

Während der Tagung findet ein kostenloser Bustransfer von den Hotels zur KFA und zurück statt.

Abfahrt der Busse:

Aquis Grana 7.45 Uhr;

Frankenberg 7.55 Uhr;

Ibis 7.55 Uhr.

Rückfahrt nach Aachen nach Programmende.

## Programm

(für Diskussionsvorträge gilt:

15 Min. Vortrag, 10 Min. Diskussion)

### Mittwoch, 17.05.1989

- ab 12.00 **Registrierung** der Teilnehmer im Tagungsbüro
- 10.30 **Begrüßung** durch den Vorstand der KFA Jülich und den Vorsitzenden der AGMS
- 13.45 **Hauptvortrag mit Diskussion:**  
*D. Hunt*, Charlottesville/USA:
- 10.55 **Protein sequencing – new methods in instrumentation**
- 15.05 *B. Hagenhoff*, A. Benninghoven, C. Wünsche und H. Musche, Universität Münster und Bayer AG, Wuppertal:  
**TOF-SIMS und FABMS modifizierter Peptide – ein Vergleich**
- 11 15.30 *B. I. Shushan*, R. F. Bonner, T. R. Covey und B. A. Thomson, SCIEX, Thornhill/Canada:  
**Advanced liquid introduction techniques for tandem mass spectrometry using atmospheric pressure ionisation**
- 12 15.55 Kaffeepause

- 16.15 *F. W. Röllgen*, Universität Bonn:  
**Mechanismus der Thermospray-  
ionisierung**
- 16.40 *M. P. Irion* und *A. Selinger*, TH Darmstadt:  
**Sekundärionen-Fouriertransform-  
Massenspektrometrie zum Studium der  
Chemie zerstäubter Metall-Clusterionen**
- 17.05 *E. H. Hebeda*, Amsterdam/Niederlande:  
**Modifizierte Nier-Quelle mit geringer  
Massendiskriminierung**
- 17.30 Ende des wissenschaftlichen  
Tagesprogramms  
Bus nach Aachen
- 19.00 Orgelkonzert im Aachener Dom

Mittwoch, 17.05.1989

- 12.55 Kaffeepause
- 13.30 *B. A. Thomson, SOLEX, Thornhill, Canada*  
*E. I. Sharkey, R. F. Bonner, T. R. Covey und*  
*Advanced liquid introduction technology*  
*for tandem mass spectrometry using*  
*atmospheric pressure ionization*
- 13.45 *Paolo* - ein Vergleich  
*TOP-GIMS und FAB/MS*  
*modifizierter*  
*Boyer AG Wuppertal*  
*und H. Muscher, Universität Münster*  
*und B. Hagenhoff, A. Benningrover, C. Wülfels*
- 14.00 *Instrumentation*  
*protein sequencing - new methods in*  
*G. Hunt, Chatham, USA*  
*Hauptvortrag mit Diskussion:*  
*Vorleser: Dr. AGMS*  
*durch den Vorstand der IFA Jülich und den*  
*Begrüßung*
- 15.00 Tegetatung der Teilnehmer im  
Aachener Dom

Donnerstag, 18.05.1989

- 8.30 *J. Gasteiger*, *W. Hanebeck*, *K. Rafeiner*,  
*P. Röse* und *K. P. Schulz*, TU München:  
**Automatische Erzeugung eines Massen-  
spektrums aus der Struktur einer  
Verbindung**
- 8.55 *W. Angenendt*, *D. Henneberg*, *B. Weimann*  
und *U. Zaffen*, MPI f. Kohlenforschung,  
Mülheim:  
**Fragmentcodes für die Suche nach Partial-  
strukturen und die statistische Bewertung  
von Hitlisten**
- 9.20 *K. Varmuza*, Universität Wien/Österreich  
**PCA am PC: ein einfaches chemo-  
metrisches Werkzeug zur Untersuchung  
von Massenspektren/Struktur-  
Beziehungen**
- 9.45 *D. Henneberg* und *B. Weimann*, MPI f.  
Kohlenforschung, Mülheim:  
**Die neue Wiley-Bibliothek**
- 10.10 Kaffeepause
- 10.30 *H. J. Förster*, *E. M. Ecker* und *H. Peil*,  
Boehringer GmbH, Ingelheim:  
**Zur Problematik der Nachweis- und  
Bestimmungsgrenzen bei quantitativen  
GCMS-Analysen mit Hilfe der Isotopen-  
verdünnungstechnik**
- 10.55 *K. Levsen*, *H. J. Winkler* und *J. Feltes*,  
Fraunhofer-Institut für Toxikologie, Hannover:  
**Organische Schadstoffe im Regenwasser**
- 11.20 *H. Schweer*, *G. Mackert* und *H. J. Seyberth*,  
Universität Heidelberg:  
**Bestimmung von Prostandoiden in  
biologischem Material mittels GC/MS/MS**
- 11.45 **Hauptvortrag mit Diskussion**  
*F. Oesch*, Universität Mainz:  
**Chemische Kanzerogenese - enzymatische  
Kontrolle kanzerogener und mutagener  
Metabolite**
- 12.50 Mittagspause

14.15 **Hauptvortrag mit Diskussion**  
G. Tölg, ISAS, Dortmund:  
**Motivation und Möglichkeiten für eine noch leistungsstärkere Elementanalytik**

15.20 K. P. Jochum, MPI f. Chemie, Mainz:  
**Neue Entwicklungen in der Spurenanalyse mit der Funken- und Lasermassenspektrometrie**

15.45 J. Rullkötter, J. S. Sinninghe Damsté, T. M. Peakman, M. Landgraf und U. Disko, KFA Jülich und Delft University/Niederlande:  
**Nachweis und Bedeutung organischer Schwefelverbindungen in Sedimenten und Hohölen**

16.10 Kaffeepause und Posterdiskussion

01.45 D. Hennberg und B. Weismann, MPI f. Kohlenforschung, Mülheim:  
**Die neue Wiley-Bibliothek**

01.50 Kaffeepause

03.00 K. J. Rötter, E. M. Ecker und H. Pell, Börsinger GmbH, Ingelheim:  
**Zur Problematik der Nachweis- und Bestimmungsgrenzen bei quantitativen GC/MS-Analysen mit Hilfe der isotopenverdünnungstechnik**

03.25 K. Levsen, H. J. Winkler und J. Feltes, Fraunhofer-Institut für Toxikologie, Hannover:  
**Organische Schadstoffe im Regenwasser**

03.50 H. Schwarc, G. Meckel und H. J. Seyberth, Universität Heidelberg:  
**Bestimmung von Frostbindeln in biologischen Material mittels GC/MS**

04.15 Hauptvortrag mit Diskussion

04.30 F. Oesch, Universität Mainz:  
**Chemische Kinetik - enzymatische Kontrolle karcinogener und mutagener Metabolite**

04.50 Kaffeepause

05.15 Kaffeepause

05.30 Kaffeepause

05.50 Kaffeepause

06.10 Kaffeepause

06.30 Kaffeepause

06.50 Kaffeepause

07.10 Kaffeepause

07.30 Kaffeepause

07.50 Kaffeepause

08.10 Kaffeepause

08.30 Kaffeepause

08.50 Kaffeepause

09.10 Kaffeepause

09.30 Kaffeepause

09.50 Kaffeepause

10.10 Kaffeepause

10.30 Kaffeepause

10.50 Kaffeepause

11.10 Kaffeepause

11.30 Kaffeepause

11.50 Kaffeepause

12.10 Kaffeepause

12.30 Kaffeepause

## Posterbeiträge

P1 U. Bahr, A. Overberg, K. Dreisewert und F. Hillenkamp, Universität Münster:

**Nachionisation von UV-laserdesorbierten organischen Molekülen**

P2 M. Bamberg und K. P. Wanczek, Universität Bremen:

**Untersuchung der Eigenschaften einer zylindrischen ICR-Zelle mit abgeschirmten Trapping-Platten**

P3 P. S. Bechthold, M. Mihelcic, K. Wingerath, KFA Jülich:

**Computersimulation eines gitterfreien Flugzeitmassenspektrometers**

P4 H. Beske, H. Holzbrecher, W. J. Quadackers und C. Wasserfuhr, KFA Jülich:

**SIMS-Untersuchungen zu den Bildungsmechanismen von Chrom- und Aluminiumoxiddeckschichten**

P5 W. A. Brand, M. Rautenschlein und K. Habfast, Finnigan MAT, Bremen:

**GC/C/MS - Ein neues Verfahren zur GC-Quantifizierung und zur <sup>13</sup>C-Isotopenbestimmung**

P6 G. Czekay, T. Drewello, K. Eller, W. Zummack und H. Schwarz, TU Berlin:

**Unimolekulare Zerfälle von Fe<sup>+</sup>-Komplexen am Beispiel verzweigter Nitrite**

P7 J. Feltes, J. Schilhabel und K. Levsen, Fraunhofer-Institut für Toxikologie, Hannover:

**Massenspektrometrische Bestimmung von Nitrophenolen in Regenwasser**

P8 W. Günther, Hewlett-Packard, Waldbronn:

**Particle beam LC/MS: EI- und CI-Spektren einiger Pestizide nach on-line HPLC-Trennung**

P9 G. Jung, R. Pesch, K. Rost und K. H. Tietje, Finnigan MAT, Bremen:

**Ein vielseitiges Simultandektorsystem**



- P10** S. Karraß, K. Eller und H. Schwarz, TU Berlin:  
**Revision und Modifikation des traditionellen Mechanismus der Aktivierung von CH- und CC-Bindungen durch ligandenfreie Übergangsmetallionen**
- P11** F. Kuhlmann und W. Schäfer, MPI für Biochemie, Martinsried:  
**Anwendung der Massenspektrometrie (FAB-MS, FAB-MS/MS) in Verbindung mit RP-HPLC und NMR-Spektroskopie zum Verständnis des Mechanismus der selektiven Tryptophanspaltung von Peptiden und Proteinen mit N-Chlorsuccinimid**
- P12** W. Lenhart und M. Linscheid, ISAS Dortmund:  
**Analytik von modifizierten Nucleotiden mit GC- und LC-MS**
- P13** S. Lenhardt, T. Knepper, K. L. Platt, A. Seidel, F. Oesch und M. Przybylski, Universität Konstanz und Universität Mainz:  
**Glutathionylkonjugate reaktiver elektrophiler Xenobiotika-Metaboliten: Strukturidentifizierung durch FAB-Massenspektrometrie und enzymatische Umsetzungen**
- P14** R. Neudert und B. Bremser, BASF Ludwigshafen:  
**Teilstrukturen aus korrelierten spektralen Eigenschaften**
- P15** P. F. Nielsen, D. Suckau, K. Schneider, A. Schäfer, C. Gauss und M. Przybylski, Universität Konstanz:  
**Analytische Entwicklung und Anwendungen von Peptide-Mapping-Methoden in der Proteinchemie mit Hilfe der Plasma-desorptions-Massenspektrometrie**
- P16** J. Opitz und G. v. Bünau, Universität Siegen:  
**Photoionisations-Massenspektrometrie: Laserinduzierte chemische Ionisation**
- P17** R. Pesch, G. Jung und G. Dielmann, Finnigan MAT, Bremen:  
**Ein Massenspektrometer für die biochemische Applikation**
- P18** R. Pesch, E. Schröder und G. Dielmann, Finnigan MAT, Bremen:  
**Optimierung des continuous-flow-FAB-Interface**
- P19** T. Prüsse und H. Schwarz, TU Berlin:  
**Übergangsmetallkatalyse in der Gasphase: Ferngesteuerte Funktionalisierung von CH- und CC-Bindungen in Imin/Fe<sup>+</sup>-Komplexen**
- P20** P. A. Ryan, A. D. Hoffman, M. Kearns und C. J. Wakefield, Kratos Analytical, Manchester/England:  
**The design and performance of a new mass spectrometer for fully automated analysis**
- P21** K. Schneider, D. Suckau, R. Gerardi, M. Messmer, D. Bitter-Suermann und M. Przybylski, Universität Konstanz und Medizin. Hochschule Hannover:  
**Strukturidentifizierung des Anaphylatoxin-Polypeptids C3a aus dem C3-Komplementprotein des Meerschweinchenserums durch FAB- und PD-Massenspektrometrie und Peptide Mapping**
- P22** D. Schröder, T. Prüsse und H. Schwarz, TU Berlin:  
**Doppelt ferngesteuerte Funktionalisierung von CH/CC-Bindungen**
- P23** W. H. Schröder, KFA Jülich:  
**Markierung mit stabilen Isotopen für Mikrosondenanalyse biologischer Proben**
- P24** H. Schweer und S. Fischer, Universität Heidelberg und Universität München:  
**Fragmentierungsreaktionen von Pentafluorobenzoyloxim-Derivaten der Prostanoid 6-Keto-PGF<sub>1α</sub>, PGE<sub>2</sub>, PGE<sub>3</sub>, Rioprostil und 1-Carboxy-Rioprostil**
- P25** R. Seidl und W. Schäfer, MPI für Biochemie, Martinsried:  
**Structure determination of dipeptides by FAB and tandem mass spectrometry**

P26 T. Sürig und H.-F. Grützmaier, Universität Bielefeld:  
**Regiospezifität der Deprotonierung diphatischer Ketone und Sulfone bei NCI**

P27 G. Thielking und H.-F. Grützmaier, Universität Bielefeld:  
**Zur Fragmentierung von protonierten Biphenyl- und Terphenylderivaten über intermediäre Ion/Neutral-Komplexe**

P28 H. J. Veith und D. Heimann, TH Darmstadt:  
**Massenspektrometrische Charakterisierung eines Brutpheromons der Honigbiene Apis Mellifera**

18.30 Ende des wissenschaftlichen Tagesprogrammes

Bus nach Aachen

20.00 Dinner im Restaurant Gala in Aachen

## Freitag, 19.05.1989

8.30 **Verleihung des Mattauch-Herzog-Förderpreises für Massenspektrometrie**  
Vorstellung der Preisträger durch Prof. H. Budzikiewicz (Universität Köln)  
– anschließend Vorträge der Preisträger

10.15 Kaffeepause

10.35 K. Eller und H. Schwarz, TU Berlin:  
**Gasphasenchemie nackter Übergangsmetallkationen im Vergleich**

11.00 D. Thölmann und H.-F. Grützmaier, Universität Bielefeld:  
**Ion-Molekül-Reaktionen isomerer Dichlorbenzole mit Ammoniak**

11.25 H. Keck, H. Renneberg, J. K. Terlouw und H. C. Visser, Universität Düsseldorf:  
**NRMS in der Phosphorchemie – Erzeugung reaktiver phosphor- und schwefelhaltiger Species**

11.50 D. Kuck, Universität Bielefeld:  
**Die wandernde Phthaloylgruppe: Massenspektrometrische Fragmentierung von 2,2-Dialkyl-1,3-indandionen**

12.20 M. Deinzer, Oregon State University, Corvallis/USA:  
**Recent studies on electron capture negative-chemical ionization mass spectrometry**

13.00 Ende der AGMS-Tagung

Wir danken den folgenden Firmen für die finanzielle Unterstützung der Diskussionstagung:

Bruker-Franzen Analytik GmbH  
Finnigan MAT GmbH  
GSG Meß- und Analysengeräte GmbH  
Hewlett-Packard GmbH  
Kratos GmbH  
MS Wil GmbH  
Spectrospin AG  
VG Instruments GmbH