

Aufbau und Funktionsweise eines Massenspektrometers

*Anwendung von elektrischen
und magnetischen Feldern
in der Massenspektrometrie*

Facharbeit von Patrick Robrecht
im Grundkurs Physik
am Reismann-Gymnasium in Paderborn

Betreuender Fachlehrer: Herr Lengsfeld

Jahrgangsstufe 12/II

Schuljahr 2010/2011

Inhaltsverzeichnis

Thema: Aufbau und Funktionsweise eines Massenspektrometers. Anwendung von elektrischen und magnetischen Feldern in der Massenspektrometrie

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einführung in die Massenspektrometrie..... | 3 |
| 1.1 | Wahl des Themas und Eingrenzung..... | 3 |
| 1.2 | Literaturliste..... | 3 |
| 2 | Beschreibung von Aufbau und Funktionsweise..... | 4 |
| 2.1 | Bestandteile eines Massenspektrometers..... | 4 |
| 2.2 | Ionisierung und Beschleunigung in der Ionenquelle..... | 5 |
| 2.3 | Trennung im Massenanalysator..... | 6 |
| 2.4 | Detektor und Massenspektrum..... | 6 |
| 2.5 | Das Ergebnis: Massenspektrum..... | 7 |
| 3 | Betrachtung mit physikalischen Größengleichungen..... | 7 |
| 3.1 | Geschwindigkeit der Ionen nach der Beschleunigung..... | 7 |
| 3.2 | Radius der Kreisbahn der Ionen im Magnetfeld..... | 8 |
| 3.3 | Herleitung der Grundgleichung der Massenspektrometrie..... | 8 |
| 3.4 | Qualität eines Massenspektrometers: Auflösungsvermögen..... | 9 |
| 4 | Anwendung in der analytischen Chemie..... | 9 |
| 4.1 | Auswertung von Massenspektren..... | 10 |
| 4.2 | Beispiele für die Interpretation von Massenspektren..... | 10 |
| 4.2.1 | Massenspektrum von Wasser..... | 10 |
| 4.2.2 | Massenspektrum von Methan..... | 11 |
| 4.3 | Schlussbetrachtung..... | 12 |
| 5 | Literaturverzeichnis..... | 13 |
| 5.1 | Internetquellen..... | 13 |
| 5.2 | Sekundärliteratur..... | 13 |
| 6 | Erklärung über die Selbstständigkeit der Abfassung..... | 15 |

1 Einführung in die Massenspektrometrie

In der analytischen Chemie ist es oft erforderlich, eine Probe nach Stoffen zu sortieren. Die Massenspektrometrie stellt dazu die notwendigen Mittel bereit, deren physikalische Grundlagen in dieser Facharbeit erläutert werden sollen.

Das Verfahren der Massenspektrometrie ist schon fast hundert Jahre alt. Der britische Chemiker und Physiker Francis William Aston bestimmte im Jahre 1919 die exakten Massen von über zweihundert Isotopen; diese Leistung wurde 1922 mit dem Nobelpreis für Chemie gewürdigt. Seitdem wurden zahlreiche Verbesserungen und neue Verfahren entwickelt, von denen im Rahmen dieser Facharbeit nur einige ausgewählte behandelt werden können.

1.1 Wahl des Themas und Eingrenzung

Für das Thema „Massenspektrometrie“ habe ich mich entschieden, weil ich neben der Physik auch an der Chemie interessiert bin und dieses Gebiet die beiden Naturwissenschaften berührt: Die Physik liefert die Grundlagen, welche in Rahmen dieser Facharbeit in den Kapiteln 2 und 3 dargestellt werden, und die Chemie wendet das Verfahren in der Analytik an, wie in Kapitel 4 beschrieben wird. Bei sämtlichen Ausführungen in dieser Facharbeit wird von einem Sektorfeldgerät¹ ausgegangen.

Dieses Thema passt in den Kontext der elektrischen und magnetischen Felder, mit denen wir uns im Physik-Kurs der Jahrgangsstufe 12 auseinander gesetzt haben.

1.2 Literaturliste

Die recht umfangreiche Literaturliste ergab sich im Laufe der Abfassung durch die unterschiedliche Ausführlichkeit der einzelnen Werke in Bezug auf die einzelnen Bestandteile und Verfahren. Nach einem Überblick anhand der Internetquellen (siehe 5.1) war es notwendig, Fachliteratur der Stadtbibliothek und Universitätsbibliothek hinzuziehen.

Grundlagen und Anwendungen in der Chemie finden sich in [12], [13], [14] und [16] auf die Auswertung von Massenspektren gehen insbesondere die Quellen [8], [10] und [17] ein. Die unterschiedlichen Ionisierungstechniken werden vor allem in [11] und [15] behandelt. Das umfassendste deutschsprachige Lehrwerk ist sicherlich [9]. Die Grafiken entstammen den Quellen [5], [6] und [7].

¹ Es gibt noch weitere Arten von Massenspektrometern wie das Quadrupol-Massenspektrometer und das Flugzeit-Massenspektrometer (vgl. [16], S. 35).

2 Beschreibung von Aufbau und Funktionsweise

Zunächst sollen der Aufbau eines Massenspektrometers sowie die Funktionsweise und das Zusammenwirken der einzelnen Teile beschrieben werden.

In einem Massenspektrometer wird die spezifische Ladung, also das Verhältnis der Masse zur Ladung der zu trennenden Teilchen, als Trenneigenschaft benutzt. Die Teilchen werden dazu ionisiert und zunächst durch ein elektrisches und danach ein magnetisches Feld abgelenkt. Wie dabei die Eigenschaften der Felder zusammenhängen, wird in Kapitel 3 mit physikalischen Größengleichungen dargestellt.

2.1 Bestandteile eines Massenspektrometers

Abbildung 1 zeigt den Aufbau eines Massenspektrometers in vereinfachter Form. Jedes Massenspektrometer besteht aus folgenden drei wesentlichen Bestandteilen, und zwar:

- einer Ionenquelle und einem Ionenbeschleuniger, denen ein Einlass-System vorgeschaltet ist,
- einem Massenanalysator (Trennrohr), in dem die Ionen getrennt werden,
- und einem Detektor für die Registrierung der Messdaten.

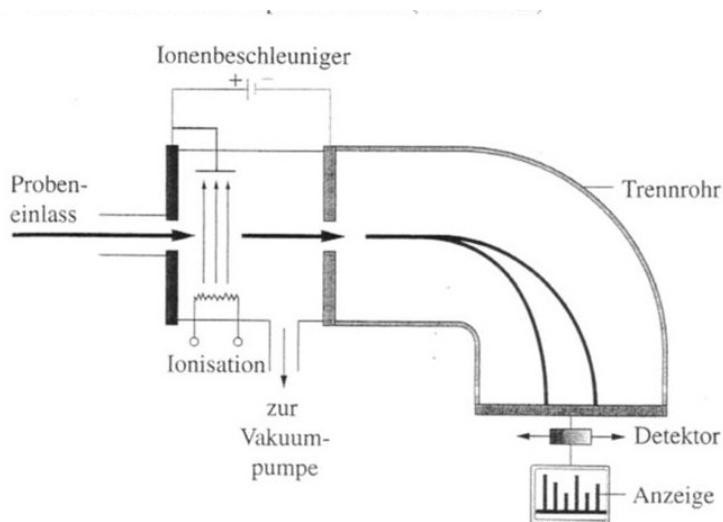


Abbildung 1: Aufbau eines Massenspektrometers (vereinfachte Darstellung)²

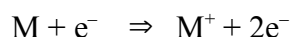
² entnommen aus: [7], S. 41f.

2.2 Ionisierung und Beschleunigung in der Ionenquelle

Der erste Schritt einer massenspektrometrischen Analyse einer Stoffprobe ist die Überführung in gasförmige Ionen, wofür mehrere Verfahren zur Verfügung stehen, die je nach Stoff unterschiedlich gut geeignet sind.

Die zu analysierende Probe (eine Stoffmenge im μmol -Bereich) gelangt durch ein Einlass-System in die Ionenquelle. Hier werden die Teilchen zwischen zwei Platten in einem elektrischen Feld ionisiert mit einer Spannung $U = 800 \text{ V}$ bis 10.000 V auf eine Austrittsgeschwindigkeit v beschleunigt (Formel für diese Geschwindigkeit siehe Abschnitt 3.1).

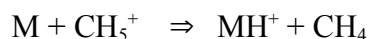
Zur Ionisierung gibt es viele mögliche Methoden³. Die am häufigsten verwendete Ionisierungstechnik für organische Stoffe ist die Elektronenstoßionisation (EI). Bei der EI werden die Teilchen im Hochvakuum verdampft (bei einem niedrigen Druck $p < 10^{-4} \text{ Pa}$) und dann mit Elektronen der kinetischen Energie⁴ von meist 70 eV beschossen, so dass ein Molekül M durch die folgende Reaktion mit einem Elektron (e^-) ionisiert wird:



Allerdings kann das Molekül auch in mehrere Ionen zerfallen, welche dann als Fragment-Ionen bezeichnet werden, da sie nur Bruchstücke des Ausgangsmoleküls sind.

Für den Fall, dass sich die Probe nicht unzerstört verdampfen lässt, wurden schonende Verfahren⁵ entwickelt, die dieses Manko nicht aufweisen, wie zum Beispiel das Fast Atom Bombardement (FAB), bei dem schnelle Atome mit großen Energiebeträgen wie Xenon oder Argon verwendet werden, oder die Matrix Assisted Laser Desorption Ionisation (MALDI) unter Laser-Einsatz zur Energieübertragung.

Die chemische Ionisation (CI) findet im Gegensatz zu den anderen, oben erwähnten Verfahren unter einem höheren Druck von bis zu 150 Pa statt. Hierbei werden die Ionen mit einem Reaktionsgas erzeugt. Ein Beispiel hierfür sind Methan-Ionen:



Falls das Ausgangsmolekül ein Wasserstoff-Atom beinhaltet, wird bei der Reaktion mit den Methan-Ionen Wasserstoff (H_2) freigesetzt und es bildet sich ein Molekül-Ion, ohne

3 Eine Übersicht über diese und weitere Ionisierungstechniken mit Darstellung der genauen Funktionsweise findet sich im Kapitel *Ion Sources*. In: [11], S. 9-37; eine Auflistung im selben Werk auf S. 288.

4 Der Energiebetrag liegt in der Regel zwischen 15 eV und 200 eV ; 70 eV ist ein häufig verwendete Energiemenge und ist damit für die meisten Stoffe höher als die 1. Ionisierungsenergie.

5 für eine Darstellung moderner Ionisierungstechniken siehe [15]

dass ein Wasserstoff-Atom dabei aufgenommen wird. Bei diesem Verfahren bilden sich nur selten Fragment-Ionen, es gehört daher zu den sogenannten „weichen“ Ionisationsverfahren.

Mit dem Austreten aus dem elektrischen Feld gelangen die Ionen in den Wirkungsbereich eines Magneten, in dem sichergestellt sein muss, dass sie diesen ohne gegenseitige Stöße oder Berührungen mit nicht ionisierten Restmolekülen durchfliegen können.

2.3 Trennung im Massenanalysator

Im Trennsystem, auch Massenanalysator genannt, werden die Ionen letztendlich getrennt, indem das Magnetfeld dafür sorgt, dass die Ionen mit gleicher spezifischer Ladung jeweils auf eine Kreisbahn mit einem bestimmten Radius r gelenkt werden. Dabei werden „schwere“ Ionen nur sehr schwach abgelenkt, leichtere hingegen stärker. In Abschnitt 3.2 wird die Trennung mit physikalischen Größengleichungen genauer beschrieben.

2.4 Detektor und Massenspektrum

Im Detektor werden die vorher getrennten Ionen erfasst. Dabei gibt es grundsätzlich drei Möglichkeiten, die Ionen zu registrieren⁶:

Die Ionen fliegen entsprechend ihrem Ablenkradius r bei konstant gehaltener Spannung U und magnetischer Induktion B auf eine Photoplatte und schwärzen diese, sodass die Häufigkeit der Ionen durch den Grad der Schwärze deutlich wird.

Seine sehr genaue Möglichkeit zur Registrierung des Massenspektrums sind mehrere Auffänger (Faraday-Töpfe), in denen die Bewegungsenergie der Ionen in elektrische Energie gewandelt wird. Die resultierende Stromstärke ist proportional zur Häufigkeit der Ionen. Dieses Verfahren wird dann verwendet, wenn die Anzahl an unterschiedlichen Ionen gering ist, da für jede Ionensorte ein Auffänger benötigt wird. Diese Methode ist allerdings nicht für ganz kleine Ionenströme geeignet, da die Stromstärken sonst zu gering sind.

Die am häufigsten verwendete Methode ist ein Kollektorspalt, der nur Ionen auf einer Flugbahn mit einem vorgegebenen Ablenkradius durchlässt. Dabei werden U und B so eingestellt, dass jeweils Ionen mit einer bestimmten spezifische Ladung erfasst werden.

⁶ Darstellung nach [9], S. 44-45

2.5 Das Ergebnis: Massenspektrum

Das Ergebnis einer massenspektrometrischen Analyse ist ein Massenspektrum, das die Verteilung der Massen in Diagrammform zeigt. Dabei wird die spezifische Ladung auf die x-Achse aufgetragen und die Ionenhäufigkeit (absolut oder als Anteil) auf die y-Achse. Aus einem solchen Diagramm lassen sich Rückschlüsse auf die Eigenschaften und die Struktur der Probe ziehen. Wie man ein Massenspektrum interpretiert, wird in Kapitel 4 dargelegt.

Bei der relativen Darstellungsweise des Massenspektrums wird die Häufigkeit des häufigsten Ions, des sogenannten Basis-Peaks, auf 100 % gesetzt und die Angaben für andere Ionen werden darauf bezogen. Als Peak wird allgemein das Auftreten einer bestimmten spezifischen Ladung im Massenspektrum bezeichnet.

3 Betrachtung mit physikalischen Größengleichungen

Für die Bewegung der Teilchen im elektrischen Feld und im magnetischen Feld müssen die aus dem Unterricht bekannten Größengleichungen für die Ablenkung von Elektronen in solchen Feldern leicht angepasst werden: Anstatt der Elektronen mit der Elementarladung e bewegen sich Ionen, deren Ladung ein ganzzahliges Vielfaches der Elementarladung ist, durch die Felder. Dieses Vielfache sei im Folgenden mit z bezeichnet:

$$z = N e$$

Oft sind die Ionen einfach positiv geladen (also $N = 1$, vgl. die Reaktionsgleichungen in Abschnitt 2.2), es können jedoch auch zwei- oder dreifach positiv geladene Ionen entstehen. Daher ist die Unterscheidung zwischen e und z notwendig, da nicht vom Regelfall ausgegangen werden kann, auch wenn dies in älterer Literatur häufig zu finden ist.

3.1 Geschwindigkeit der Ionen nach der Beschleunigung

In dem elektrischen Feld werden die Teilchen ionisiert und mit der anliegenden Beschleunigungsspannung U beschleunigt. Dabei wird elektrische Energie E_{el} in kinetische Energie (Bewegungsenergie) E_{kin} umgewandelt.

Für die Geschwindigkeit der Ionen beim Austritt aus dem elektrischen Feld erhält man durch Gleichsetzen der beiden Energieformen nach dem Energieerhaltungssatz:

$$\begin{aligned} E_{kin} &= E_{el} \\ \Leftrightarrow \frac{1}{2} m v^2 &= z U && | \text{Umformen nach } v^2 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\Leftrightarrow v^2 = \frac{2 z U}{m} \quad | \text{ Wurzelziehen } (v > 0) \quad (2)$$

$$\Leftrightarrow v = \sqrt{\frac{2 z U}{m}} \quad (3)$$

3.2 Radius der Kreisbahn der Ionen im Magnetfeld

Bei der kreisförmigen Ablenkung der Ionen im Magnetfeld wirkt die Lorentzkraft F_L als Zentripetalkraft F_Z . Daher lässt sich durch Gleichsetzen der beiden Kräfte der Radius der Kreisbahn r durch die anderen physikalischen Größen ausdrücken:

$$F_L = F_Z$$

$$\Leftrightarrow B v z = \frac{m v^2}{r} \quad | \text{ Dividieren durch } v \quad (6)$$

$$\Leftrightarrow B z = \frac{m v}{r} \quad | \text{ Multiplizieren mit } r \quad (7)$$

$$\Leftrightarrow B z r = m v \quad | \text{ Dividieren durch } (B z) \quad (8)$$

$$\Leftrightarrow r = \frac{m v}{z B} \quad (9)$$

3.3 Herleitung der Grundgleichung der Massenspektrometrie

Durch die Kombination der Gleichungen (2) und (9) erhält man eine in der Literatur oft als Grundgleichung der Massenspektrometrie bezeichnete Gesetzmäßigkeit, welche die spezifische Ladung in Abhängigkeit der übrigen Größen angibt.

Zunächst ergibt sich aus Gleichung (9) durch Umformung nach dem Verhältnis der Masse zur Ladung:

$$\frac{m}{z} = \frac{B r}{v} \quad | \text{ Quadrieren} \quad (10)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{m}{z}\right)^2 = \frac{B^2 r^2}{v^2} \quad | \text{ Einsetzen von (2)} \quad (11)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{m}{z}\right)^2 = \frac{B^2 r^2}{\frac{2 z U}{m}} \quad | \text{ Auflösen des Doppelbruches} \quad (12)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{m}{z}\right)^2 = \frac{B^2 r^2}{2 U} \frac{m}{z} \quad | \text{ Dividieren durch } \frac{m}{z} \quad (13)$$

$$\Leftrightarrow \frac{m}{z} = \frac{B^2 r^2}{2 U} \quad (\text{Grundgleichung der Massenspektrometrie})$$

Als Einheit für m/z findet man manchmal Thomson (Th), das als Quotient aus der atomaren Masseneinheit u und der Elektronenladung e definiert ist. In der Regel finden sich jedoch Angaben ohne Einheit, die als Quotienten aus der Massenzahl (d. i. die Masse in u) und der Ladungszahl N zu verstehen sind.

Wie die Grundgleichung der Massenspektrometrie durch Veränderung oder Konstanthalten der drei Größen Spannung U , magnetische Induktion B und Ablenkradius r in der Praxis ausgenutzt wird, wurde bereits in Abschnitt 2.4 dargestellt.

3.4 Qualität eines Massenspektrometers: Auflösungsvermögen

Entscheidend für die Qualität des Massenanalysators ist das Auflösungsvermögen R (in deutschsprachiger Literatur auch A), eine dimensionslose Größe, die als Quotient aus der Masse m eines Ions und der Massendifferenz zwischen dieser Masse und der Masse eines zweiten Ions, von dem das erste unterschieden werden soll, definiert ist:

$$R = \frac{m}{\Delta m}$$

Ein Auflösungsvermögen $R = 1.000$ bedeutet so beispielsweise, dass das Massenspektrometer mit dieser Auflösung Ionen der Massen $1.000 u$ und $999 u$ unterscheiden könnte. Die für eine Trennung von Teilchen erforderliche Auflösung ist abhängig davon, welche Ionen unterschieden werden sollen.

Sogenannte doppelfokussierende Massenspektrometer für den Einsatz in chemischen Analyse-Instituten erreichen heute Werte⁷ über $R = 100.000$, Spezialgeräte sogar bis zu $R = 1.000.000$. Einfache Sektorfeldgeräte erreichen nur Werte von $R = 5.000$.

4 Anwendung in der analytischen Chemie

Massenspektrometer finden vor allem in der analytischen Chemie Anwendung, so bei der Bestimmung von Stoffcharakteristika wie der molaren Masse von Stoffverbindungen und der Summenformel von Molekülen.

Dass die praktische Bedeutung der Massenspektrometrie in der Chemie bedeutend größer ist als in der Physik, die nur die Grundlagen und das Wissen zur Konzeption bereitstellt, ist schon anhand der Titel im Literaturverzeichnis ersichtlich.

⁷ Werte für R zitiert nach: [19], S. 2

4.1 Auswertung von Massenspektren

Da mit einem Hochauflösungs-Massenspektrometer die Masse eines Moleküls mit einer Genauigkeit von mehreren Dezimalstellen bestimmt werden kann (unter der Voraussetzung, dass die Ladung bekannt ist), ist es möglich, sogar Moleküle mit fast identischer Masse zu unterscheiden. Ein Beispiel hierfür sind die Moleküle $C_6H_{10}O$ und C_7H_{14} mit einer Molekülmasse von jeweils 98 u. Bei entsprechend hoher Auflösung werden diese jedoch im Massenspektrum unterschieden.

Außerdem ermöglicht die Molekülmasse Rückschlüsse auf die Zusammensetzung eines unbekanntes Moleküls, da mit Hilfe einiger Regeln auf das Vorkommen bestimmter Elemente⁸ in der Verbindung geschlossen werden kann. Bei Molekülen größerer Masse sind für solche Schlussfolgerungen jedoch in der Regel Zusatzinformationen oder ein Ausschluss-Verfahren notwendig, da diese häufig in mehrere Ionen zerfallen. Auch können oft funktionale Gruppen erkannt werden⁹, insbesondere, wenn das Molekül bei der Ionisierung in zwei Fragment-Ionen zerfällt.

4.2 Beispiele für die Interpretation von Massenspektren

Im Folgenden soll anhand von zwei Beispielen gezeigt werden, wie von einem Massenspektrum auf den vorliegenden Stoff geschlossen werden kann. Der Einfachheit halber handelt es sich bei den Stoffen um solche, welche bei der Ionisierung nur einfach geladene Ionen bilden.

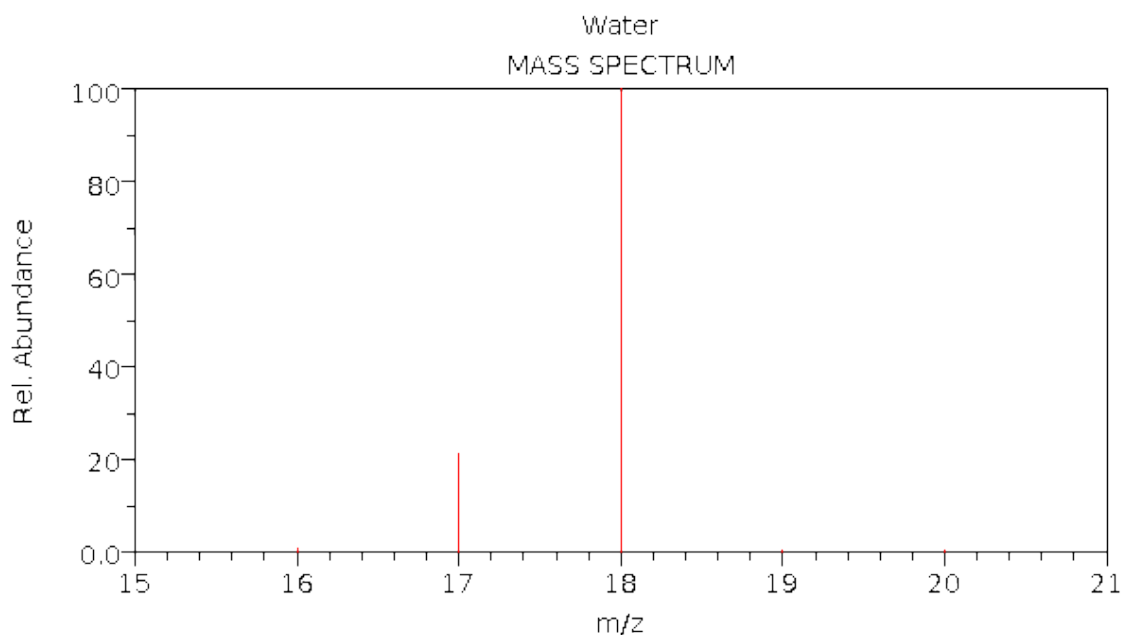
4.2.1 Massenspektrum von Wasser

Da im Massenspektrum von Wasser (siehe Abbildung 2) der höchste Wert bei 18 u vorliegt, kommen nur Elemente mit einer Atommasse bis 18 u infrage. Durch die Betrachtung der Peaks kommt man schnell darauf, dass ein Sauerstoff-Atom in der Molekülverbindung enthalten sein muss (Peak bei 16 für O^+).

Eine einleuchtende Molekülformel ist dann H_2O , was durch den Peak bei 17 u bestätigt wird, der OH^+ entspricht. Außerdem liegen H^+ (Fragment-Peak bei 1 u) vor. H_2O^+ ist der Molekül-Peak bei 18 u.

⁸ Stickstoff-Regel: Wenn das Molekül-Ion eine ungerade Masse aufweist, so enthält es eine ungerade Anzahl an Stickstoff-Atomen. Nach [17], S. 39

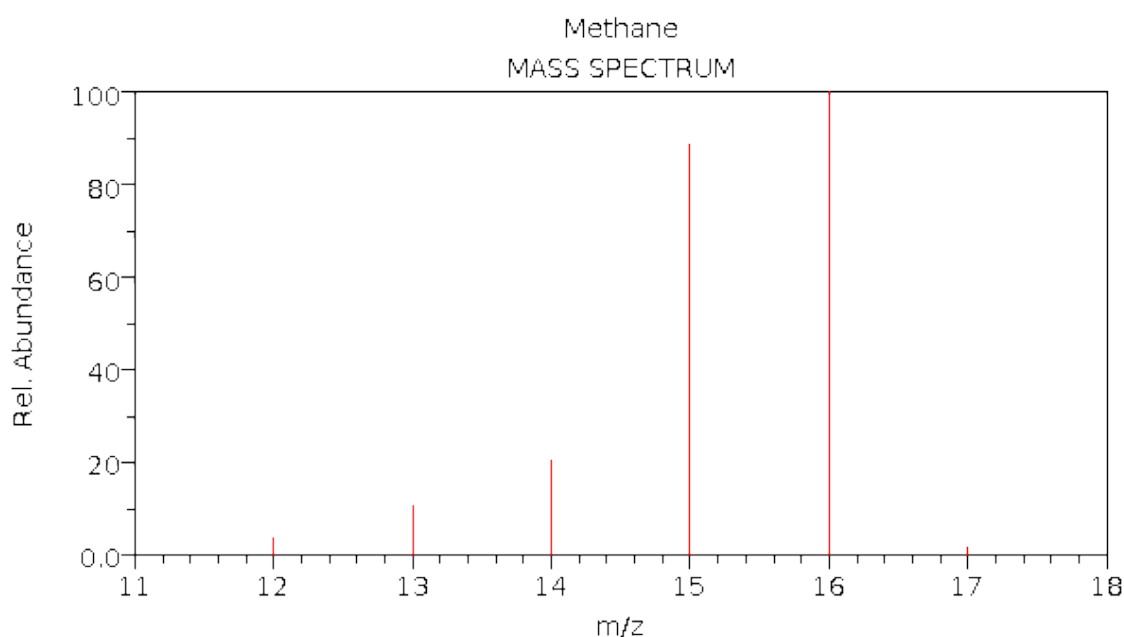
⁹ vgl. *Herleitung der Konstitution aus dem Massenspektrum*. In: [8], S. 541f. und *Häufige Fragment-Ionen*. Tabelle im Anhang von [17], S. 361-364



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

Abbildung 2: Massenspektrum von Wasser¹⁰

4.2.2 Massenspektrum von Methan



NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry>)

Abbildung 3: Massenspektrum von Methan (CH_4)¹¹

Da sich die Peaks im Massenspektrum von Methan (siehe Abbildung 3) im Bereich zwischen 12 u und einschließlich 16 u nur um 1 u unterscheiden, müssen vier Wasserstoff-Atome in der Verbindung enthalten sein. Der kleine Peak bei 17 u wird hier erst einmal

¹⁰ Massenspektrum von Wasser nach [6]

¹¹ Massenspektrum von Methan nach [5]

nicht berücksichtigt, weil er rechts vom Basis-Peak bei 16 u liegt. Mit der Einschränkung, dass alle Ionen einfach geladen sind, muss hier ein Sonderfall mit Isotopen verschiedener Massenzahlen vorliegen.

Bei vier Wasserstoff-Atomen verbleibt noch eine Masse von 12 u für den Rest des Moleküls, was einem Kohlenstoff-Atom entspricht. Als Molekülformel ergibt sich CH_4 . Im Massenspektrum von Methan liegen also folgende Ionen vor: C^+ , CH^+ , CH_2^+ , CH_3^+ (Fragment-Peaks) und CH_4^+ (Molekül-Peak). Der Peak bei 17 u ergibt sich durch Kohlenstoff-Atome mit der Massenzahl 13: Es liegen hier $^{13}\text{CH}_4^+$ vor.

4.3 Schlussbetrachtung

Die Massenspektrometrie ist ein immer weiter verbessertes und interessantes Verfahren, das mittlerweile durch die vielen Techniken für die Ionisierung und für den Massenanalysator sehr komplex geworden ist. Für verschiedene Unterdisziplinen der Analytik (zum Beispiel die Proteanalytik) gibt es unterschiedlich optimierte Anwendungen der Massenspektrometrie, die den Umfang dieser Facharbeit weit übersteigen würden. In der analytischen Chemie besitzt das Verfahren einen hohen Stellenwert für die Elementanalyse.

5 Literaturverzeichnis

Für die Erstellung der Facharbeit wurden die im Folgenden verzeichneten Quellen aus dem Internet und wissenschaftlichen Publikationen gesichtet. Auch nicht in die Abfassung einbezogene Quellen sind aufgeführt. Die Fachbücher sind in der Stadtbibliothek bzw. Universitätsbibliothek Paderborn erhältlich.

5.1 Internetquellen

- [1] DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR MASSENSPEKTROMETRIE: *Das ist Massenspektrometrie*
<http://www.dgms-online.de/dgms1/Wissen/Das-ist-MS/> (11.05.2011)
- [2] FRANKE, DR. STEPHAN: *Massenspektrometrie Zusatzinfo*
http://www.chemie.uni-hamburg.de/oc/mikroanalytik/MS_Backgr1.pdf
(11.05.2011)
- [3] HEINRICH-HEINE-UNIVERSITÄT DÜSSELDORF, BIOLOGISCH-MEDIZINISCHES FORSCHUNGSZENTRUM: *Grundlagen der Massenspektrometrie*
http://www.uni-duesseldorf.de/WWW/BMFZ/mambo/index.php?option=com_content&task=view&id=28&Itemid=40 (11.05.2011)
- [4] KUBIK, PROF. DR. STEFAN: *Massenspektrometrie*
http://www.chemie.uni-kl.de/forschung/oc/kubik/index.php?lan=de&act=0lecoc3&sub_act=mas&sub_sub_act=gru (11.05.2011)
- [5] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY, MATERIAL MEASUREMENT LABORATORY: *Methane*
<http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C74828&Mask=200> (12.06.2011)
- [6] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY, MATERIAL MEASUREMENT LABORATORY: *Water*
<http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7732185&Mask=200> (12.06.2011)

5.2 Sekundärliteratur

- [7] ARNOLD, DR. KARIN U. A.: *Organische Chemie* (aus der Reihe *Chemie Oberstufe*)
1. Auflage, Cornelsen Verlag, Berlin 2010; ISBN 978-3-06-011177-0
S. 41 *Massenspektrometrie*

- [8] BREITMAIER, EBERHARD und JUNG, GÜNTHER: *Organische Chemie. Grundlagen, Stoffklassen, Reaktionen, Konzepte, Molekülstruktur*
4. Auflage, Georg Thieme Verlag, Stuttgart 2001; ISBN 978-3-13541504-8
S. 531-545: Kapitel 28.7 *Massenspektrometrie*
- [9] BUDZIKIEWICZ, PROF. DR. HERBERT und SCHÄFER, DR. MATHIAS: *Massenspektrometrie. Eine Einführung*
5. Auflage, Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2005; ISBN 978-3-527-30822-4
- [10] CHARALAMBOUS, JOHN und MAJER, J. R.: *Instrumentation and Presentation of Mass Spectra*
In: CHARALAMBOUS, JOHN (Hrsg.): *Mass Spectrometry of Metal Compounds*
Butterworth & Co., London/Boston 1975; ISBN 0-408-70678-3
- [11] CHARETTE, JEAN und DE HOFFMANN, EDMOND und STROOBANT, VINCENT: *Mass Spectrometry. Principles and Applications*
John Wiley & Sons, Chichester u. a. 1996; ISBN 0-471-96696-7
- [12] CHRISTEN, PROF. DR. DR. H. C. HANS RUDOLF und VÖGTLE, PROF. DR. FRITZ: *Grundlagen der organischen Chemie*
2. Auflage, Otto Salle Verlag, Frankfurt am Main 1998; ISBN 978-3-79355399-1
S. 278-285: Kapitel 5.4 *Massenspektrometrie*
- [13] CRAINE, LESLIE E., HART, DAVID J. und HART, HAROLD: *Organische Chemie*
2. Auflage, Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2002; ISBN 978-3-52730379-3
S. 455-460: Kapitel 12.6 *Massenspektrometrie*
- [14] EHRENBERGER, FRIEDRICH: *Quantitative organische Elementanalyse. Analysemethoden zur Bestimmung der Elemente im Makro-, Mikro- und Spurenbereich in organischer und anorganischer Matrix*
VCH, Weinheim 1991; ISBN 3-527-28056-1
S. 77ff.: *Das Massenspektrometer als Detektor* und S. 221ff.: *Multi-Elementbestimmung mit einem Klein-Massenspektrometer als Detektor*
- [15] FALES, HENRY M.: *Newer Ionization Techniques*
In: MILNE, GEORGE W. A. (Hrsg.): *Mass Spectrometry: Techniques and Applications*; S. 179-215
John Wiley & Sons, New York 1971; ISBN 0-88275-789-X

- [16] FRANCKE, PROF. DR. DR. H. C. WITTKO und WALTER, PROF. EM. DR. WOLFGANG: *Lehrbuch der Organischen Chemie*
24. Auflage, S. Hirzel Verlag, Stuttgart 2004; ISBN 978-3-777-61221-8
S. 34f.: Kapitel 1.8.1
- [17] McLAFFERTY, FRED W. und TUREČEK, FRANTIŠEK: *Interpretation von Massenspektren*
4. Auflage, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg/Berlin 1995; ISBN 3-86025-148-1
- [18] OTTO, MATTHIAS: *Analytische Chemie*
3. Auflage, Wiley-VCH Verlag, Weinheim 2006; ISBN 978-3-527-31416-4
S. 324ff.: Kapitel 3.5 *Massenspektrometrie – die Bruchstücke eines Moleküls werden identifiziert*
- [19] SCHRÖDER, DR. ERNST: *Massenspektrometrie. Begriffe und Definitionen*
Springer, Berlin/Heidelberg 1991; ISBN 3-540-53329-X

6 Erklärung über die Selbstständigkeit der Abfassung

Ich erkläre, dass ich diese Facharbeit ohne fremde Hilfe angefertigt habe und nur die im Literaturverzeichnis angeführten Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Paderborn, den 15. Juni 2011

(Patrick Robrecht)