly to fixed filter instruments, but require slope and bias adjustment for proper prediction performance.



Model 6250 System

NEAR INFRARED SPECTROPHOTOMETER

SPECIFICATIONS

Spectrophotometer

Scan Time: 0.4 seconds minimum;
20 seconds for full performance
(1750 wavelengths)

Analysis Time: 0.5 to 200 seconds

Wavelength Range: 600nm–2500nm

Wavelength Accuracy: * 0.5nm

Wavelength Repeatability: *
Less than 0.015nm S.D.

Spectral Bandwidth: *
10nm + 1nm standard
slits available in other bandwidths

Photometric Range:
3.5A (1100nm–2500nm)
6.0A (600nm–1100nm)

Linearity: * 1% of reading

Noise: * 1100nm–2500nm
 25×10^{-6} Log 1/R at 0.0 Log 1/R
units S.D.
 45×10^{-6} Log 1/R at 0.75 Log 1/R
units S.D.

Stray Light: * Less than 0.1% (at
2300nm)

Specular Reflectance: *
Infinite absorber—unmeasurable
Less than 0.7% measuring carbon
black

Detector:

Lead Sulfide, 1100nm–2500nm
Silicon, 600nm–1100nm

Power: 110 V, 60 Hz
220/240 V, 50 Hz

Sample Cells and Capacities:
2 × Power Cells, 0.5–5gm (Standard)
Granular Cell 50–200gm (Optional)
Paste Cell 50–200gm (Optional)
Liquid Cell 2–30gm (Optional)
Flow Thru Cell 1–10ml (Optional)
Textile/Films 20–2cm (Optional)
50 Plastic Liners (Optional)

Computer

IBM PC/XT or AT
Enhanced Color Monitor, 12"
Memory: 10 or 20 Mbyte
Winchester Hard Disk
512 Kbyte RAM
360 Kbyte Floppy Disk

Power: 110 V, 60 Hz

Line Printer:
80 Characters Per Line
120 Cps.
RS232C Serial Interface
32 Kbyte Buffer

Calibration Programs

1. Closed Population:
Best Pair/Best Triplet

Modified Fast Forward Stepwise
Regression
Multiple Term Linear Regression

2. Open Population:
PSCo Stepwise Forward Regression
Norris Optimization

Auxiliary Programs:

Control Charts: \bar{X} and \bar{R}

Calibration Transfer

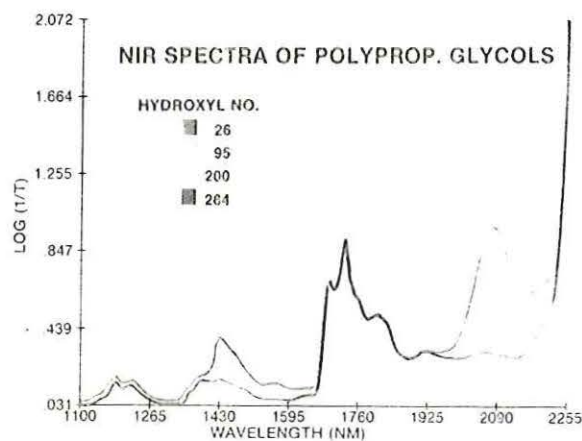
Sample Selection:
Mahalanobis Distance or Random
Spectral Library

DIMENSIONS / WEIGHTS

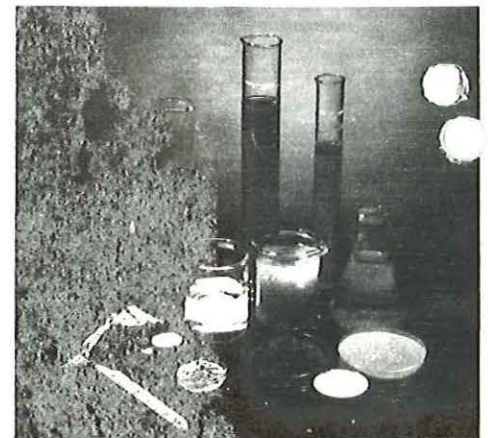
Spectrophotometer
Height: 41 cm (16 in.)
Width: 69 cm (27 in.)
Depth: 48 cm (19 in.)

Computer
Height: 54 cm (21.3 in.)
Width: 65 cm (25.6 in.)
Depth: 56 cm (22.0 in.)

Weight (Total unit)
159 kg (350 lbs.) net
318 kg (700 lbs.) shipping



*test data available



GARDNER
NEOTEC
Division

PACIFIC
SCIENTIFIC

Gardner/Neotec
3140 Gardner Lane
Silver Spring, MD 20910, USA
800 451-7777
Tel: 301 491-8171
Fax: 301 491-8172

Page
45
Circle
58 on
Reader
Service

meyvis

wetenschappelijke instrumenten
meyvis en co. b.v.
pergolesilaan 4 postbus 265
4600 AG bergen op zoom telefoon 01640-36022

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten

Wetenschappelijke instrumenten