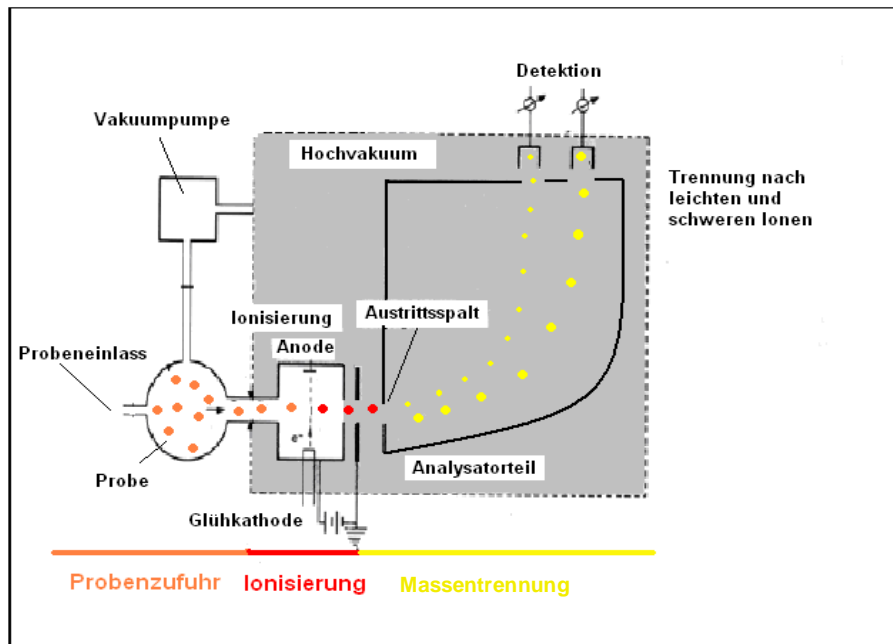


## GC/MS – Ionen in der Gasphase



Die Gaschromatographie stellt bereits seit über 60 Jahren eine weitverbreitete, leistungsfähige, analytische Methode zur Trennung von Gemischen flüchtiger Verbindungen und zu deren quantitativer Bestimmung dar (vergleiche hierzu auch LCI-Focus 5/2006: Verfahren in der Lebensmittelanalytik – Gaschromatographie). Dabei hat sich der prinzipielle Aufbau der Geräte über die Jahre kaum verändert: Ein Gaschromatograph (GC) besteht vom Grundprinzip her aus einem Injektor, einer Trennsäule und einem Detektor. In den vergangenen Jahrzehnten konnten jedoch zum Teil beachtliche technische Weiterentwicklungen dieser Bauelemente erreicht werden. Wurden zu Beginn der GC beispielsweise kurze, gepackte Edelstahlsäulen mit einem Durchmesser bis zu mehreren Millimetern zur Trennung eingesetzt, verwendet man heute Kapillarsäulen aus Quarzglas mit einer Länge von bis zu 100 m und einem Durchmesser im  $\mu\text{m}$ -Bereich.

### MS als Detektor

Auch auf dem Gebiet der gaschromatographischen Detektoren konnten in den vergangenen Jahren beachtliche Fortschritte – insbesondere bezüglich der Empfindlichkeit und der Selektivität – verzeichnet werden. Gab es beispielsweise zu Beginn der Gaschromatographie Detektionsverfahren, die auf einer volumetrischen Quantifizierung der getrennten Gase beruhten, steht heute eine Vielzahl äußerst sensibler Detektionsverfahren zur Verfügung. Neben Detektortypen wie FID (Flammenionisationsdetektor) oder ECD (Electron Capture Detector, Elektroneneinfangdetektor) gehört die Massenspektrometrie (MS) heutzutage zu den

bevorzugten Detektionsarten in der Gaschromatographie. Mittels der Kombination der GC mit der MS besteht die Möglichkeit, jede gaschromatographierbare Verbindung zu detektieren, zu quantifizieren und gleichzeitig für jede Substanz charakteristische Informationen zu erhalten, die zur raschen und sicheren Identifizierung der Verbindung führen können. Das Massenspektrum einer Substanz entsteht durch Ionisation (Erzeugung geladener Teilchen) neutraler Moleküle und nachfolgendem Zerfall der beim Ionisationsprozess gebildeten primären Ionen in Fragmentionen, die entsprechend ihres Masse-Ladungs-Verhältnisses ( $m/z$ ) aufgetrennt und anschließend von einem Detektor registriert werden.

### **Ionisationstechniken**

In der sog. Ionenquelle werden die entsprechenden Ionen auf verschiedene Arten erzeugt. Bei der GC-MS-Kopplung hat sich als Ionisationstechnik neben der chemischen Ionisation (CI) insbesondere die Elektronenstoßionisation (Electron Impact, EI) bewährt. Hierbei gelangen die Probenmoleküle in die unter Hochvakuum stehende Ionenquelle, in der sie durch einen von einer Glühkathode emittierten Elektronenstrahl mit definierter Energie beschossen werden. Beim Zusammenprall mit diesen energiereichen Elektronen entstehen aus den Analytmolekülen positiv geladene Molekülradikationen, die teilweise weiter fragmentieren (zerfallen). Daraus resultiert ein für jede Substanz charakteristisches Fragmentierungsmuster. Diese weitestgehend geräteunabhängigen „Fingerprints“ werden in Spektrenbibliotheken gesammelt und können zur Identifizierung unbekannter Substanzen herangezogen werden.

### **Anwendungsmöglichkeiten der GC/MS**

Aufgrund ihrer hohen Empfindlichkeit, ihrer guten Reproduzierbarkeit für quantitative Bestimmungen sowie der Möglichkeit, unbekannte Substanzen zu identifizieren, zeichnet sich die GC/MS durch eine Vielfalt an Anwendungsoptionen aus. Eine weitverbreitete Anwendung der GC/MS mit EI ist die Rückstandsanalytik von Pflanzenschutzmitteln und Kontaminanten in Lebensmitteln und im Trinkwasser. Ferner eignet sich die GC/MS hervorragend in der Aromastoff- und in der Geruchsstoffanalytik.

*SÜSSWAREN (2008) Heft 9*