

ressante Titel

Herbert Budzikiewicz, Mathias Schäfer

Massenspektrometrie
Eine Einführung

*Fünfte, vollständig überarbeitete
und aktualisierte Auflage*

pektroskopie



WILEY-
VCH

WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

C 14 2/15 a



2005 170

Prof. Dr. Herbert Budzikiewicz

Universität zu Köln
Institut für Organische Chemie
Greinstraße 4
50939 Köln

Dr. Mathias Schäfer

Universität zu Köln
Institut für Organische Chemie
Greinstraße 4
50939 Köln

Originalausgabe

1. Auflage 1972
2. Auflage 1980
- Nachdruck 1989 der 2. Auflage 1980
3. Auflage 1992
4. Auflage 1998

■ Alle Bücher von Wiley-VCH werden sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren und Verlag in keinem Fall, einschließlich des vorliegenden Werkes, für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler irgendeine Haftung.

Bibliografische Information

Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

© 2005 WILEY-VCH GmbH & Co. KGaA,
Weinheim

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in andere Sprachen vorbehalten. Kein Teil dieses Buches darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikroverfilmung oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen, verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden.

Printed in the Federal Republic of Germany
Gedruckt auf säurefreiem Papier

Einbandgestaltung SCHULZ Grafik-Design,
Fußgönheim

Satz K+V Fotosatz GmbH, Beerfelden

Druck betz-druck gmbh, Darmstadt

Bindung Litges & Dopf Buchbinderei GmbH,
Heppenheim

ISBN-13 978-3-527-30822-4

ISBN-10 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 Ionenarten 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
 - 3.6 Tandem-Massenspektrometrie 58
 - 3.6.1 Grundlagen 58
 - 3.6.2 Technische Durchführung 62
 - Sektorfeldgeräte 62
 - Triplequadgeräte 63
 - In-Source oder Skimmer-CID bei Electrospray 63
 - 3.7 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
6	Qualitative und quantitative Analyse von Gemischen	83
6.1	Vorbemerkungen	83
6.2	Qualitative Analytik	83
6.2.1	Mit chromatographischer Trennung	83
	GC-Kopplung	83
	LC- und CE-Kopplung	84
6.2.2	Qualitative Analyse ohne vorhergehende chromatographische Trennung	85
6.3	Quantitative Analytik	86
7	Bindungsenergien und thermodynamische Daten aus IP- und AP-Messungen	89
8	Interpretation der Fragmentierungsmuster organischer Verbindungen	93
8.1	Symbolik	93
8.2	Allgemeine Vorbemerkungen	95
8.3	Konzept der „lokalisierten Ladung“	100
8.4	Typische Zerfalls- und Umlagerungsreaktionen	102
8.5	Hinweise zur Interpretation von Spektren	104
9	Besprechung einzelner organischer Verbindungsklassen	111
9.1	Kohlenwasserstoffe	111
9.1.1	Alkane	111
9.1.2	Alkene	112
9.1.3	Alkine	113
9.1.4	Alicyclen	113
9.1.5	Aromatische Kohlenwasserstoffe	113
9.2	Hydroxyverbindungen	117
9.2.1	Aliphatische Alkohole	117
9.2.2	Cycloalkanole	118
9.2.3	Phenole und Benzylalkohole	119

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	Cycloalkanone	136
9.8.4	Aromatische Ketone	137
9.9	Carbonsäuren und Ester	138
9.9.1	Aliphatische Säuren und ihre Ester	138
9.9.2	Aromatische Säuren und ihre Ester	140
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
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“)	197
19	Literatur	203
	Sachregister	209