Arbeitsgemeinschaft Massenspektrometrie

Diskussionstagung am 29.9. - 1.10.1975 auf Schloß Reisensburg (Günzburg/Donau)

PROGRAMM

Montag, 29. September

ab 15,30 Uhr Registrierung und Hotelzuweisung im Tagungsbüro

18.30 Uhr Gemeinsames Abendessen im Schloß

20.00 Uhr Hauptvortrag

J. Müller, TH München:

Anwendung der Massenspektrometrie zur Konstitutionsermittlung

metallorganischer und anorganischer Verbindungen

anschl. Diskussion des Hauptvortrages

Dienstag, 30. September

9.00 Uhr Hauptvortrag

J.T. Clerc, ETH Zürich:

Bibliotheksuche und Pattern Recognition -Theoretische Gundlagen, Möglichkeiten, Grenzen

10.00 Uhr

10.30 Uhr Hauptvortrag

B. Willholm, Firmenich S.A. (Genf): Kritirche Betrachtungen zur automatischen Bibliotheksuche

aus der Sicht des Anwenders

11.30 Uhr Diskussion beider Hauptvorträge

12.30 Uhr Mittagessen

Kurzvorträge:

14.00 Uhr

H. Knöppel, H. Schauenburg, Euratom-CCR (Ispra): Bibliotheksuche nach CLERC kombiniert mit CROSSBOW Strukturdarstellung

und -zerlegung als Ausgabe eines GC-MS-Computer-Sytems für die

Analyse organischer Mikroschadstoffe

14.25 Uhr E. Ziegler, K.Boll, D.Henneberg, MPI Mülheim:

Aufbau einer Datenbank mit Massenspektren und Molekülstrukturen

14.50 Uhr K. Varmuza, H. Rotter, TH Wien:

Beurteilungskriterien und Anwendungsmöglichkeiten für

Klassifikatoren zur Interpretation von Massenspektren

15.15 Uhr D. Henneberg, B. Weimann, MPI Mülheim

Die Automatisierung der Auswertung von Spektrenserien

15.40 Uhr W. Riepe, H. Küper, ISAS Dortmund:

Automatische qualitative Gemischanalyse durch fraktionierte Verdampfung,

Korrelationsanalyse der Spektren und Ermittlung von Spektren der

Einzelkomponenten

16.05 Uhr Pause

16.30 Uhr A. Falick, ETHL Lausanne:

Unimolecular Decomposition Pathways of Heptene Ions

16.55 Uhr F. Borchers, K. Levsen, Univ. Bonn:

Feldionenkinetische Differenzierung von Wasserstoffscramblingprozessen

und unspezifischen Wasserstoffumlagerungen

17,20 Uhr	HJ. Veith, TH Darmstadt: FD-MS von quartären Stickstoffverbindungen
17.45 Uhr	HM. Gierlich, H.J. Heinen, H.D. Beckey, Univ. Bonn: Anwendungsmöglichkeiten von Quadrupol-Massenfiltern in der Felddesorptions-/Feldionisations-Massenspektrometrie
18.45 Uhr	Abendessen
Mittwoch, 1. Oktober	
9.00 Uhr	Houptvortrag
	W.J. Richter, Ciba-Geigy (Basel): Chemische Derivatisierung, ein nach wie vor unentbehrliches Hilfsmittel der Massenspektrometrie
10.30 Uhr	Pause
	Kurzvorträge
11.00 Uhr	W.A. König, Univ. Hamburg: Strukturaufklärung eines neuen Peptid-Nucleosid-Antibioticums
11.25 Uhr	H. Schwarz, TU Berlin: Ammoniak-Eliminierung aus ω -Phenylalkylaminen
11.50 Uhr	D. Schumann, TU Berlin: Über Wasserstoffwanderungen in cyclischen Aldimin- Kondensationsprodukten
12.15 Uhr	JL. Derocque, Univ. Saarbrücken: Beweis für die "Through-Bond" Stabilisierung von Arylkationen durch Elektronendonatoren in meta-Stellun;
13.00 Uhr	Abschließendes gemeinsames Mittagessen

Hinweis für die Tagungsteilnehmer:

 $\frac{\text{Anmoldungen}}{\text{Teilnehmerzahl bereits erreicht ist.}} \text{ $k\"{o}$nnen nicht mehr entgegengenommen werden, da die maximal zulässige}$

Hotelreservierungen wurden - falls auf der Anmeldung nicht anders vermerkt - für die Nächte 29./30.9. und 30.9./1.10. vorgenommen.

Bohnreisende werden gebeten, vom Bahnhof Günzburg zum Schloß gemeinsam Taxis zu benutzen; wegen der geringen Zahl entsprechender Vormerkungen kann ein Bus nicht bereitgestellt werden.

<u>Kurzvorträge</u>: Für den Vortrag stehen 15 Minuten, zur anschließenden Diskussion 10 Minuten zur Verfügung; bitte diese Zeiten unbedingt einhalten ! Dias der Größe 5x5 cm können projiziert werden.

H.-W. Fehlhaber

- Hoechst AG -