

Inhaltsverzeichnis

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

- 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

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