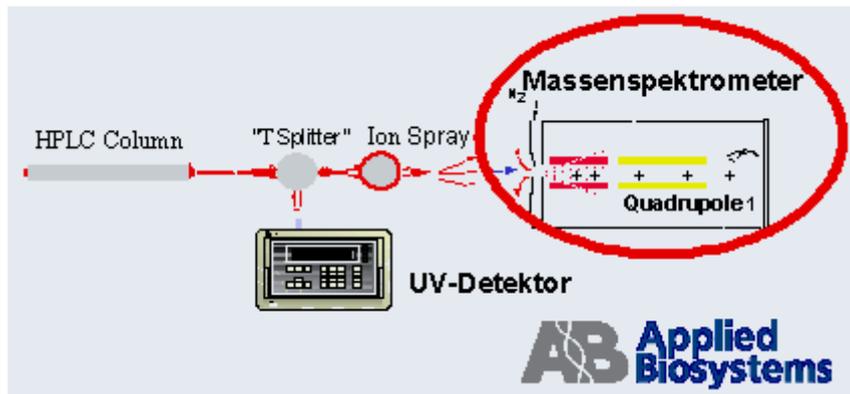


Massenspektrometrie - Technik für die Spurenanalytik



Warum MS?

Heutzutage wird es immer wichtiger und selbstverständlicher, in kürzester Zeit Spuren bestimmter Substanzen sicher nachzuweisen und quantifizieren zu können. Das Besondere der Massenspektrometrie (kurz: MS) liegt darin, dass aus kleinsten Analysenmengen eine Vielzahl von Informationen erhalten werden kann. So können z. B. Strukturen und Massen von organischen Molekülen bestimmt und Isotopenverhältnisse von Proben erkannt werden. Besonders eignet sich die Massenspektrometrie jedoch wegen ihrer hohen Empfindlichkeit bzw. der niedrigen Nachweisgrenze zur qualitativen und quantitativen Spurenanalyse.

Organische Moleküle zerfallen je nach Ionisationsverfahren entsprechend bestimmter Regeln durch Energiezufuhr in der Ionenquelle zu Kationen, Anionen oder Radikalen. Das Fragmentierungsmuster, d.h. die Art und Weise sowie die Intensität der einzelnen Bruchstücke, geben Auskunft über die Molekülstruktur. Diese Informationen können sowohl zur Identifizierung der gewünschten Analyten als auch zur Strukturaufklärung einer unbekanntem Substanz genutzt werden.

Die elegante Methode der Massenspektrometrie hat eine hohe Selektivität, große Empfindlichkeit und kurze Analysenzeiten. Auch bieten Spektrenbibliotheken z. T. sehr gute Vergleichsmöglichkeiten und sind somit eine große Hilfe bei der Identifizierung auch komplexer Substanzgemische.

Prinzip

Das Prinzip der Massenspektrometrie beruht auf der Ionisierung der Analytmoleküle oder Atome, welche dann anhand ihres Masse/Ladungsverhältnisses getrennt und detektiert werden (siehe Abbildung).

Diese physikalische Trennungsart haben alle Massenspektrometer gemeinsam, dennoch gibt es gravierende Unterschiede in Aufbau und Auswertung.

Instrumentelles

Der generelle Aufbau der Geräte setzt sich aus einem Einlasssystem, einer Ionenquelle, einem Trennsystem und einem Detektor zusammen

- **Einlasssystem**
Entscheidend beim Einlasssystem ist, ein ausreichendes Vakuum im Gerät aufzubauen und beizubehalten. Das Vakuum ist nötig, damit die Moleküle kontrolliert ionisiert werden und sich ihr Weg durch das Messgerät ungehindert ohne Zusammenstöße fortsetzt. Wäre Luft im System würden die Molekülbruchstücke gar nicht am Detektor ankommen, sondern schon vorher mit den Luftmolekülen zusammenstoßen. Ein in der Praxis häufig zum Einsatz kommendes Einlasssystem ist die Kopplung der MS mit chromatographischen Geräten (z. B. HPLC, GC).
- **Ionenquelle**
Um neutrale Moleküle oder Elemente trennen zu können, müssen daraus positive oder negative Ionen entstehen. Das grundlegendste Verfahren ist die ESI, die Elektronenspray-Ionisation. Hierbei wird die Analytlösung in ein Hochspannungsfeld vernebelt und somit ionisiert. Diese harte Methode ist auf Grund der entstandenen Bruchstücke günstig für die Identifizierung von Verbindungen.
- **Trennsysteme**
Massenauftrennung erfolgt unter verschiedenartigen Bedingungen. Oft sind sogar mehrere und sogar verschiedene MS-Einheiten gekoppelt (MS/MS). Einige Trennsysteme sind z.B. Magnetfeld-Sektorenfeldgeräte, Quadrupol-MS, Flugzeit-MS und Ionenfallen.
- **Detektoren**
Als Detektoren werden Elektronenvervielfacher (Multiplifier) eingesetzt.