

## Literatur zur Massenspektrometrie

1. **M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh: Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie.**  
Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 8. Auflage 2012, € 79,95; ISBN 9783135761084  
Behandelt die Grundlagen von UV/VIS, IR und Raman, NMR und MS. Das Standardwerk.
2. **H. Budzikiewicz, M. Schäfer: Massenspektrometrie - Eine Einführung.**  
Wiley-VCH, Weinheim, 6. Auflage 2012, € 39,90; ISBN 9783527329113
3. **J. H. Groß: Massenspektrometrie. Ein Lehrbuch.**  
Springer Spektrum, Heidelberg, 2013, € 89,95; ISBN 9783827429803  
Umfassendes und gut lesbares Kompendium aller MS-relevanter Themenbereiche, sowohl für Anfänger als auch für Fortgeschrittene geeignet. Aufgrund seiner detaillierten Darstellung auch ein gutes Nachschlagewerk für Anwender.
4. **E. DeHoffmann, V. Stroobant: Mass Spectrometry: Principles and Applications.**  
John Wiley & Sons, Chichester, 3. Auflage 2007, € 129,00; ISBN 9780470033104  
Aktuelle MS-Monographie. Behandelt die modernen massenspektrometrischen Techniken auch im Hinblick auf die physikalisch-instrumentellen Grundlagen z.T. sehr gut.
5. **J. Throck Watson, O.D. Sparkman: Introduction to Mass Spectrometry.**  
John Wiley & Sons, 4. Auflage 2007, € 79,30; ISBN 9780470516348  
Sehr ausführliche Darstellung aller gängigen Ionisationsmethoden, Analysatoren, Detektoren und Einlasssysteme, sowie chromatographischer Kopplungstechniken. Neben den klassischen Fragmentierungsreaktionen werden auch biochemische Anwendungen behandelt. Die Fülle an Detailinformationen dürfte für einen Anfänger erschlagend sein, für den erfahrenen Anwender ist sie eine Fundgrube.
6. **F.W. McLafferty, F. Turecek: Interpretation von Massenspektren.**  
Springer Spektrum, Heidelberg, 2013, € 29,99; ISBN 9783642398483  
Grundlegende und detaillierte Erläuterungen zur Interpretation von Massenspektren (MS für Fortgeschrittene). Diskutiert wird auch das Fragmentierungsverhalten einzelner Verbindungsklassen der organischen Chemie.

## Anwendungsbereiche der MS:

- Umweltanalytik
  - Lebensmittelanalytik
  - Forensik
  - „Life sciences“
  - Prozesskontrolle, Produktkontrolle
  - Geologie
  - **Strukturaufklärung**
  - ...
- } Empfindlichkeit!

## Informationen aus der MS:

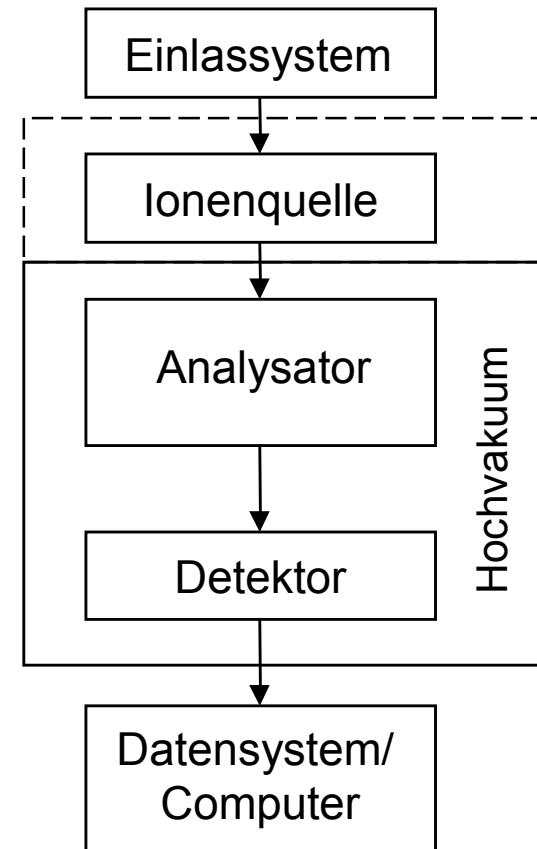
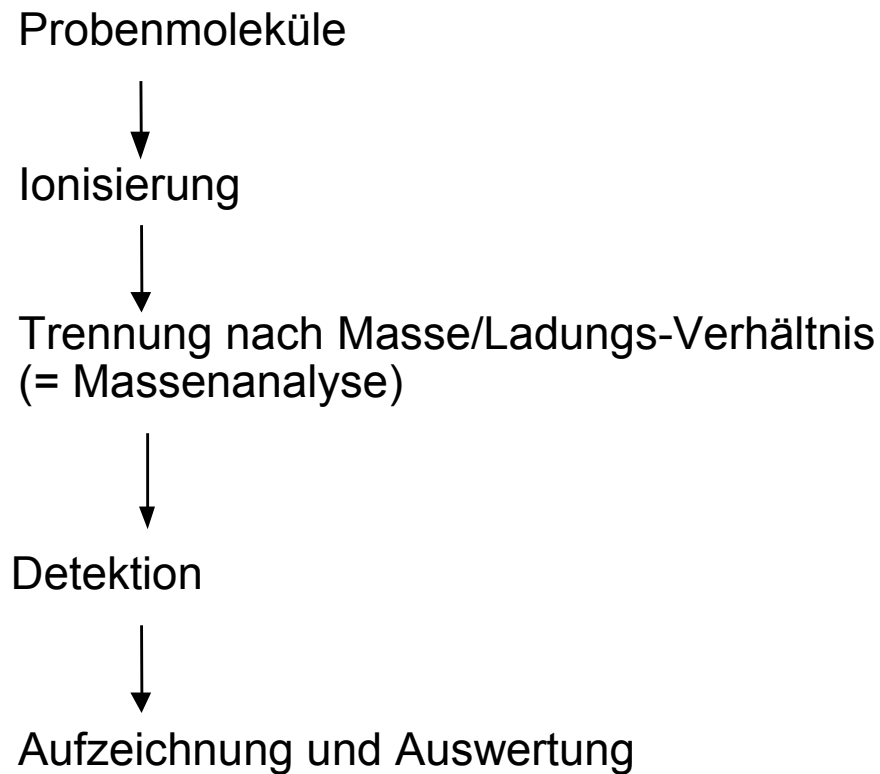
- Molekülmasse
- Elementarzusammensetzung (Summenformel)
- Strukturinformationen

## **MS ist keine spektroskopische Methode! (⇒ Massenspektrometrie)**

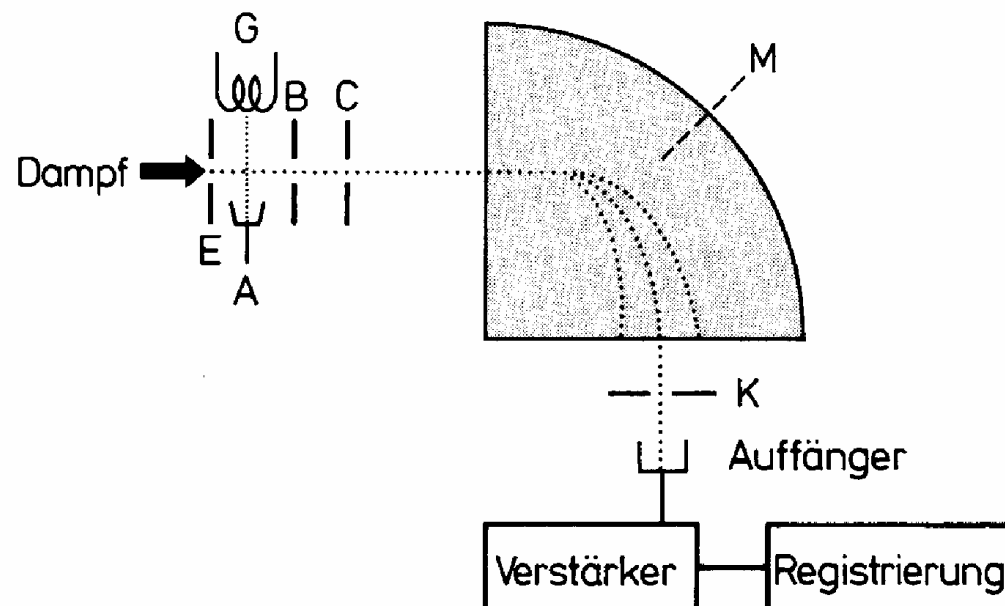
- beruht nicht auf der WW von elektromagnetischer Strahlung mit Materie
- elektromagnetische Strahlung ist nicht die Informationsquelle
- ist „nicht-konservativ“ (Probe wird bei der Messung zerstört)

# Prinzip der Massenspektrometrie: Trennung schneller gasförmiger Ionen nach Masse und Ladung

## Ablauf eines massenspektrometrischen Experiments:



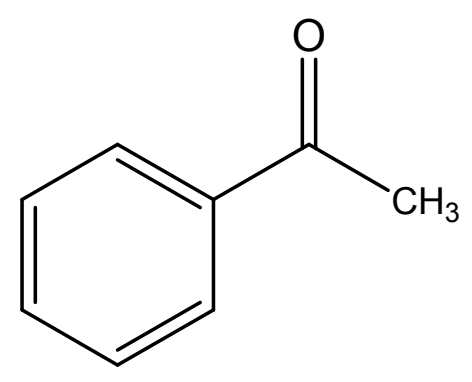
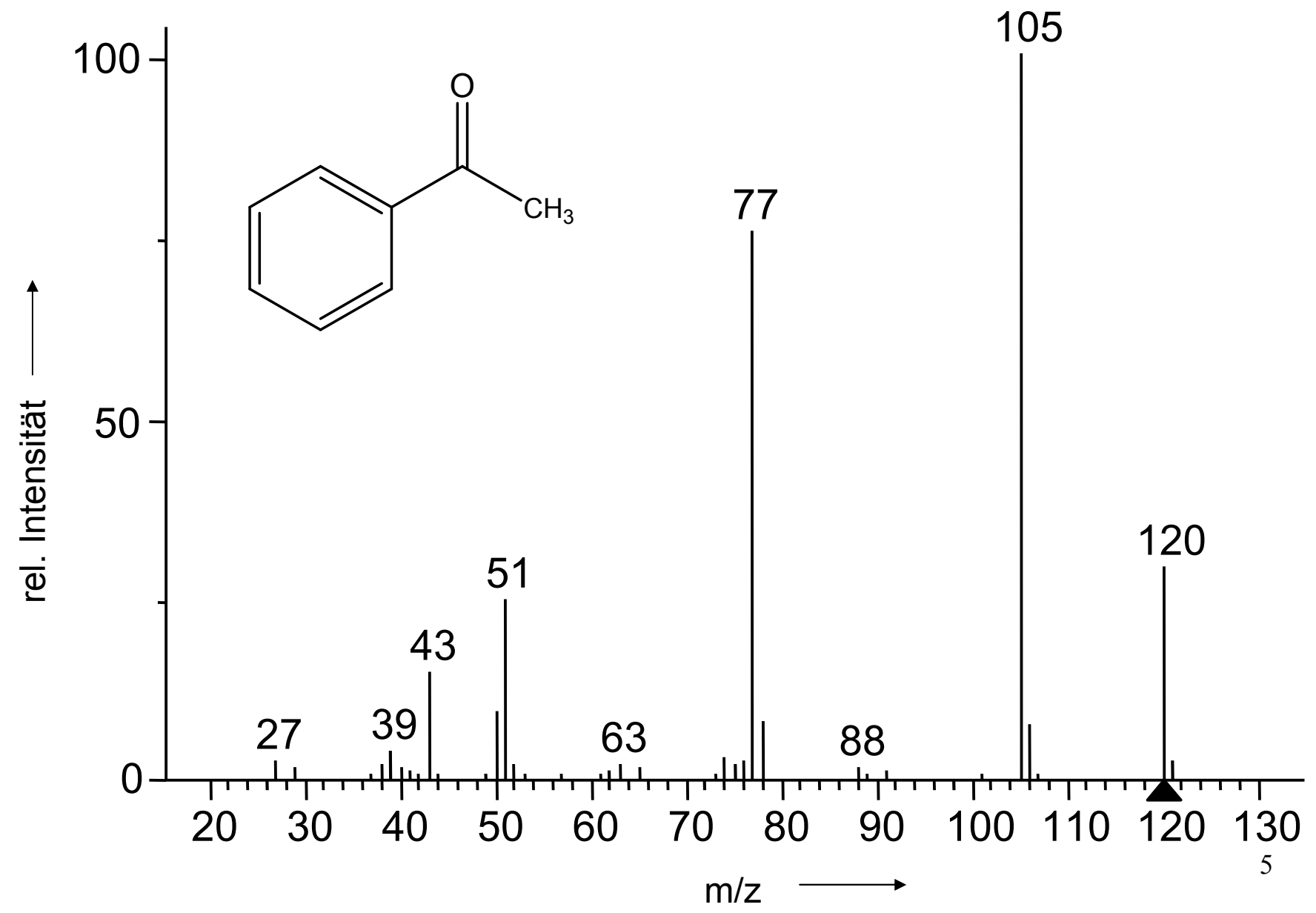
## Aufbau eines Massenspektrometers



**Abb. 20.1** Schema eines Massenspektrometers mit 90°-Sektorfeld (die magnetischen Feldlinien sind senkrecht zur Papierebene gerichtet)

- E Eintrittsspalt
- G Glühkathode
- A Anode
- B,C Beschleunigungsblenden
- K Kollektorspalt
- M Magnetisches Sektorfeld (90°)

# Massenspektrum



# Übersicht

## Einlasssysteme

- direkter Einlass
- indirekter Einlass
- Gaschromatograph (GC)
- Flüssigkeitschromatograph (HPLC)

## Analysatoren

- Flugzeit-MS
- Sektorfeld-MS
- Quadrupol
- Ionenfalle

## Interpretation von Massenspektren

- Erkennung/Eigenschaften des Molekülions
- Isotopie und Präzisionsmasse
- Fragmentierungen

## Ionisierungsmethoden

- Elektronenstoß-Ionisation (EI)
- Chemische Ionisation (CI)
- Elektrospray-Ionisation (ESI)
- Matrix-unterstützte Laserdesorption/Ionisation (MALDI)

## Detektoren

- Sekundärelektronenvervielfacher
- (Channeltron)
- Faraday-Cup