LOEWE-Schwerpunkt AmbiProbe

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN

dkfz.

GSI

JOHANN WOLFGANG GOETHE UNIVERSITÄT FRANKFURT AM MAIN

Vollantrag auf Einrichtung eines LOEWE-Schwerpunktes an der Justus-Liebig-Universität Gießen (Federführung)

„AmbiProbe – Massenspektrometrische *in-situ*-Analytik für die Problembereiche Gesundheit, Umwelt, Klima und Sicherheit“

Projekt C.1: Miniaturisierte feldtaugliche Massenanalysatoren

Projektleiter : Klaus-Peter Hinz und Zoltan Takats

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Justus-Liebig-Universität Gießen

Zusammenfassung

Ziel:
Entwicklung mobiler miniaturisierter Massenanalysatoren für den in-situ-Betrieb mit hohem analytischen Informationsgehalt

Methoden:
Einsatz von Flugzeit-Analysatoren und Quadrupol-Ionenfallen für die mobile *in-situ*-Analytik zur Steigerung der analytischen Aussagekraft der erzeugten Daten.

Innovativer Aspekt:
• mobiles bipolares Flugzeit-Massenspektrometer mit interaktivem System zur größenoptimierten Einzelpartikelanalyse
• transportabler Quadrupol-Ionenfallen-Analysator für mehrdimensionale online Massenspektrometrie

Verknüpfung mit anderen Schwerpunkt-Projekten:
Bereich A (Ionenerzeugung), B (Transport), Projekt C3 (in-situ-Strukturaufklärung)

Einleitung

Die mobile in-situ-Analytik erfordert Massenanalysatoren, die sich auszeichnen durch geringe Abmessungen und geringes Gewicht, Unempfindlichkeit gegenüber mechanischen, elektrischen und magnetischen Einflüssen, hohen analytischen Informationsgehalt der gewonnenen Daten und ein gutes Kosten-Nutzen-Verhältnis. Diese Anforderungen können derzeit nur Flugzeit-Analysatoren, Quadrupolfilter und Quadrupol-Ionenfallen erfüllen. Die Quadrupol-Ionenfallentechnologie kann zur internen Auftrennung und Identifizierung von komplexen *in-situ*-Proben mit Hilfe mehrdimensionaler Massenspektrometrie genutzt werden. Kosten-Nutzen-Relation, analytische Aussagekraft, Stabilität und Unempfindlichkeit sind bei diesem Analysatortyp ausgesprochen günstig. Ein Vorteil von Flugzeit-Massenanalysatoren ist hingegen, dass Ionen beider Polaritäten aus demselben Primärereignis analysiert werden können [Hinz 1996]. Somit ist zu erwarten, dass Ionen beider Polaritäten in einer in-situ-Analyse mithilfe z.B. der REIMS-Methode erzeugt, in einem Gasstrom transportiert und dann in einen bipolaren Flugzeitanalysator nach Polarität getrennt und analysiert werden können.

Ziele

Design, Aufbau und Inbetriebnahme eines transportablen Quadrupol-Ionenfallen-Analysators (QIT)

Erprobung und Charakterisierung des QIT mit Atmosphärendruck-Schnittstelle und in-situ Ionenquellen und Transfersystemen

Anpassung und Erweiterung des bipolaren Flugzeitmassenspektrometers LAMPAS 3 an Ionen- und Partikel-Transfersysteme durch Implementierung eines aerodynamischen Linsensystems, verzögerter Ionenextraktion und Ionenreflektoren

Entwicklung eines interaktiven Systems zur größenoptimierten Einzelpartikelanalyse mit dem LAMPAS 3

Einsatz des QIT und LAMPAS 3 zur in-situ Identifizierung und Strukturaufklärung in Zusammenarbeit mit Forschungs- und Industriepartnern

Methoden

• Umbau und Erweiterung einer kommerziellen Ionenfalle vom Typ „LCQ Deca“ durch Austausch vorhandener gegen eigen-entwickelte, angepasste und miniaturisierte Komponenten

• Entwiclung eines Ionenfallen-Massenanalysator für in-situ-Analytik mit Atmosphärendruck-Interface und neuer Ionenoptik

• Anpassung und Erweiterung des vorhandenen Systems LAMPAS 3 an die neuartigen Ionen- und Partikeltransfersysteme (Projekt B1) durch Entwicklung eines aerodynamischen Linsensystem für den direkten Einlass des Partikel-Luft-Gemisch in das Massenspektrometer

• bipolare Flugzeitmassenspektrometrie zum Nachweis von Ionen in-situ ablatierter Stoffe mit verzögerter Ionenextraktion und Ionenreflektoren

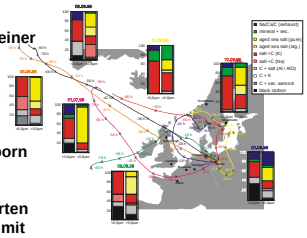
• größenoptimierte Einzelpartikelanalyse mit inter-aktivem, computer-gesteuerten System zur Anpassung der Strömungsparameter im Einlasssystem an die Anzahl-Größen-Verteilung des zu messenden Aerosols

Vorarbeiten

• Testaufbau mit Ionenfalle vom Typ „LCQ Deca“ (Thermo Fisher)

• Vorarbeiten zur Erprobung und Charakterisierung einer Atmosphärendruck-Schnittstelle

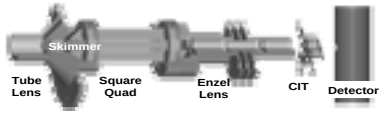
• Entwicklung, Aufbau und Erprobung des bipolaren Flugzeitmassenspektrometers LAMPAS 2 für die Einzelpartikelanalytik und Einsatz des Gerätes in zahlreichen Labor- und Feldmesskampagnen [Trimborn 2000, 2002]



Feldmesskampagne LACE 98 [Trimborn 2002]

• Entwicklung, Aufbau und Erprobung des verkleinerten bipolaren Flugzeitmassenspektrometers LAMPAS 3 mit neuer Ionenquelle und neuem optischen System

• Vorarbeiten zur Implementierung eines aerodynamischen Linsensystems, des Systems zur verzögerten Ionenextraktion und von Ionenreflektoren



Design f-r CIT instrumente2

LAMPAS 2

Arbeitspakete

Arbeitsprogramm:

Arbeitspaket 1: **Aufbau eines transportablen Quadrupol-Ionenfallen-Analysators**

Arbeitspaket 2: **Implementierung einer Atmosphärendruck-Schnittstelle und Ionenoptik**

Arbeitspaket 3: **Entwicklung computergesteuerter RF-AC- und DC-Quellen**

Arbeitspaket 4: **Entwicklung einer LabView-basierten Steuersoftware**

Arbeitspaket 5: **Aufbau eines miniaturisierten Vakuumsystems und eines feldtauglichen Gehäuses für die Ionenfalle**

Arbeitspaket 6: **Anpassung eines bipolaren Flugzeitmassenspektrometers an Ionen- und Partikel-Transfersysteme**

Arbeitspaket 7: **Implementierung eines aerodynamischen Linsensystems**

Arbeitspaket 8: **Implementierung von verzögerter Ionenextraktion und Ionenreflektoren**

Arbeitspaket 9: **Entwicklung eines interaktiven Systems zur größenoptimierten Einzelpartikelanalyse**

Arbeitspaket 10: **Anpassung der Steuersoftware des bipolaren Massenspektrometers**

Literatur

Hinz, K.-P., Kaufmann, R., Spengler, B. (1996) Simultaneous Detection of Positive and Negative Ions From Single Airborne Particles by Real-time Laser Mass Spectrometry, Aerosol Sci. Technol. **24**, 233-242.

Trimborn, A., Hinz, K.-P., Spengler, B. (2000) On-line Analysis of Atmospheric Particles with a Transportable Laser Mass Spectrometer. *Aerosol Sci. Technol.* **33** 191-201.

Trimborn, A., Hinz, K.-P., Spengler, B. (2002) On-line Analysis of Atmospheric Particles with a Transportable Laser Mass Spectrometer During LACE 98. *J. Geophys. Res.* **107** D21, 8132.

C1 - Mini-QIT, Mini-dual-API-TOF
Aufbau mobile QIT
API-Schnittstelle und Ionenoptik
Computergest. RF-AC/DC-Quellen
Labview-Steuerung
Feldtaugliches Vakuumsystem und Gehäuse
Dual-Aerosol-API-TOF mit Transfersystemen
Aufbau aerodynanmische Linse
Aufbau verzögerte Ionenextraktion
Interaktive Software
Steuersoftware dual-Aerosol-API-TOF