DISKUSSIONSTAGUNG
DER ARBEITSGEMEINSCHAFT
MASSENSPEKTROMETRIE

Braunschweig, 9.-12. Juni 1992

PROGRAMM

(für Diskussionsvorträge
gilt 15 Min. Vortrag, 5 Min. Diskussion)

Dienstag, 9.6.1992

ab 11.00		**Registrierung der Teilnehmer im Tagungsbüro**
13.45		Begrüßung durch den Präsidenten der FAL und den Vorsitzenden der AGMS
14.00	HV	**Hauptvortrag mit Diskussion** **W. Krätschmer,** Heidelberg: **C_{60} und andere Fullerite: Neue Formen des Kohlenstoffs**
15.00	V1	**T. Drewello,** Hahn-Meitner-Institut, Berlin; A. Ding und M. Fieber, TU Berlin, Berlin: **Erzeugung und Charakterisierung (in)stabiler, dikationischer Cluster - Experimente mit Synchrotronstrahlung**

15.20	V2	**S. Schmidt,** C. Weickhardt, H. Nagel und U. Boesl, Inst. f. Phys. und Theor. Chemie, TU München, Garching: **Einsatz von Multiphotonionisation und Flugzeitmassenspektrometrie zur zeitaufgelösten Spurenanalyse in Gasgemischen**
15.40		**Kaffeepause**
16.10	V3	**K. Levsen,** Frauenhofer-Institut für Toxikologie und Aerosolforschung, Hannover: **Einsatz der Massenspektrometrie in der Innenraumluftanalytik**
16.30	V4	**J. Hille** und M. Bülow, Zentrum für Heterogene Katalyse, Berlin: **Adsorptionsphänomene - massenspektrometrisch gesehen**
16.50	V5	**D. Henneberg,** B. Weimann und U. Zalfen, MPI für Kohlenforschung, Mülheim: **Struktursuchen als Hilfsmittel zur Interpretation von Massenspektren**
18.00		**Besuch der Herzog August Bibliothek, Wolfenbüttel**

Mittwoch, 10.6.1992

9.00		**Verleihung des Mattauch-Herzog-Promotions- und -Förderpreises. Vorstellung der Preisträger durch den Vorsitzenden der Jury**
9.20		Vortrag des Promotionspreisträgers
9.40		Vortrag des Förderpreisträgers
10.00	V6	**G. Gebauer,** Lehrstuhl für Pflanzenökologie, Bayreuth: **Die Messung natürlicher $^{15}N/^{14}N$-Isotopenverhältnisse: Anwendungsbeispiele aus der Ökosystemforschung**
10.20	V7	**H.J. Laue** und P. Bach, Finnigan MAT, Bremen: **Multi-Ionenzählung für Isotopenverhältnismessungen**
10.40		**Kaffeepause**
11.10	V8	**H. Förstel** und D. Lembrich, Forschungszentrums, KFA, Jülich: **Einsatz niedrig angereicherten Wassers und der SIRA-Methode zur Beobachtung der Wasserbewegung im Boden**
11.30	V9	**M. Ende,** Staatl. Chem. Untersuchungsamt, Oldenburg: **Untersuchungen von Lebensmitteln und Humanproben auf polychlorierte Dibenzo-p-dioxine und Dibenzofurane (PCDD/F) - Aufnahme von PCDD/F mit der Nahrung**

11.50	V10	**H.-G. Hege**, KNOLL AG, Ludwigshafen: **Anwendung der Thermospray-LC/MS bei der Identifizierung von Arzneistoffmetaboliten**
12.10		**Mittagspause**
14.00	HV	**Hauptvortrag mit Diskussion J. Kluge,** Mainz: **Resonanz-Ionisations-Massenspektrometrie**
15.00	V11	**P. Caravatti,** Spectrospin AG, Fällanden, Schweiz; C. Watson, J. Wronka und F. Laukien, Bruker Instruments, Inc., Billerica, USA: **Electrospray Ionization in Combination with an External Ion Source Fourier Transform Mass Spectrometer**
15.20	V12	**M.L. Vestal,** und R.W. Nelson, Vestec Corporation, Houston, USA: **Comparison of Reflectron and Linear TOF Mass for Matrix Assisted Laser Desorption of Peptides and Proteins**
15.40		**Kaffeepause**
16.10	V13	**P. Dobberstein,** H. Münster und E. Schröder, Finnigan MAT, Bremen: **Neue Ergebnisse mit Elektrospray-Ionisation an Sektorfeldgeräten**
16.30	V14	**D. Waidelich** und E. Bayer, Inst. f. Org. Chemie, Tübingen: **Elektrospray-MS: sein Potential in der täglichen Laborpraxis**

16.50	V15	**S. Thiebes,** H. Nehring und F.W. Röllgen, Inst. f. Physikalische Chemie, Bonn: **Verlustreaktionen von Erdalkaliionen in der Thermospray-Massenspektrometrie**
20.00		**Klavierabend im Forum der FAL**

Donnerstag, 11.6.1992

9.00	HV	**Hauptvortrag mit Diskussion N.M.M. Nibbering**, Amsterdam, Holland: **Chemistry with and within the mass spectrometer**
10.00	V16	**D. Thölmann** und H.-Fr. Grützmacher, Fakultät f. Chemie, Bielefeld: **FT-ICR-Untersuchungen zu den Reaktionen von Amin-Radikalkationen mit Halogenaromaten**
10.20	V17	**S. Dohmeier** und H.-Fr. Grützmacher, Fakultät f. Chemie, Bielefeld: **Intermolekulare Benzylierungen in der Gasphase**
10.40		**Kaffeepause**
11.10	V18	**M. Hesse** und H. Benz, Org.-Chem. Institut, Zürich, Schweiz: **Massenspektrometrische Wasserabspaltung aus cyclischen Carbonylverbindungen**
11.30	V19	**C. Borchers**, D. Suckau, M. Jetschke, K. Hägele und M. Przybylski, Fakultät f. Chemie, Konstanz: **Molekulare Charakterisierung von Oberflächentopographie und Mikroumgebung in Protein-Tertiästrukturen durch selktive proteinchemische Modifizierung und massenspektrometrische Peptide-mepping-Analyse**

11.50	V20	**B. Spengler,** D. Kirsch und R. Kaufmann, Inst. f. Lasermedizin, Düsseldorf: **Unimolekularer und bimolekularer Zerfall von Peptidionen in der matrix-assistierten Laserdesorption**
12.10		**Mittagspause**
14.00	HV	**Hauptvortrag mit Diskussion H. Mann,** Odense: **Elektrospray - Prinzip, Anwendung und Vergleich mit Laserdesorption**
15.00	V21	**J. Metzger,** W. Gläßgen und H.-U. Seitz, Inst. f. Org. Chemie, Tübingen: **Anthocyan-Analytik mit Ion Spray-Massenspektrometrie und HPLC-MS**
15.20	V22	**W. Dreher,** BASF, Limburgerhof: **Strukturaufklärung von Metaboliten im Pflanzenschutz durch Ion Spray-HPLC/MS/MS**
15.40		**Kaffeepause**
16.00		**Posterdiskussion**
	P1	**W.A. Brand** und A. Tegtmeyer, Finnigan MAT, Bremen: **Neuere Untersuchungen zur direkten $^{18}O/^{16}O$-Bestimmung an Wasser mittels Isotope Ratio Monitoring**
	P2	**W.A. Brand** und A. Hilkert, Finnigan MAT, Bremen: **GCCMS-Untersuchungen zur ^{15}N-Bestimmung aus GC-Eluaten bei natürlicher Häufigkeit**

P3 **U. Zalfen,** B. Weimann und D. Henneberg, MPI für Kohlenforschung, Mülheim: **Statistische Untersuchungen über das Vorkommen und die Bedeutung von Strukturmerkmalen in spektralen Ähnlichkeitsumgebungen**

P4 **U. Bahr,** A. Deppe und M. Karas, Inst. f. Med. Physik und Biophysik, Münster; U. Gießmann, Finnigan MAT, Bremen: **Matrix-unterstützte Laserdesorptions-Massenspektrometrie von synthetischen Polymeren**

P5 **I. Steppuhn,** H.K. Cammenga, Inst. f. Phys. und Theor. Chemie, Braunschweig; A. Ehmke, Inst. für Pharm. Biologie, Braunschweig; H.-M. Schiebel, Inst. f. Org. Chemie, Braunschweig: **Diskriminierungseffekte bei schonenden Ionisierungsverfahren: Untersuchungen zur Solvatisierung von Steroidalkaloiden und Steroidalkaloidglykosiden**

P6 **R. Woisch,** C. Bicke und J.O. Metzger, Fachbereich Chemie, Oldenburg: **Matrixeffekte bei der FAB-MS von underivatisierten Oligosacchariden**

P7 **U. Lüttgens,** Th. Dülcks und F.W. Röllgen, Inst. f. Phys. Chemie, Bonn: **Einfluß des Zusatzes von Tensiden auf die Ionenemission in der EH-MS**

P8 **J. Hau** und M. Linscheid, ISAS Inst. f. Spektrochemie, Dortmund: **Elektrospray für Sektorfeld-MS: Erste Ergebnisse**

P9 **K. Schmeer,** D. Waidelich und Ernst Bayer, Inst. f. Org. Chemie, Tübingen: **Anwendungen von Elektrospray-MS bei der Strukturaufklärung von Pflanzeninhaltstoffen**

P10 **B. Spengler** und R. Kaufmann, Inst. f. Lasermedizin, Düsseldorf: **Peptidsequenzierung durch Flugzeitanalyse metastabil zerfallener Molekülionen in Reflektor-Flugzeitmassenspektrometern**

P11 **H. Etspüler,** W. Fiedler, D. Suckau und M. Przybylski, Fakultät f. Chemie, Konstanz: **Neue Methoden der Epitopstrukturanalyse in Proteinantigen/Antikörperkomplexen durch Kombination von selektiven proteolytischen Abbauverfahren und Plasmadesorptions-Massenspektrometrie**

P12 **D. Waidelich,** M. Hans und E. Bayer, Inst. f. Org. Chemie, Tübingen: **MS/MS und MS/MS/MS von N-substituierten Arensulfonamiden mit einem Triple-Quadrupol Elektrospray-Gerät**

P13 **C. Schulze,** Zentrum für Molekulare Neurobiologie, Hamburg: **Anwendung von LSIMS und contious flow-FAB bei der Isolierung biologisch aktiver Peptide**

P14 **K. Eckart,** MPI f. Exp. Medizin, Göttingen: **Dynamische LSIMS-Ionisation als Probeneinlaß zur Aufnahme von Tandemmassenspektren mit einem Fokusebenendetektor**

P15 **D. Wiehr,** T. Knepper, M. Kussmann und M. Przybylski, Fakultät f. Chemie, Konstanz:

Massenspektrometrische Strukturuntersuchungen von cytostatisch aktiven Methotrexat-Lipid- und Peptid-Konjugaten und deren Komplexen mit der Dihydrofolatreduktase

P16 **H. Fredrickson,** GBF; Braunschweig; B. Tindall, Deutsche Sammlung von Mikroorganismen und Zellkulturen GmbH, Braunschweig; K.-D. Klöppel, GBF, Braunschweig: **Chemotaxonomy of extremely halophilic archaebacteria based on FAB-MS(/MS) of intact polar membrane lipids**

P17 **H. Schmidt** und R. Basner, Inst. f. Niedertemperatur-Plasmaphysik, Greifswald; H. Steinhauser, Deutsche Carbone GmbH, Neunkirchen; A. Hartwig, Inst. f. Phys. Chemie, Köln: **Massenspektrometrische Untersuchungen zur Elektronenstoßionisierung von APSM**

P18 **J. Friedel** und H.J. Veith, Inst. f. Org. Chemie, Darmstadt: **Zur massenspektrometrischen Bestimmung der Position von Doppelbindungen in längerkettigen Dienen**

P19 **E. Reder** und H.J. Veith, Inst. f. Org. Chemie, Darmstadt: **Neuartige Alkaloide aus dem Giftdrüsensekret sozialparasitischer Ameisen - Eine GC-MS-Studie**

P20 **H. Münster,** E. Schröder und R. Pesch, Finnigan MAT, Bremen: **GC/MS/MS-Technik: Anwendung einer automatisierten Gerätesteuerung in der Umweltanalytik**

P21 **Franz J. Mayer** und A. Holle, Bruker-Franzen Analytik GmbH, Bremen: **Messung der absoluten Molekularmassenverteilung von Polymeren in einem Flugzeit-Massenspektrometer mittels matrixunterstützter Laserdesorption**

P22 **W. Schrader** und M. Linscheid, ISAS Inst. f. Spektrochemie, Dortmund: **Kopplung von Kapillarzonenelektrophorese mit einem Sektorfeld-MS**

P23 **H. Keck** und P. Tommes, Inst. f. Anorg. Chemie und Strukturchemie I, Düsseldorf: **Strukturuntersuchungen an geradelektronischen phosphorhaltigen Kationen - H_2PS^+ und CH_2PS^+**

P24 **J.H. Gross** und H.J. Veith, Inst. f. Org. Chemie, Darmstadt: **Stoßinduzierte Alkaneliminierungen aus langkettigen Iminium Ionen: Ist der Charge-remote Mechanismus gültig?**

P25 **K. Seemeyer,** T. Prüsse und H. Schwarz, Inst. f. Org. Chemie, TU Berlin: **Eisenkationen vermittelte regio- und stereoselektive Eliminierungen**

P26 **J. Hrusak,** D. Schröder und H. Schwarz, Inst. f. Org. Chemie, TU Berlin: **Ungewöhnlicher metastabiler Zerfall von protoniertem Fluorbenzol: Eine kombinierte experimentelle und theoretische Studie**

P27 **D. Schröder** und H. Schwarz, Inst. f. Org. Chemie, TU Berlin: **Anwendung der Neu-**

tralisation-Reionisations-Massenspektroskopie zur Strukturaufklärung von metallorganischen Komplexen

P28 **G. Drechsler** und U. Boesl, Lehrstuhl f. Phys. Chemie I, Garching: **Massenselektive Erzeugung neutraler molekularer Systeme und Cluster: Kohlenstoffcluster und Metallkohlenstoffverbindungen**

P29 **F.J. Winkler,** Inst. f. Chemie Weihenstephan, Freising; J. Winkler und H. Krause, Org.-Chem. Institut, Garching: **Chiralitätseffekte in den Chemische-Ionisations-Massenspektren von α,β-Dihydroxycarbonsäurealkylestern**

P30 **J. Sun** und H.-Fr. Grützmacher, Fakultät f. Chemie, Bielefeld; C. Lifshitz, The Hebrew University of Jerusalem, Israel: **Neue Reaktionen von ionisierten Kohlenstoffclustern in der Gasphase**

P31 **A. Mehdizadeh,** H.-Fr. Grützmacher und D. Kuck, Fakultät f. Chemie, Bielefeld: **Isomerisierungsreaktionen der Molekülionen von Triarylisobutenen**

P32 **F. Strehle,** L. Cubilla und H.-Fr. Grützmacher, Fakultät f. Chemie, Bielefeld: **Zur massenspektrometrischen Differenzierung isomerer Dichlorcycloalkane**

P33 **J. Schwarz** und H. Schwarz, Inst. f. Org. Chemie, TU Berlin: **Reaktionen von $FeCH_3^+$ und $CoCH_3^+$ mit 1-Octin**

P34 **N. Goldberg** und H. Schwarz, Inst. f. Org. Chemie, TU Berlin: **Aktivierung von Alkenen mit Titankationen: Eine FTICR-Studie**

P35 **J. Rohloff** und R. Herzschuh, Fachbereich Chemie, Leipzig: **MS-Fragmentierung stereoisomerer cyclischer Kohlenwasserstoffe**

P36 **R. Herzschuh,** Fachbereich Chemie, Leipzig: **Stereochemische Einflüsse auf elektronenstoßinduzierte Fragmentierungen**

P37 **H. Lehmann** und R. Herzschuh, Fachbereich Chemie, Leipzig: **Strukturtypenanalyse technischer Gemische mittels normal- und hochauflösender Massenspektrometrie**

P38 **R. Herzschuh,** M. Pelzing und Th. Birkenfeld, Fachbereich Chemie, Leipzig: **Strukturaufklärung von Abprodukten des Plasmaätzens in der Mikroelektronik mittels Massenspektrometrie**

P39 **L. Mikolajczyk,** K.Metzner und B. Adler, Buna AG, Schkopau: **VC-Monitoring mitttels Ionenfallentechnik**

P40 **M. Schär,** K.O. Börnsen und E. Gassmann, Ciba-Geigy, Basel, Schweiz: **Analytical Applications of Matrix assisted Laser Desorption/Ionisation MS**

19.00 **Kaltes Buffet im Forum der FAL**

Freitag, 12.6.1992

8.45	HV	**Hauptvortrag mit Diskussion H.-R. Schulten,** Wiesbaden: **Neue Untersuchungen zur Struktur der organischen Bodensubstanzen**
9.40	V23	**K.P. Wirth,** D.S. Jones, J.A.E. Pratt, P.A. Ryan und H. Schmiedel, Shimadzu Europa GmbH, Duisburg: **Die Analyse von Biomolekülen hoher Massen mit Elektrospray und Liquid SIMS**
10.00	V24	**K. Strupat,** M. Karas, F. Hillenkamp und C. Eckerskorn, Inst. f. Med. Physik u. Biophysik, Münster: **Massenspektrometrische Analyse geblotteter Proteine nach gelelektrophoretischer Trennung mittels Matrix-unterstützter Laserdesorption/Ionisation (MALDI-MS)**
10.20	V25	**U. Christians** und K.-Fr. Sewing, Inst. f. Allgem. Pharmakologie, Med. Hochschule, Hannover; H.-M. Schiebel, Inst. f. Org. Chemie, Braunschweig; L. Ernst, Inst. f. Anorg. u. Analyt. Chemie, Braunschweig; N. Kosian und M. Schmidt, Lab. f. Geoanalytik, Hildesheim: **Entwicklung eines HPLC/MS-Verfahrens zur Messung des Immunsuppressivums FK506 und seiner Metabolite in Blut und Urin transplantierter Patienten**
10.40		**Kaffeepause**

11.10	V26	**J. Schmidt,** W. Dathe, R. Kramell, A. Meyer, C. Brückner, G. Schneider und G. Sembdner. Inst. für Pflanzenbiochemie, Halle: **GC/MS-Untersuchungen von Jasmonsäure, davon abgeleiteten Verbindungen und deren Konjugaten**
11.30	V27	**W.D. Lehmann,** M. Stephan, K. Metzger, G. Fürstenberger, Deutsches Krebsforschungszentrum, Heidelberg; H. Maier, Universitätsklinik, Heidelberg: **GC-MS Bestimmung des Hydroxylierungsprofils langkettiger Fettsäuren - Eine neue Methode zur quantitativen Erfassung und Charakterisierung der in vivo Lipidperoxidation**
11.50	V28	**G.F. Pauli,** U. Matthiesen und P. Junior, Inst. f. Pharmazeutische Biologie, Düsseldorf: **DCI-massenspektroskopische Untersuchungen an herzwirksamen Glykosiden**
12.10	V29	**J. Hau** und M. Linscheid, ISAS, Inst. f. Spektrochemie, Dortmund: **Zur Verbesserung der Empfindlichkeit von Continuous-Flow-FAB MS**
12.30		**Ende der Tagung**