Inhaltsverzeichnis

| Vorwort zur 5. Auflage IX | | | |
|---------------------------------------|--|--|--|
| Aus dem Vorwort zur 1. Auflage $X\!I$ | | | |
| Einleitung 1 | | | |
| Teil I | Grundlagen 5 | | |
| 1 | Terminologie 7 | | |
| 2 | Apparative Grundlagen 11 | | |
| 2.1 | Einlasssystem 11 | | |
| 2.1.1 | Möglichkeiten der Probeneinführung 11 | | |
| | Indirekte Probeneinführung 12 | | |
| | Direkte Probeneinführung 12 | | |
| | Kopplung mit einem Gaschromatographen 13 | | |
| 2.1.2 | | | |
| 2.1.3 | | | |
| 2.1.4 | Veränderungen von Proben vor der Ionisierung 16 | | |
| 2.1.5 | | | |
| 2.2 | Ionenquellen 18 | | |
| 2.2.1 | Ionisierungsverfahren, die zu M ⁺ führen 18 | | |
| | Elektronenstoßionisation 18 | | |
| | Photo- und Laser-Ionisation 19 | | |
| | Feldionisation 20 | | |
| 2.2.2 | Chemische Ionisation 20 | | |
| 2.2.3 | Oberflächenionisation (Desorptionsverfahren) 24 | | |
| | Felddesorption 25 | | |
| | Fast Atom Bombardment 26 | | |
| | Cf-Plasmadesorption 28 | | |
| | Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionisation 28 | | |
| 2.2.4 | | | |
| | Electrospray und Ionenspray, Thermospray 30 | | |
| | Particle Spray 32 | | |

Massenspektrometrie, Fünfte Auflage. H. Budzikiewicz, M. Schäfer Copyright © 2005 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim ISBN: 3-527-30822-9

| 2.2.5 | Spezielle Ionisierungsverfahren für Metalle |
|--------------|---|
| | und anorganische Verbindungen 32 |
| | Sekundärionenmassenspektrometrie |
| | und verwandte Techniken 32 |
| | Thermoionisation 33 |
| | Vakuum-Entladungen (Funkenionenquellen) 33 |
| | Inductively Coupled Plasma Massenspektrometrie 33 |
| 2.3 | Analysator 33 |
| 2.3.1 | Beschleunigung 33 |
| 2.3.2 | Trennung der Ionen 34 |
| | Magnetfeldgeräte 34 |
| | Flugzeit-Massenspektrometer 34 |
| | Ionenbeweglichkeitsspektrometer 35 |
| | Quadrupol-Massenspektrometer (Massenfilter) 35 |
| | Quadrupol-Ionenfallen (Quistor, q-Ion Trap) 37 |
| | Ionen-Cyclotron-Resonanz-Spektrometer 37 |
| | Beschleuniger-Massenspektrometer 39 |
| | Tandemgeräte 39 |
| 2.3.3 | Auflösungsvermögen und Fokussierung 41 |
| 2.4 | Registrierung 44 |
| 2.4.1 | Technische Durchführung 44 |
| 2.4.2 | Ausgabe der Messdaten 46 |
| | Totalionenstrom 46 |
| | Selected Ion Monitoring 46 |
| | Vollständige Massenspektren 48 |
| | Bestimmung der nominellen Ionenmasse 49 |
| | Bestimmung der exakten Ionenmasse 50 |
| 2.5 | Rechnersysteme 51 |
| • | |
| 3 | lonenarten 53 |
| 3.1 | Molekülion 53 |
| 3.2 | Fragmentionen 54 |
| 3.3 | Mehrfach geladene Ionen 55 |
| 3.4 | Quasi-Molekülionen 55 |
| 3.5 | Metastabile Ionen 56 Tandem-Massenspektrometrie 58 |
| 3.6 3.6.1 | zarracini masserisperia e a a a a a a a a a a a a a a a a a a |
| | Grundlagen 58 |
| 3.6.2 | Technische Durchführung 62 |
| | Sektorfeldgeräte 62 |
| | Triplequadgeräte 63 |
| 3.7 | in-source oder skimmer-Cid ber Electrospa-y |
| 3./ | Fragmentierungsmuster 64 |

| Teil II | Auswertung von Massenspektren 69 |
|--|---|
| 4 | Bestimmung von Molekülmasse |
| | und Elementarzusammensetzung 71 |
| 4.1 | Molekülmasse 71 |
| 4.2 | Elementarzusammensetzung einer Verbindung 72 |
| | |
| 5 | Isotopenanalyse 75 |
| 5.1 | Berechnung von Isotopenmustern 75 |
| 5.2 | Hohe und extrem hohe Massenbereiche 77 |
| 5.3 | Nachweis und quantitative Bestimmung |
| | schwerer Isotope 80 |
| _ | Qualitative und quantitative Analyse von Gemischen 83 |
| 6 | Quantative und quantitudive manyse von |
| 6.1 6.2 | Vorbemerkungen 83 Qualitative Analytik 83 |
| | Mit chromatographischer Trennung 83 |
| 6.2.1 | GC-Kopplung 83 |
| | LC- und CE-Kopplung 84 |
| 6.2.2 | Qualitative Analyse ohne vorhergehende |
| 0.2.2 | chromatographische Trennung 85 |
| 6.3 | Quantitative Analytik 86 |
| 0.5 | Qualitative Finally and To |
| | |
| 7 | Bindungsenergien und thermodynamische Daten |
| 7 | Bindungsenergien und thermodynamische Daten aus IP- und AP-Messungen 89 |
| | aus IP- und AP-Messungen 89 |
| 7 | aus IP- und AP-Messungen 89 Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer |
| 8 | aus IP- und AP-Messungen 89 Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 |
| 8 8.1 | aus IP- und AP-Messungen 89 Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 |
| 8 8.1 8.2 | aus IP- und AP-Messungen 89 Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 |
| 8.1 8.2 8.3 | aus IP- und AP-Messungen 89 Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 |
| 8.1 8.2 8.3 8.4 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 |
| 8.1 8.2 8.3 | aus IP- und AP-Messungen 89 Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 |
| 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 |
| 8.1 8.2 8.3 8.4 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 |
| 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 |
| 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 Kohlenwasserstoffe 111 Alkane 111 |
| 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 9 9.1 9.1.1 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 Kohlenwasserstoffe 111 Alkane 111 Alkene 112 |
| 8 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 9 9.1 9.1.1 9.1.2 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 Kohlenwasserstoffe 111 Alkane 111 Alkene 112 Alkine 113 |
| 8 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 9 9.1 9.1.1 9.1.2 9.1.3 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 Kohlenwasserstoffe 111 Alkane 111 Alkene 112 Alkine 113 |
| 8 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 9 9.1.1 9.1.2 9.1.3 9.1.4 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 Kohlenwasserstoffe 111 Alkane 111 Alkene 112 Alkine 113 Alicyclen 113 |
| 8 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 9 9.1 9.1.1 9.1.2 9.1.3 9.1.4 9.1.5 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 Kohlenwasserstoffe 111 Alkane 111 Alkene 112 Alkine 113 Alicyclen 113 Aromatische Kohlenwasserstoffe 113 Hydroxyverbindungen 117 |
| 8 8.1 8.2 8.3 8.4 8.5 9 9.1 9.1.1 9.1.2 9.1.3 9.1.4 9.1.5 9.2 | Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen 93 Symbolik 93 Allgemeine Vorbemerkungen 95 Konzept der "lokalisierten Ladung" 100 Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen 102 Hinweise zur Interpretation von Spektren 104 Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen 111 Kohlenwasserstoffe 111 Alkane 111 Alkene 112 Alkine 113 Alicyclen 113 Aromatische Kohlenwasserstoffe 113 Hydroxyverbindungen 117 Aliphatische Alkohole 117 |

| Inhaltsverzeichni | 5 |
|-------------------|---|
|-------------------|---|

| 9.3 | Ether 122 |
|--------|---|
| 9.3.1 | Aliphatische Ether 122 |
| 9.3.2 | Cyclische Ether 124 |
| 9.3.3 | Aromatische Ether 125 |
| 9.4 | Thiole und Thioether 127 |
| 9.5 | Amine 128 |
| 9.5.1 | Aliphatische Amine 128 |
| 9.5.2 | Cycloalkylamine 130 |
| 9.5.3 | Aromatische Amine 130 |
| 9.6 | Halogenverbindungen 131 |
| 9.6.1 | Aliphatische Halogenverbindungen 131 |
| 9.6.2 | Aromatische Halogenverbindungen 133 |
| 9.7 | Nitroverbindungen 133 |
| 9.8 | Aldehyde und Ketone 134 |
| 9.8.1 | Aldehyde 134 |
| 9.8.2 | Aliphatische Ketone 135 |
| 9.8.3 | • |
| 9.8.4. | Aromatische Ketone 137 |
| 9.9 | Carbonsäuren und Ester 138 |
| 9.9.1 | Aliphatische Säuren und ihre Ester 138 |
| 9.9.2 | |
| 9.10 | Koordinationsverbindungen 142 |
| 10 | Beispiele aus dem Naturstoffbereich 145 |
| 10.1 | Aminosäuren und Peptide 145 |
| 10.2 | Zucker 150 |
| 10.3 | Steroide 154 |
| | |
| 11 | Stereochemische Probleme 159 |
| 7.0 | W. b. Col. 1 15 |
| 12 | Weiterführende Literatur 163 |
| 13 | Fachausdrücke 167 |
| 14 | Abkürzungen 171 |
| •• | |
| 15 | Ausgewählte Isotopenmassen und -häufigkeiten 175 |
| 16 | Umrechnungsfaktoren 181 |
| 17 | Lösungen der Aufgaben 183 |
| | |
| 18 | Spektren wichtiger Lösungsmittel, von Hahnfett sowie von abgegebenem GC-Säulenmaterial ("Säulenbluten") |
| 19 | Literatur 203 |

Sachregister 209

197