

HPLC-MS in der Non-Target und in der Spurenanalytik

Ein praxisnaher Überblick über alte und neue Ionisationstechniken, praktische Probleme, Strukturaufklärung und Quantifizierung



Termin

Mo. 28.04.2025, 09:00 Uhr –
Di. 29.04.2025, 17:00 Uhr

Teilnahmegebühren

Präsenz-Teilnahme

1.390,00 €*
Für HDT-Mitglieder

[Für HDT-Mitglieder](#) 1.320,00 €*
Für Nicht-Mitglieder

Veranstaltungsort

Haus der Technik e.V.
Hollestr. 1
45127 Essen



Weitere Informationen und die Möglichkeit zur Online-Buchung Ihrer Teilnahme finden Sie auf der [Veranstaltungs-Webseite](#).

Stand: 29.04.2025, 17:03 Uhr

HPLC-MS in der Non-Target und in der Spurenanalytik

Durch die stetige Neu- und Weiterentwicklung von HPLC-Systemen, stationären Phasen, Ionisationsmethoden und Massenspektrometern hat die Flüssigchromatographie (U/HPLC) gekoppelt mit Massenspektrometrie (MS) in den letzten 20 Jahren einen ungeahnten Aufschwung genommen. Die "online" Strukturaufklärung mittels MS/MS ist heute in Realproben mit nur wenigen ng Substanz möglich. Nachweisgrenzen liegen oft im untersten pg-Bereich. So stellen die HPLC- bzw. GC-QqQ-MS den Goldstandard in der Target-Analyse dar.

In der Non-Target-Analyse konnte man sich noch nicht auf einen Goldstandard einigen. Es gibt sehr interessante neue Geräteentwicklungen, wie z. B. die Ionenmobilitäts-Massenspektrometrie, hocheffiziente MS/MS-Möglichkeiten und eine Vielzahl von hilfreichen Softwarelösungen, die es uns ermöglichen in Non-Target-Analysen eine Identifizierung von Analyten zu realisieren. Allerdings bedarf es einer etwas umfangreicheren Interpretation der Massenspektren zur Strukturaufklärung.

In einer Übersicht werden zunächst die in der HPLC-MS gebräuchlichsten Ionenquellen und Massenspektrometern (inkl. Ionenmobilitäts-Massenspektrometrie) vorgestellt und ihre Funktionsweise sowie Vor- und Nachteile diskutiert. Anhand von praktischen Beispielen aus der Lebensmittelanalytik und der Metabolomanalyse wird gezeigt, wie man Strukturen unbekannter Verbindungen aufklären kann. Der Kurs beschränkt sich auf die Anwendung der HPLC-MS auf niedermolekulare Verbindungen (bis ca. 2000 u).

Zum Thema

Neben allen gängigen Ionisationsmechanismen in der HPLC-MS (ESI, APCI, APPI, APLI, LTP) werden auch alle Massenspektrometern (Sektorfeld, Quadrupol, Triplequad, IonTrap, TOF, Orbitrap, FT-ICR-MS) sowie die unterschiedlichen Ionenmobilitäts-Massenspektrometern (FAIMS, DTIMS, TIMS, TWIMS) besprochen. Zudem behandelt der Kurs verschiedene Fragmentierungstechniken zur Spektrenbildung und behandelt chromatographische und massenspektrometrische Störfaktoren, wie Säulenbluten, Kontaminationen, Memoryeffekte, Ionensuppression, Ionen/Moleküleaddukte etc. Zudem wird ein Software-unterstützter Workflow inkl. Massenspektreninterpretation vorgestellt, um eine Non-Target-Analyse durchführen zu können.

Zielsetzung

Es werden fundierte Kenntnisse über die neuesten HPLC-Entwicklungen, alle kommerziell erhältlichen Ionisierungsarten und allen Massenspektrometern vermittelt. Zudem wird anhand von open-source Software ein Workflow für eine Non-Target-Analyse aufgezeigt.

Programm

28.04.2025

09:00–17:00	HPLC - MS - Teil 1 Begrüßung, Vorstellung und Organisatorisches Aufbau der HPLC und neue Entwicklungen Injektor Nieder- und Hochdruckgradientensysteme Bio-HPLC Stationäre Phasen Chromatographische Störparameter Ionenquellen...
-------------	--

29.04.2025

09:00–17:00 HPLC - MS - Teil 2

Massenanalysatoren und deren Kombination mit der
IonenmobilitätsspektrometrieSektorfeldQuadrupolTriplequad IonTrap OrbitrapFT-ICRMSFAIMS-
OrbitrapDTIM-qTOF-MSTWIM-qTOF-MSTIMS-TOFFragmentierungsreaktionenDIA,DDA etc.
Grundlegende Regeln der SpektreninterpretationMassenspektrometrische StörparameterKriterien
für...
