

ARBEITSGEMEINSCHAFT MASSENSPEKTROMETRIE

14. Diskussionstagung, 17. bis 19. Juni 1981

Max-Planck-Haus  
Berliner Straße 10, 6900 Heidelberg

P R O G R A M M

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

Mittwoch, 17. Juni 1981

- ab 12.00 Registrierung der Teilnehmer im Tagungsbüro
- 14.00 Begrüßung
- 14.15 H a u p t v o r t r a g mit Diskussion  
G. von Unruh, Medizin. Universitätsklinik Bonn:  
Massenspektrometrie in der medizinischen Forschung
- 15.30 Helga Ludwig-Köhn, Astrid Sziedat, H.V. Henning, G. Spitteler, Organ.-chem. Institut, Universität Göttingen:  
Massenspektrometrische Aufklärung unbekannter Steroidmetabolite aus Urin und Hämofiltrat chronisch erkrankter Patienten
- 15.55 PAUSE
- 16.30 H. Jungclas, H. Danigel, I. Schmidt, Kernchemie, Universität Marburg; J. Dellbrügge, A. Hardewig, Medizin. Klinik, Universität Marburg:  
Flugzeit-Massenspektrometrie zum quantitativen Nachweis von Pharmaka im Blutserum
- 16.55 M. Senn, R. Endeke, R. Schubert, Boehringer Mannheim GmbH:  
MS/MS-Einsatz eines Triple-Quadrupole Massenspektrometers zur Quantifizierung von Arzneistoffen in Körperflüssigkeiten
- 17.20 M. Przybylski, D. Friedrich, Institut für Organ. Chemie, Universität Mainz; J. Preiß, J. Fischer, I. Medizin. Klinik u. Poliklinik, Universität Mainz:  
Identifizierung und quantitative Bestimmung von Methotrexat und Methotrexat-Metaboliten nach hochdosierter Therapie durch HPLC und FD-MS
- 17.45 H. Schildknecht, H. Hiller, Organ.-Chem. Institut, Universität Heidelberg:  
Kommunikationsstoffe von Säugetieren
- ca. 18.30 Schloßbesichtigung

Donnerstag, 18. Juni 1981

- 8.30 H a u p t v o r t r a g mit Diskussion  
B. Brehm, Lehrstuhl für Experimentalphysik, TU Hannover:  
Doppelt geladene Molekülionen
- 9.45 W. Franke, R. Wolfschütz, G. Frenking, H. Schwarz,  
Insitut f. Organ. Chemie, TU Berlin:  
C-Äquilibrierung in cyclischen  $C_6H_{11}^+$ -Ionen
- 10.10 PAUSE
- 10.40 H. Kühne, M. Hesse, Organ.-Chem. Institut, Universität  
Zürich:  
Der  $(M+11)^+$ -Peak in Massenspektren von Diaminen
- 11.05 J. Grotemeyer, H.F. Grützmacher, Fak. Chemie, Univer-  
sität Bielefeld:  
Ursache und Folgen der kinetischen Verschiebung bei der  
Bildung von  $C_7H_7^+$ -Ionen
- 11.30 G. Baykut, K.-P. Wanczek, H. Hartmann, Institut f. Phys.  
Chemie, Universität Frankfurt:  
Struktur und Reaktionen der Molekularionen von Verbin-  
dungen des Typs  $C_2H_4X$  ( $X = NH, PH, S$ ), untersucht mit  
Hilfe der ICR-Spektrometrie
- 11.55 O.H.J. Christie, Rogaland Research Institute,  
Stavanger/Norwegen:  
Auswertung von Spektren von komplexen Proben durch  
multivariate Datenauswertung
- 12.30 MITTAGESSEN
- 14.00 H a u p t v o r t r a g  
H. Fehlhaber, Hoechst AG, Frankfurt:  
Möglichkeiten und Grenzen der Präzisionsmassenbestimmung
- 14.45 Dietlinde Krauss, Organ.-Chem. Institut, Universität  
Heidelberg:  
Kombination Gas-Chromatographie/Hochauflösungs-Masse-  
spektrometrie
- 15.15 J. van Katwijk, Shell Laboratorium, Amsterdam:  
Hochauflösungsmassenspektrometrie unter Ausnützung des  
Linienprofils und Isotopenhäufigkeitswerten
- 15.30 Diskussion der o.g. Vorträge
- 16.00 PAUSE
- 16.30 T. Gäumann, Inst. Chim-Phys., ETH Lausanne:  
Massenspektren von n-Paraffinen
-

(Donnerstag, 18. Juni 1981)

- 16.55 M. Klemens, D. Krauss, B. Tauscher, Organ.-Chem. Institut, Universität Heidelberg:  
Verhalten freier und derivatisierter 2-Propylpentansäure (Valproinsäure) und ihrer Metaboliten-Analoga bei Elektronenstoß
- 17.20 W.A. König, M. Aydin, W. Günther, U. Schulze, Institut f. Organ. Chemie u. Biochemie, Universität Hamburg:  
Peptidsequenzierung mittels GC/MS; Optimierung des Verfahrens unter Einsatz von CI
- 17.45 J. Rullkötter, Institut f. Erdöl u. Organ. Geochemie, KFA Jülich:  
Das Steranthermometer: GC/MS-Untersuchungen zur Temperaturgeschichte von Erdölen und Sedimenten
- ca. 20.00 Gemeinsames Abendessen im Hotel Stiftsmühle, Heidelberg

Freitag, 19. Juni 1981

- 8.30 H a u p t v o r t r a g mit Diskussion  
N.M.M. Nibbering, Lab. f. Organ. Chemie, Universität Amsterdam:  
Ionenchemie in der Gasphase mittels Ionen-Cyclotron-Resonanz (in Englisch)
- 9.30 Hp. Kellerhals, M. Allemann, Spectrospin AG, Fällanden/Schweiz:  
Ionen-Cyclotron-Resonanz bei hoher Feldstärke mit supraleitendem Magneten
- 9.55 H.J. Veith, Institut f. Organ. Chemie u. Biochemie, TH Darmstadt:  
Zur Anwendung der FI/FD-Methode (Vergleich von FD-Emittern; Registrierung schwacher Ionenströme)
- 10.20 PAUSE
- 10.45 R. Stoll, U. Schade, F.W. Röllgen, Institut f. Phys. Chemie, Universität Bonn:  
Thermische Desorption von organischen Molekülen
- 11.10 K.D. Klöppel, Institut f. Phys. Chemie, Universität/GHS Siegen:  
Sekundärionen-Massenspektrometrie von organischen Verbindungen. Vergleich mit EI, CI, FI, FD.
- 11.35 C. Wakefield, Kratos GmbH, Karlsruhe:  
Application of Fast Atomic Bombardement to the Analysis of Thermally Labile Compounds
-

(Freitag, 19. Juni 1981)

- 12.00 U. Rapp, M. Höhn, H. Kaufmann, G. Dielmann, Finnigan MAT,  
Bremen:  
DCI-Techniken angewendet auf Sulfonsäuren und deren Salze
- 12.25 W.D. Lehmann, Medizin. Biochemie, Univ.-Krankenhaus  
Eppendorf, Universität Hamburg:  
Methodische Untersuchungen zur off-line-Kombination  
von HPLC und FD-MS
- 12.50 C. Brunnée, L. Delgmann, G. Dielmann, Finnigan MAT,  
Bremen:  
LC/MS-Interface für EI- und CI-Ionisation
- ca. 13.15 ENDE