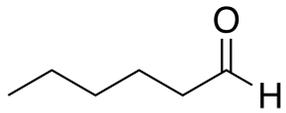
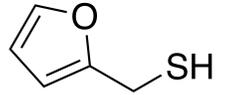


FORSCHUNGSORIENTIERTES LEHREN UND LERNEN (FOLL)



Fingerabdruck von Molekülen Rotationsspektroskopie als Analysemethode der Zukunft?



Erik Bennat, Katharina Bett, Noah Evers, Johanna Harzendorf, Marlene Heidhues, Judith Hoffmann, Ronja Müller, Jun.-Prof. Dr. Daniel Obenchain

Forschungsfrage:

Ist es möglich, eine Mischung verschiedener Substanzen mit dem *BrightSpec Discovery K-band MRR Spectrometer* eindeutig zu charakterisieren?

Dafür wurde Folgendes betrachtet:

- (Mess-) Eigenschaften und Genauigkeit des Gerätes:
 - Aufnahme und Auswertung vollständiger Spektren (18 GHz- 26 GHz) sowie ausgewählter Einzelfrequenzen
 - Qualitative und quantitative Analyse von Mischungen
- Erstellung geeigneter Konzepte zur Auswertung der generierten Daten

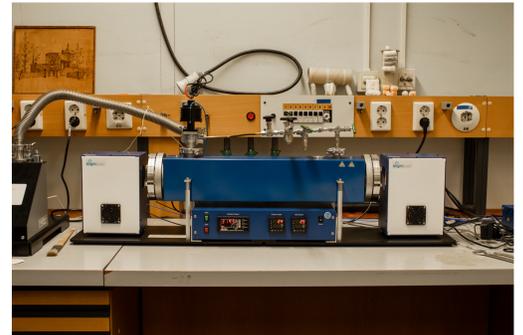


Abb. 1: BrightSpec Discovery K-band MRR Spectrometer

Rotationsspektroskopie:

- Analysemethode zur Identifikation von Molekülen und ihrer Konfiguration.
- Jedes Molekül besitzt ein individuelles Rotationsverhalten. Durch Bestrahlung mit Mikrowellen werden Rotationszustände angeregt.
- Die dann von den Molekülen emittierte Strahlung wird detektiert und in Form eines Rotationsspektrums (Fingerabdruck) dargestellt.

Methodenentwicklung:

- Simulieren von Rotationsspektren mit dem Computerprogramm *PGOPHER* als Auswertungsmöglichkeit
- Vorhersagen von Spektren mit dem Computerprogramm *PGOPHER* bei ca. 2 Kelvin
- Umgang mit dem Messgerät und Entwicklung von Datenauswertungsprogrammen:
 - Schreiben von allgemein anwendbaren Codes mit Python
 - *peakfinder* (Python-package aus *scipy*) identifiziert und charakterisiert Peaks über Frequenz, Intensität und Breite auf halber Höhe der Peaks
- Einfluss der Parameter Druck, Messanzahl, Dampfdruck der Proben und Geräteeinstellungen auf die Güte der Messergebnisse/Signifikanz
 - Es gibt einen stoffspezifischen Druck mit maximalen Intensitäten
 - ⚡ Geräbedingte Druckschwankungen, die gemessenen Intensitäten sind inkohärent
- Erstellung einer Datenbank mit Breite, Höhe und Frequenz der Peaks als Referenzwerte zur einheitlichen Datenanalyse
- Aufreinigung von Daten: Wasserpeaks, Hintergrundrauschen

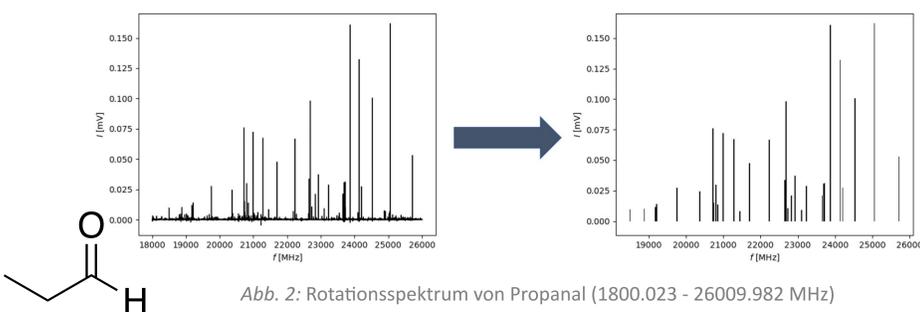


Abb. 2: Rotationsspektrum von Propanal (1800.023 - 26009.982 MHz)

Qualitativ:

- Festlegung der Messunsicherheit durch den Vergleich der Frequenzen der Wasserpeaks
- Aufnahme von Spektren der Reinstoffe und Mischungen aus Ethanol, Propanal und 2-Methyltetrahydrofuran-3-on
- Vergleich der Spektren der Mischungen mit denen der reinen Moleküle
 - Identifizierung der einzelnen Moleküle
- ca. 80 % der Peaks konnten zugewiesen werden
- Lediglich Moleküle mit ähnlichen Dampfdrücken gleichzeitig messbar

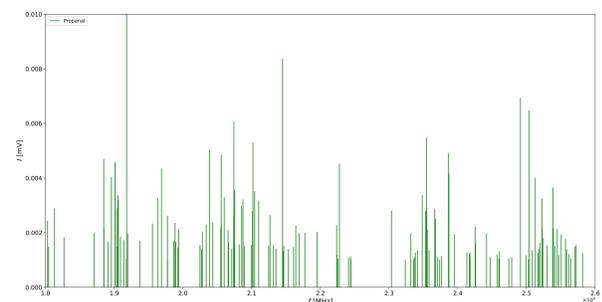


Abb. 3: Propanal Peaks aus dem in Abb. 4 gezeigten Spektrum

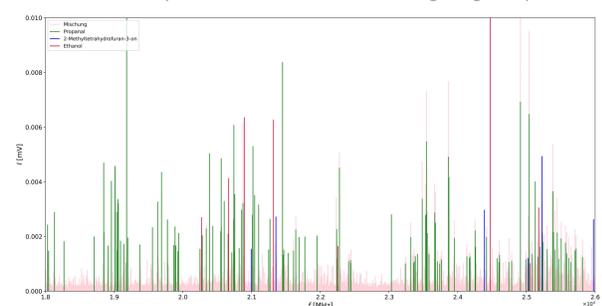


Abb. 4: Spektrum einer Mischung aus Propanal, Ethanol und 2-Methyltetrahydrofuran-3-on

Quantitativ:

- Untersuchung von Mischungen aus Propanal und 2-Methyltetrahydrofuran-3-on mit unterschiedlichen Mischungsverhältnissen untersucht (in der flüssigen Phase 1:1, 1:5, 1:10, 1:24)
- Qualitative Aussage erschwert durch geräbedingte Druckschwankungen
- Kein Zusammenhang zwischen Intensitäten und Mischungsverhältnissen erkennbar

Fazit:

- Die qualitative Analyse von diesen Mischungen war erfolgreich durchführbar.
- Die quantitative Analyse führte zu keinen verlässlichen Aussagen.
- Mit selbstgeschriebenen Python Programmen ist die Auswertung und Darstellung der Daten möglich.

Ausblick:

- Aktuell noch wenig Vergleichsliteratur oder Auswertungsmöglichkeiten
- Aber: mögliche Zukunftstechnologie mit großem Potential zur Strukturaufklärung in Forschung und Industrie

