

VERANSTALTUNGSORT

Universität zu Köln
Department für Chemie
Greinstrasse 4
50939 Köln
www.chemie.uni-koeln.de

ANFAHRT

Die Teilnehmer erhalten nach dem Anmeldeschluss eine ausführliche Wegbeschreibung zum Veranstaltungsort.

Die Deutsche Bahn bietet attraktive Konditionen für Ihre Anreise zu GDCh-Veranstaltungen an. Informationen erhalten Sie unter www.gdch.de/bahn.

UNTERKUNFT

Als geeignete Übernachtungsmöglichkeiten wurden uns nachfolgende Hotels genannt. Diese Hinweise erfolgen ohne jede Verbindlichkeit unsererseits:

Ibis Köln Centrum, Neue Weyerstrasse 4, 50676 Köln
Tel.: +49 221 20960, E-Mail: H1449@accor.com
www.accorhotels.com/de/hotel-1449-ibis-koeln-centrum/index.shtml

Ibis Styles Köln City, Barbarossaplatz 4A, 50674 Köln
Tel.: +49 221 9215200, E-Mail: H8743@accor.com
www.accorhotels.com/de/hotel-8743-ibis-styles-koeln-city/index.shtml

Hotel Motel One Köln Waidmarkt, Tel-Aviv-Straße 6, 50676 Köln
Tel.: +49 221 2725950, E-Mail: koeln-waidmarkt@motel-one.com
www.motel-one.com/de/hotels/koeln/koeln-waidmarkt

Weitere Unterkünfte erfragen Sie bitte bei:
KölnTourismus GmbH
Kardinal-Höfner-Platz 1
50667 Köln
Tel.: +49 221 34643-0
E-Mail: info@koelntourismus.de
Internet: www.koelntourismus.de

Wir weisen ausdrücklich darauf hin, dass die Haftung für bestellte und nicht abgenommene Zimmer beim Besteller liegt.

INHOUSE-SEMINARE Schulungen nach Ihren Vorstellungen

Individuell, effizient, zeit- und kostensparend –
nutzen Sie das Expertenwissen und unser Know-how
als langjähriger Seminaranbieter auch für Ihre Inhouse-Seminare.

Ihre Ansprechpartnerin: Melanie Sakarya
Tel.: +49 69 7917-331/-364 oder E-Mail: fb@gdch.de

ANMELDUNG

Melden Sie sich bitte online bis zum 26.8.2019 (Anmeldeschluss) bei der Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh) an:



Lena Rubner
Fortbildungsorganisation

Telefon: +49 69 7917-364
E-Mail: l.rubner@gdch.de
www.gdch.de/fortbildung

GEBÜHREN

GDCh-Mitglied € 1.670,-
Nichtmitglied € 1.750,-

Die Gebühren sind einschließlich Begleitmaterial und GDCh-Zertifikat, Mittagessen, Kaffeepausen- und Konferenzgetränken, ausschließlich Unterkunft zu verstehen. Sie unterliegen nicht der Mehrwertsteuerpflicht (Steuerbefreiung nach § 4 Nr. 21. a) bb) UStG).

Ihr direkter Link zu unserer Internetseite:



Die AGB finden Sie im Internet unter www.gdch.de/teilnahme.

HINWEIS AUF WEITERE VERANSTALTUNGEN

- 355/19 **Theorie und Praxis der UHPLC**
Leitung: Prof. Dr. Thomas Welsch
14. – 15. November 2019 · Leipzig
- 991/19 **Patent Know-how für Chemiker**
Leitung: PA Dr. Hans-Peter Jönsson, Claudia Ramcke
28. November 2019 · Frankfurt am Main
- 528/19 **Grundlagen der Auditierung**
Leitung: Dr. Barbara Pohl
28. – 29. November 2019 · Frankfurt am Main
- 530/19 **Datenintegrität und Computervalidierung im analytischen Labor**
Die Umsetzung von Annex 11 und OECD 17 Advisory Document in der Praxis
Leitung: Carsten Buschmann
5. – 6. Dezember 2019 · Frankfurt am Main



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Grundlagen der Massenspektrometrie: Messtechnik und Interpretation von Massenspektren

Prof. Dr. Mathias Schäfer
Dr. Matthias Letzel

- Chemie im Massenspektrometer
- Ionisierungsmethoden
- Fragmentierungsprozesse
- Identifizierung und Strukturaufklärung



319/19

23. – 27. September 2019 · Köln



Anerkannt mit 66 Punkten
(www.zefo.org)

ZIEL

Im einwöchigen Kurs werden technische und theoretische Grundlagen der Massenspektrometrie erklärt und die korrekte Interpretation von unterschiedlichen MS-Datensätzen vermittelt. Die Teilnehmer werden an die instrumentell analytische Strukturanalyse organischer Verbindungen mit MS-Methoden herangeführt. Die wichtigsten Methoden der Massenspektrometrie (instrumentelle Grundlagen der Ionisation, Massenanalyse und Auswertung) werden ausführlich in Theorie und Übungen betrachtet. Der Informationsgehalt der resultierenden Massenspektren wird anhand exemplarischer Fälle aufgezeigt, wobei auch auf mögliche/typische Interpretationsfehler und Anwendungsgrenzen hingewiesen wird. In Übungen wird die Interpretation von Massenspektren trainiert. Der Kurs legt einen Schwerpunkt auf die Vermittlung der grundlegenden chemischen Mechanismen der Fragmentierungen organischer Verbindungen unter EI-Bedingungen. Wichtige Fragmentierungsreaktionen werden diskutiert, sodass auch die Prozesse, die bei anderen Ionisierungs- und Anregungsbedingungen ablaufen, verstanden werden können.

INHALT

Schwerpunkte des Kurses sind:

- Physikalische Grundlagen der Arbeitsweise moderner Massenspektrometer: Methoden der Ionenerzeugung (Schwerpunkt ist die Elektronenionisation (EI), aber auch chemische Ionisation und aktuelle Methoden wie matrixassistierte Laser-Ionisation/Desorption (MALDI) und Elektrosprayionisierung (ESI) werden betrachtet), Prinzipien und Methoden der Ionentrennung und der Detektion und der Datenanalyse
- Massenspektrometrische Fragmentierungsreaktionen mono- und polyfunktioneller Verbindungen werden erklärt, wobei EI-induzierte Fragmentierungen im Fokus stehen. Zerfallsreaktionen anderer Anregungsbedingungen bzw. Ionisierungsverfahren werden ebenso besprochen
- Auswertung von Massenspektren und Anwendung zur Strukturanalyse unbekannter Verbindungen (mit ausführlichen Übungen und Erklärungen)
- Artefakte, Massenspektrometer als chemische Reaktionsgefäße
- Besichtigung verschiedener MS-Instrumente (Sektorfeld-, Time-of-Flight-, Ion-Trap-, Orbitrap- und Quadrupol-Massenspektrometer)

ZIELGRUPPE

Chemiker, Analytische Chemiker, Lebensmittelchemiker, Chemieingenieure, andere Naturwissenschaftler und technische Mitarbeiter chemischer Laboratorien

VORKENNTNISSE

Studium der Chemie oder chemisch-technologischer und angrenzender Fächer, gute Grundlagenkenntnisse der Organischen Chemie sind erforderlich.

BEGLEITMATERIAL

Die Teilnehmer erhalten während des Kurses schriftliches Begleitmaterial sowie nach erfolgreicher Teilnahme ein GDCh-Zertifikat.

TEILNEHMERZAHL

maximal 20 Personen

MONTAG, 23. SEPTEMBER 2019

- 10.00 Begrüßung, Vorstellung der Teilnehmer und Dozenten, Organisatorisches und Übersicht über das Kursprogramm
 10.30 Seminar: Elektronen Ionisierung (EI) & alternative Ionisierungsverfahren
 12.15 Mittagspause
 13.30 Seminar: Grundlagen zur Interpretation von EI-Massenspektren
 15.30 Kaffeepause
 16.45 Besprechung von entstandenen Fragen und Problemen
 19.00 Ausklang des ersten Veranstaltungstages in informeller Runde auf Einladung der GDCh

DIENSTAG, 24. SEPTEMBER 2019

- 9.00 Seminar: Instrumentelle Grundlagen der Massenspektrometrie
 10.15 Kaffeepause
 10.45 Seminar: Fragmentierungsprozesse monofunktioneller Verbindungen I
 12.15 Mittagspause
 13.30 Übungen I: Aufgaben zur Strukturanalyse organischer Verbindungen mittels EI-Massenspektrometrie
 15.00 Kaffeepause
 16.45 Besprechung der Übungen und entstandener Fragen

MITTWOCH, 25. SEPTEMBER 2019

- 9.00 Seminar: Fragmentierungsprozesse monofunktioneller Verbindungen II
 10.30 Kaffeepause
 11.00 Seminar: Tandem-Massenspektrometrie, insbesondere Ion-Trap-Massenspektrometrie
 12.15 Mittagspause
 13.30 Übungen II: Aufgaben zur Strukturanalyse organischer Verbindungen mittels EI-Massenspektrometrie
 15.00 Kaffeepause
 16.45 Besprechung der Übungen und entstandener Fragen

DONNERSTAG, 26. SEPTEMBER 2019

- 9.00 Seminar: Chemisches Verständnis unterschiedlicher Ionisierungs- und Fragmentierungsverfahren: Theorie der Massenspektren
 10.30 Kaffeepause
 11.00 Seminar: Computer und Datenbanken in der Massenspektrometrie
 12.15 Mittagspause
 13.30 Seminar: Fragmentierungsprozesse monofunktioneller Verbindungen III
 14.30 Übungen III: Aufgaben zur Strukturanalyse organischer Verbindungen mittels EI-Massenspektrometrie, Vergleich und Einordnung der Computer unterstützten Recherchen Parallel dazu in Kleingruppen: Laborführung
 17.00 Kaffeepause
 17.30 Besprechung der Übungen und entstandener Fragen

FREITAG, 27. SEPTEMBER 2019

- 9.00 Seminar: Gemischanalyse mit der Massenspektrometrie: Kopplung mit chromatographischen Trennverfahren
 10.30 Kaffeepause
 11.00 Artefakte besonderer Art: Massenspektrometer als Reaktionsgefäße
 12.15 Schlussbesprechung und Kursbeurteilung

LEITUNG**Prof. Dr. Mathias Schäfer**

Department für Chemie, Institut für Organische Chemie, Universität zu Köln

Prof. Dr. Mathias Schäfer ist seit 1999 Leiter der Abteilung für Massenspektrometrie des Departments für Chemie an der Universität zu Köln, an der er sich 2011 im Fach Organische Chemie habilitiert hat. Seine Arbeitsgebiete umfassen Fragestellungen der Naturstoffanalytik, die detaillierte Strukturaufklärung von Ionen mit MS und ionenspektroskopischen Verfahren und die Chemie in der Gasphase. Prof. Schäfer ist Co-Autor eines einführenden Lehrbuchs zur Massenspektrometrie und hat über 90 Artikel in wissenschaftlichen Fachzeitschriften veröffentlicht.

**Dr. Matthias Letzel**

Organisch-Chemisches Institut der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

Dr. Matthias Letzel war seit 1999 Leiter der Abteilung Massenspektrometrie in der Fakultät für Chemie der Universität Bielefeld. Seit 2012 ist er dies am Organisch-Chemischen Institut der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster. Seine Arbeitsgebiete umfassen die Analyse von Syntheseprodukten unterschiedlichster Art und die Strukturaufklärung mit Hilfe der Massenspektrometrie. Sein besonderes Interesse gilt der Programmierung von Hilfsprogrammen für die MS, namentlich ist Dr. Letzel Autor des als Download frei erhältlichen Software Tools UMC. Er ist Autor von mehr als 40 Artikeln in wissenschaftlichen Fachzeitschriften.

REFERENTEN

Dr. Matthias Letzel Westfälische Wilhelms-Universität Münster
 (siehe Leitung)
 Prof. Dr. Mathias Schäfer Universität zu Köln
 (siehe Leitung)

STOFFVERMITTLUNG

In Seminaren werden allgemeine und spezielle Aspekte der Massenspektrometrie diskutiert und erklärt. Überdies bilden ausführliche Übungen zur Interpretation von Massenspektren und zum Verständnis von Zerfallsprozessen einen Schwerpunkt des Kurses. Diese Übungen werden in mehreren Kleingruppen durchgeführt, intensiv betreut und die Aufgaben bzw. die Lösungen besprochen. Bei der Laborführung werden verschiedenartige Massenspektrometer und einige spezielle Arbeitstechniken vorgestellt.

Änderungen und Ergänzungen vorbehalten

www.gdch.de/fortbildung

Obwohl im Text häufig nur von Chemikern, Teilnehmern etc. die Rede ist, sind damit selbstverständlich auch Chemikerinnen, Teilnehmerinnen etc. gemeint.