

Sachverzeichnis

A

Acetonitril 10, 90, 100, 154
 Additiv 155
 Agent Report Software 88
 Agilent-Massenspektrometrie 15, 213
 Aldehyd 65
 Alkaliaddukt 165
 Alkalikation 156
 Alkansulfonsäure 158
 Alkohol 65
 All Ion Fragmentation (AIF) 135
 Ambient Desorption Ionization Technique 16
 Ameisensäure 50, 84, 100, 205
 Amidphase 94
 Ammoniumaddukt 62
 Ammoniumfluorid 173
 Analysator 202
 Analytation 8, 9
 Analytmolekül 9, 152
 Anionen-Austauschchromatografie 181
 Anisol 10
 Arbeitszyklus 40
 At-column-dilution-Methode 191
 Atmosphärendruck 166, 214
 – Fotoionisation (APPI) 6, 10, 149, 180
 – – Artefaktbildung 4
 – – Nachweisempfindlichkeit 162
 – Ionisationsquelle 3
 – – dopant-assisted (DA) 6, 154
 – – Ionensuppression 4
 – Massenspektrometer 5
 Atmospheric Pressure
 – Chemical Ionization (APCI) 5, 8, 47, 149, 180
 – – Additive 160
 – – Nachweisempfindlichkeit 161
 – Ionization (API) 149, 189
 – Laser Ionization (APLI) 5, 10

– Photoionization (APPI), *siehe*
 Atmosphärendruck
 Auflösungskarte 103
 Außersäulenvolumen (ECV) 22, 23, 27, 31

B

Base 48
 Biochromatografie 51
 Biopolymer 151
 Biphenylphase 92
 Bis-Nalbuaphin 194
 Blackbox 148
 Blindgradient 55

C

Caprolactam 193
 Carbonsäure 65
 Charged Residue Mechanism (CRM) 8
 Charged-Aerosol-Detektion (CAD) 42
 Charging-Effekt 203
 Chemical Noise 58
 Chlorid 63
 Chromatografie 50
 Chromatografiedatensystem 227
 Chromatogramm 23
 – Aufteilung in Perioden 132
 – Qualität der Basislinie 58
 Chromeleon 228
 Chromolith 189
 Classroom Training 174
 Cloud-Computing 228
 Cone-Spannung 162
 Core-shell-Teilchen 104
 Coulomb-Explosion 150
 CSH-XSelect-Säule 190
 Curtain Gas (CUR) 122, 217
 Cyclophosphamid 83, 90, 97

D

- Data
 - Dependent Acquisition (DDA) 135
 - Independent Acquisition (DIA) 135
- Datenbank 138
- Datenerfassungsrate 40
- Datenmanagementsystem 227
- Declustering 59
- Degradationsmethode 191
- Dekonvolution 215
- Design of Experiments (DoE) 125
- Detektion
 - uniforme 41
 - universelle 41
- Detektionsfenster 133
- Detektor
 - elektrochemischer 4
 - UV-Detektor 57, 63, 79
 - zerstörungsfreier 44
- Dewetting 87
- Dimethylbenzidin 163
- Dimethylformamid 154
- DIN 38407-47 78
- Diodenarraydetektor 43
- Direktinjektion 109
- Display Mass 187
- Diverter-Ventil 170
- Docetaxel 83, 90, 125
- Dopaminverunreinigungen 197
- Dopant 10, 153
- Dopant-assisted Atmospheric-Pressure Photoionization (DA-APPI) 6, 10
- Doppelpeak 111
- Doxorubicin 83, 92, 97
- Drogenscreening 136
- DryLab 102
- Durchflusszeit 81

E

- Elektrochemie 42
- Elektronenionisation 64
- Elektronenmultiplier 203
- Elektronenmultipliierröhrchen 209
- Elektrospray 200
- Elektrospray-Ionisation (ESI) 3, 5, 46, 12, 108, 149, 180, 189, 214
 - Additive 159
 - ESI-Nadel 122
 - ESI-Spannung 59, 122
 - Nachweisempfindlichkeit 161
- Eluentenabmischung 25
- Eluentenadditiv 50
- Empfindlichkeit 46

Enoxaparin 189

Epirubicin 83, 92, 97

Equilibrierung 89

Essigsäure 100

Etoposid 125

F

- Feinoptimierung 102
- Festphasenextraktionssäule 110
- Fittingsystem 30, 224
- Fließgeschwindigkeit 108
- Fließinjektion (FIA) 165
- Fließinjektionsanalyse (FIA) 47, 52, 59, 124
- Fließmittel 48
- Flow-through-needle-Prinzip 26
- Flugzeitmassenanalysator 37
- Flugzeitmassenspektrometrie (TOFMS) 40, 136, 225
 - 5-Fluorouracil 83, 90, 115
- Flüssigchromatografie (LC) 21, 213, 224
- Flussrate 108
- Fotoionisation 153
- Fotoionisationsdetektor (PDI) 6
- Fotomultiplier 203, 209
- Fragmentierung, stoßinduzierte (CID) 165
- Fragmentierungsreaktion 64
- FTICR-Massenspektrometer 38
- Full-scan-Spektrum 137, 219

G

- Gaschromatografie 213
- Gasphase 45
- Gasphasenaddukt 61, 62
- Gasstrom 123
- Gefriertrocknung 196
- Gemcitabin 83, 90, 115
- Gradientenelution 23
- Gradientengenerator 183
- Gradientensteigung 99
- Gradientenverzögerungsvolumen (GDV) 22, 23, 225
- Gradient-grade-Lösemittel 192

H

- Hagen-Poiseuille-Gesetz 27
- Heißdampfreiniger 204
- Heptansulfonsäure 157
- Hexapol 204
- High Resolution/Accurate Mass (HRAM) 225
- Hochdruckgradientenpumpe 24
- Hochdurchsatzanalytik 24
- Hochdurchsatztrennsäule 33
- Hochdurchsatztrennung 22

- Hochflussanwendung 217
HPLC-Analytik 22
HPLC-Flussrate 161
HPLC-MS-Kopplung 78
– kritische Peakpaare 80
Hybridmassenspektrometer 77
Hybridsystem 219
– QqTOF-Architektur 220
Hydroniumion 182
Hydroxyecosatetraensäure 181
Hypercarb 115
- I**
- Ifosfamid 83, 90, 97
Information Dependent Acquisition (IDA) 135
Injektionsvolumen 109, 113
In-source fragmentation 64
Interaktionschromatografie, hydrophile (HILIC) 48
Ion Evaporation Mechanism (IEM) 8
Ionburn 206
Ionenbrücke 201
Ionenchromatografie 179, 181, 183
Ionenchromatogramm, extrahiertes (EIC) 43
Ionenfalle 181
– Massenspektrometer 13, 38
– Orbitrap 181
Ionenmobilität 15
Ionenmobilitätsmassenspektrometrie (IMS) 6, 15, 16, 215
Ionenoptik 169
Ionenpaarbildner 157, 168, 181
Ionenpaarchromatografie 158
Ionenpaarreagenzien 168
Ionenquelle 3, 156, 168, 200
Ionenstrahlführung 12
Ionensuppression 12, 55, 60, 129, 147, 165, 170
– Bestimmung 11
– durch die Probenmatrix 168
Ionenzyklotronresonanz 226
Ionisation
– bei Atmosphärendruck 166
– Optimierung 166
Ionisationsmethode 5
Ionisierungsspannung 122
Ionspray 149
Irinotecan 112
Isomere 42
Isopropanol 114, 209
IT-Sicherheit 229
- K**
- Kaliumhydroxid 181
Kapillare 201
Kapillarmesszellen 44
Kapillarspannung 162
Kationenaddukt 167
Kohlenstoff, grafitisierter 115
Kohlenwasserstoff, polyaromatischer (PAK) 11
Kollisionsspannung 202
Kollisionszelle 218
Konus 201
Konversionsdetektor 203
Konversionsdynodendetektor 209
Kosten 214
- L**
- Labor-Information-Management-System 229
Large-volume Injection (LVI), *siehe* Direktinjektion
Laserdesorption/ionisation, matrixunterstützte (MALDI) 189
LC-MS-Interface 148
LC-MS-Kopplung 3, 21
– Methodenentwicklung 46, 75
– Problemlösungen 187
– technische Aspekte 21
LC-MS-Setup 55
Lebensmittelanalytik 21
Lichtleitertechnik 44
Lichtstreuungsdetektion (ELSD) 42
Linearität 162
Linear-solvent-strength (LSS)-Modell 114
Lock-Spray 38
Lösungsmittel 48, 154
– organisches 94
LTQ-Orbitrap-Massenspektrometer 14
- M**
- Make-up-Fluss 106
Massenauflösung, mangelnde 68
Massenbestimmung, falsche 69
Massensignal, unbekanntes 61
Massenspektrometer 13, 35, 36, 180
– Datenraten 40
– hochauflösendes 80
– Messzyklus 36
– Tuning 52
– Zykluszeiten 40
Massenspektrometrie (MS) 5, 21, 225
– Detektionsfähigkeit 41
– Quellenparameter 54
Massenspektrum, Fehlinterpretation 67

- Massenübergänge 81
 Massenzuordnung, irrtümliche 67
 Matrix-Blank 171
 Matrixeffekt 54, 170, 179
 Matrixeffektchromatogramm 82
 Matrix-Spike 170
 Mehrkomponententrennung 193
 Mehrphotonenionisation, resonanzverstärkte (REMPI) 11
 Membranpulsationsdämpfer 25
 Metabolomik 181
 Metallion 66
 Metering Device (MD) 26
 Methanol 94
 Methansulfonsäure 182
 Method Scouting System 88
 Methodenentwicklungskit 85
 Methohexital 191
 Methotrexat 101
 Mikrospray 150
 Mikrotropfen 7
 Mikrowellenvials 195
 Miniaturisierung 139
 Mixed-mode-Phase 92
 Multianalytmethode 81, 109
 Multiple Reaction Monitoring (MRM) 36, 164
 – retentionszeitunabhängiger MRM-Modus 130, 132
 Muttertropfen 7
 Mykotoxine 82
 Myoglobin 151
- N**
- Nachsäulenaddition 159, 161
 Nachweisempfindlichkeit 161, 214
 Nachweisteknik 151
 Nalbuphin 194
 Nano-HPLC-Technik 148
 Nano-LC-MS-System 179, 217
 Nano-LC-Quelle 53
 Nanospray 151
 Naphthalin 10
 Nebulizer 149
 Nebulizer-Gas 9
 Negativ-Elektrospray 167
 Neutralverlustscan 37
 Niederdruckgradientenpumpe 25
 Non-target Screening 77
 Non-target-Analytik 15
 Nozzle-skimmer Dissociation 64
- O**
- Offline-SPE 121
 Oligomerentrennung 193
 Oligonukleotide 173
 Online-SPE 117
 – LC-MS/MS 118
 Orbitrap 14, 38, 136, 223, 226
 Oxidation
 – elektrochemische in der ESI-Ionenquelle 63
 – fotochemische 63
- P**
- Paclitaxel 83, 90, 125
 Parameter, massenspektrometrische 121
 Partikel, vollporöse 104
 Peakbreite 134
 PEEK-Fingertight-Verschraubung 30
 PEEKSil-Kapillare 140
 Pestizidscreening 103, 136
 Phasen, monolithische 104, 107
 Phasenkollaps 87
 Phosphateluate 50
 Phosphatpuffer 56, 154, 156
 pH-Wert 100, 167
 Polaritätswechsel 129, 169
 Polyether 66
 Polyethylen- und Polypropylenglykole (PEG/PPG) 66
 Polysiloxane (Silicone) 66
 Polystyrolion 7
 Positiv-Ionen-Elektrospray 166
 Postcolumn-Infusion 61
 Prednisolon 159
 Prefilter 202
 Probeninjektion 25, 34
 Probenschleife 116
 Probenverschleppung 32
 Proteomanalytik 39
 Protonaddukt 62
 Pseudomoleküln 149
 Pseudomolekülkation 159
 Pufferrechner 102
- Q**
- QTOF-System 16
 QTRAP-Technologie 220
 Quadrupol 181, 202
 – Flugzeitmassenspektrometer 136
 – Massenspektrometer 13
 – Orbitrap 181
 – Reinigung 205
 Quality by Design (QbD) 125
 Quantifier 219
 Quantifizierung 129
 Quasimoleküln 6

Quellenparameter 54, 123
 – Optimierung 124
 Quellentemperatur 123
 Quellenverschmutzung 58

R

Raumladung 70
 Reaktandgas 47, 155
 Reäquilibrierungszeit 33
 Reinheitssiegel 58
 Restgas, gelöstes 67
 Retentionsmechanismus 48
 Retentionszeitfenster 132
 RP-Chromatografie 83
 Rückstandsanalytik 128

S

Safranprobe 4
 Sandwich-Injektion 191
 Säulenbluten 65
 Säulenreäquilibrierung 33
 Säulenschaltventil 107
 Säulenvolumen 112
 Säure, organische 48
 SCIEEX (SCientific EXchange) 217
 Screening
 – for Unknowns 36, 37
 – manuelles/teilautomatisiertes 88
 – mittels LC-MS 135
 – vollautomatisiertes 88
 Screeningexperiment 88
 Selected/Single Reaction Monitoring (SRM)
 36, 164
 Sheath-Gas 9
 Signal, fehlendes bei Probenanalyse 57
 Signalintensität 57
 Signalstabilität 53
 Signalunterdrückung 61
 Signal-zu-Rausch-Verhältnis 103
 Simulationssoftware 102
 Single-Quadrupol-Massenspektrometer 39
 Skimmer 201
 Small-molecule-Analyse 51, 225
 Soft-clipping-Phänomen 163
 Software 227
 Spektrenbibliothek 147, 216
 Spektroskopie 42
 Split-loop-Sampler 26, 32
 Spraystabilität 53
 Spraytechnik 200
 Spurenanalytik 128
 Steuerungssoftware 70
 Stickstoff 59, 201

Stickstoffreinheit 59
 Störkomponente 82
 Supercritical Fluid Chromatography (SFC)
 16
 Suppressionseffekte 168
 Suspected-target Screening 76
 Systemkapillare 26

T

Tandem-Massenspektrometrie 83
 – im Raum 36
 Target Scan Time 133
 Targetanalytik 16, 76, 128
 Targeted Screening 36
 Taylor-Konus 7
 Temperatur 97
 Tetrabutylammoniumbromid 157
 Tetrahydrofuran 97, 154
 Therapeutic Drug Monitoring (TDM) 223
 Thermo Fisher Scientific 223
 Thermo Scientific EasySpray nano-LC
 Interface 227
 Thermospray 200
 Time-of-flight (TOF)-Massenspektrometer
 14, 151, 181, 220
 – Triple-TOF-Technologie 222
 Toluol 10
 Totalionenstromchromatogramm 137
 Totalreflexion, innere 44
 Trägermaterial, chromatografisches 104
 Transferkapillare 105, 150
 Trennmatrix 192
 Trennsäule
 – geometrisches Säulenvolumen 112
 – Innendurchmesser 108
 – Innendurchmesserreduzierung 140
 Triethylamin (TEA) 155, 181
 Trifluoressigsäure (TFA) 51, 155, 157, 181
 – TFA-Fix 157
 Triple-Quadrupol-Massenspektrometer 13,
 36, 80, 128, 218, 226
 Trockengas 180
 Trocknungsgas 123

U

UHPLC-Analytik 22, 134, 224
 – Fittingsystem 30
 Umkehrphasenchromatografie 48, 179
 Umweltanalytik 75, 80, 222
 UV-Chromatogramm 90

V

Vakuumentgaser 158
 Vanquish UHPLC-System 26

- Verbindung, perfluorierte 66
 - Verbindungskapillare 28
 - Vernebelungsgas 123, 126
 - Vernebelungsgasrate, mangelhaft angepasste 59
 - Verschmutzung/Verunreinigung 65, 169
 - Versuchsplanung, statistische 125
 - Vorläuferion 36
 - Vorläuferionenscan 37
- W**
- Wartungsfernabfrage (remote monitoring) 228
 - Wartungsingenieur 199
 - Waste-Ventil 105
 - Waters-System 15
 - Weichmacher 65
- Z**
- Zerfallsprodukt 36
 - Zersetzungsprodukt 187, 191
 - Zitronensäure 197
 - Zykluszeit 25, 32, 134
 - Zytostatika 83, 125