(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum
Internationales Büro

(43) Internationales Veröffentlichungsdatum
2. Februar 2006 (02.02.2006)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer
WO 2006/010527 A1

(51) Internationale Patentklassifikation[7]: G01N 33/28, 21/35

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP2005/007839

(22) Internationales Anmeldedatum:
19. Juli 2005 (19.07.2005)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:
10 2004 035 948.2 23. Juli 2004 (23.07.2004) DE

(71) Anmelder *(für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US)*: **BASF Aktiengesellschaft** [DE/DE]; 67056 Ludwigshafen (DE).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder *(nur für US)*: **SENS, Rüdiger** [DE/DE]; Faselwiese 15, 67069 Ludwigshafen (DE). **VAMVAKARIS, Christos** [DE/DE]; Otto Beck Strasse 10, 68165 Mannheim (DE). **EBERT, Sophia** [DE/DE]; Richard-Wagner-Str. 53, 68165 Mannheim (DE). **THIEL, Erwin** [DE/DE]; Schlosserstr. 5, 57234 Wilnsdorf (DE).

(74) Gemeinsamer Vertreter: **BASF Aktiengesellschaft**; 67056 Ludwigshafen (DE).

(81) Bestimmungsstaaten *(soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare nationale Schutzrechtsart)*: AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

(84) Bestimmungsstaaten *(soweit nicht anders angegeben, für jede verfügbare regionale Schutzrechtsart)*: ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

[Fortsetzung auf der nächsten Seite]

(54) **Title:** METHOD FOR DETERMINING THE PRESENCE OF A CHEMICAL COMPOUND WHICH IS HOMOGENEOUSLY DISTRIBUTED IN A MEDIUM BY MEANS OF CROSS-CORRELATING A MEASURING SPECTRUM WITH REFERENCE SPECTRA

(54) **Bezeichnung:** VERFAHREN ZUR BESTIMMUNG DES VORHANDENSEINS EINER IN EINEM MEDIUM HOMOGEN VERTEILTEN CHEMISCHEN VERBINDUNG MITTELS KREUZKORRELATION EINES MESSSPEKTRUMS MIT REFERENZSPEKTREN

(57) **Abstract:** The invention relates to a method for determining the identity or non-identity of at least one chemical compound V' which is homogeneously distributed in a medium by a) irradiating the medium containing at least one homogeneously distributed chemical compound V' with analytical radiation of the variable wavelength λ, and b) determining the spectral measuring function I'(λ) using the absorbed, reflected, emitted and/or scattered radiation. The inventive method is characterized by determining a correlation function K (δλ,c',c) in accordance with equation (I), wherein K (δλ,c', c) represents the relative shift δλ of the functions I'(λ,c') and I(λ,c) and the concentrations c' and c of the at least one chemical compound V' and V dependent correlation; c' represents the concentration of the at least one chemical compound V' of known or suspected identity which is homogeneously distributed in the medium; c' represents the concentration of the at least one chemical compound V of known identity which is homogeneously distributed in the medium, I'(λ,c') is the measuring function of the at least one chemical compound V' which is homogeneously distributed in the medium in the concentration c', I(λ,c) is the comparative function of the at least one chemical compound V which is homogeneously distributed in the medium in the concentration c', and N is the scaling factor; and determining the identity and/or non-identity of compounds V' and V in relation to each other using the correlation function K (δλ,c',c).

(57) **Zusammenfassung:** Die vorliegende Erfindung betrifft ein Verfahren zur Bestimmung der Identität oder Nicht-Identität mindestens einer in einem Medium homogen verteilten chemischen Verbindung V' durch: a) Bestrahlung des mindestens eine homogen verteilte chemische Verbindung V' enthaltenden Mediums mit Analysestrahlung variabler Wellenlänge λ und b) Bestimmung der spektralen Messfunktion I'(λ) anhand der absorbierten, reflektierten, emittierten und/oder gestreuten Strahlung, welches dadurch gekennzeichnet ist, dass man gemäß Gleichung (I) eine Korrelationsfunktion K (δλ,c' ,c) bestimmt, wobei bedeuten K (δλ ,c', c) die von der relativen Verschiebung δλ der Funktionen I'(λ,c') und I(λ,c) und den Konzentrationen c' und c der mindestens einen chemischen Verbindung V' und V abhängige Korrelation, c' Konzentration der mindestens einen homogen im Medium verteilten chemischen Verbindung V' bekannter oder vermuteter Identität, c Konzentration der mindestens einen homogen im Medium verteilten chemischen Verbindung V bekannter Identität, I'(λ,c') Messfunktion des mindestens eine homogen verteilte chemische Verbindung V' in der Konzentration c' enthaltenden Mediums, I(λ,c) Vergleichsfunktion des mindestens eine homogen verteilte chemische Verbindung V in der Konzentration c enthaltenden Mediums und N Normierungsfaktor, und mit Hilfe der Korrelationsfunktion K (δλ,c',c) Identität oder Nicht-Identität zwischen den Verbindungen V' und V ermittelt.

WO 2006/010527 A1

Veröffentlicht:
— *mit internationalem Recherchenbericht*

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.