Massenspektrometrie II Arnd Ingendoh

Teil 4 – Analysatoren TOF und QTOF



Analysatoren

- Übersicht
- Quadrupole und Ionenfallen
- Flugzeitanalysatoren und QTOF Hybride
- Ion Mobility Spectrometry
- Hochauflösende MS: Orbitrap und FTMS
- Abgrenzung der Verfahren

4a. TOF- Time of Flight (Flugzeitmassenspektrometer)



- Erstes TOF publiziert 1946 von W.E. Stephens
- Ein Paket von Ionen wird in einem elektrischen Feld beschleunigt. Die Zeit, die das Ionenpaket auf der nachfolgenden Flugstrecke bis zum Detektor braucht, wird gemessen.
- Die Ionen werden aufgrund ihrer Masse in der Flugstrecke getrennt.

E-Feld Beschleunigung



Flugstrecke (Driftstrecke)

Prinzip MALDI-TOF



Ideal für die Kopplung mit MALDI (gepulstes Ionisationsverfahren, das Pakete von Ionen erzeugt).

Prinzip MALDI-TOF



Start der Analyse und Beschleunigung der Moleküle Ankunft am Detektor. Die Moleküle werden ihrer Masse entsprechend getrennt. Zeitmessung

4028

Berechnung der Flugzeit

Ionen der Ladung q werden im elektrischen Feld mit der Energie E_{el} beschleunigt:

E_{el}=q*U = e*z*U

Anschliessend haben sie die kinetische Energy E_{kin}:

 $E_{kin} = \frac{1}{2} * mv^{2}$ Es gilt: $E_{el} = E_{kin}$ Daraus folgt: $V = \sqrt{\frac{2 * e * z * U}{m}}$ Mit: $t = \frac{s}{v}$ Folgt die $t = \frac{s}{\sqrt{2eU}} \sqrt{\frac{m_{i}}{z}}$



Da die Parameter U und s des TOF bekannt sind (ebenso wie die physikalischen Konstante e), kann m/z berechnet werden zu:

$$\frac{m}{z} = \frac{2 \cdot e \cdot U \cdot t^2}{s^2}$$

Berechnung der Flugzeit

Unterschied der Flugzeit zweier benachbarter Massen $m_1 = 720$ und $m_2 = 721$ Da (U = 20 kV, s = 2m, z=1):

$$t_{1} = \frac{s}{\sqrt{2eU}} \sqrt{\frac{m_{1}}{z}} = \frac{2m}{\sqrt{2 x 20000 V x 1.6x10_{-}19 C}} \sqrt{\frac{721 x 1,66x10_{-}27kg}{1}}$$
$$= 24.984.390 x 1.094x10_{-}12 s$$
$$= 27.333 \,\mu s$$
$$t_{2} = \frac{s}{\sqrt{2eU}} \sqrt{\frac{m_{2}}{z}} = 27.352 \,\mu s$$
$$\Delta t = 19 \,ns$$

Im TOF müssen die analogen Messsignale digitalisiert, d.h. abgetastet werden, damit sie im PC weiter verarbeitet werden können. Moderne Flugzeitmassenspektrometer arbeiten mit Hochfrequenz-Digitaloszilloskopen mit 5 GHz Abtastrate der analogen Signale. Die Kanalbreite beträgt dann $\frac{1}{5 x 109 Hz} = 0.2 ns$

Problem: die Ionen haben unterschiedliche Startgeschwindigkeiten und stossen mit Matrixmolekülen

Räumliche Verteilung der Ionenentstehung:

- Durch die Struktur und Ausdehnung der Matrixkristalle werden die Ionen von unterschiedlichen Stellen desorbiert
- Die Ionen bewegen sich durch den MALDI Prozess in verschiedene Richtungen, über einen breiten Winkel verteilt

Initial energy (=speed) spread:

- durch den MALDI Prozess ("Eruption") entsteht eine Verteilung der Startgeschwindigkei
- Durch Stösse mit Matrixmolekülen in der dichten Wolke über dem Target werden Ionen abgebremst



Reference: W. Ens, Y. Mao, F. Mayer, K.G. Standing, *Rapid Communications In Mass Spectrometry, 5, 117-123 (1991)* **Problem:** die Ionen haben unterschiedliche Startgeschwindigkeiten und stossen mit Matrixmolekülen

Folge: Ionen derselben Masse haben leicht unterschiedliche v $\pm \delta v$, d.h. kommen nicht zu genau derselben Zeit am Detektor an, sondern bilden ein ausgedehntes Paket \rightarrow der Signalpeak ist verbreitert (schlechte Auflösung)





Lösung: Methoden zur Energiekompensation

- Verzögerte Beschleunigung der Ionen: "Delayed ion extraction" (DE)
- 2. Energiefokussierung durch Reflektion der Ionen (**Reflector TOF**)

Lösung: Methoden zur Energiekompensation

1. Delayed ion extraction



- -

Lösung: Methoden zur Energiekompensation 2. Reflector-TOF



- Ionen mit höherer kinetischer Energie treten tiefer in das Gegenfeld des Reflektors ein, ehe sie umkehren.
- Sie legen daher einen längeren Weg zurück als Ionen mit geringerer E_{kin} (und damit v).
- Beide treffen sich zeitgleich am Detektor.

Reflectron: Gegenfeld, aufgebaut durch aufeinanderfolgende Ringelemente



Sandler Mass Spectrometry User's Group University of California San Francisco



MALDI-TOF Linear vs. reflector mode

Wenn der Reflektor-Mode im TOF so viel bessere Massenauflösung liefert: warum verwendet man überhaupt noch lineare Systeme?

Der lineare Modus hat Vorteile

- bei labilen Molekülen: durch den MALDI Prozess werden sie angeregt und zerfallen u.U. In der Driftstrecke. Sie werden dann nicht mehr richtig reflektiert und gehen verloren (Beispiele: Zucker mit Sialinsäure)
- bei großen Moleküle mit MW>30 kDa: sie zeigen oft eine breite Energieverteilung, die der Reflektor nicht mehr kompensieren kann. Hier leidet die Transmission, d.h. grosse Teile des Ionenpaket gehen verloren, die Empfindlichkeit wird gering.

Es ist sinnvoll, beide Modi im TOF einzusetzen, linear und Reflektor, zwischen denen man je nach Bedarf schalten kann.



MALDI-TOF Animation

Video "MALDI-TOF animation"

MALDI-TOF/TOF zur MS/MS Fragmentierung

Verschiedene MS/MS Prozesse können verwendet werden



CID: Collision induced dissociation (wie in QqQ oder lonenfalle) **ISD:** In-source decay

LID: Laser-induced dissociation (metastabile lonen zerfallen in der Driftstrecke)



ISD – In-Source Decay



- Analytionen werden zunächst nur desorbiert, aber nicht beschleunigt
- Wechselwirkung mit Elektronen in der "Matrixwolke"
- Prozess u.U. ähnlich wie ETD (electron transfer dissociation) in ESI
- Die Ionen fragmentieren in der Ionenquelle
- Beschleunigung der Fragmente nach ca. 100 ns

ISD – In-Source Decay Spektren von grossen Molekülen

Analyse eines intakten Antikörpers IgG. Fragen:

• Ist der N-terminus modifiziert mit pyroGlu?



• Ist K die endständige Aminosäure am C-terminus?



LID – Laser Induced Dissociation



- Beschleunigung der Analytionen durch die "Matrixwolke"
- Stossaktivierung und Vibrationsanregung der Analytionen
- Die Ionen fragmentieren mit einer zeitlichen Verzögerung
- Fragmente sind ähnlich wie im CID (gleicher Prozess)

CID / LID im MALDI-TOF/TOF

Problem: Wenn die Ionen nach Verlassen der Beschleunigungsstrecke zerfallen oder durch Stöße fragmentiert werden, verlieren sie einen der reduzierten Masse entsprechenden Teil ihrer kinetischen Energie

$$E_{intakt} = \frac{1}{2}mv^2 \qquad \qquad E_{frag} = \frac{1}{2}(m - mver_{lust})v^2$$

z.B. ist bei der intakten Masse 1000 Da (Beschleunigung mit 10 kV):Intaktes Ion bei 1000Da $E_{kin intakt} = 10 \text{ keV} (100\%)$ Fragment f1 mit 500Da $E_{kin f1} = 5 \text{ keV} (nur noch 50\%)$ Fragment f2 mit 100Da $E_{kin f2} = 1 \text{ kV} (nur noch 10\%)$

Alle Ionen mit E_{kin frag} < 70% E_{kin intakt} können nicht mehr tief genug in das Gegenfeld des Reflektors eindringen, werden zu früh reflektiert und verfehlen den Detektor.

Sie müssen daher nachbeschleunigt werden. Das geschieht in einer zweiten Beschleunigungsstrecke (TOF 2).

CID / LID im MALDI-TOF/TOF



 $E_{kin}_{intakt} = (10+20) \text{ keV} = 30 \text{ keV} (100\%)$ $E_{kin}_{f1} = (5+20) \text{ keV} = 25 \text{ keV} (83\%)$ $E_{kin}_{f2} = (1+20) \text{ kV} = 21 \text{ keV}(70\%)$

Mit der Nachbeschleunigung haben auch sehr kleine Fragmente (10% der ursprünglichen Masse) noch genügend kinetische Energie, um den Reflektor passieren zu können und auf den Detektor zu treffen.

Beispiel eines MALDI-TOF/TOF



MALDI-TOF/TOF Spektrum eines Peptids



Typische Anwendungsbereiche von MALDI-TOF/TOF

- Proteomics (bottom-up und top-down mit ISD)
- Glycopeptidanalyse
- MALDI Molecular Imaging
- Identifizierung von Mikroorganismen
- Analyse von Biotherapeutika (Proteine und Antikörper)
- Synthetische Polymere
- •

Imaging MALDI: Biomarker Discovery and Identification on tissue

Principle of MALDI imaging

34

M. Stoeckli et al. / Analytical Biochemistry 311 (2002) 33-39



Fig. 1. MALDI MS imaging process: Cryostatic sections are fixed and coated with matrix, before they are analyzed in a TOF MS. Specific software is used for image acquisition and calculation of image data.

Monitoring of Biomarker Tissue Distribution

MALDI Tissue Imaging: Principle





normal







Invasive Tumor



Epithelium

Tumor Cells (derived from epithelial cells)



Human Breast Cancer Study

100% 0%



Brustkrebstherapie ist abhängig von der Präsenz des "Her2" Markers

- 2 Arten von Brustkrebs, die sich in der Aggressivität des Krankheitsverlaufs unterscheiden: sie können durch den Marker "Her2" differenziert werden, der entsprechend starke Präsenz beim schlechteren Verlauf zeigt
- Dieser Unterschied ist entscheidend für die nachfolgende Art der Chemotherapie
- Falsche Diagnose: belastende Therapie und zusätzliche Kosten von € 25.000, entscheidet über Überlebensrate
- Diagnose wird momentan durch Immunostaining erstellt; diese ist aber nicht eindeutig: "Jeder Histopathologe muss ein Bild beurteilen, das aus Grauzonen besteht und das er in eine Schwarz-Weiss-Antwort überführen muss."
- Die Folge ist eine signifikante Anzahl von Falschbeurteilungen
- Kann MALDI Imaging diese Klassifizierung eindeutiger gestalten?

Marker Panel für Her2+ Patienten



HER2 Marker Panel: Averaged MALDI-TOF MS spectra of HER2+ and HER2breast cancer tissues (discovery set). The arrows mark 6 out of 7 peaks distinguishing the tissue groups.



ROC and box plots of two selected mass signals showing the differentiation of HER2 negative and Her2 positive cancers

The complete Biomarker ID Workflow

From Tissue to Top Down ETD/PTR Spectrum



Sample kindly provided by Dr. Walch and Dr. Rauser, Helmholtz Zentrum Munich

Combination with MALDI Imaging: Identification of a Protein Biomarker Candidate from Breast Cancer Tissue

ETD/PTR TopDown Sequence Analysis



CRIP 1 ist in denselben pathway wie auch HER2 involviert Neuer Marker für HER2 Patienten?

MALDI Biotyper: Identifizierung von Bakterien



Jedes Bakterium hat ein eigenes, eindeutiges MALDI-TOF MS Profil

Fungi, yeast, gram+ and gram- bacteria



Identifizierung durch Vergleich mit Spektrenbibliotheken

Identification by pattern matching



results output; ranking according to matching score
Identifizierung durch Vergleich mit Spektrenbibliotheken

Classificatior	Results		BRUKER
Project Info			
Project Name: Project Description: Project Owner: Project Creation Date/Time: Project Analyte Count:	My Project 312 contains very urgent data kraeuter 2007-02-23 13:12:35.203 12		
Analyte 1 Analyte Name: Analyte Description: Analyte [D: Analyte Creation Date/Time:	A1 measured at A1 XY00001-1 2007-02-23 13:17:56.484		
Match	Matched Pattern	Score Value	NCBI Identifier
1	Acidiphilium acidophilum B349_UFL	2.527	<u>76588</u>
2	Pseudomonas lundensis DSM 6252T HAM	0.626	<u>86185</u>
3	Nocardia sp MB_9090_05 THL	0.408	<u>1817</u>
4	Enterococcus cloacae (PX) 22086116 I_MLD	0.407	<u>550</u>
5	Pseudomonas jessenii CIP 105274 HAM	0.383	77298
6	Escherichia coli ATCC 25922 THL	0.369	<u>562</u>
7	Klebsiella pneumoniae ssp pneumoniae 9295_1 CHB	0.358	72407
8	Pseudomonas abietaniphila CIP 106708 HAM	0.31	<u>89065</u>
9	Pseudomonas savastanoi ssp savastanoi LMG 5011 HAM	0.306	<u>29438</u>
10	Pseudomonas rhodesiae DSM 14020T HAM	0.251	<u>76760</u>

Color-coded identification result.

Vorteile der MALDI-TOF Technologie

- Theoretisch unbegrenzter m/z (Massen)-Bereich
- Simultane Analyse aller Ionen (sehr schnell, kein Scannen notwendig)
- Sehr schnelle Analyse ermöglicht hohem Probendurchsatz
- Hohe Massenauflösung R ≤ 35.000
- Hohe Massengenauigkeit (< 2 ppm), aber die Masseneichung ist relativ aufwendig
- Sehr einfache Handhabung, hoher Automatisierungsgrad, einfach erlernbar
- Einfache Dateninterpretation durch einfach geladene Ionen

MALDI-TOF: Spinnenetz der Eigenschaften



4b. Qq-TOF Hybrid



simultane Detektion



QTOF Massenauflösung und Massengenauigkeit



Automatische Bestimmung der Summenformel



Startpunkt: Jede Komponente hat eine eindeutige Masse! z.B. Reserpine, C₃₃H₄₀N₂O₉: 609.280657 Da [M+H]⁺

> Wenn es nur so einfach wäre wie im TV...

Need to get this sample through the mass spec... and look good doing it ! "

Theoretisches Spektrum von Reserpine

Anzahl von möglichen Summenformeln bei Messfehlern von:





LC/MS run

Sulfadrug-Mix, 5 compounds found



1st suggestion



2nd suggestion

2nd suggestion (zoom)

3rd suggestion

🞇 G2000016.D (modified) [Default.ms (modified)] - Bruker Daltonics Data	nalysis			
Eile Edit Find MassList Deconvolute Identify Process Calibrate Annotation	<u>M</u> ethod	<u>V</u> iew <u>T</u> ools <u>W</u> indow <u>H</u> elp		
🖆 🖬 🎒 🖪 🕼 🖉 🛛 🦗 🆄 🏷 ଦ° 🔍 🗍 🛦 🛝 🗛 🗛	<u>a</u> .	, ar i ar i ar i ar i ar i ar	16 tat 🛛 🛛 🖓 🛛	🛿 🕨 🗛 🎎 🚠 📖 🕅 🍑 📷 🌆
Generate formula	npou tens	nd Mass Spectra - GZ000016.D	Π	× 12 0-in #227
Min: C ₅ H ₅ Cl ₀ N ₄ O ₀ S ₀ Generate			l l	1000#1000
Max: C ₂₀ H ₂₀ Cl ₂ N ₄ O ₂ S ₂	2500-	286.02622	21	
C 5-20 CI 0-2 H 5-20 N 4-4 0 0-2 S 0-2				
Measured m/z: 85.022029 Tolerance: 0.005 Charge: 1 📩	2000-			
# MF m/z err dbl eq 1 C16 H 5N 45 1 295 022942 0.000914 0.000				
2 C10H10C11N402S1 285.020750 0.001279 0.000 3 C7H14C11N402S2 285.020750 0.001279 0.000	1500-			
4 C 13 H 9 N 4 S 2 285.026314 0.004285 0.000 5 C 13 H 6 C 1 N 4 O 2 285.026314 0.004285 0.000	1000			
	1000			288.021290
	500-			299.010592
	1		11	
	0			
				C7H14CIN40252 ,285.02
	3000-			we have a C of the second
	2500-			ratio of 4th and
Valence mode OFF 💌 Double bond eq min 0 🗆 Signed error		286.02298	80	5th isotope differs
Algorithm: LOW Double bond eq max 0	2000-			
Generate n formula 200	1500-			
	1000			288.020402
	1			289.019113
	500-			
	0-		/	
For Help, press F1	0	285 286	287 raether	288 289 290 m/z

Generate Molecular Formula

🗞 G2000016.D (modified) [Default.ms (modified)] - Bruker Daltonics DataAn	alysis	
Eile Edit Find MassList Deconvolute Identify Process Calibrate Annotation M	<u>1</u> ethod <u>V</u> iew	w Iools Window Help
🖉 🖬 🖪 🖪 📓 🚜 🕅 🗖 🍳 🏹 🗛 🔺 🗛	a n n	
Generate Molecular Formula	Compour	ind Mass Spectra - GZ000016.D
Mjn:	1.5- 1.0- 1.0- 0.5- 0.0- ×104 2.0-	+MS, 13.Umin #387 285.022029 287.019410 286.026221 288.021290 C10H10CIN4025 ,285.02 285.020924
Valence mode AUTO Sigma limit: 0.025 Double bond eq min 0 Generate n formula 200 Double bond eq max 0	1.5- - - 1.0-	correct formula has best "σ–fit" : Sulfachloropyridazine
	0.5- 0.0- 0.0-	286.019895 285 286 287 288 289 m/z
For Help, press F1		raether 284.494748 m/z 0 cnts

Einbindung von MS/MS Daten zur Reduzierung der Liste von möglichen Summenformeln

Erythromycin ($C_{37}H_{67}NO_{13}$), $M_{[M+H]} = 724.4685$

Mass Spectrum von Erythromycin

734,4683

2	1	20205					I			_	
	Meas. m/z	#	Formula	m/z	err (ppm)	rdb	N-Rule	e Conf	mSigma		
	734.4683	1	C 34 H 60 N 11 O 7	734.4672	-1.6	10.5	ok	even	6.51		
	734.4683	2	C 37 H 68 N O 13	734.4685	0.3	4.5	ok	even	8.19		
	734.4683	3	C 35 H 56 N 15 O 3	734.4685	0.2	15.5	ok	even	18.68		
	734.4683	4	C 39 H 189 N 2 O 3	734.4693	1.3	-53.5	ok	even	23.88		
	734.4683	5	C 24 H 185 N 14 O 4	734.4698	2.0	-60.5	ok	even	47.49		
	734.4683	6	C 26 H 197 O 14	734.4698	2.0	-71.5	ok	even	49.24		\mathbf{N}
	734.4683	7	C 23 H 189 N 10 O 8	734.4684	0.1	-65.5	ok	even	52.47		
	734.4683	8	C 20 H 52 N 27 O 4	734.4690	0.9	8.5	ok	even	53.31		
	734.4683	9	C 22 H 64 N 13 O 14	734.4690	0.9	-2.5	ok	even	54.81		
	734.4683	10	C 22 H 193 N 6 O 12	734.4671	-1.7	-70.5	ok	even	61.52		
	734.4683	11	C 20 H 181 N 20 O 2	734.4671	-1.7	-59.5	ok	even	61.79	3,4	737
	734.4683	12	C 21 H 68 N 9 O 18	734.4677	-0.9	-7.5	ok	even	65.90		
	734.4683	13	C 19 H 56 N 23 O 8	734.4677	-0.9	3.5	ok	even	67.10	쓰	
	734.4683	14	C 50 H 60 N 3 O 2	734.4680	-0.4	22.5	ok	even	82.59		
	734.4683	15	C 10 H 197 N 8 O 19	734.4690	0.8	-83.5	ok	even	120.69		
	734.4683	16	C 5 H 48 N 39 O 5	734.4695	1.6	1.5	ok	even	122.78		
	734.4683	17	C 9 H 72 N 11 O 25	734.4695	1.6	-20.5	ok	even	125.51		
	734.4683	18	C 5 H 177 N 32 O 3	734.4676	-1.0	-66.5	ok	even	130.04		
	734.4683	19	C 8 H 185 N 22 O 9	734.4689	0.8	-72.5	ok	even	130.75		
	734.4683	20	C 9 H 201 N 4 O 23	734.4676	-1.0	-88.5	ok	even	131.79		
	734.4683	21	C 7 H 60 N 25 O 15	734.4695	1.6	-9.5	ok	even	132.89		
.	734.4683	22	C 4 H 52 N 35 O 9	734.4682	-0.2	-3.5	ok	even	135.80		
	734.4683	23	C 8 H 76 N 7 O 29	734.4682	-0.2	-25.5	ok	even	137.02		
	734.4683	24	C 7 H 189 N 18 O 13	734.4676	-1.0	-77.5	ok	even	140.74		
	734.4683	25	C 6 H 64 N 21 O 19	734.4682	-0.2	-14.5	ok	even	145.83		

Mass List \lambda Deconvolution Results \lambda SmartFormula .

Mass accuracy: 25 possible hits in a 2 ppm window without any filtering applied

×	#	Meas. m/z	Formula	m/z	err [ppm]	N-Rule	e Conf	mSigma
	1	734.4683	C 34 H 60 N 11 O 7	734.4672	-1.6	ok	even	6.51
	2	734.4683	C 37 H 68 N O 13	734.4685	0.3	ok	even	8.19
R.	3	734.4683	C 35 H 56 N 15 O 3	734.4685	0.2	ok	even	18.68
õ	4	734.4683	C 50 H 60 N 3 O 2	734.4680	-0.4	ok	even	82.59
EΙ								

∖ Mass List) Deconvolution Results) SmartFormula

- 4 possible hits when additionally <u>isotope pattern</u> <u>matching</u> and "estimate carbon number" are used as filters
- These are the choices without taking MS/MS into account

MS/MS Spectrum von Erythromycin

Which <u>fragment</u> sum formulae fit the best with the <u>total</u> sum formula proposals ?

- MS/MS spectrum shows significant fragments
- especially the low mass fragments (e.g., at 158 Da) are important for reduction of possible hits

Fragment annotation im MS/MS Spektrum

Metabolomics: example coffee capsules

13 different coffee capsule types:

- 3 lungo style (recomended extraction volume 120 ml)
- 7 espresso «blends»
- 3 espresso «pure origine» coffee from one country only
- QC sample: mix of all analytical samples
- Extracted 2 times each with 35 ml water using XN 3005 Nespresso
 Pixie espresso maschine (Krups)

Question: can we identify compounds which are related to the <u>taste strength</u> of the coffee (not coffein content, but roast degree)?

> Picture from: http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Used_and_cleaned_Nespresso_capsules.jpg

Statistical evaluation of the sample cohort

SmartFormula zur Identifizierung der Komponente

SmartFormula zur Identifizierung der Komponente

Datenbanksuche in CompoundCrawler

Eingabe der Summenformel in Datenbank

Interpretation des Ergebnisses: Nicotinsäure als Abbauprodukt von Trigonelline trägt zum starken Kaffeearome bei

"Trigonelline degradation is proportional to roast degree. Its byproducts include pyridines, which are said to contribute a roasty aroma to the coffee."

http://www.coffeeresearch.org/science/bitt ermain.htm

Compound X

Multitarget Screening in Lebensmittelkontrolle

akkurate Massen zum target screening statt MRM im QqQ

Workflow

Workflow

Struktur der Datenbank

- simple text file, in "comma separated value" format
- can easily be edited with excel or notepad

	m/z	RT	formula	name								
	A	В	С	D	E	F	G	Н		J	K	
1	215.093773	28.9	C8H14CIN5	Atrazine	1912-24-9	Х	Ehrenstorfer 34			0.03	3	
2	290.082205	32.7	C15H15CIN2O2	Chloroxuron	1982-47-4	Х	Ehrenstorfer 35			0.03	3	
3	213.055656	32.4	C10H12CINO2	Chlorpropham	101-21-3	х	Ehrenstorfer 36			0.03	3	
4	212.071641	28.5	C10H13CIN20	Chlortuloron	15545-48-9	Х	Ehrenstorfer 37			0.03	3	
5	172.0636	23.6	C7H10CIN3	CRIMIDINE	535-89-7	Х	Ehrenstorfer 38			0.03	3	
6	240.089022	25.5	C9H13CIN6	Cyanazine	21725-46-2	Х	Ehrenstorfer 39			0.03	3	
7	188.0697	22.1	C6H10CIN5	DESETHYL ATRAZIN	6190-65-4	Х	Ehrenstorfer 40			0.03	3	
8	145.015523	6.2	C3H4CIN5	Desethyl-Desisopropylatrazin		Х	Ehrenstorfer 41			0.03	3	
9	173.046823	20.2	C5H8CIN5	Desisopropylatrazin	1007-28-9	х	Ehrenstorfer 42		10000	0.03	3	
10	232.017018	29.7	C9H10Cl2N2O	Diuron	330-54-1	х	Ehrenstorfer 43			0.03	3	

Workflow

- Berechnung der theoretischen Masse des [M+H]⁺ lons aus der Summenformel

- Berechnung der jeweiligen EIC ("extracted ion current" = Massenspur im Chromatogram
- Peaks mit der falschen Retentionszeit werden verworfen

Open Analysis Name: D:\PP_AppIMeet_2007/for_TA an Pp1/TA_7(Ehr34_2ppb_Luna_A182_getunt_1-8,2_01_1398.d Method Sommag. 25.02.2007, 00:40:20 Openator: eid demo Instrume/Fast: microTOF Method: pp_targetanalysis_pesticides_ohne-profil_psw2_short-gradient_carbamates.m Sample Name: EHr34_2ppb_Luna_A182_getunt Galabrate Comment: Luna_ASun C18 2x100m (Mort Target_Analysis_uTOF(Data)DemoPestoideDataBase_For=File_1398.cs/ Multi Target Screening with D:\Demo/2007(Target_Analysis_uTOF(Data)DemoPestoideDataBase_For=File_1398.cs/ Formal Formal Err(Mpa) Signe A Sorgen Vitil Target Screening with D:\Demo/2007(Target_Analysis_uTOF(Data)DemoPestoideDataBase_For=File_1398.cs/ Formal Err(Mpa) Signe A Sorgen Vitil Target Screening with D:\Demo/2007(Target_Analysis_uTOF(Data)DemoPestoideDataBase_For=File_1398.cs/ Formal Err(Mpa) Signe A Descreening Methoacouron 300007 C 9112 Br 1N 20 2 [M+1]+ 0.0 1.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	hr34_2ppb_Luna_A	1B2_getunt_	_1-B,2_01_1398.d [1398.m	(modified)] - Bruker Daltonics Tar	jetAnalysis					8 _
Itelahod Operation Outcome Soft Reg. Operation Outcome Soft Reg. Distrument / Ser #: Instrument / Ser #: I	Open	Analysis N	ame: D:\PP_AppliMeet_2	2007\for_TA	an Pp1\TA_7\Ehr34_2ppb_Li	una_A1B2_ge	tunt_1-B,2_()1_1398.d			
Destund operator: est demo Instrument / Serk: mixTOTOF Clear Results Sample Name: Eh/34_2ppb_Luna_A182_getunt Calbrate Comment: Luna_2.Sum C18 2x100mm (Port 1), mit Vorsaule, Kalbration: 10 mM NaFormiat, 100 ul/min, Ehrenstonfer Mix: 34 , 2 ppul (95/5), Tur Scregen Scregen Multi Target: Screening with D1:Demo(2007/Target_Analysis_uTOFIDeata/DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv/ Found Compound Name Reg. No. Multi Target: Screening with D1:Demo(2007/Target_Analysis_uTOFIDeata/DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv/ Print Metoarron 306007 C 11 12 0 2 (14H17) 11 N 20 (2 Metoarron 306007 C 11 12 0 2 (14H17) 0.0 Metoarron Metoarron Metoarron Metoarron Metoarron Metoarron Metoarron	Mothod -		i Date: Sonntay, 25.02.20	07,00:40:20	,						
Instrument / Ser#: microTOF Clear Results sample Name: pt_argetanalysis_pesticides_ohne-profil_psw2_short-gradient_carbamates.m Sample Name: btrast_2ppb_luma_AIB2_getunt Calibrate Comment: Luna 2.Sum C18 2x100mm (Port 1), mit Vorsaule, Kalibration: 10 mM NaFormiat, 100 u/min, Ehrenstorfer Mix: 34 , 2 pgul (95/5), Tur Scrgen Seneral Upinnown Mult Target Screening with 'D\Demo\2007/Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv' Found Compound Name Reg.No. Mult Target Screening with 'D\Demo\2007/Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv' Found Compound Name Reg.No. Mult Target Screening with 'D\Demo\2007/Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv' Mult Ascoursenin		Operator:	esi demo								
Clear Results Method: pp_targetanalysis pesticides ofthe profil psw2_short-gradient_carbamates.m Sample Name: Eh/34_2pb_Luna_A182_getunt Galbrate Comment: Luna 2.Sun C18 2x100mm (Port 1), mit Vorsaule, Kalbration: 10 mM NaFormiat, 100 ul/min, Ehrenstorfer Mix 34 , 2 pgul (95/5), Tur Sorgen Multi Target Screening with Dx10emo/2007/Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv' Found Compound Name Reg,No. Mol.Formula PHI [d RT[Err [ppm]] Err [mDa] Signa A Birrer		Instrumen	t / Ser#: micrOTOF								
Clear Results Sample Name: Ehr34_2ppb_Luna_A182_getunt Comment: Luna 2.5um C18 2x100mm (Port 1), mit Vorsaule, Kalibration: 10 mM NaFormiat, 100 ul/min, Ehrenstorfer Mix 34, 2 pgul (95/5), Tun Sorgen Multi Target Screening with 'D:\Demo\2007\Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPestideDataBase_For-File_1398.csv' Ferred Unknown Multi Target Screening with 'D:\Demo\2007\Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPestideDataBase_For-File_1098.csv' Found Compound Name Rep.No. Mol.Formula PMI dRT Rep. No. Bayre Multi Target Screening with 'D:\Demo\2007\Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPestideDataBase_For-File_1398.csv' Err (mDa) Sigma An Bayre Metoxuron 1993708 C10 H14 C1 N 2 0 2 MH+H 0.0 3.5 1.0 0.0596 48 Diron 30001 C 9H112 G1 N 3 0 1 MH+H 0.0 3.6 0.6010 615 Pint Metoxuron 1993708 C10 H14 C1 N 2 0 1 MH+H 0.0 3.6 0.8600 0.033 0.53 0.53 0.53 0.53 0.53 0.53 0.53 0.53 0.53 0.53 0.6 <td>Class Devides</td> <td> Method:</td> <td>pp_targetanalysis_</td> <td>_pesticides_o</td> <td>hne-profil_psw2_short-gradi</td> <td>ent_carbamat</td> <td>es.m</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	Class Devides	Method:	pp_targetanalysis_	_pesticides_o	hne-profil_psw2_short-gradi	ent_carbamat	es.m				
Calibrate Comment: Luna 2.5un C18 2:100mm (Port 1), mit Vorsaule, Kalibration: 10 mM NaFormiat, 100 u/(min, Ehrenstorfer Mix 34 , 2 pgd (95/5), Tun Sorgen Mult Target Screening with D:\Demo\2007/Target_Analysis_uTOF[Data]DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv/ Found Compound Name Reg.No. Mol.Formula PMI RTI Err [mpon] Err [mDa] Signs Arr Bive	Cjear Results	Sample Na	ime: Ehr34_2ppb_Lunaj	_A1B2_getun	t						
Strgen Multi Target Screening with D:\Demo\2007\Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv' Found Compound Name Reg.No. Mol.Formula PMIL d RT [Err [opm] Err [nDa] Sigma Ai Seve MetoXuron 199708 C10H1H (1 N 2 0 2 [MH-H] 0.0 3.5 1.0 0.0594 416 Print MetoXuron 1993708 C10H1H (1 N 2 0 2 [MH-H] -0.0 2.3 0.5 0.0531 618 Print Ouron 300007 C10H1 12 N 2 0 1 [M+H] -0.0 6.7 -1.6 0.0623 648 Ouron 30001 C10H1 12 N 3 0 151 [M+H] -0.0 6.6 0.0610 811 Ouron 166109 C10H1 2N 30 151 [M+H] -0.0 8.1 1.2 0.0353 252 Print with Egcel ++ Desethyl-Desisopropyla 0 C3H5 C1 N S [M+H] -0.0 1.6 -0.2 0.0368 503 ++ Desethyl-Desisopropyla 0 C3H 5 C1 N S	Calibratio	Comment:	Luna 2.5um C18 2	- (100mm (Porl	t 1), mit Vorsaule, Kalibration	: 10 mM NaFo	ormiat. 100 u	l/min. Ehrens	torfer Mix 34	. 2 paul (95/	5). Tune opi
Strgen Multi Target Screening with 'D:\Demo\2007\Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv' Found Compound Name Reg.No. Mol.Formula PMI d RT[Err (ppm) Err (ppm) Err (ppm) Sigma Au Save Metobromuron 300007 C 9H 12 Dr 1N 2 O 2 (M+H)+ 0.0 3.5 1.0 0.0596 480 Save Metobromuron 1993708 C 10H 1/C 1N 3 0 1 (M+H)+ 0.0 3.5 1.0 0.0596 480 Print Metosuron 1993708 C 10H 1/C 1N 3 0 1 (M+H)+ -0.0 3.5 1.0 0.0596 480 DataAnalysis Metosuron 1993708 C 10H 1/C 1N 3 0 151 (M+H)+ -0.0 8.1 1.2 0.0503 680 Ouron 33007 C 7H 11 C 1 N 3 (M+H)+ -0.0 8.1 1.2 0.0384 500 DataAnalysis +++ CRIMDINE 53077 C 7H 11 C 1 N 3 (M+H)+ -0.0 1.4 -0.2 0.036 603 ++ Resolut 100]			,,,)	-,,,
Description Multi Target Screening with D:\Demo\2007\Target_Analysis_uTOF\Data\DemoPesticideDataBase_For-File_1398.csv' Spece Found Compound Name Reg.No. Mol.Formula PMI d RT[Err [mDa] Sigma Au Spece Metoshomuron 306007 C 9 H12 B1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.1 7.8 -2.0 0.0594 318 Print Metoshomuron 306007 C 9 H12 B1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.5 1.0 0.0596 46 Metoshoruron 33001 C 9 H11 C1 N 3 O 1 [M+H]+ 0.0 3.5 0.0531 619 Metoshoruron 33001 C 9 H11 C1 N 3 O 1 S 1 [M+H]+ 0.0 6.7 -1.6 0.0623 648 Methaberxthiazuron 1869109 C 10 H1 N 3 O 1 S 1 [M+H]+ 0.0 3.6 0.6 0.610 815 Methaberxthiazuron 1869109 C 10 H1 N 3 O 1 S 1 [M+H]+ 0.0 1.1 -0.2 0.033 0.7 0.0370 696 ++ C RIMUTRON 114602 <td< td=""><td>Screen 💌</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></td<>	Screen 💌										
Multi Target Screening with D:Demol2007/Target_Analysis_uTOPDeta(DemoPestiddeDetaBase_For-File_1398.csv' Found Compound Name Reg.No. Molt-formula PMIL dRT [Err [mDa] Sigma An Seve	bergen										
Found Compound Name Reg.No. Mol.Formula PMI d RT [Err [mba] Signa Au Seve	eneral Unknown 🛛 👻	. Multi Targe	et Screening with 'D:\Demo\20(D7\Target_Ar	halysis_uTOF\Data\DemoPes	ticideDataBas	e_For-File_1	398.csv'			
Save		- Found	Compound Name	Reg.No.	Mol.Formula	PMI	d RT [Err [ppm]	Err [mDa]	Sigma	Area
Seve			Metobromuron	306007	C9H12Br1N2O2	[M+H]+	0.1	7.8	-2.0	0.0594	31842
Bond Metoxuron 1993708 C 10 H 14 C 1 N 2 O 2 [M+H]+ -0.0 1.1 -0.3 0.0512 541 Print Diuron 33001 C 9 H 11 C 1 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 6.7 -1.6 0.0623 645 Data Methabenzthiazuron 1869109 C 10 H 12 N 3 O 15 1 [M+H]+ 0.0 6.7 -1.6 0.0623 645 Data Desethyl-besisopropyla O C 3H 5 C 1 N 5 [M+H]+ 0.0 3.6 0.8 0.0610 815 Print with Egcel ++ C RMIDNE 53507 C 7 H 11 C 1 N 3 [M+H]+ 0.0 0.1 0.0 0.0384 503 Print with Egcel ++ Monolnuron 174602 C 9H 12 C 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 0.1 0.0 0.0384 503 ++ Monolnuron 174602 C 9H 12 C 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 1.0 0.0370 669 ++ Metolachlor 5121802 C 111 N 1 O 2 <td>Caus</td> <td>1</td> <td>Metazachlor</td> <td>6712902</td> <td>C14H17Cl1N3O1</td> <td>[M+H]+</td> <td>0.0</td> <td>3.5</td> <td>1.0</td> <td>0.0596</td> <td>48636</td>	Caus	1	Metazachlor	6712902	C14H17Cl1N3O1	[M+H]+	0.0	3.5	1.0	0.0596	48636
Print	Sane		Metoxuron	1993708	C 10 H 14 CI 1 N 2 O 2	[M+H]+	-0.0	1.1	-0.3	0.0512	54115
Erint		1	Diuron	33001	C9H11Cl2N2O1	[M+H]+	-0.0	2.3	0.5	0.0531	61943
DetaAnalysis Methabenzthiazuron 1869109 C 10 H 12 N 3 0 1 S 1 [M+H]+ 0.0 3.6 0.8 0.0610 815 DataAnalysis ++ Dessthyl-Desisopropyla 0 C 3 H 5 C 11 N 5 [M+H]+ -0.0 8.1 1.2 0.0333 252 Print with Excel ++ CRIMIDINE S3007 C 7 H 11 Cl N 3 [M+H]+ -0.0 8.1 1.2 0.0333 252 Print with Excel ++ CRIMIDINE S3002 C 9 H 12 Cl N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 0.14 -0.2 0.0384 503 ++ Methabenzthiazuron 174602 C 9 H 12 Cl N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.3 0.7 0.0373 666 ++ Methabenzthiazuron 198204 C 15 H 16 Cl N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.3 -1.0 0.0253 8600 ++ Atrazine 191209 C 8 H 15 Cl N 1 S 0 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0251 1166 ++ Atrazine	Print		Cyanazine	2172502	C 9 H 14 Cl 1 N 6	[M+H]+	0.0	6.7	-1.6	0.0623	64533
DataAnalysis +++ Desethyl-Desisopropyla 0 C 3 H 5 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 8.1 1.2 0.0353 252 Print with Excel +++ CRIMIDINE 53507 C 7 H 11 Cl 1 N 3 [M+H]+ -0.0 1.4 -0.2 0.0368 404 +++ CRIMIDINE 53507 C 7 H 11 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ -0.0 1.4 -0.2 0.0368 404 +++ Linuron 33002 C 9H 11 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 1.0 0.0384 503 ++ MetoInuron 174602 C 9H 12 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.3 0.7 0.0370 669 ++ DESETHYL ATRAZIN 61904 C 6H 11 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0373 668 ++ DESETHYL ATRAZIN 61904 C 15H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.22 -1.5 0.0373 668 ++ Chloroxuron 198204 C 15H 23 Cl 1 N 10 2 [M+H]+ <td></td> <td></td> <td>Methabenzthiazuron</td> <td>1869109</td> <td>C10H12N3O151</td> <td>[M+H]+</td> <td>0.0</td> <td>3.6</td> <td>0.8</td> <td>0.0610</td> <td>81911</td>			Methabenzthiazuron	1869109	C10H12N3O151	[M+H]+	0.0	3.6	0.8	0.0610	81911
DataAnalysis +++ CRIMIDINE 53507 C7H11 Cl N3 [M+H]+ -0.0 1.4 -0.2 0.0368 404 Print with Excel ++ Linuron 33002 C 9H 11 Cl N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 0.1 0.0 0.0384 503 Print with Excel ++ Monolinuron 174602 C 9H 12 Cl N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.3 0.7 0.0370 666 ++ METAMITRON 4139402 C 10H 11 N 4 0 1 [M+H]+ 0.0 3.3 -7 0.0370 699 ++ DESETHYL ATRAZIN 619004 C 6H 11 Cl N 5 [M+H]+ 0.0 3.3 -1.0 0.0253 866 ++ Atrazine 191209 C 8H 15 Cl N 5 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0300 993 ++ Atrazine 191209 C 8H 15 Cl N 5 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0251 1166 +++ Propazine 13902 C 9H 17 Cl N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 +++ Prometryn		++	Desethyl-Desisopropyla	0	C3H5Cl1N5	[M+H]+	-0.0	8.1	1.2	0.0353	25219
Print with Excel ++ Linuron 33002 C 9 H 11 Cl 2 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 0.1 0.0 0.0384 503 Print with Excel ++ Montinuron 174602 C 9 H 12 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 2.6 -0.6 0.0249 563 ++ METAMITRON 4139402 C 10H 11 N 4 O 1 [M+H]+ 0.0 3.3 0.7 0.0373 666 ++ DESETHYL ATRAZIN 619004 C 6H 11 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 3.3 -1.0 0.0253 866 ++ Atrazine 191209 C 8H 15 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0300 993 ++ Atrazine 191209 C 8H 15 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0251 1186 ++ Propazine 13902 C 9H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Propazine 13902 C 9H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Propazine <t< td=""><td>DataAnalysis</td><td> ++</td><td>CRIMIDINE</td><td>53507</td><td>C7H11Cl1N3</td><td>[M+H]+</td><td>-0.0</td><td>1.4</td><td>-0.2</td><td>0.0368</td><td>40494</td></t<>	DataAnalysis	++	CRIMIDINE	53507	C7H11Cl1N3	[M+H]+	-0.0	1.4	-0.2	0.0368	40494
Print with Excel +++ Monolinuron 174602 C 9 H 12 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 2.6 -0.6 0.0249 563 ++ METAMITRON 4139402 C 10 H 11 N 4 O 1 [M+H]+ 0.0 3.3 0.7 0.0373 666 ++ DESETHYL ATRAZIN 619004 C 6 H 11 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 3.9 0.7 0.0370 695 ++ DESETHYL ATRAZIN 619004 C 6 H 11 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ -0.0 3.3 -1.0 0.0253 860 ++ DESETHYL ATRAZIN 619004 C 6 H 11 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0300 993 ++ Atrazine 191209 C 8 H 15 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ -0.0 1.1 0.2 0.0205 1166 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0251 1166 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Propazine	<u></u>	J ++	Linuron	33002	C9H11Cl2N2O2	[M+H]+	0.0	0.1	0.0	0.0384	50330
Hink Widt Eged ++ METAMITRON 4139402 C 10 H 11 N 4 O 1 [M+H]+ 0.0 3.3 0.7 0.0373 666 ++ DESETHYL ATRAZIN 619004 C 6 H 11 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 3.3 -1.0 0.0253 866 ++ Object Cl 5 H 16 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.3 -1.0 0.0253 866 ++ Atrazine 191209 C 8 H 15 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0309 993 ++ Metolachlor 5121802 C 15 H 23 Cl 1 N 1 0 2 [M+H]+ -0.0 1.1 0.2 0.0205 1361 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Propazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.0 -0.0 0.0197 917 ++ Storeatine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ Storeatine 51033 C 9 H 13 N 2 O 1 [Print with Excel	1 ++	Monolinuron	174602	C9H12Cl1N2O2	[M+H]+	0.0	2.6	-0.6	0.0249	56395
++ DESETHYL ATRAZIN 619004 C 6 H 11 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 3.9 0.7 0.0370 699 ++ Chloroxuron 198204 C 15 H 16 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.3 -1.0 0.0253 860 ++ Atrazine 191209 C 8 H 15 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0300 993 ++ Metolachlor 5121802 C 15 H 23 Cl 1 N 1 O 2 [M+H]+ -0.0 5.2 -1.5 0.0251 1065 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.1 0.2 0.0251 1861 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Prometryn 728603 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Prometryn 728603 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5			METAMITRON	4139402	C 10 H 11 N 4 O 1	[M+H]+	0.0	3.3	0.7	0.0373	66815
++ Chloroxuron 198204 C 15 H 16 Cl 1 N 2 O 2 [M+H]+ 0.0 3.3 -1.0 0.0253 860 ++ Atrazine 191209 C 8 H 15 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0300 993 ++ Metolachlor 5121802 C 15 H 23 Cl 1 N 1 O 2 [M+H]+ -0.0 5.2 -1.5 0.0251 1065 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0251 1166 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Propazine 728603 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Sebutylazine 728606 C 10 H 20 N 5 51 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0199 917 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 <td< td=""><td></td><td>++</td><td>DESETHYL ATRAZIN</td><td>619004</td><td>C6H11Cl1N5</td><td>[M+H]+</td><td>-0.0</td><td>3.9</td><td>0.7</td><td>0.0370</td><td>69901</td></td<>		++	DESETHYL ATRAZIN	619004	C6H11Cl1N5	[M+H]+	-0.0	3.9	0.7	0.0370	69901
++ Atrazine 191209 C 8 H 15 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.0 0.2 0.0300 993 ++ Metolachlor 5121802 C 15 H 23 Cl 1 N 1 0 2 [M+H]+ -0.0 1.1 0.2 0.0251 1166 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0251 1166 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Propazine 728006 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0205 1361 ++ Prometryn 728706 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0205 1361 +++ Prometryn 728706 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0197 913 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+		++	Chloroxuron	198204	C 15 H 16 CI 1 N 2 O 2	[M+H]+	0.0	3.3	-1.0	0.0253	86015
++ Metolachlor 5121802 C 15 H 23 Cl 1 N 1 0 2 [M+H]+ -0.0 5.2 -1.5 0.0294 1065 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0251 1186 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Sebutylazine 728005 C 10 H 20 N 5 51 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.0 -0.01 0.0197 913 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.139 961 +++ Terbutylazine S91503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ <		++	Atrazine	191209	C8H15C11N5	[M+H]+	-0.0	1.0	0.2	0.0300	99394
++ Propazine 113002 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.1 0.2 0.0251 1186 ++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.2 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Propazine 72803 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Sebutylazine 72806 C 10 H 20 N 5 51 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Prometryn 728706 C 10 H 20 N 5 51 [M+H]+ -0.0 0.0 -0.0 0.0197 913 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0197 913 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 2108709 C 8 H 15 N 4 O 1 5 1 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Isoproturon 3412306 C 12 H 19 N 2 O 1 [M+H		++	Metolachlor	5121802	C 15 H 23 CI 1 N 1 O 2	[M+H]+	-0.0	5.2	-1.5	0.0294	106564
++ Propazine 13902 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.2 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Sebutylazine 728003 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Sebutylazine 728006 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.0 -0.0 0.0197 913 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Terbutylazine 591503 C 91 H 7 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Isoporturon 3412306 C 12 H 19 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.8		++	Propazine	13902	C9H17Cl1N5	[M+H]+	0.0	1.1	0.2	0.0251	118620
++ Sebutylazine 728603 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.5 0.3 0.0205 1361 ++ Prometryn 728706 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Prometryn 728706 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.0 -0.0 0.0197 913 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 0 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 0 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 0 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 <td< td=""><td></td><td>++</td><td>Pronazine</td><td>13902</td><td>C9H17Cl1N5</td><td>[M+H]+</td><td>-0.2</td><td>1.5</td><td>0.3</td><td>0.0205</td><td>136115</td></td<>		++	Pronazine	13902	C9H17Cl1N5	[M+H]+	-0.2	1.5	0.3	0.0205	136115
++ Prometryn 728706 C 10 H 20 N 5 S 1 [M+H]+ 0.0 0.5 -0.1 0.0231 2075 +++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.0 -0.0 0.0197 913 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0199 917 +++ Metribuzin 2108709 C 8 H 15 N 4 O 1 5 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ Metribuzin 2108709 C 8 H 15 N 4 O 1 5 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ Metribuzin 2108709 C 8 H 15 N 4 O 1 5 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.113 961 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Isoproturon 3412306 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1		++	Sebutylazine	728603	C 9 H 17 Cl 1 N 5	[M+H]+	0.0	1.5	0.3	0.0205	136115
+++ Simazine 12209 C 7 H 13 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.0 -0.0 0.0197 913 +++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ FENURON 2108709 C 8 H 15 N 4 O 1 5 1 [M+H]+ -0.0 4.2 -0.9 0.0143 961 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Tsoproturon 3412306 C 12 H 19 N 2 O 1 [M+H]+ 0.0 1.9 0.4 0.0180 1630 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 + - - - - - - - - - - - - - - - - - - -		++	Prometryn	728706	C 10 H 20 N 5 S 1	[M+H]+	0.0	0.5	-0.1	0.0231	207587
+++ FENURON 10108 C 9 H 13 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.4 -0.1 0.0139 917 +++ Metribuzin 2108709 C 8 H 15 N 4 O 1 5 1 [M+H]+ -0.0 4.2 -0.9 0.0143 961 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ 0.0 1.9 0.4 0.0180 1630 +++ Tsoproturon 3412306 C 12 H 19 N 2 O 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 -		+++	Simazine	12209	C 7 H 13 CI 1 N 5	[M+H]+	-0.0	0.0	-0.0	0.0197	91392
H+++ Metribuzin 2108709 C 8 H 15 N 4 O 1 5 1 [M+H]+ -0.0 4.2 -0.9 0.0143 961 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Tsoproturon 3412306 C 12 H 19 N 2 O 1 [M+H]+ 0.0 1.9 0.4 0.0180 1630 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 -		+++	FENLIRON	10108	C9H13N2O1	[M+H]+	-0.0	0.4	-0.1	0.0139	91741
+++ Terbutylazine 591503 C 9 H 17 Cl 1 N 5 [M+H]+ -0.0 0.7 -0.2 0.0137 1255 +++ Isoproturon 3412306 C 12 H 19 N 2 O 1 [M+H]+ 0.0 1.9 0.4 0.0180 1630 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 Image: the state of the sta		+++	Metribuzin	2108709	C8H15N40151	[M+H]+	-0.0	4.2	-0.9	0.0143	96105
+++ Isoproturon 3412306 C 12 H 19 N 2 O 1 [M+H]+ 0.0 1.9 0.4 0.0180 1630 +++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963		+++	Terbutylazine	591503	C 9 H 17 Cl 1 N 5	[M+H]+	-0.0	0.7	-0.2	0.0137	125577
+++ TERBUTRYN 88600 C 10 H 20 N 5 5 1 [M+H]+ -0.0 0.8 -0.2 0.0124 1963 Help Screening Results General Unknown Results G		+++	Isoproturon	3412306	C12H19N2O1	[M+H]+	0.0	1.9	0.4	0.0180	163059
Help Screening Results General Unknown Results		+++	TERBUTRYN	88600	C 10 H 20 N 5 S 1	[M+H]+	-0.0	0.8	-0,2	0.0124	196305
Help Screening Results General Unknown Results		•	-								
	Help	Screen	ing <u>R</u> esults General <u>L</u>	Jnknown Res	ults						
p, press F1 PP	p, press F1									PP	

Multitarget Screening: Sehr hohe Anzahl von Pestiziden gleichzeitig abfragen

Jeder andersfarbig markierter Peak repräsentiert ein Pestizid

Ion Mobility Mass Spectrometry

Information aus:

- MS-Spektren: exakte Masse von Komponenten
- MS/MS-Spektren: grundsätzliche Strukturaussagen, Verifizierung von bekannten Strukturen
- Ion mobility: Trennung von <u>Isomeren</u> und <u>Strukturunterschieden</u> von gleichen Molekülen (durch ihre unterschiedlichen Stoßquerschnitte Å²)

Theorie der Ion Mobility

- "Gelfiltration in der Gasphase"
- Trennt Ionen mit unterschiedlichen Driftgeschwindigkeiten (v_d) aufgrund ihrer Stoßquerschnitts mit einem Puffergas in einem elektrischen Feld E

Bestimmung von K

$$K = \frac{3 q}{16 N} \sqrt{\frac{1 2\pi}{\mu k_b T}} \frac{1}{\Omega} \longrightarrow K \sim \frac{q}{\Omega}$$

Die "mobility constant" K ist abhängig von:

- Ionenladung q
- Dichte des Puffergases N
- Masseverhältnis der Analyt- und Gasmoleküle μ . Für große Moleküle der Masse gilt μ ~ Masse des Puffergases
- Temperatur T
- Stoßquerschnitt Ω

Im wesentlichen ist K proportional zum Verhältnis von Ladung und Stoßquerschnitt.

IMS Setup

Trennung von zwei isomeren Peptiden

Identisches MW, aber Permutation der Sequenz
Trennung von zwei "isomeren Charakteren"





Identische Person:

Figur "Dame Edna Everage" Schauspieler Barry Humphries Haben dieselbe Masse, aber unterschiedliche äußere Struktur

Bestimmung der Ligandenbindung bei extrem großen Molekülen



E. Van Duijn et al., J Am Chem Soc 2009

QTOF: Spinnenetz der Eigenschaften

