



... zurück

Definitionen und Erläuterungen

Relative Masse eines Elements

Mittelwert der exakten Massen der natürlich auftretenden Isotope; gewichtet nach ihrem prozentualen Anteil (Atommasse; bzw. Molmasse)

Beispiel **Chlor**:

75,53% ^{35}Cl 34,968854

24,47% ^{37}Cl 36,965896

rel. Molmasse: 35,4527 [g/mol]

Nominelle Masse

gerundete Masse eines Ions (entsprechend der Zusammensetzung) bezogen auf die Massen der häufigsten Isotope der im Ion vertretenen Elemente (^1H , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{32}S)

Bei Schwermetallen gilt: das häufigste Isotop ist nicht das leichteste!

Exakte Masse

exakte Masse eines Ions (entsprechend der Zusammensetzung) bezogen auf die Massen der häufigsten Isotope der im Ion vorhandenen Elemente.

Bei Anwesenheit von Schwermetallen: verwendetes Isotop angeben (eng. monoisotopic mass)

Beispiel $(\text{C}_2\text{H}_5)_4\text{Pb}$:

- $[\text{M}]^{+\bullet}$ m/z 322,130975 für ^{206}Pb
- $[\text{M}]^{+\bullet}$ m/z 324,1332269 für ^{208}Pb

Massendefekt

aufgrund der Dezimalen der Isotopenmassen kommt es zur Massenabweichung

Beispiele:

- positive Massenabweichung (z.B. Kohlenwasserstoffe)

$$^1\text{H} = 1.007825 \text{ u} \quad \text{C}_{10}\text{H}_{22}^+ = 142,17215 \text{ u}$$

- negative Massenabweichung (z.B. PFK)

$$^{19}\text{F} = 18.998405 \text{ u} \quad \text{C}_{10}\text{F}_{21}^+ = 518.96646 \text{ u}$$

Auflösung [A eng. R]

$$A = m / \Delta m$$

Einheitsauflösung:	Quadrupol-MS
10% Valley Def.:	Sektorfeld-MS
50% Valley Def.:	FTICR-MS
Breite bei halber Höhe:	TOF-MS

Beispiel: A = 5000 (BE-Massenspektrometer, 10% Tal zwischen zwei Signalen)

Separierung möglich:	m/z 50.000 und m/z 50.010 m/z 100.000 und m/z 100.020 m/z 5000.000 und m/z 5001
Einheitsauflösung:	m/z 50 und m/z 51 m/z 100 und m/z 101 m/z 1000 und m/z 1001

Klicken Sie [hier](#), um eine erläuternde Graphik [144 KB] aufzurufen!

Peakmatching

Die Signale des zu untersuchenden und eines Referenzions bekannter Masse werden durch Veränderung der Beschleunigungsspannung zur Deckung gebracht; d.h. Ihre Ablenkungsradien sind gleich. Aus der Bewegungsgleichung für geladene Teilchen im magnetischen Sektorfeld ergibt sich:

$$m_1 : m_2 = U_2 : U_1$$

Die gesuchte Masse des betreffenden Ions läßt sich so sehr genau bestimmen (Meßfehler steigt mit steigendem m/z-Wert).

Abweichung bzw. Fehler der Messung

Angabe in atomaren Milli-Masseneinheiten mmu (absolut)

Angabe in Parts Per Million ppm (relativ)

$$\text{ppm} = 1 \cdot 10^6 \cdot (\text{gemessene Masse} - \text{exakte Masse}) / \text{exakte Masse}$$

Merke: Die Fehlerangabe in ppm ist massenabhängig und wird größer mit kleiner Masse bzw. kleiner mit steigender Masse! Ein Fehler von 2 mmu entspricht bei m/z 100 ca. 20 ppm, bei m/z 1000 nur noch 2 ppm!

Stickstoffregel

Organische Verbindungen mit einer ungeraden Zahl an Stickstoffatomen können keine geradzahlige Molmasse haben.

Zahl der Elektronen

Handelt es sich beim untersuchten Ion um $[M]^{+\bullet}$ (EI) oder um $[M+H]^+$ bzw. $[M+Na]^+$ (FAB, ESI)?

Energie

1 eV ist die Energie, die ein Elektron beim Durchlaufen einer Potentialdifferenz von 1V aufnimmt. (1 eV = $1,6 \cdot 10^{-19}$ J)

Atomare Masseneinheit u [amu bzw. Dalton d]

u = 1/12 der Masse von ^{12}C

1 u = $1,67 \cdot 10^{-27}$ kg

mmu: Millimasse 0,001 u

Literatur

H. Budzikiewicz, *Massenspektrometrie*, VCH Verlag, 3.Auflage, 1992

F.W. McLafferty, **F. Turecek**, *Interpretation von Massenspektren*, Spektrum Akad. Verlag, 1995

M. Hesse, **H. Meier**, **B. Zeeh**, *Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie*, Georg Thieme Verlag Stuttgart, 4. Auflage, 1991