

**23. DISKUSSIONSTAGUNG DER ARBEITSGEMEINSCHAFT
MASSENSPEKTROMETRIE**

Konstanz, 5.-8. Juni 1990

P R O G R A M M

(für Diskussionsvorträge gilt: 15 Min. Vortrag, 10 Min. Diskussion)

Dienstag, 05.06.1990

- ab 10.00 **Registrierung** der Teilnehmer im Tagungsbüro
- 13.45 **Begrüßung**
durch den Rektor der Universität Konstanz,
Herrn Prof. Dr. Horst Sund
und den Vorsitzenden der AGMS
- 14.00 V1 **Hauptvortrag mit Diskussion**
J.M. Hayes, Indiana University,
Bloomington, USA:
Isotope Ratio Monitoring GCMS, Techniques
and Applications
- 15.05 V2 **R. Guilluy, E.J. Jumeau, J.L. Brazier, M.**
Desage, H. Chandron and J. Girard,
Universität Claude Bernard, Lyon,
Frankreich:
First Study of Geographic Origin of Heroin
and Related Drugs by Gas Chromatography-
Combustion-Isotope Ratio Mass Spectrometry
(GCIRMS)
- 15.30 V3 **R. Medina, K. Kempe, H.L. Schmidt und J.**
Jumeau, Technische Universität München und
VG Isotech, Middlewich, England:
On-Line Measurements of Hydrogen, Carbon,
Nitrogen and Oxygen Isotope Ratios in the
Range of Natural Abundance by an GC-IRMS
Interface
-

- 15.55 V4 **E.J. Jumeau, C.S. Fenwick und S. Craig, VG**
Isotech, Middlewich, England:
A Review of New Applications by the
Technique of Gas Chromatography Isotope
Ratio Mass Spectrometry
- 16.20 *Kaffeepause*
- 16.50 V5 **L. Koch, EG-Kommission, Europäisches Institut für**
Transurane, Karlsruhe:
Verfahren zur schnellen automatischen
Isotopenanalyse von Uran und Plutonium
- 17.15 V6 **H. Bacer, R. Wieler und P. Signer, ETH**
Zürich:
Extraktion von Edelgasen aus Festkörpern
mit "Closed System Stepwise Etching"
- 17.40 V7 **A. Selinger, P. Schnabel und M.P. Irion, TH**
Darmstadt:
FTMS-Studien der Chemie kalter Metall-
Cluster-Kationen

Mittwoch, 06.06.1990

- 8.30 V8 **Hauptvortrag mit Diskussion:**
G. Dube, Zentralinstitut für Physikal.
Chemie, Akademie der Wissenschaften,
Berlin, DDR:
Mechanismen der Ionenbildung in der FAB-
Massenspektrometrie
- 9.35 V9 **C. Wünsche, H. Musche und A. Benninghoven,**
Bayer AG Wuppertal und Universität Münster:
Analytik von pharmazeutischen Wirkstoffen
und Metaboliten mit Sekundärionen-
Massenspektrometrie
- 10.00 V10 **S. Lenhardt, K. Hägele, T. Knepper und M.**
Przybylski, Universität Konstanz:
FAB-Massenspektrometrische Identifizierung
von Konjugationsreaktionen elektrophiler
Xenobiotika mit Glutathion
-

- 10.25 *Kaffeepause*
- 10.55 V11 **V. Kováčik, Universität Bielefeld:
MIKE- und CA-massenspektrometrische
Untersuchungen von Sacchariden des Typs D-
Xylan**
- 11.20 V12 **J. Peter-Katalinic, A. Wallon, F. Vögtle
und A.L. Burlingame, Universität Bonn und
University of California, San Francisco:
Strukturstudien an Käfigverbindungen
mittels FAB-MS und LSIMS/MS**
- 11.45 V13 **W.D. Lehmann, G. Fürstenberger und T.
Jacobi, Deutsches Krebsforschungszentrum,
Heidelberg:
Quantifizierung von Lipoxygenase-
Metaboliten in Mäuseepidermis nach
Behandlung mit irritierenden und
hyperplasiogenen Tumorpromotoren**
- 12.10 V14 **N. Theobald und W. Lange, Deutsches
Hydrographisches Institut Hamburg:
Massenspektroskopische Verfahren zur
Ermittlung der Verursacher von
Gewässerverschmutzungen durch Öl**
- 12.35 *Mittagspause*
- 14.00 V15 **Hauptvortrag mit Diskussion:
K.P. Schäfer, Abteilung für
Molekularbiologie, Byk Gulden Konstanz:
Neue Entwicklungen und Perspektiven in der
Gentechnologie**
- 15.05 V16 **J. Metzger, Universität Tübingen:
Peptid- und Proteinanalytik mittels API-MS**
- 15.30 V17 **G. Dielmann und W. Wagner-Redeker, Finnigan
MAT Bremen:
Einsatz von Quadrupol-Massenspektrometern
in der Biochemie: Elektrospray-Massenspektrometrie**
-

- 15.55 V18 B.N. Green, J. von Helden und S.A. Jarvis,
VG Instruments Wiesbaden:
**Anwendungen eines neuen Massenspektrometers
in der Analyse von Protein-Gemischen**
- 16.20 *Kaffeepause*
- 16.45 V19 P.F. Nielsen, B. Landis, M. Svoboda, K.
Schneider und M. Przybylski, Universität
Konstanz:
**Reverse N-Terminal Sequence Analysis of
Polypeptides and Peptide Mixtures by
Combined Edman Degradation/Plasma
Desorption Mass Spectrometry**
- 17.10 V20 M. Karas, U. Bahr, A. Ingendoh, B. Stahl
und F. Hillenkamp, Universität Münster:
**Neue Ergebnisse der Laser-Massen-
spektrometrie von Makromolekülen - I**
- 17.35 V21 A. Overberg, U. Bahr, M. Karas und F.
Hillenkamp, Univesität Münster:
**Neue Ergebnisse der Laser-Massen-
spektrometrie von Makromolekülen - II**
- 20.00 *Konzert des Arco-Quartetts im Kapitelsaal des
Münsters*

Donnerstag, 07.06.1990

- 8.30 V22 **Hauptvortrag mit Diskussion:**
H.J. Dietze, Zentralinstitut für Isotopen-
und Strahlenforschung, Akademie der
Wissenschaften, Leipzig, DDR:
**Molekül- und Clusterionen in Funken- und
Laserplasmen und deren Bedeutung für eine
ultraempfindliche Massenspektrometrie**
- 9.35 V23 K.P. Jochum, H.M. Seufert und W.
Obermiller, Max-Planck-Institut für Chemie,
Mainz:
**Hochempfindlicher Spurenelementnachweis in
geo- und kosmochemischen Proben mit der
Funkenmassenspektrometrie**
-

- 10.00 V24 **S. Becker** und H.J. Dietze, Akademie der Wissenschaften, Leipzig, DDR:
Spurenanalyse an Hochtemperatursupraleitenden $YBa_2Cu_3O_x$ - und Bi-Sr-Ca-Cu-O Keramiken
- 10.25 *Kaffeepause*
- 10.55 V25 **K. Habfast** und H.J. Laue, Finnigan MAT Bremen:
Ein Thermionen-Isotopenmassenspektrometer mit sehr hoher Abundance Sensitivity: Aufbau und Ergebnisse
- 11.20 V26 **H. Knoll**, M. Paul, K.P. Wanczek und H.B. Linden, Universität Bremen und Linden Chromaspec, Bremen:
ICR-Spektren negativer Ionen von Polyperfluoralkanen
- 11.45 V27 **P.J. Frenzel**, Hüls AG, Marl:
Der Validierungscode: Eine digitale Antwort auf das nicht ausdiskutierte Thema: Wie sicher ist die Stoffzuordnung bei der routinemäßigen Strukturaufklärung?
- 12.10 V28 **A. Nikiforov**, A. Woidich, L. Jirovetz und G. Reich, Universität Wien:
Automatisierbare Teilinterpretation von kombinierten GC/MS/IR/AES-Daten
- 12.35 *Mittagspause*
- 14.00 V29 **D. Henneberg**, B. Weimann und U. Zalfen, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim:
Ordnungsprinzipien für die Hitliste einer Ähnlichkeitssuche
- 14.25 V30 **D. Henneberg**, B. Weimann und U. Zalfen, Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, Mülheim:
Ähnlichkeitssuche in Strukturbibliotheken auf der Basis von Fragmentcodes
-

Posterdiskussion**Posterbeiträge**

- P1 **B.L.M. van Baar**, Y. van den Winkel und F. Bickelhaupt, Universität Amsterdam:
The generation of silaaromatics by neutralization reionization mass spectrometry
- P2 **H-H. Büker** und H-Fr. Grützmaker, Universität Bielefeld:
Protonentransfer-Reaktionen und Protonen-Affinität "Protonenschwamm" 4,5-Bis(dimethylamino)-carbazol
- P3 **S. Karraß** und H. Schwarz, TU Berlin:
Eisen-vermittelter β -Methyltransfer bei Heptamethyldisilazan in der Gasphase
- P4 **H. Knoll** und K.P. Wanczek, Universität Bremen:
ICR-spektrometrische Untersuchung der Ionenchemie des 3-Fluoro-1,2-dioxaphospholans
- P5 **D. Kuck**, Universität Bielefeld:
Cyclisierung und Protonenaustausch in den $[M-H]^+$ -Ionen von Di- und Oligophenylalkanen
- P6 **J. Opitz** und G. von Büнау, Universität Siegen:
Photoionisation von Propinal: Dynamik des Zerfalls von angeregten Zwischenzuständen
- P7 **M. Paul** und K.P. Wanczek, Universität Bremen:
ICR-spektrometrische Untersuchung der Ionenchemie des Bis(trifluoromethyl)-phosphans
- P8 **M. Rentzea**, M. Höne, F. Kühn und H.A. Staab, Max-Planck-Institut für medizinische Forschung, Heidelberg:
"Proximitätseffekte" in den EI- und CI-MS-Spektren von 2,2',6,6'-Tetrakis(dimethylamino)biphenyl und von strukturell verwandten Biphenylen
- P9 **T. Sürig**, H.-Fr. Grützmaker und N. De Kimpe, Universität Bielefeld und Universität Gent, Belgien:
Zur EI-Massenspektrometrie von α -Halogenketiminen
- P10 **J. Sun** und H.-Fr. Grützmaker, Universität Bielefeld:
Protonenaustauschreaktion und Fragmentierungen bei Carbonyl-protonierten Benzophenonen
- P11 **D. Schröder**, K. Eller und H. Schwarz, Universität Berlin:
Metallkatalysierte Oxidation in der Gasphase
-

- P12 **J. Winkler**, TU München:
Zeitabhängigkeit des H/D-Austausches zwischen
Ionisierungsgas und Wandfeuchtigkeit bei CIMS
- P13 **D. Wittneben** und H.-F. Grützmaier, Universität Bielefeld:
Zur Reaktivität des B-distonischen Ions ${}^+CH_2-O-CH_2-CH_2$ bei
bimolekularen Prozessen
- P14 **N. Bertram** und G.E. von Unruh, Medizinische
Universitätsklinik Bonn:
Baclofen-2,4-di- ${}^{13}C$, Synthese und Analytik
- P15 **K. Eckart**, M.M. Brudny, K.-D. Klöppel, M. Weirauch und J.
Spiess, Max-Planck-Institut für experimentelle Medizin,
Göttingen:
Strategien der Peptidsynthese: Die Rolle der Massenspektrometrie
- P16 **W. Simon**, S. Lenhardt, M. Przybylski, W. Pfeleiderer und H.H.
Inhoffen, Universität Konstanz:
Strukturuntersuchungen von Metall-Corrinen durch FAB- und
Plasmadesorptions-Massenspektrometrie
- P17 **D. Suckau**, J. Köhl, G. Karwath, K. Schneider, D. Bitter-Suermann
und M. Przybylski, Universität Konstanz und Medizinische
Hochschule Hannover:
Molekulare Identifizierung von Epitopstrukturen durch
massenspektrometrische Peptide-Mapping-Analyse von
immobilisierten Antigen-Antikörperkomplexen
- P18 **J. Moncur**, C. Moore, D. Jones, B. Wright und C. Wakefield, Kratos
Analytical, Manchester, England:
Dioxin analysis of smokestack samples by hybrid GC-MS-MS.
- P19 **C. Maier**, W. Weinmann, P.F. Nielsen, J. Maaßen, E. Sturm, K.
Klemm, T. Voß, K.P. Schäfer und M. Przybylski, Universität
Konstanz und Byk Gulden Pharmazeutika, Konstanz:
Primärstrukturanalyse von gentechnischen Proteinen des
Lungensurfactant-Systems mit Hilfe der ${}^{252}Cf$ -Plasmadesorptions-
Massenspektrometrie
- P20 **M. Mák**, J. Tamas, S. Maho, Z. Tuba und M. Przybylski, Hungarian
Academy of Sciences, Budapest und Universität Konstanz:
Fast Atom Bombardment and Plasma Desorption Mass Spectrometry of
Quarternary Salts of Some Aminoandrostanes
- P21 **E. Junker**, K.P. Wirth und F.W. Röllgen, Universität Bonn:
Änderung der Ionisierungsbedingungen während der dynamischen
Zerstäubung bei der FABMS im Bereich des Phasenübergangs
flüssig/fest.
- P22 **U. Lüttgens**, **St. Thiebes**, H. Nehring, F.W. Röllgen und K.D. Cook,
Universität Bonn und University of Tennessee, Knoxville, USA:
Optische Beobachtungen des elektrohydrodynamischen Abbaus von
Flüssigkeiten in der EH- und ES-MS

- P23 **H.-W. Fehlhaber**, M. Girg und K. Schmalz, Hoechst AG, Frankfurt:
FAB-MS organischer Verbindungen in Gegenwart von Lithium-Salzen - eine einfache und universelle Methode zur zuverlässigen Molmasse-Bestimmung
- P24 **M. Dey**, C. Köster, J. Grottemeyer und E.W. Schlag, TU München:
Ein DLI-Interface gekoppelt mit der Multiphoton-Ionisations-Massenspektrometrie
- P25 **H. Götz**, **U. Grüner** und H. Wollnik, Universität Gießen:
Kopplung eines Flugzeit-Massenspektrometers als massenselektiver Detektor an einen Gaschromatographen
- P26 **J. Hau** und M. Linscheid, Institut für Spektrochemie und angewandte Spektroskopie, Dortmund:
Eine neue Ionenoptik für LC/MS Ionenquellen
- P27 **J.A. Koprio**, N. Müller und G. Rettinghaus, Balzers AG, Liechtenstein:
Kalibrierung, Stabilität und Reproduzierbarkeit in der quadrupolmassenspektrometrischen Gasanalyse
- P28 **K.H. Maurer**, **U. Rapp**; H. Schwarz und **T. Weiske**, AMD Intetra, Beckeln; und TU Berlin:
MS/MS Experimente mit einem 4-Sektor-Massenspektrometer (BEBE)
- P29 **D. Thölmann** und H.-Fr. Grützmaker, Universität Bielefeld:
Möglichkeiten einer selektiven chemischen Ionisation mit neutralen Reagenzien in der Ion-Trap-Massenspektrometrie
- P30 **M. Wiegand**, R. Gallagher, J.R. Chapman, D. Jones, M. Mann, Kratos GmbH, Manchester, England und Odense University, Dänemark:
An Electrospray Ion Source for a Double Focusing Mass Spectrometer
- P31 **R. Wolf**, O. Breas und R. Neudert, BASF AG, Ludwigshafen:
MS-EXPERT: Dokumentation von Expertenwissen zur Interpretation von Massenspektren
- P32 **R. Guilluy** und J.K. Brazier, Universität Claude Bernard, Lyon, Frankreich:
¹³C₂ Measurement by continuous flow dual inlet GC-IRMS: Potentiality of Microsampling for Dynamic Metabolic Study in Pharmacology and Biotechnology
- P33 **J. Hille**, Akademie der Wissenschaften der DDR, Berlin, DDR:
Massenspektrometrische Gasspurenanalyse mit gepackten, direkt gekoppelten Säulen
-

- P34 **A. Hollerbach**, F. Boberg, A. Garming und K.-P. Voß,
Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover:
Massenspektrometrische Untersuchungen an
Alkylschwefelheterocyclen und ihren Oxidationsprodukten
- P35 **P. Kastenmayer** und F. Couzy, Nestec Ltd Lausanne, Schweiz:
Determination of Zn absorption in human subjects with ^{70}Zn as an
extrinsic label using thermal ionisation quadrupole mass
spectrometry
- P36 **H.M. Seufert** und K.P. Jochum, Max-Planck-Institut für
Chemie, Mainz:
Multi-Element-Analyse mit der Lasermassenspektrometrie
- P37 **E. H. Hebeda** und J. Schijf, Lab. für Isotopen-Geologie,
Amsterdam:
Verwendung von CCl_2F_2 zur Unterdrückung von Oxidionen während
einer Multielementanalyse von seltenen Erdmetallen im
Thermionenmassenspektrometer

- 18.45 Abfahrt der Busse zur Schiffsanlegestelle Konzil
- 19.30 Bodensee-Schiffsfahrt auf der MS Überlingen mit
Abendessen. Es unterhält Sie die Gruppe "Golden
Four"
- 23.30 Rückkehr zur Anlegestelle Konzil
- 24.00 Rückfahrt des Busses zur Universität

Freitag 08.06.90

- 8.30 V31 **Hauptvortrag mit Diskussion:**
J.P. Maier, Universität Basel, Schweiz:
**Ionen im Weltall, auf der Erde, und ihre
spektroskopische Charakterisierung**
- 9.35 V32 **K. Eller**, L.M. Roth, W. Zummack, B.S.
Freiser und H. Schwarz, TU Berlin:
**Die Reaktionen von Fe^+ und Co^+ mit n-
Butylcyanid - Zwei scheinbar einfache, eng
verwandte Systeme?**
- 10.00 V33 **G. Thielking**, C. Hampel, A. Mersch und H.F.
Grützmacher, Universität Bielefeld:
**Protonenaffinitäten phenylsubstituierter
 α , β -ungesättigter Carbonylverbindungen -
ICR- oder MIKE-Spektrometrie?**
-

- 10.25 *Kaffeepause*
- 10.55 V34 **H. Keck, Universität Düsseldorf:
Zur McLafferty-Umlagerung beim Zerfall
phosphororganischer Verbindungen**
- 11.20 V35 **H.J. Veith und J.H. Gross, TH Darmstadt:
Verlaufen Olefin-Eliminierungen aus
Immoniumionen über Ion-Molekül Komplexe?**
- 11.45 V36 **U. Boesl, R. Weinkauf, C. Walter und C.
Weickardt, TU München:
Laser-Tandem-Massenspektrometrie mit zwei
Lasern in einem hochauflösenden Flugzeit-
Spektrometer**
- 12.10 V37 **R.H. Bateman und J. von Helden, VG
Instruments GmbH, Wiesbaden:
Konstruktionsmerkmale und erste Ergebnisse
eines Tandem-Massenspektrometers mit
Fokusebenen-detektion**
- 12.35 V38 **R. Schubert, E. Schröder und H. Münster,
Finnigan MAT Bremen:
Ein duales Detektionssystem für
Applikationen mit Probenmengen bis in den
Sub-fmol-Bereich**
- 13.00 *Ende der AGMS-Tagung*
-