

## // SELEKTIVER IONENSPEICHER - VERFAHREN ZUR MESSUNG VON MOLEKÜLSPEKTREN IN EINEM IONENSPEICHER, ZUR GEZIELTEN ENTNAHME VON MOLEKÜLEN ODER ISOMEREN UND ZUR BESTIMMUNG DER ZUSAMMENSETZUNG EINER PROBE

Ref-Nr: TA-6190

### HINTERGRUND

Mit der neuen Methode werden Spektren geladener Moleküle in einem Ionenspeicher gewonnen. Hierzu werden spezifisch angeregte Ionen aus dem Speicher entfernt. Dies kann bis zur vollständigen Entnahme eines Moleküls oder auch eines Isomers, also eines Moleküls der gleichen Masse aber einer anderen Struktur, geschehen.

### LÖSUNG

Daher ist es mit dieser Methode möglich, die Zusammensetzung einer Probe quantitativ zu bestimmen und zwar auch wenn die Bestandteile eben alleine massenspektrometrisch nicht getrennt werden können. Neu gegenüber dem Stand der Technik ist, dass die Ionen eine spezifische innere Anregung erfahren, die über Stöße mit einem neutralen Gas in kinetische Energie umgewandelt wird wodurch ein Teil der angeregten Ionen den Speicher verläßt. Das Spektrum eines Ions wird dann über die Zahl der entlassenen Ionen als Funktion der Anregungsfrequenz erhalten. In Anlehnung an das Verfahren, wird diese neue Methode „leak-out spectroscopy“ genannt. Die Abbildung zeigt die Linie eines Rotationsschwingungsübergangs des HCO<sup>+</sup> Moleküls das mit der genannten Methode gewonnen wurde.



PROvendis GmbH

Martin van Ackeren  
+49.208 94105-34  
ma@provendis.info  
www.provendis.info

### ENTWICKLUNGSSTAND

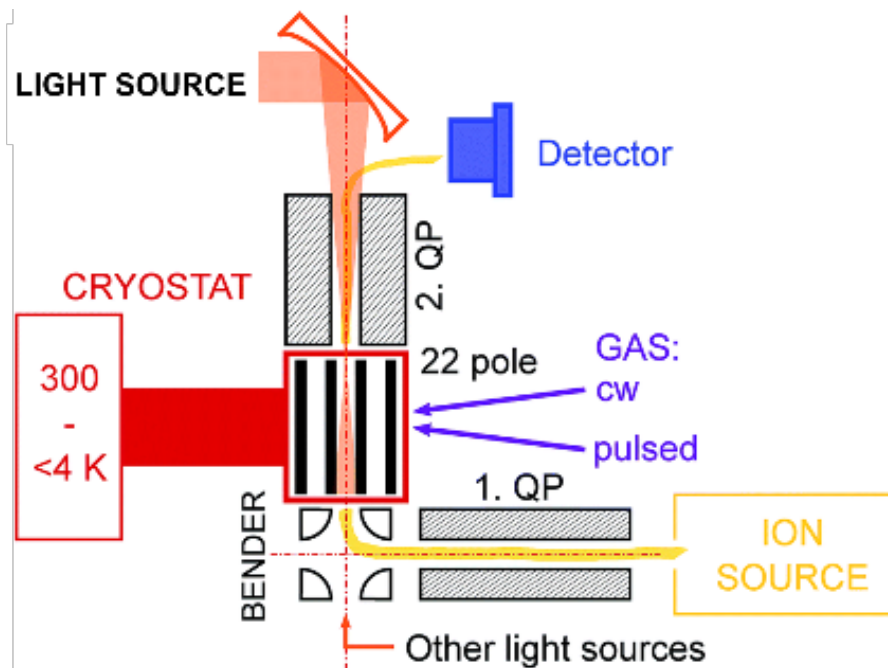
Labormuster

### PATENTSITUATION

DE anhängig

### CATEGORIES

//Chemie //Analytik //Elektronik und Elektrotechnik //Mess- und Regeltechnik //Optik, Photonik und Lasertechnik //Sensorik und Messgeräte //Physikalische Technik



Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus zur leak-out spectroscopy

## VORTEILE

- Selektive Ionenfalle
- Gezielte Molekülnahme
- Sensitives Messverfahren
- Hohe Empfindlichkeit
- Kombination von Massen- und optischer Spektroskopie

## ANWENDUNGSBEREICHE

Mit der erfindungsgemäßen Technologie können Spektren vielfältiger Ionen gemessen werden. Zudem ist es erstmals möglich, Isomere zu trennen, die sich nur in ihren Anregungsfrequenzen unterscheiden. Es wird darüber hinaus auch eine Differenzierung von rechts- und linkshändigen Molekülen angestrebt, was mit anderen Methoden nicht möglich ist. Das neue Verfahren eignet sich zur Erfassung jeglicher Arten von Spektren der Ionenspezies wie Rotations-, Schwingungs-, Ro-Vibrations, elektronische Spektren. Auch die Zusammensetzung der Spinzustände der Elektronen und Kerne lassen sich bestimmen. Damit ergeben sich ganz neue Anwendungen, u.a. im Pharmabereich.

## SERVICE

Eine Anmeldung am Deutschen Patent- und Markenamt ist am 22.10.2021 erfolgt, weitere Auslandsnachmeldungen sind im Prioritätsjahr möglich. Die Funktionsfähigkeit der Erfindung konnte in ersten Laborversuchen nachgewiesen werden. Erste Publikationen sowohl zur Molekülspektroskopie als auch zu quantitativen Bestimmung von Isomerenverhältnissen sind in Vorbereitung. Im Namen der Universität zu Köln bieten wir Unternehmen die Möglichkeit der Lizenzierung und der gemeinsamen Weiterentwicklung der Technologie mit dem Erfinder an.

---

## PUBLIKATIONEN & VERWEISE

Brett A. McGuire, Oskar Asvany, Sandra Brünken & Stephan Schlemmer, Laboratory spectroscopy techniques to enable observations of interstellar ion chemistry, *Nat Rev Phys* 2, 402–410 (2020). [doi.org/10.1038/s42254-020-0198-0](https://doi.org/10.1038/s42254-020-0198-0)

Sven Fanghänel, Oskar Asvany, Stephan Schlemmer, Optimization of RF multipole ion trap geometries, *Journal of Molecular Spectroscopy* Volume 332, February 2017, Pages 124-133

Weitere Publikationen zu dieser Erfindung sind in Bearbeitung, deren Veröffentlichung ist im Jahr 2022 geplant.

---