

Arbeitsgemeinschaft
Massenspektrometrie

20. Diskussionstagung, 10. - 12. Juni 1987
Universität Oldenburg

P R O G R A M M

Mittwoch, 10.6.1987

- ab 11.00 Registrierung der Teilnehmer im Tagungsbüro, Foyer
des Naturwissenschaftlichen Gebäudes.
- 14.00 Begrüßung
- 14.15 Hauptvortrag mit Diskussion

C. Brunnée, Finnigan MAT GmbH, Bremen: "Der ideale
Analysator - Realität und Fiktion".
- 15.30 H.F. Kammer und E.R. Hilf, Universität Oldenburg:
"Physik der Ablösung organischer Moleküle bei PDMS".
- 15.55 L. Bütfering, G. Schmelzeisen-Redeker und
F.W. Röllgen, Universität Bonn: "Mechanismen der
Thermospray-Ionisierung".
- 16.20 Pause
- 16.40 A. Bodenhausen, T. Gäumann und J. Rapin, EPFL-
Ecublens, Lausanne, Schweiz: "FT-MS in zwei
Dimensionen".
- 17.05 M. Bamberg, K.P. Wanczek, Universität Bremen:
M. Allemann, Spectrospin AG, Fällanden, Schweiz:
"Hochauflösung in der Fourier-Transform-ICR
Spektrometrie".
- 17.30 P. Caravatti, P. Grossmann, M. Allemann, H.P.
Kellerhals, Spectrospin AG, Fällanden, Schweiz:
"GC-FTMS Kopplung mittels einer externen Ionen-
quelle".
- 17.55 V. Grau, A. Maulshagen und D. Müller, Ruhr-
Universität Bochum: "EBE-Tandem-Massenspektrome-
trie mit einem MAT 731".
- 18.30 Abfahrt zum Empfang beim Oberbürgermeister der
Stadt Oldenburg im Rathaus.

Donnerstag, 11.6.1987

- 8.15 Hauptvortrag mit Diskussion.
H. Schwarz, Technische Universität Berlin:
"Lehrbuchrezepte auf dem Prüfstand: zur Rolle von Ion/Dipol-Komplexen und distonischen Ionen bei der α -Spaltung, der McLafferty-Umlagerung und anderen massenspektrometrischen Prozessen".
- 9.20 C.B. Lebrilla, Th. Drewello, Ch. Schulze und H. Schwarz, Technische Universität Berlin:
"Organometallic Reactions in the Gas Phase: The Reactions of Fe⁺ and Co⁺ with Linear Nitriles".
- 9.45 Th. Drewello, C.B. Lebrilla, E. Anklam, K.-D. Asmus und H. Schwarz, Technische Universität Berlin: "Charge Stripping von Dithioether-adikalkationen. Bindungsstabilisierung durch Verlust antibindender Elektronen".
- 10.10 Pause
- 10.30 R. Wolf und H.-F. Grützmacher, Universität Bielefeld: "Bildung und Reaktionen von destabilisierten Benzylkationen".
- 10.55 R. Spilker und H.-F. Grützmacher, Universität Bielefeld: "Zur Skelett-Umlagerung der Molekülionen von Benzofuranen und Chromenen".
- 11.20 J.O. Metzger, W. Schwarting, P. Köll, Universität Oldenburg; F.J. Winkler, Technische Universität München: "Stereochemische Effekte und RDA-Reaktionen in den CI- und EI-Massenspektren der 1,5-Anhydropentofuranosen".
- 11.45 M. Rentzea, M. Höne und H.A. Staab, MPI für Medizinische Forschung, Heidelberg: Nachbarschaftseffekte in den MS-Spektren von Bis(dimethylamino)aromaten, II. Intramolekulare Cyclisierung von 2,2' - Bis(dimethylamino)biphenylen zu Phenanthridinium Ionen.
- 12.10 Mittagessen
- 13.30 Hauptvortrag mit Diskussion.
M. Przybylski, Universität Mainz: "Dynamische Analyse chemischer und biochemischer Reaktionen mit Hilfe der FAB-Massenspektrometrie".
- 14.35 E. Schröder, Finnigan MAT GmbH, Bremen; F. Theobald, H. Münster und H. Budzikiewicz, Universität Köln: "Gasphasenprozesse bei der Ionisation unter Fast Atom Bombardment".

- 15.00 R. Schubert, R. Pesch, Finnigan MAT GmbH, Bremen;
R. Caprioli, Baylor University, Houston, USA:
"Continuous Flow FAB: neue Möglichkeiten für LC/MS
und FAW".
- 15.25 Pause
- 15.45 B. Weimann und D. Henneberg, MPI für Kohlen
forschung, Mülheim: "Rangfolge in Hitlisten,
eine problemabhängige Größe!"
- 16.10 MS Datenbank. Berichte und Diskussion: Fragebogen
aktion; aktueller Stand von Spektrenbibliotheken;
Erfahrungen mit einem firmeninternen MS-Datenbank
system; Aufbau von spektroskopischen Datenbankver
bundsystemen. M. Linscheid, Institut für Spektro-
chemie, Dortmund; D. Henneberg, MPI für Kohlen-
forschung, Mülheim; H.P. Richter, Bayer A.G.,
Leverkusen.
- ab 17.15

Posterbeiträge

- P 1 D. Grzelak und D. Müller, Ruhr-Universität Bochum:
"Eine Casium-Ionenquelle mit geringer thermischer
Belastung der Probe für Liquid-SIMS".
- P 2 W. Dostmann, H.G. Genieser, B. Jastorff, H.-M.
Schiebel, P. Schulze und I. Erxleben, Universität
Bremen: "FAB-induzierte Reaktionen an Cyclo-
nucleotid-Analoga in der Matrix".
- P 3 M. Masur und H.-F. Grützmaier, Universität
Bielefeld: "Ion/Molekül-Komplexe bei der Isomeri-
sierung von $C_7H_{14}O^+$ -Keton-Ionen".
- P 4 D. Kuck, D. Thölmann und H.-F. Grützmaier,
Universität Bielefeld: "Stereokontrollierter
Protonenaustausch in protonierten 1,4-Dibenzyl-
cyclohexanenll.
- P 5 G. Thielking und H.-F. Grützmaier, Universität
Bielefeld: "H-Wanderungen in protonierten Benz-
aldehyden: a-Komplexe und n-Komplexe"?
- P 6 D. Kuck, G. Prior und H.-F. Grützmaier, Univer-
sität Bielefeld; D.R. Müller und W.J. Richter,
Ciba-Geigy AG, Basel, Schweiz: "Gerüst- und
Wasserstoff-Umlagerungen in niederen Alkylbenze-
nium-Ionen".
- P 7 R. Postma, P.J.A. Ruttink und J.K. Terlouw,
Universität Utrecht, Niederlande: "The $[CH_2=CHOH/
H_2O]^+$ -system: a Theoretical Study of Distonic
Ions, Hydrogen-bridged Ions and Ion-Dipole
Complexes".

- P 8 B. van Baar und J.K. Terlouw, Universität Utrecht, Niederlande: "Collision Induced Dissociative Ionization of Neutral Fragments from Hydrogen bonded C₃H₈O₂ Radical Cations".
- P 9 W. Kulik und W. Heerma, Universität Utrecht, Niederlande: "Identification of Amino Acids in the FAB Mass Spectra of Peptides".
- P 10 T. Weiske und H. Schwarz, Technische Universität Berlin: "Interferenzfreie "charge-stripping"-Spektren mit einem BEB-Tripelsektorfeld-Massenspektrometer".
- P 11 C. Schulze und H. Schwarz, Technische Universität Berlin: "Unimolekulare Reaktionen Fe⁺-komplexierter mehrfach ungesättigter Kohlenwasserstoffe".
- P 12 H. Schwarz, C. Lebrilla und T. Prüsse, Technische Universität Berlin: "Identifikation von Zwischenprodukten in Organometallischen Reaktionen in der Gasphase".
- P 13 G.B. Lebrilla, J.K. Terlouw und H. Schwarz, Technische Universität Berlin: "The Generation and Detection of Free Carbonic and Carbamic Acid".
- P 14 N. Steinrück, T. Weiske und H. Schwarz, Technische Universität Berlin: "Gasphasenreaktionen Fe⁺-aktivierter Allene".
- P 15 N. Heinrich, W.Koch und H. Schwarz, Technische Universität Berlin: "Mechanismus der [2+1]-Cycloaddition von Keten⁺ und Ethylen: Strukturen und Energien".
- P 16 R. Neudert und W. Bremser, BASF AG, Ludwigshafen: "Automatisierte Direktverdampfung mittels optimierter EI/CI-Umschaltung und TIC-Steuerung".
- P 17 I. Manz, P. Fonrobert, T. Knepper, M. Przybylski, H. Thomas, J. Klein und F. Oesch, Universität Mainz: "Strukturdifferenzierung Fremdstoffmetabolisierender Isoenzyme durch Endoprotease-Abbau und FAB-MS (peptide mapping)".
- P 18 H. Beck, K. Eckart, W. Mathar und R. Wittkowski, Bundesgesundheitsamt Berlin: "Möglichkeiten zur Optimierung von GC/MS-Parametern bei der Bestimmung von PCDF's und PCDD's im ppq-Bereich".
- P 19 V. Grau, A. Maulshagen und D. Müller, Ruhr Universität Bochum: "Intramolekulare Ringmethylierung in Trimethylsilylethern der Halogenphenolkationen".

- P 20 E. Schröder und W. Schäfer, Finnigan MAT, Bremen: "FAB MS/MS Experimente zur Sequenzierung von Peptiden".
- P 21 J. Grotemeyer, K. Walter, U. Boesl und E.W. Schlag, Technische Universität München: "Zerfallsreaktionen von Alkylbenzol-Molekülonen untersucht mit Multiphoton-Ionisations-Massenspektrometrie (MUPI-MS)".
- P 22 A.T. Tas, J. de Waart, J. van der Greef, J. Bouwman und M.C. ten Noever de Brauw, TNO-CIVO, Zeist, Niederlande: "Factor-Discriminant Analysis".
- P 23 C. Randt und M. Linscheid, Institut für Spektrochemie, Dortmund: "Die quantitative Bestimmung von 5-Methyldeoxycytidin in DNA".
- 18.30 Abfahrt zum Abendessen nach Bad Zwischenahn

Freitag, 12.6.1987

- 8.15 Hauptvortrag mit Diskussion
J. Peter-Katalinic, Universität Bonn: "Massenspektrometrische Untersuchungen von Glykokonjugaten biologischen Ursprungs".
- 9.20 D. Bachmann, M. Karas und F. Hillenkamp, Universität Frankfurt: "Matrixunterstützte W-Laser-Desorptions-Massenspektrometrie bioorganischer Moleküle".
- 9.45 J. Grotemeyer, K. Walter, U. Boesl und E.W. Schlag, Technische Universität München: "Untersuchung der Ionisation und Fragmentierung von Biomolekülen durch Multiphotonen-Ionisations-Massenspektrometrie (MUPI-MS)".
- 10.10 Pause
- 10.30 K. Eckart und H. Schwarz, Technische Universität Berlin: "Sequenzierung von hormonalen Peptiden im pmol-Bereich".
- 10.55 M.C. ten Noever de Brauw und A. Tas, TNO CIVO, Zeist, Niederlande: "DCI-MS Pyrolysis of Bacterial".
- 11.20 M. Ende, Staatl. Chem. Untersuchungsamt, Oldenburg: "Massenfragmentographische Bestimmung von Polychlordibenzodioxinen und -furanen in Frauenmilch".
- 11.45 H. Beck, K. Eckhart, W. Mathar, C.-S. Rühl und R. Wittkowski, Bundesgesundheitsamt Berlin: "Anwendung und Vergleich unterschiedlicher massenspektrometrischer Bestimmungsmethoden zur Quantifizierung von PCDF's und PCDD's in biologischen Matrices".

- 12.10 A. Dommröse und K. Figge, NATEC, Hamburg:
"Bestimmung organischer Spurenstoffe in der
Atmosphäre zur Ursachenforschung von Wald
schäden".
- 12.35 Schlußwort
- (Für die Diskussionsvorträge gilt: 15 Min. Vortrag
10 Min. Diskussion).