

ChemABS Informationen zur Massenspektrometrie

1. Ionisierungs-Methode:

EI (Elektronenstoß Ionisation): für unpolare flüchtige Proben.

Ergibt M^+ , möglich sind aber auch $[M+H]^+$ und $[M-H]^+$ oder überhaupt kein sichtbarer Molekül- oder Quasimolekül-Peak. In diesem Fall sind andere Methoden wie CI oder ESI auszuprobieren.

CI (Chemische Ionisation): für unpolare flüchtige Proben ohne Molekülpeak.

Ergibt $[M+H]^+$ (CI ist im Moment leider nicht durchführbar, bitte stattdessen ESI abgeben).

ESI (Elektrospray): für polare schwer flüchtige oder zersetzliche Proben.

Ergibt $[M+H]^+$ und $[M-H]^-$, üblich sind auch $[M+Na]^+$, $[M+NH_4]^+$, $[M+Cl]^-$, $[M+Formiat]^-$, sowie Cluster Ionen $[2M+H]^+$, $[2M+Na]^+$, $[2M-H]^-$ und mehrfach geladene Ionen $[M+xH]^{x+}$, $[M-xH]^{x-}$.

MALDI (Matrix Assisted Laser Desorption Ionisation): für polare schwer flüchtige Proben.

Ergibt $[M+H]^+$ und $[M-H]^-$, üblich ist aber auch $[M+Na]^+$ (HRAM ist nicht möglich bei MALDI).

2. Einlass-System:

Direkt: Es werden nur Ionisierungsart spezifische direkte Methoden ohne Chromatographie benutzt:

DEP (Direktverdampfungsprobe): bei EI und CI für mäßig flüchtige und/oder thermolabile Proben.

DIP (Direktinsertionsprobe): bei EI und CI für leicht flüchtige oder Schutzgas benötigende Proben.

TA (Targetanalyse): bei MALDI.

FIA (Fließ-Injektions Analyse): bei ESI.

GC (Gaschromatographie): bei EI und CI für flüchtige und thermostabile Proben und Gemische.

3. Messparameter:

Niederauflösung (LR): Routinemassenspektrum mit nomineller Massengenauigkeit.

Hochauflösung (HR): Massenfeinbestimmung des gesamten Massenspektrum (HRAM).

Ionenpolarität (Positiv/Negativ): Positiv bei EI und CI, Positiv und Negativ bei ESI und MALDI.

4. Lösungsmittel:

Substanz möglichst ungelöst abgeben. DMSO und DMF sind ganz allgemein nicht geeignet!

Nicht flüchtige Puffer und Salze bitte vermeiden, weil sie die Instrumente verunreinigen und die Probensignale verschlechtern. Statt TFA zum Ansäuern immer Ameisensäure verwenden!