



Labor

Seminar

Interpretation von Massenspektren

Termin/Ort

10. – 11. März 2015 in Essen

Leitung

Prof. Dr. Michael Oehme

Seminar

Vergleich von Massenspektren mit Datenbanken

Von leider falsch bis zum Erfolg: Tricks und Werkzeuge

Termin/Ort

12. März 2015 in Essen

Leitung

Prof. Dr. Michael Oehme

Interpretation von Massenspektren

Zielsetzung

Die Veranstaltung richtet sich an Personen, die sich mit Massenspektrometrie beschäftigen und dabei Grundkenntnisse der Spektreninterpretation benötigen, um die Resultate einer Spektrensuche zu evaluieren oder einfachere Spektren unbekannter Substanzen selbst zu interpretieren. Die Vermittlung der Grundlagen zur Strukturidentifizierung steht im Mittelpunkt. An Hand von Beispielen werden die Fragmentierungseigenschaften (Elektronenionisation) von ausgewählten Stoffgruppen besprochen. Dabei wird speziell auf grundlegende Prinzipien der Interpretation eingegangen wie Anwendung von Isopenverteilungen, Erkennen von Heteroatomen, Interpretation aller vorhandenen Fragmente und Elimination alternativer Strukturen. Zahlreiche Massenspektren werden während des Kurses besprochen. Zusätzlich lösen die Teilnehmer Übungsbeispiele.

Teilnehmerkreis

Wissenschaftliche Mitarbeiter und Personen, die sich mit der Interpretation von Massenspektren befassen und noch wenig Erfahrungen haben. Es werden Grundkenntnisse in der Massenspektrometrie und von einfachen organischen Reaktionsmechanismen vorausgesetzt.

Programm

1. Tag

- 09:00 **Elektronen-Ionisationsprozesse (EI)**
Was ist Elektronen-Ionisation - Welche Information enthält ein EI-Massenspektrum - Generelle Fragmentierungsreaktionen
- 09:45 **Kaffeepause**
- 10:00 **Interpretation von Isotopenverteilungen**
Isotopenverhältnisse der wichtigsten Elemente - Berechnen von Isotopenverteilungen - Informationsgehalt (Heteroatome, Elementarzusammensetzung) Interpretationen an Hand von Beispielen

- 10:45 **Hilfen zur raschen Erkennung der Stoffklasse/Struktur**
Molekülion, ja oder nein? - Doppelbindungs/Ringregel -
Wichtige Fragmentierungsreaktionen - Information über
Teilstrukturen/Stoffklassen (Serien geradezahliger/-un-
geradezahliger Ionen, Intensität des Molekülions, Ab-
spaltung neutraler Fragmente, Heteroatome, typische
Fragmentierungen)
- 12:00 **gemeinsames Mittagessen**
- 13:00 **Interpretation von Massenspektren in Gruppen**
Aufgaben zu den Themen vom Vormittag
- 14:00 **Kaffeepause**
- 14:15 **Besprechung der Lösungen**
- 15:00 **Aromaten und Heterozyklen**
Typische Fragmentierungsreaktionen von Aromaten -
Funktionelle Gruppen und Umlagerungsreaktionen -
Strukturisomere - Polyzyklische und heterozyklische Aro-
maten
- 15:45 **Interpretation von Massenspektren in Gruppen**
Aufgaben zu den Themen des Tages
- 16:30 **Aufsummierung des ersten Tages, Diskussion**
- 17:00 **Ende des ersten Tages**

2. Tag

- 09:00 **Umlagerungsreaktionen und Reaktivitätszentren**
H-Umlagerungen - Einfluss von funktionellen Gruppen -
Alkyl/Phenylumlagerungen - Kohlenstoffgerüstumlage-
rungen
- 09:45 **Kaffeepause**
- 10:00 **Interpretation von Massenspektren in Gruppen**
Aufgaben zu den Themen des Tages
- 11:00 **Besprechung der Aufgabenlösungen**
- 12:00 **gemeinsames Mittagessen**
- 13:00 **Offenkettige Strukturen und Alizyklen**
Alkane, verzweigte Alkane und Alkene - Aliphatische
Alkohole, Ether, Aldehyde, Ketone, Carbonsäuren, Ester
und Amide - Amine und Nitroverbindungen
- 13:45 **Kaffeepause**
- 14:00 **Computerunterstützter Spektrenvergleich und -inter-
pretation**
Suchalgorithmen - Reine Spektren/Gemische - Ähnliche
Verbindungen - Informationsgehalt - Was ist identisch?
(Zuverlässigkeit der Suche, Spektrenqualität) Vorgehen -
Beispiele von nicht und teilweise erfolgreichen Suchen,
was nun?

- 15:00 **Interpretation von Massenspektren in Gruppen**
Weitere Aufgaben zu den Themen des Kurses
- 15:45 **Kaffeepause**
- 16:00 **Restliche Lösungen**
- 16:30 **Ende der Veranstaltung**

Leitung

Prof. Dr. Michael Oehme, Institute for Applied Analytical Chemistry,
Appenzell, Schweiz

Uhrzeiten

10.03.2015, 09:00 Uhr – 11.03.2015, 16:30 Uhr
Essen, Haus der Technik

Termin/Teilnahmegebühr/Ort

HDT-Mitglieder: € 1240,00 – Nichtmitglieder: € 1290,00
mehrwertsteuerfrei, einschließlich veranstaltungsgebundener Arbeitsunterlagen sowie Mittagessen und Pausengetränken
Kurztitel: Interpretation/Massenspektren

10.03.2015 – 11.03.2015 • Veransth.-Nr.: **N-H050-03-571-5**
Essen, Haus der Technik

Vergleich von Massenspektren mit Datenbanken

Von leider falsch bis zum Erfolg: Tricks und Werkzeuge

Zielsetzung

Der Vergleich von EI-Massenspektren mit Datenbanken (Bibliothekssuche) kann oft frustrierend (kein Strukturvorschlag) oder trotz guter Übereinstimmung falsch sein. Zudem: Was tun, wenn das Massenspektrum nicht in der Datenbank ist?

Der Kurs vermittelt Informationen über das Spektrensuchprogramm des NIST-Browsers, die auch auf andere Programme anwendbar sind, sowie Tricks zur Optimierung des Spektrenvergleichs. Zudem werden Strategien vermittelt, wie man Strukturen von Substanzen ermitteln kann, die nicht in Spektrenbibliotheken vorkommen. An Hand von Beispielen werden Lösungsstrategien vorgestellt, welche Teilstrukturen identifizieren, hilfreiche Zusatzinformationen liefern und oft eine Identifikation der Stoffklasse oder in günstigen Fällen sogar der ganzen Struktur ermöglichen. Zahlreiche Beispiele werden mit den Teilnehmern diskutiert.

Achtung: Grundkenntnisse im Interpretieren von Massenspektren sind nötig!

Inhalt

- Wie funktioniert die Spektrensuche (Identität, Ähnlichkeit, Suchalgorithmen, was ist signifikante Information, Suche nach Teilstrukturen etc.)
- Technische Voraussetzungen für einen erfolgreichen Spektrenvergleich (Parameter für Aufnahmebedingungen, Massensignaltreue, Massenkalisierung, gaschromatographische Auflösung etc.). Testverfahren zur Gerätekontrolle
- Hintergrundsubtraktion, Vergleich mit Blindproben,
- Vorgehen beim Spektrenvergleich: Optimierung und Suchmöglichkeiten des „NIST-Browser“
- Was für Datenbanken gibt es?
- Identifizierung von unbekanntem Strukturen, die in den Datenbanken fehlen
- Suche nach Strukturelementen mit Hilfe des Unterprogrammes „Substructure Analysis“
- Fallbeispiele: Probleme durch Ko-Elutionen, hohen Hintergrund, falsche Versuche, Fehler in den Spektrenbibliotheken, Suche nach Teilstrukturen oder Stoffklassen
- Lösen von Beispielen mit den Teilnehmern.

Leitung

Prof. Dr. Michael Oehme, Institut für Angewandte Analytische Chemie, Appenzell, Schweiz

Uhrzeiten

12.03.2015, 09:00 Uhr – 17:00 Uhr
Essen, Haus der Technik

Termin/Teilnahmegebühr/Ort

HDT-Mitglieder: € 720,00 – Nichtmitglieder: € 770,00
mehrwertsteuerfrei, einschließlich veranstaltungsgebundener Arbeitsunterlagen sowie Mittagessen und Pausengetränken
Kurtitel: MS Datenbank

12.03.2015 • Veranstd.-Nr.: N-H050-03-572-5
Essen, Haus der Technik



HAUS DER TECHNIK

Außeninstitut der RWTH Aachen
Kooperationspartner der Universitäten Duisburg-Essen
Münster - Bonn - Braunschweig

Anmeldung per Fax: 02 01/18 03-2 80

Veranstaltung

Veranst.-Nr.: _____
Kurtztitel: _____
am: _____
Ort: _____
Teiln.-Geb.: Mitglieder € _____
 € _____

Veranstaltungsteilnehmer

Hr./Fr./Name, Vorname _____
Titel/Geb.datum, -ort: _____
Funktion: _____ Abt.: _____
Tel.: _____ Fax: _____
E-Mail: _____

Rechnungsanschrift

Ihre Bestell-Nr.: _____
Lieferanten-Nr. HDT: _____
Firma: _____
Abteilung: _____
zu Händen: _____
Straße/Postfach: _____
PLZ/Ort: _____

Ich zahle per Rechnung
 per Kreditkarte Visacard
 Mastercard
 AMEX
 Diners Club

Karteninhaber: _____

Karten-Nr.: []

gültig bis: [] [] [] [] [] []

----- Datum Unterschrift -----

Aufgrund des Datenschutzgesetzes weisen wir Sie daraufhin, dass Ihre Angaben gespeichert werden, um Sie über Veranstaltungen des Hauses der Technik zu informieren.

Die Anmeldebestätigung, Anfahrtsbeschreibung und Hotelauswahl erhalten Sie rechtzeitig vor Veranstaltungsbeginn.

Ihre Anmeldung

Bitte nennen Sie	Ihren Vor- und Nachnamen, Ihren Titel, Firmen-/Rechnungsanschrift, Ihre Abteilung, Telefon, Fax, E-Mail, Veranstd.-Nr., Kurztitel, Datum
online	www.hdt-essen.de/anmeldung
per E-Mail	anmeldung@hdt-essen.de
per Fax	0201/1803-280
per Post	Haus der Technik e.V., 45117 Essen
nach Anmeldung	erhalten Sie eine Anfahrtsbeschreibung

Veranstaltungen finden Sie unter www.hdt-essen.de

mit komfortabler Suchfunktion nach Termin, Ort, Stichwort

Ihre Fragen

beantworten Ihnen

zur Information	M. Hartwich Andrea Wiese Katrin Saager	 0201/1803-1  0201/1803-1  0201/1803-344	 -269  -346
		information@hdt-essen.de	
fachlich	Dipl.-Ing. Kai Brommann		
		k.brommann@hdt-essen.de	
zur Anmeldung	Nadine Sandner Monica Martins	www.hdt-essen.de/anmeldung  0201/1803-211  0201/1803-212	 -280
		anmeldung@hdt-essen.de	
zur Hotelbuchung	Nuri Grohnert	www.hdt-essen.de/hotel  0201/1803-322	 -276
		hotel@hdt-essen.de	

Unsere AGB

finden Sie im Internet und Programmbuch

Zahlungsweise	per Überweisung oder per Kreditkarte (VISA, MASTERCARD, AMEX und Diners Club)
Stornierung	Bei Umbuchung oder Stornierung einer Anmeldung kann das HDT eine Gebühr von 50,- € erheben. Diese Gebühr entfällt für HDT-Mitglieder. Für alle Anmeldungen, die nicht schriftlich bis 7 Tage vor Veranstaltungsbeginn zurückgezogen werden, muss die Teilnahmegebühr voll berechnet werden.
Umsatzsteuer	Teilnahmegebühren des HDT e.V. sind gem. § 4 Nr. 22 UStG umsatzsteuerfrei

Wir erwarten

Sie in

Essen	Hollestr. 1, 45127 Essen
-------	--------------------------