

Inhaltsverzeichnis

	Vorwort zur 6. Auflage	XI
	Aus dem Vorwort zur 1. Auflage	XIII
	Einleitung	XV
Teil I	Grundlagen	1
1	Terminologie	3
2	Apparative Grundlagen	9
2.1	Das Einlasssystem	9
2.1.1	Möglichkeiten der Probeneinführung	9
2.1.1.1	Indirekte Probeneinführung	10
2.1.1.2	Direkte Probeneinführung	10
2.1.1.3	Die Kopplung mit einem Gaschromatographen	11
2.1.2	Die Probenmenge im Routinebetrieb	11
2.1.3	Verunreinigungen	11
2.1.4	Die Veränderung von Proben vor der Ionisierung	14
2.1.5	Herstellung flüchtigerer Derivate	15
2.2	Ionenquellen	16
2.2.1	Ionisierungsverfahren, die zu M ⁺ führen	16
2.2.1.1	Elektronenionisation	16
2.2.1.2	Photo- und Laserionisation	17
2.2.1.3	Feldionisation	17
2.2.2	Chemische Ionisation	18
2.2.3	Oberflächenionisation (Desorptionsverfahren)	21
2.2.3.1	Felddesorption	21
2.2.3.2	Fast-Atom Bombardment	23
2.2.3.3	Cf-Plasmadesorption	24
2.2.3.4	Matrixunterstützte Laserdesorption/-ionisation	24
2.2.3.5	Desorption Electrospray Ionisation (DESI) und Direct Analysis in Real Time (DART)	24

VI | Inhaltsverzeichnis

- 2.2.4 Sprayverfahren 26
 - 2.2.4.1 Elektrospray- und Ionensprayverfahren 27
- 2.2.5 Chemische Ionisation und Photoionisation bei Atmosphärendruck 30
- 2.2.6 Massenspektrometrie mit einem induktiv gekoppelten Plasma 30
- 2.2.7 Spezielle Ionisierungsverfahren für Metalle und anorganische Verbindungen 30
 - 2.2.7.1 Sekundärionen-Massenspektrometrie und verwandte Techniken 30
 - 2.2.7.2 Thermoionisation 31
 - 2.2.7.3 Vakuumentladungen (Funkenionenquellen) 31
- 2.3 Analysator 31
 - 2.3.1 Beschleunigung 31
 - 2.3.2 Trennung der Ionen 32
 - 2.3.2.1 Magnetfeldgeräte 32
 - 2.3.2.2 Flugzeit- (Time of Flight, TOF) -Massenspektrometer 32
 - 2.3.2.3 Ionenbeweglichkeitsspektrometer 33
 - 2.3.2.4 Quadrupol-Massenspektrometer (Massenfilter) 33
 - 2.3.2.5 Quadrupol-Ionenfallen (Quistor, *q-Ion Trap*) 35
 - 2.3.2.6 Ionenzyklotronresonanz-Spektrometer 35
 - 2.3.2.7 Orbitraps 37
 - 2.3.2.8 Beschleuniger-Massenspektrometer 37
 - 2.3.2.9 Tandemgeräte 38
 - 2.3.3 Auflösungsvermögen und Fokussierung 40
- 2.4 Registrierung 43
 - 2.4.1 Technische Durchführung 43
 - 2.4.2 Ausgabe der Messdaten 45
 - 2.4.2.1 Gesamtionenstrom 45
 - 2.4.2.2 Selected-Ion Monitoring 45
 - 2.4.2.3 Vollständige Massenspektren 47
 - 2.4.2.4 Die Bestimmung der nominellen Ionenmassen 49
 - 2.4.2.5 Die Bestimmung der exakten Ionenmasse 49
- 2.5 Rechnersysteme 51

- 3 Ionenarten 53**
 - 3.1 Das Molekülion 53
 - 3.2 Fragmentionen 54
 - 3.3 Mehrfach geladene Ionen 55
 - 3.4 Quasi-Molekülionen 56
 - 3.5 Metastabile Ionen 56
 - 3.6 Tandem-Massenspektrometrie 58
 - 3.6.1 Grundlagen 58
 - 3.6.2 Technische Durchführung 62
 - 3.6.2.1 Sektorfeldgeräte 62

3.6.2.2	Triplequad-Geräte	63
3.6.2.3	Stoßaktivierung und Fragmentierung in der Elektrospray-Ionenquelle: <i>In-source</i> oder Skimmer-CID	65
3.7	Fragmentierungsmuster	65
3.7.1	Abhängigkeit des Fragmentierungsmusters von der Molekülstruktur	65
3.7.2	Abhängigkeit des Fragmentierungsmusters von Betriebsparametern	67
Teil II	Die Auswertung von Massenspektren	73
4	Die Bestimmung von Molekülmasse und Elementarzusammensetzung	75
4.1	Molekülmasse	75
4.2	Die Elementarzusammensetzung einer Verbindung	76
5	Isotopenanalyse	79
5.1	Die Berechnung von Isotopenmustern	79
5.2	Hohe und extrem hohe Massen	81
5.3	Nachweis und quantitative Bestimmung schwerer Isotope	84
6	Qualitative und quantitative Analyse von Gemischen	87
6.1	Vorbemerkungen	87
6.2	Qualitative Analytik	87
6.2.1	Mit chromatographischer Trennung	87
6.2.1.1	GC-Kopplung	87
6.2.1.2	LC- und CE-Kopplung	88
6.2.2	Qualitative Analyse ohne vorhergehende chromatographische Trennung	89
6.3	Quantitative Analytik	91
7	Bindungsenergien und thermodynamische Daten aus IE- und AE-Messungen	95
8	Die Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen	99
8.1	Symbolik	99
8.2	Allgemeine Vorbemerkungen	101
8.3	Das Konzept der „lokalisierten Ladung“	105
8.4	Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen	107
8.5	Hinweise zur Interpretation von Spektren	110
9	Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen	115
9.1	Kohlenwasserstoffe	115
9.1.1	Alkane	115

VIII | Inhaltsverzeichnis

- 9.1.2 Alkene 117
- 9.1.3 Alkine 118
- 9.1.4 Alicyclen 118
- 9.1.5 Aromatische Kohlenwasserstoffe 118
- 9.2 Hydroxyverbindungen 123
- 9.2.1 Aliphatische Alkohole 123
- 9.2.2 Cycloalkanole 125
- 9.2.3 Phenole und Benzylalkohole 126
- 9.3 Ether 130
- 9.3.1 Aliphatische Ether 130
- 9.3.2 Cyclische Ether 131
- 9.3.3 Aromatische Ether 132
- 9.4 Thiole und Thioether 134
- 9.5 Amine 136
- 9.5.1 Aliphatische Amine 136
- 9.5.2 Cycloalkylamine 138
- 9.5.3 Aromatische Amine 138
- 9.6 Halogenverbindungen 140
- 9.6.1 Aliphatische Halogenverbindungen 140
- 9.6.2 Aromatische Halogenverbindungen 142
- 9.7 Nitroverbindungen 143
- 9.8 Aldehyde und Ketone 144
- 9.8.1 Aldehyde 144
- 9.8.2 Aliphatische Ketone 145
- 9.8.3 Cycloalkanone 147
- 9.8.4 Aromatische Ketone 147
- 9.9 Carbonsäuren und Ester 150
- 9.9.1 Aliphatische Säuren und ihre Ester 150
- 9.9.2 Aromatische Säuren und ihre Ester und Amide 152
- 9.10 Koordinationsverbindungen 155

- 10 Beispiele aus dem Naturstoffbereich 157**
- 10.1 Aminosäuren und Peptide 157
- 10.2 Zucker 165
- 10.3 Steroide 169
- 10.4 Dopinganalyse 171

- 11 Stereochemische Probleme 177**

- 12 Anhang 181**
- 12.1 Weiterführende Literatur 181
- 12.1.1 Allgemeine und apparative Grundlagen 181
- 12.1.2 Kopplungstechniken 181
- 12.1.3 Anorganische und Komplexchemie 182
- 12.1.4 Organische Chemie 182

12.1.5	Biochemie, Naturstoffe u.ä.	182
12.1.6	Enzyklopädie und periodisch erscheinende Literatur	183
12.1.7	Spektrensammlungen	183
12.2	Englische Fachausdrücke	184
12.3	Abkürzungen	188
12.4	Ausgewählte Isotopenmassen und -häufigkeiten	190
12.5	Umrechnungsfaktoren	195
12.6	Lösungen der Aufgaben	195
12.7	EI-Massenspektren wichtiger Lösungsmittel und von Hahnfett	211
12.8	Literatur	213
12.9	Sachregister	219

