

# Anhang

- I**      **Massenspektren isotopenmarkierter TMS-Äpfelsäuren**
  
- II**     **Verschiebung der Ionensignale isotopenmarkierter TMS-Äpfelsäuren**
  
- III**     **$^{13}\text{C}$ -Einbauratenbestimmung der Mischungen C bis H und K über  
Massenspektren**
  
- IV**    **Produkt-Ionen-Spektren**
  
- V**     **Natürliche Häufigkeit der Isotomere charakteristischer Fragment-  
Ionen unmarkierter und positionsspezifisch markierter TMS-Äpfelsäuren**
  
- VI**    **Korrektur der Intensitätsverhältnisse**

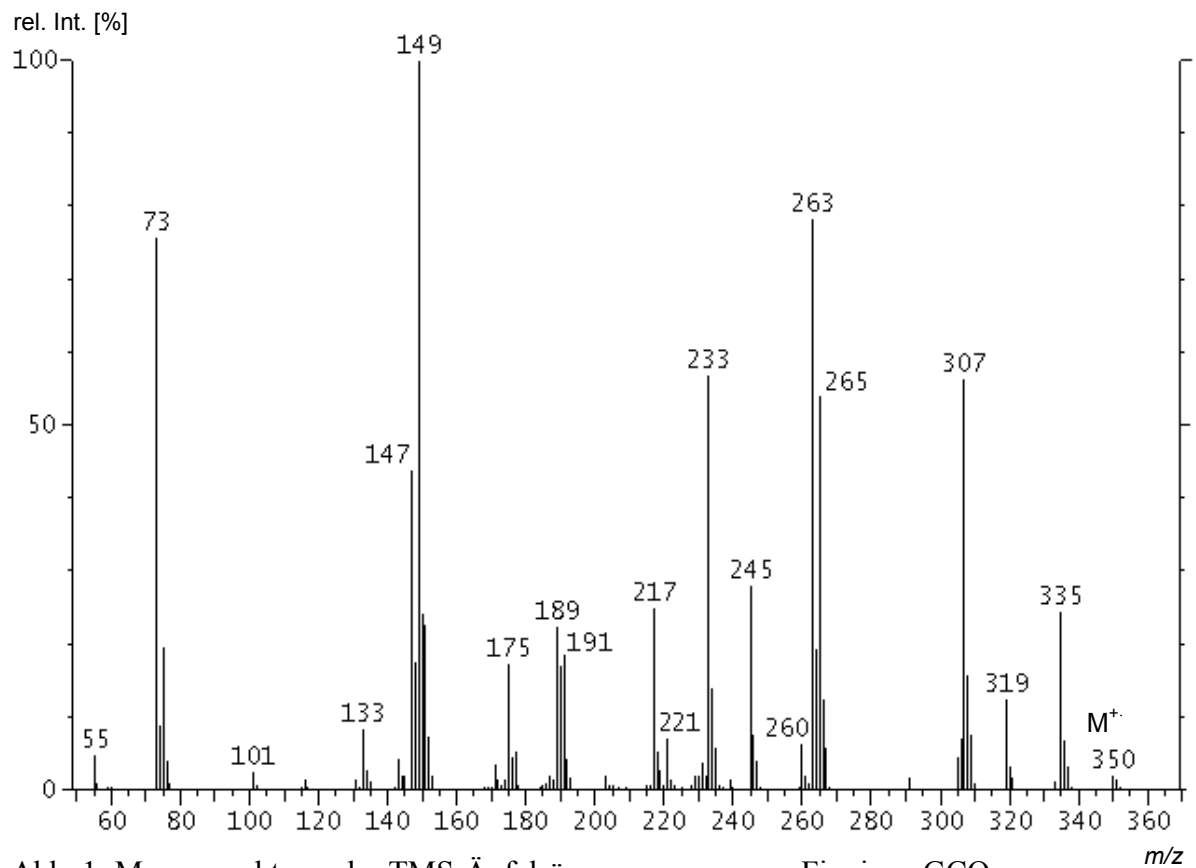
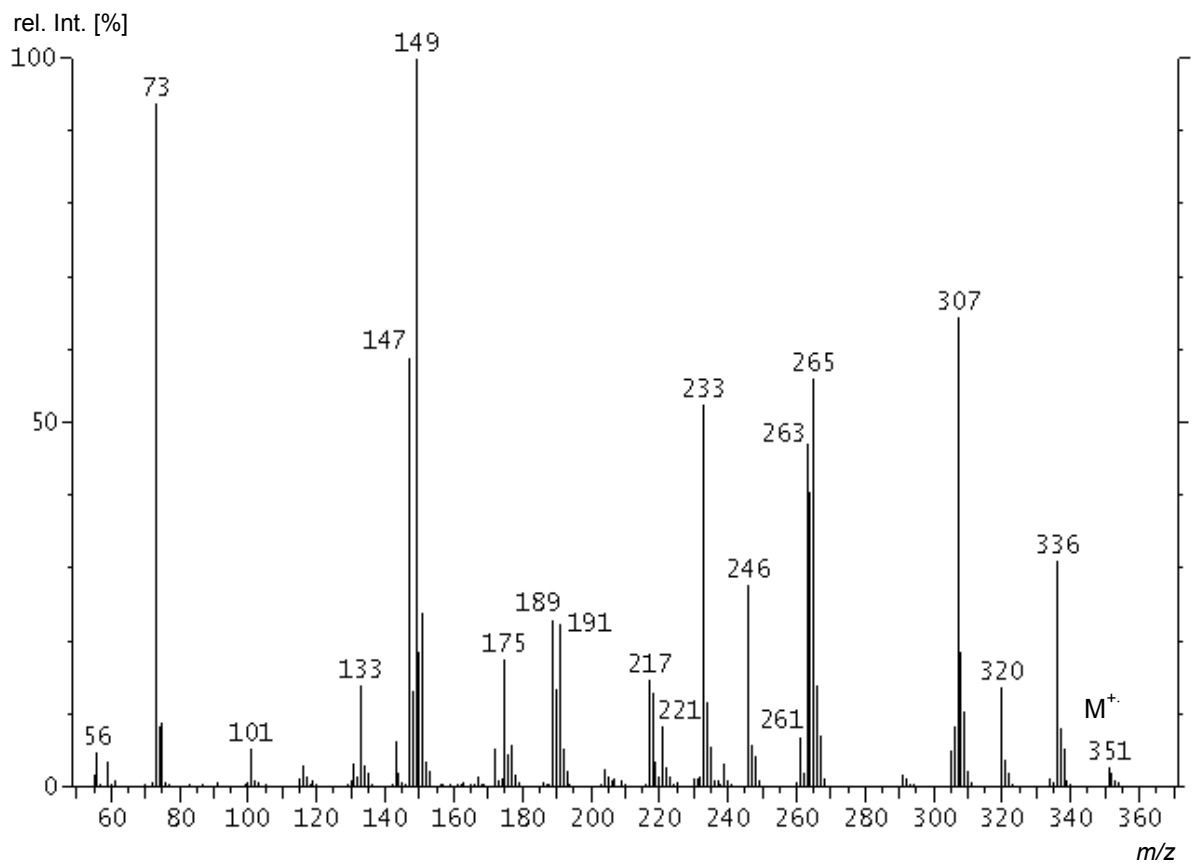
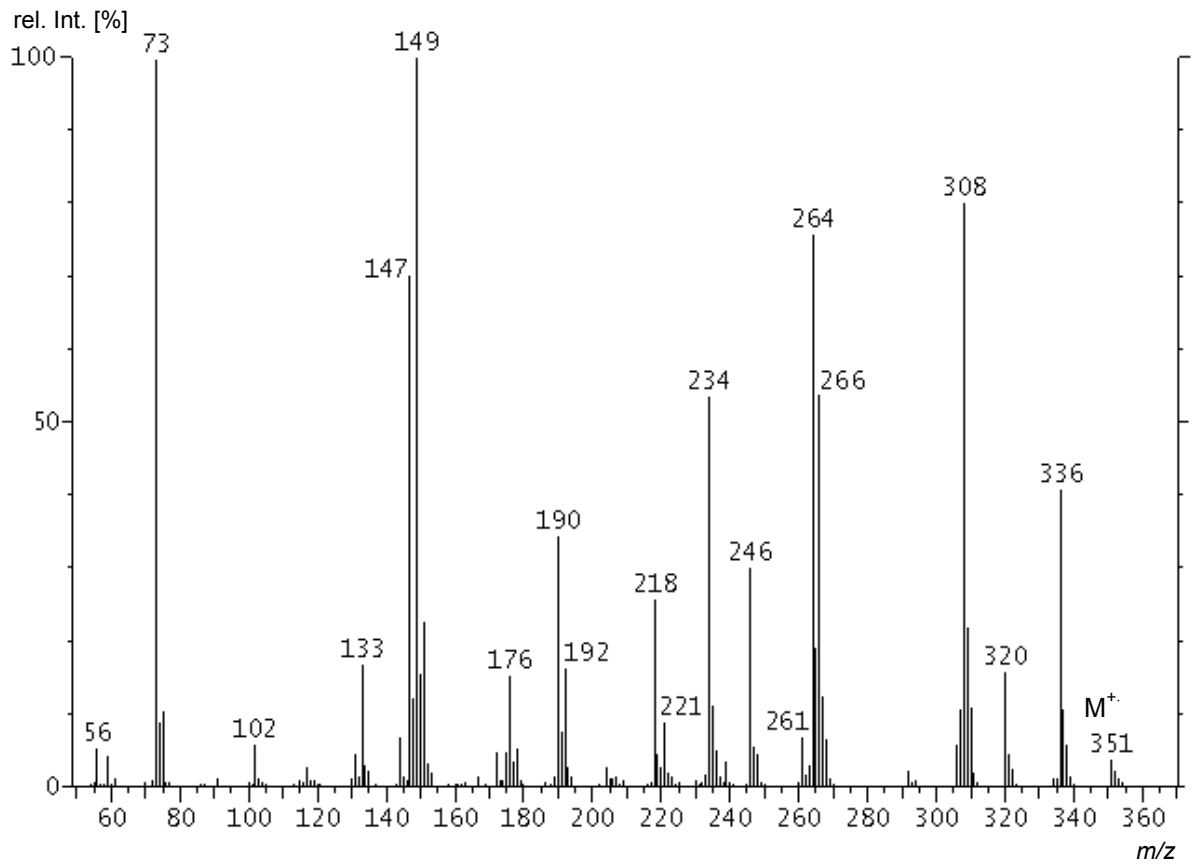
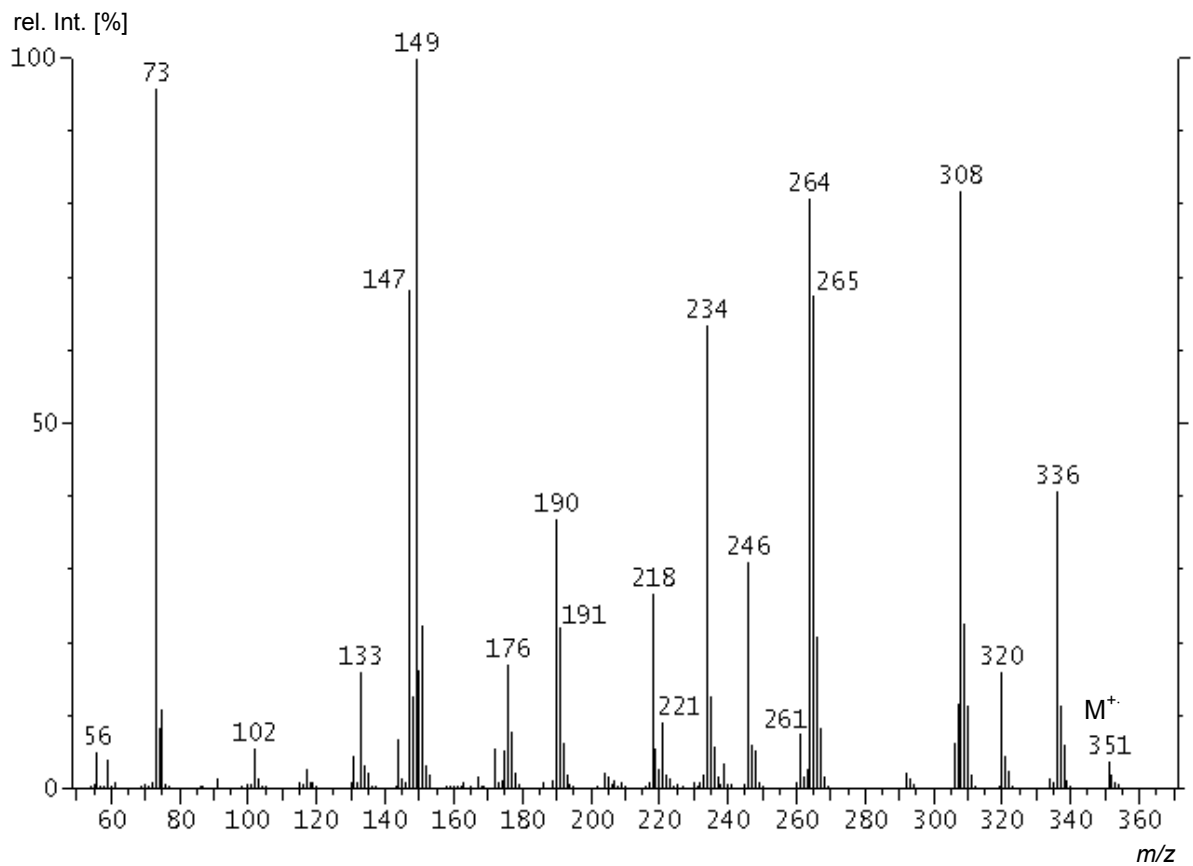
**I Massenspektren isotope-markierter TMS-Äpfelsäuren**

Abb. 1: Massenspektrum der TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

Abb. 2: Massenspektrum der  $[1-^{13}\text{C}]$ TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

Abb. 3: Massenspektrum der [2-<sup>13</sup>C]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.Abb. 4: Massenspektrum der [3-<sup>13</sup>C]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

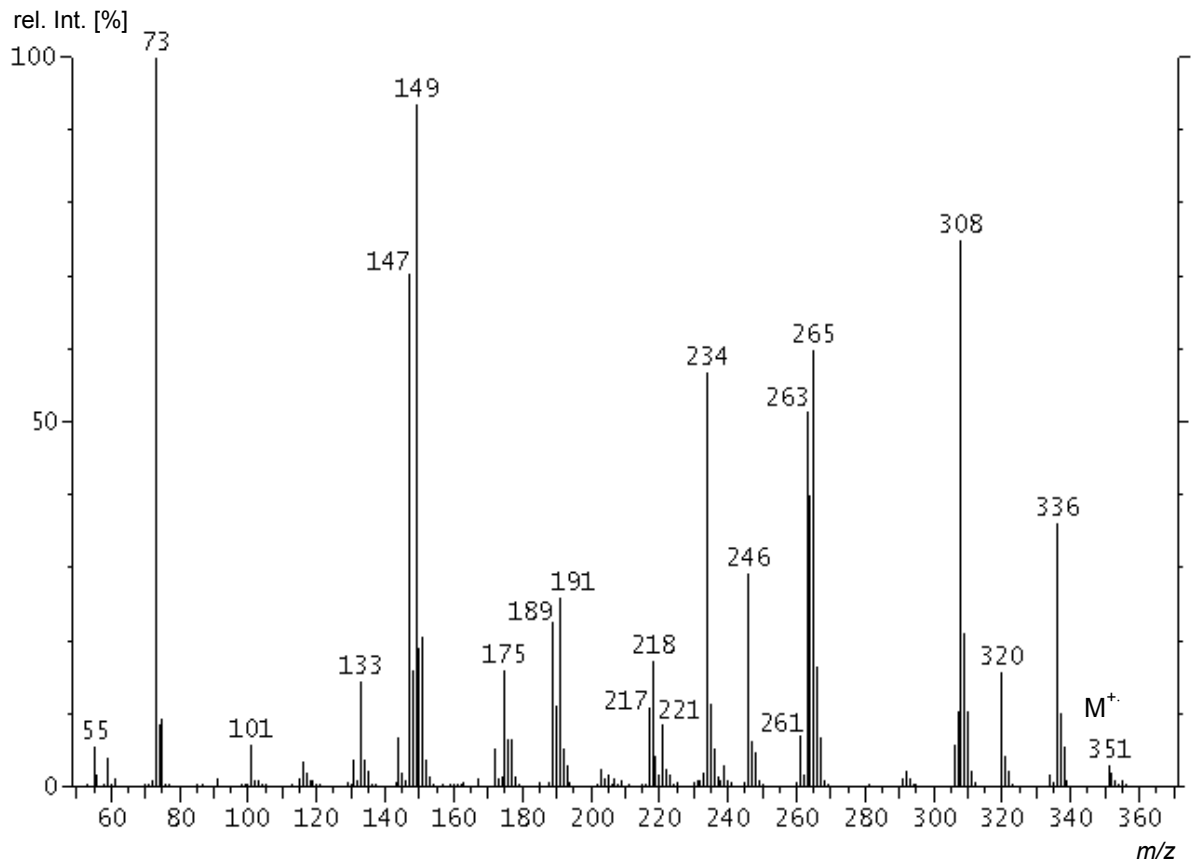


Abb. 5: Massenspektrum der [4-<sup>13</sup>C]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

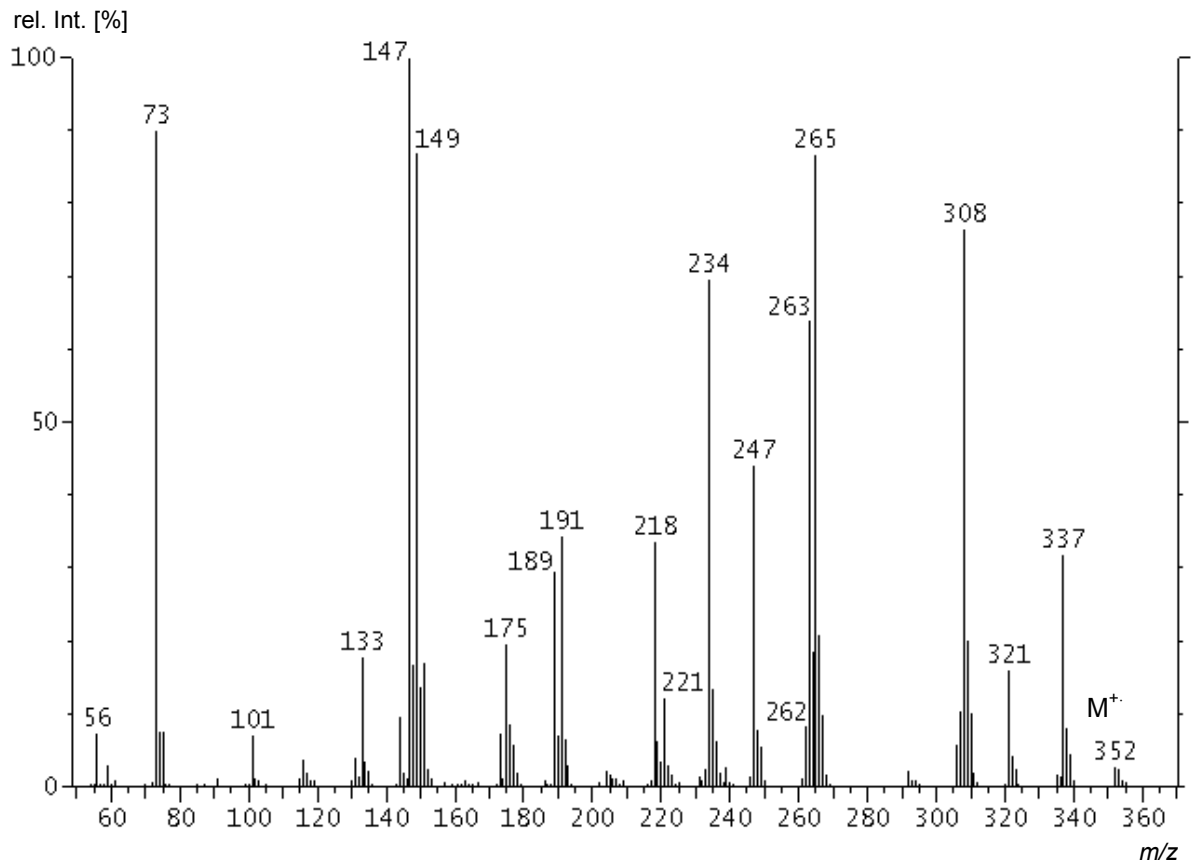


Abb. 6: Massenspektrum der [1,4-<sup>13</sup>C<sub>2</sub>]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

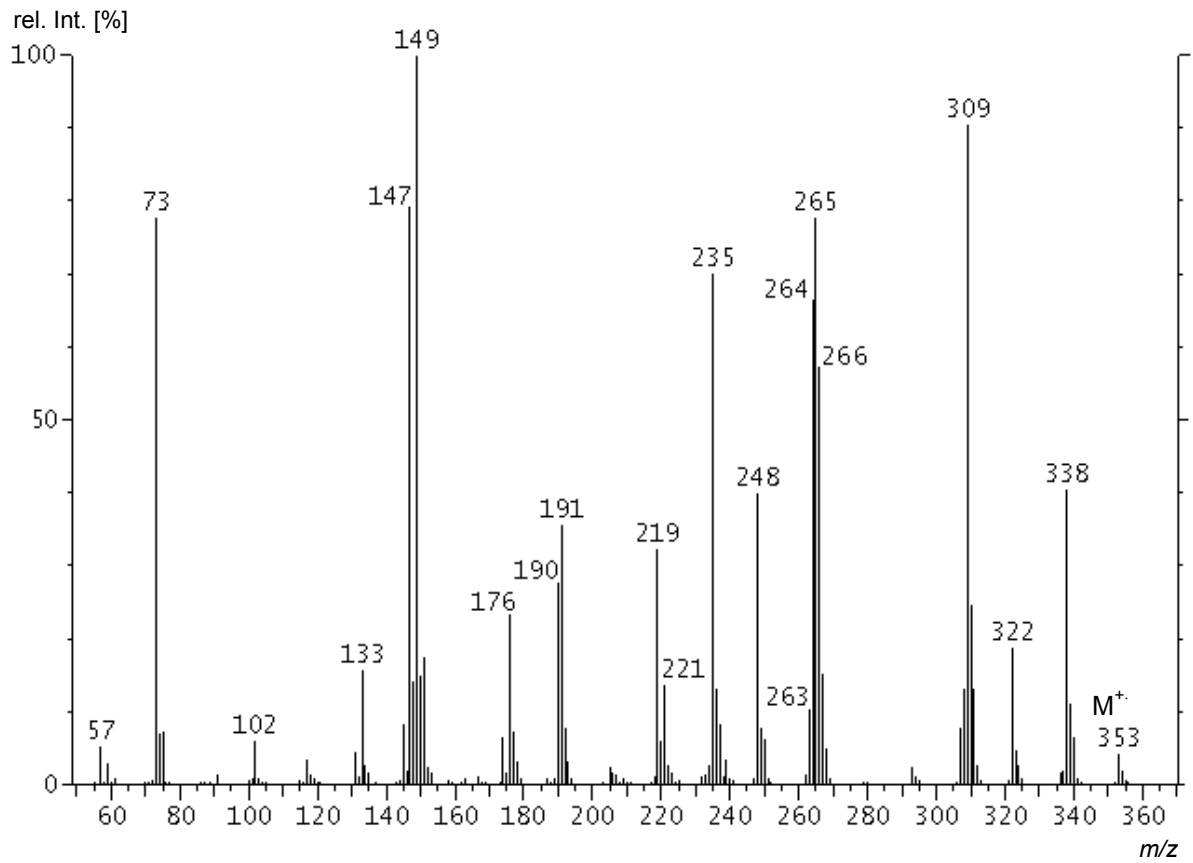


Abb. 7: Massenspektrum der [1,3,4-<sup>13</sup>C<sub>3</sub>]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

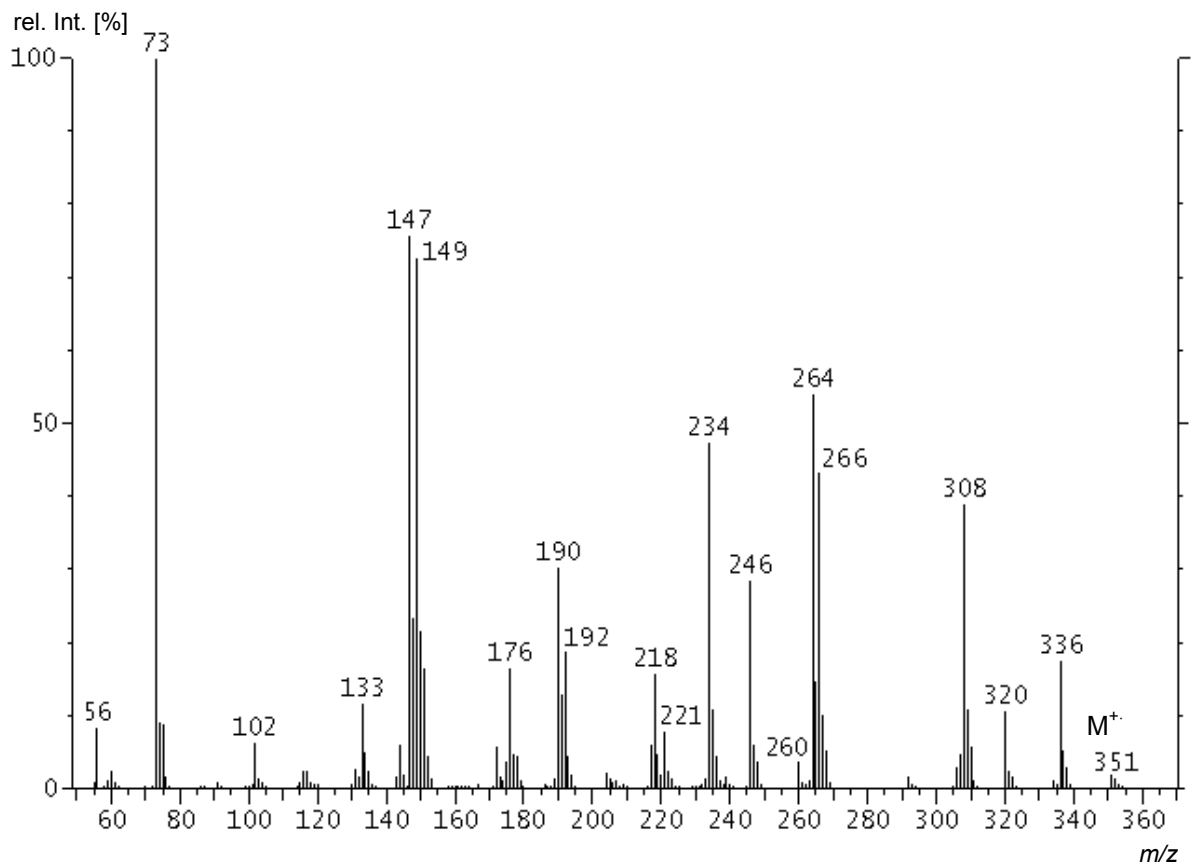
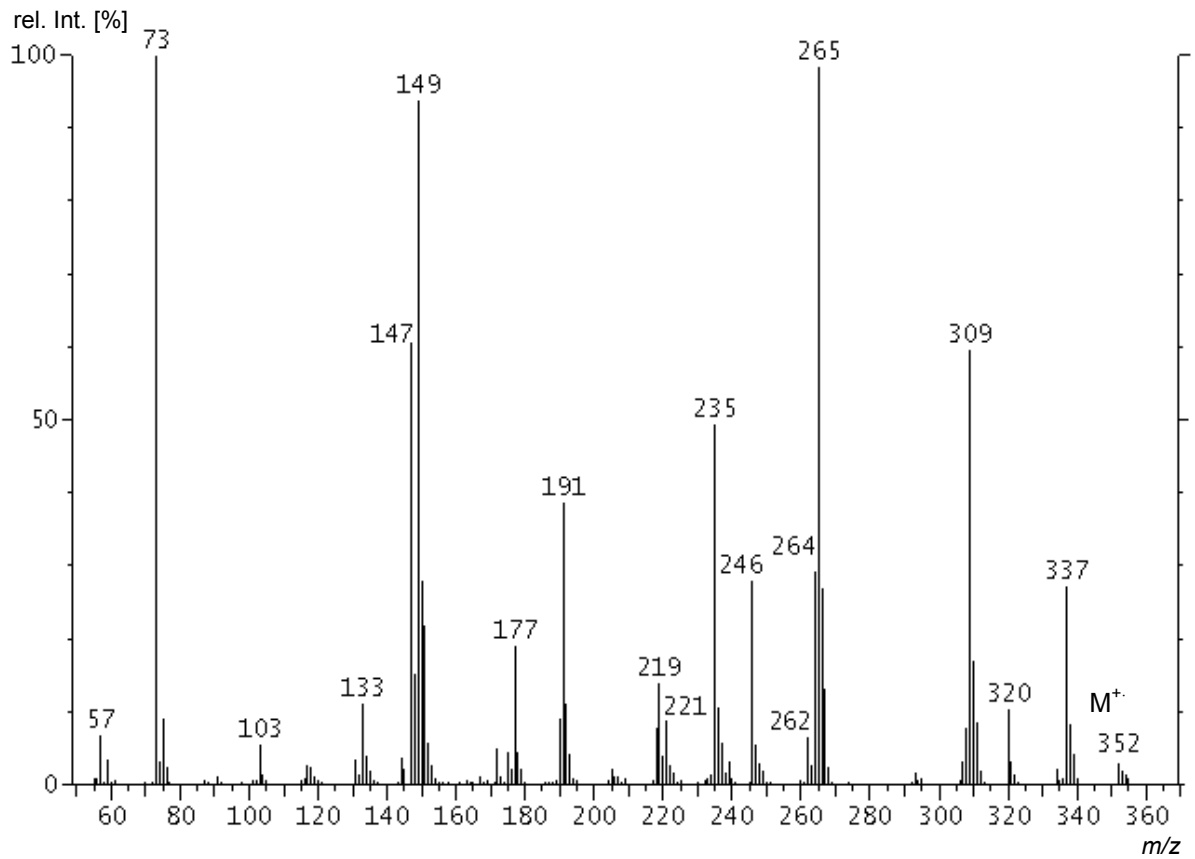
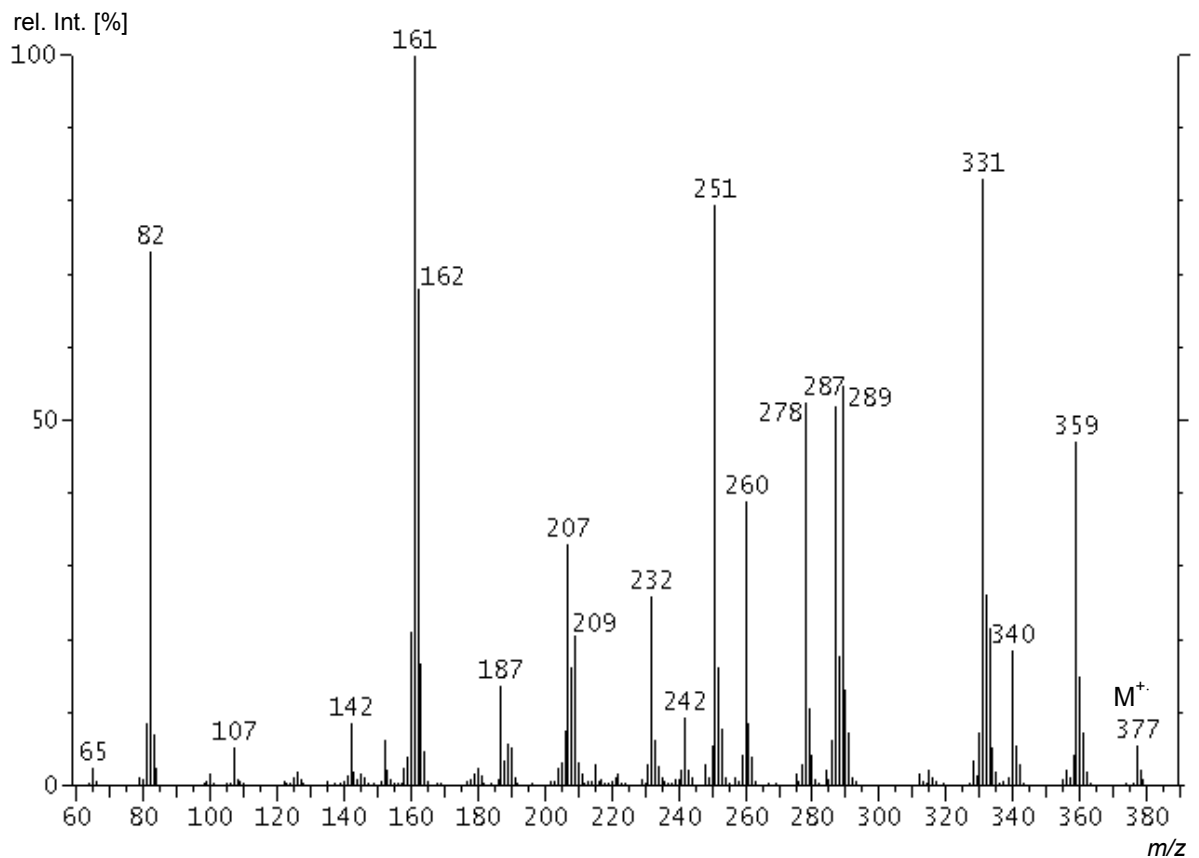


Abb. 8: Massenspektrum der [2-D]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

Abb. 9: Massenspektrum der [3-D<sub>2</sub>]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.Abb. 10: Massenspektrum der [D<sub>27</sub>]TMS-Äpfelsäure, gemessen am Finnigan GCQ.

## II Verschiebung der Ionensignale isotopenmarkierter TMS-Äpfelsäuren

TMS-1	Isotopenmarkierte TMS-Äpfelsäuren								[D <sub>27</sub> ] TMS-1
	[1- <sup>13</sup> C] 1	[2- <sup>13</sup> C] 1	[3- <sup>13</sup> C] 1	[4- <sup>13</sup> C] 1	[1,4- <sup>13</sup> C <sub>2</sub> ] 1	[1,3,4- <sup>13</sup> C <sub>3</sub> ] 1	[2-D]1	[3-D <sub>2</sub> ]1	
350	351	351	351	351	352	353	351	352	377
335	336	336	336	336	337	338	336	337	359
319	320	320	320	320	321	322	320	320	340
307	307	308	308	308	308	309	308	309	331
265	265	266	265	265	265	265	266	265	289
263/I	263	264	264	263	263	264	264	265	287
263/II	264	264	264	264	265	266	264	264	278
260	261	261	261	261	262	263	260	262	278
245	246	246	246	246	247	248	246	246	260
233	233	234	234	234	234	235	234	235	251
221	221	221	221	221	221	221	221	221	242
217	<b>217/ 218</b>	218	218	<b>217/ 218</b>	218	219	<b>217/ 218</b>	<b>218/ 219</b>	232
191	191	192	191	191	191	191	192	191	209
190	190	190	190	190	190	190	190	190	205- 209
189	189	190	190	189	189	190	190	191	207
175	175	176	176	175	175	176	176	177	187
147	147	147	147	147	147	147	147	147	162
143	143	144	144	144	144	145	144	144	152
133	133	133	133	133	133	133	133	133	142
101	101	102	102	101	101	102	102	103	107

Tab. 1: Verschiebung der Ionensignale bei isotopenmarkierten TMS-Äpfelsäuren.

[D <sub>27</sub> ] TMS-1	Isotopenmarkierte [D <sub>27</sub> ]TMS-Äpfelsäuren								TMS-1
	[1- <sup>13</sup> C] 1	[2- <sup>13</sup> C] 1	[3- <sup>13</sup> C] 1	[4- <sup>13</sup> C] 1	[1,4- <sup>13</sup> C <sub>2</sub> ] 1	[1,3,4- <sup>13</sup> C <sub>3</sub> ] 1	[2-D]1	[3-D <sub>2</sub> ]1	
377	378	378	378	378	379	380	378	379	350
359	360	360	360	360	361	362	360	361	335
340	341	341	341	341	342	343	341	341	319
331	331	332	332	332	332	333	332	333	307
289	289	290	289	289	289	289	290	289	265
287	287	288	288	287	287	288	288	289	263/I
278	279	279	279	279	280	281	279	279	263/II
278	279	279	279	279	280	281	278	280	260
260	261	261	261	261	262	263	261	261	245
251	251	252	252	252	252	253	252	253	233
242	242	242	242	242	242	242	242	242	221
232	232/ 233	233	233	232/ 233	233	234	232/ <b>233</b>	233/ 234	217
209	209	210	209	209	209	209	210	209	191
Mehrere, sich überlagernde Peaks von <i>m/z</i> 205 bis 209.									190
207	207	208	208	207	207	208	208	209	189
187	187	188	188	187	187	188	188	189	175
162	162	162	162	162	162	162	162	162	147
152	152	153	153	153	153	154	153	153	143
142	142	142	142	142	142	142	142	142	133
107	107	108	108	107	107	108	108	109	101

Tab. 2: Verschiebung der Ionensignale bei isotopenmarkierten [D<sub>27</sub>]TMS-Äpfelsäuren.



### III <sup>13</sup>C-Einbauratenbestimmung der Mischungen C bis H und K über Massenspektren

Die Tab. 3 bis 23 enthalten die anhand der Ionen **b**, **g**, **h**, **d** und **c** aus dem Massenspektrum gemessenen und die theoretischen <sup>13</sup>C-Einbauraten der Mischungen C bis H und K sowie deren arithmetisches Mittel, die Standardabweichung (in Klammern) und den absoluten Fehler. Weiterhin sind für jede Mischung die prozentualen Anteile der in 1-Position markierten und in 1-Position nicht markierten Äpfelsäuren angegeben. Alle Angaben sind in Prozent.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 1,2,3,4-Position						Mittel	Theor.	Fehler
	<b>b</b> ( <i>m/z</i> 335)		<b>g</b> ( <i>m/z</i> 319)		<b>h</b> ( <i>m/z</i> 245)				
Unmark.	50,7	(3,5)	49,2	(4,2)	49,6	(4,5)	49,8	50	0,2
1-fach	50,8	(3,4)	52,5	(4,6)	51,4	(2,9)	51,5	50	1,5
2-fach	-0,7	(1,2)	-1,3	(1,1)	-1,0	(2,3)	-1,0	0,0	1,0
3-fach	-0,8	(0,6)	-0,5	(0,9)	-0,1	(0,9)	-0,5	0,0	0,5
4-fach	-0,1	(0,7)	0,1	(0,8)	0,1	(0,3)	0,1	0,0	0,1

Tab. 3: Mischung C.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 2,3,4-Position				Mittel	Theor.	Fehler
	<b>d</b> ( <i>m/z</i> 307)		<b>c</b> ( <i>m/z</i> 233)				
Unmark.	53,3	(3,9)	50,3	(4,1)	51,8	50,0	1,8
1-fach	48,1	(3,7)	51,1	(3,6)	49,6	50,0	0,4
2-fach	-2,0	(2,3)	-1,3	(2,1)	1,6	0,0	1,6
3-fach	0,5	(1,2)	-0,1	(0,9)	0,2	0,0	0,2

Tab. 4: Mischung C.

%-Anteile <sup>13</sup> C-markierter Äpfelsäuren	Gemessen	Theor.	Fehler
1-fach und in 1-Position markiert (PR1f1m = PR1)	2,0	0,0	2,0
1-fach und nicht in 1-Position markiert (PR1fn1m)	49,5	50,0	1,5
2-fach und in 1-Position markiert (PR2f1m)	0,1	0,0	0,1
2-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR2fn1m)	-1,1	0,0	1,1
3-fach und in 1-Position markiert (PR3f1m)	2,7	0,0	2,7
3-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR3fn1m)	-3,2	0,0	3,2

Tab. 5: Mischung C.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 1,2,3,4-Position								
	<b>b</b> ( <i>m/z</i> 335)		<b>g</b> ( <i>m/z</i> 319)		<b>h</b> ( <i>m/z</i> 245)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	50,7	(5,1)	50,2	(4,6)	49,7	(2,7)	50,2	50,0	0,2
1-fach	49,3	(3,9)	51,9	(4,1)	50,7	(3,5)	50,6	50,0	0,6
2-fach	-0,5	(1,4)	-0,9	(1,6)	-0,7	(0,8)	-0,7	0,0	0,7
3-fach	0,7	(0,6)	-1,2	(0,4)	-0,3	(0,3)	-0,3	0,0	0,3
4-fach	-0,2	(0,7)	0,0	(0,9)	0,6	(0,5)	0,2	0,0	0,2

Tab. 6: Mischung D.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 2,3,4-Position						
	<b>d</b> ( <i>m/z</i> 307)		<b>c</b> ( <i>m/z</i> 233)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	53,3	(4,1)	49,8	(4,5)	51,6	50,0	1,6
1-fach	48,4	(3,8)	51,3	(4,3)	49,8	50,0	0,2
2-fach	-2,0	(1,2)	-0,8	(0,3)	-1,4	0,0	1,4
3-fach	0,3	(0,4)	-0,3	(0,6)	0,0	0,0	0,0

Tab. 7: Mischung D.

%-Anteile <sup>13</sup> C-markierter Äpfelsäuren	Gemessen	Theor.	Fehler
1-fach und in 1-Position markiert (PR1f1m = PR1)	1,4	0,0	1,4
1-fach und nicht in 1-Position markiert (PR1fn1m)	49,2	50,0	0,8
2-fach und in 1-Position markiert (PR2f1m)	0,6	0,0	0,6
2-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR2fn1m)	-1,3	0,0	1,3
3-fach und in 1-Position markiert (PR3f1m)	-0,1	0,0	0,1
3-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR3fn1m)	-0,2	0,0	0,2

Tab. 8: Mischung D.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 1,2,3,4-Position								
	<b>b</b> ( <i>m/z</i> 335)		<b>g</b> ( <i>m/z</i> 319)		<b>h</b> ( <i>m/z</i> 245)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	50,7	(5,1)	52,4	(5,0)	49,2	(3,7)	50,7	50,0	0,7
1-fach	1,7	(1,8)	-0,9	(3,3)	2,0	(1,5)	0,9	0,0	0,9
2-fach	48,0	(4,8)	47,5	(4,8)	50,0	(4,4)	48,5	50,0	1,5
3-fach	-0,3	(2,6)	0,9	(4,8)	-1,7	(1,8)	-0,4	0,0	0,4
4-fach	-0,1	(0,9)	0,2	(1,6)	0,6	(1,1)	0,2	0,0	0,2

Tab. 9: Mischung E.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 2,3,4-Position						
	<b>d</b> ( <i>m/z</i> 307)		<b>c</b> ( <i>m/z</i> 233)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	55,7	(4,5)	52,2	(4,6)	54,0	50,0	4,0
1-fach	45,8	(2,9)	47,7	(3,6)	46,7	50,0	3,7
2-fach	-1,8	(1,5)	0,3	(1,5)	-0,7	0,0	0,7
3-fach	0,2	(1,3)	-0,2	(1,1)	0,0	0,0	0,0

Tab. 10: Mischung E.

%-Anteile <sup>13</sup> C-markierter Äpfelsäuren	Gemessen	Theor.	Fehler
1-fach und in 1-Position markiert (PR1f1m = PR1)	3,2	0,0	3,2
1-fach und nicht in 1-Position markiert (PR1fn1m)	-2,3	0,0	2,3
2-fach und in 1-Position markiert (PR2f1m)	49,1	50,0	0,9
2-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR2fn1m)	-0,6	0,0	0,6
3-fach und in 1-Position markiert (PR3f1m)	-0,2	0,0	0,2
3-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR3fn1m)	-0,2	0,0	0,2

Tab. 11: Mischung E.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 1,2,3,4-Position								
	<b>b</b> ( <i>m/z</i> 335)		<b>g</b> ( <i>m/z</i> 319)		<b>h</b> ( <i>m/z</i> 245)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	48,5	(5,1)	51,8	(5,7)	52,0	(3,8)	50,8	50,0	0,8
1-fach	3,8	(1,6)	0,4	(3,4)	-0,5	(1,6)	1,3	0,0	1,3
2-fach	0,7	(1,5)	1,4	(1,9)	2,1	(2,6)	1,4	0,0	1,4
3-fach	47,9	(3,8)	49,4	(4,9)	47,7	(3,3)	48,3	50,0	1,7
4-fach	-0,9	(1,4)	-3,0	(1,6)	-1,3	(1,8)	-1,7	0,0	1,7

Tab. 12: Mischung F.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 2,3,4-Position						
	<b>d</b> ( <i>m/z</i> 307)		<b>c</b> ( <i>m/z</i> 233)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	51,5	(5,2)	50,9	(5,0)	51,2	50,0	1,2
1-fach	5,7	(2,4)	2,6	(1,3)	4,1	0,0	4,1
2-fach	43,2	(2,7)	47,0	(4,4)	45,1	50,0	4,9
3-fach	-0,5	(1,3)	-0,5	(1,1)	-0,5	0,0	0,5

Tab. 13: Mischung F.

%-Anteile <sup>13</sup> C-markierter Äpfelsäuren	Gemessen	Theor.	Fehler
1-fach und in 1-Position markiert (PR1f1m = PR1)	0,4	0,0	0,4
1-fach und nicht in 1-Position markiert (PR1fn1m)	0,8	0,0	0,8
2-fach und in 1-Position markiert (PR2f1m)	3,3	0,0	3,3
2-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR2fn1m)	-1,9	0,0	1,9
3-fach und in 1-Position markiert (PR3f1m)	47,0	50,0	3,0
3-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR3fn1m)	1,3	0,0	1,3

Tab. 14: Mischung F.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 1,2,3,4-Position								
	<b>b</b> ( <i>m/z</i> 335)		<b>g</b> ( <i>m/z</i> 319)		<b>h</b> ( <i>m/z</i> 245)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	81,1	(3,9)	77,8	(3,2)	80,2	(2,0)	79,7	80,0	0,3
1-fach	19,2	(3,5)	21,6	(2,7)	20,6	(1,9)	20,5	20,0	0,5
2-fach	0,0	(1,8)	0,3	(3,1)	-0,8	(1,0)	-0,2	0,0	0,2
3-fach	-0,6	(0,6)	0,0	(1,2)	-0,2	(0,5)	-0,3	0,0	0,3
4-fach	0,2	(0,4)	0,4	(0,6)	0,2	(0,4)	0,3	0,0	0,3

Tab. 15: Mischung G.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 2,3,4-Position						
	<b>d</b> ( <i>m/z</i> 307)		<b>c</b> ( <i>m/z</i> 233)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	85,5	(2,7)	83,8	(2,3)	84,6	85,0	0,4
1-fach	15,2	(1,9)	15,7	(1,9)	15,4	15,0	0,4
2-fach	-0,2	(1,2)	0,1	(1,1)	0,0	0,0	0,0
3-fach	-0,4	(0,5)	0,4	(0,5)	0,0	0,0	0,0

Tab. 16: Mischung G.

%-Anteile <sup>13</sup> C-markierter Äpfelsäuren	Gemessen	Theor.	Fehler
1-fach und in 1-Position markiert (PR1f1m = PR1)	4,9	5,0	0,1
1-fach und nicht in 1-Position markiert (PR1fn1m)	15,6	15,0	0,6
2-fach und in 1-Position markiert (PR2f1m)	-0,2	0,0	0,2
2-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR2fn1m)	0,0	0,0	0,0
3-fach und in 1-Position markiert (PR3f1m)	0,0	0,0	0,0
3-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR3fn1m)	-0,3	0,0	0,3

Tab. 17: Mischung G.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 1,2,3,4-Position								
	<b>b</b> ( <i>m/z</i> 335)		<b>g</b> ( <i>m/z</i> 319)		<b>h</b> ( <i>m/z</i> 245)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	89,3	(3,8)	89,2	(2,7)	90,4	(2,8)	89,6	90,0	0,4
1-fach	10,6	(2,5)	10,5	(2,9)	9,1	(2,8)	10,1	10,0	0,1
2-fach	-0,1	(2,3)	0,0	(2,3)	0,5	(1,1)	0,2	0,0	0,2
3-fach	0,3	(0,9)	0,4	(1,9)	0,0	(0,6)	0,2	0,0	0,2
4-fach	-0,1	(0,3)	-0,1	(0,6)	0,0	(0,4)	-0,1	0,0	0,1

Tab. 18: Mischung H.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 2,3,4-Position						
	<b>d</b> ( <i>m/z</i> 307)		<b>c</b> ( <i>m/z</i> 233)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	92,8	(2,7)	93,4	(1,9)	93,1	92,5	0,6
1-fach	7,7	(1,9)	6,3	(1,6)	7,0	7,5	0,5
2-fach	-0,4	(0,9)	0,1	(1,4)	-0,1	0,0	0,1
3-fach	-0,1	(0,6)	0,2	(0,5)	0,0	0,0	0,0

Tab. 19: Mischung H.

%-Anteile <sup>13</sup> C-markierter Äpfelsäuren	Gemessen	Theor.	Fehler
1-fach und in 1-Position markiert (PR1f1m = PR1)	3,5	2,5	1,0
1-fach und nicht in 1-Position markiert (PR1fn1m)	6,6	7,5	0,9
2-fach und in 1-Position markiert (PR2f1m)	0,4	0,0	0,4
2-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR2fn1m)	-0,2	0,0	0,2
3-fach und in 1-Position markiert (PR3f1m)	0,1	0,0	0,1
3-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR3fn1m)	0,1	0,0	0,1

Tab. 20: Mischung H.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 1,2,3,4-Position								
	<b>b</b> ( <i>m/z</i> 335)		<b>g</b> ( <i>m/z</i> 319)		<b>h</b> ( <i>m/z</i> 245)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	64,8	(3,1)	64,7	(4,2)	64,9	(3,2)	64,8	65,0	0,2
1-fach	25,5	(3,9)	26,9	(3,0)	26,2	(2,8)	26,2	26,0	0,2
2-fach	7,7	(2,4)	7,4	(2,1)	6,7	(1,6)	7,3	7,0	0,3
3-fach	1,9	(3,1)	1,0	(2,0)	2,3	(1,6)	1,7	2,0	0,3
4-fach	0,1	(1,5)	0,0	(0,9)	-0,1	(1,7)	0,0	0,0	0,0

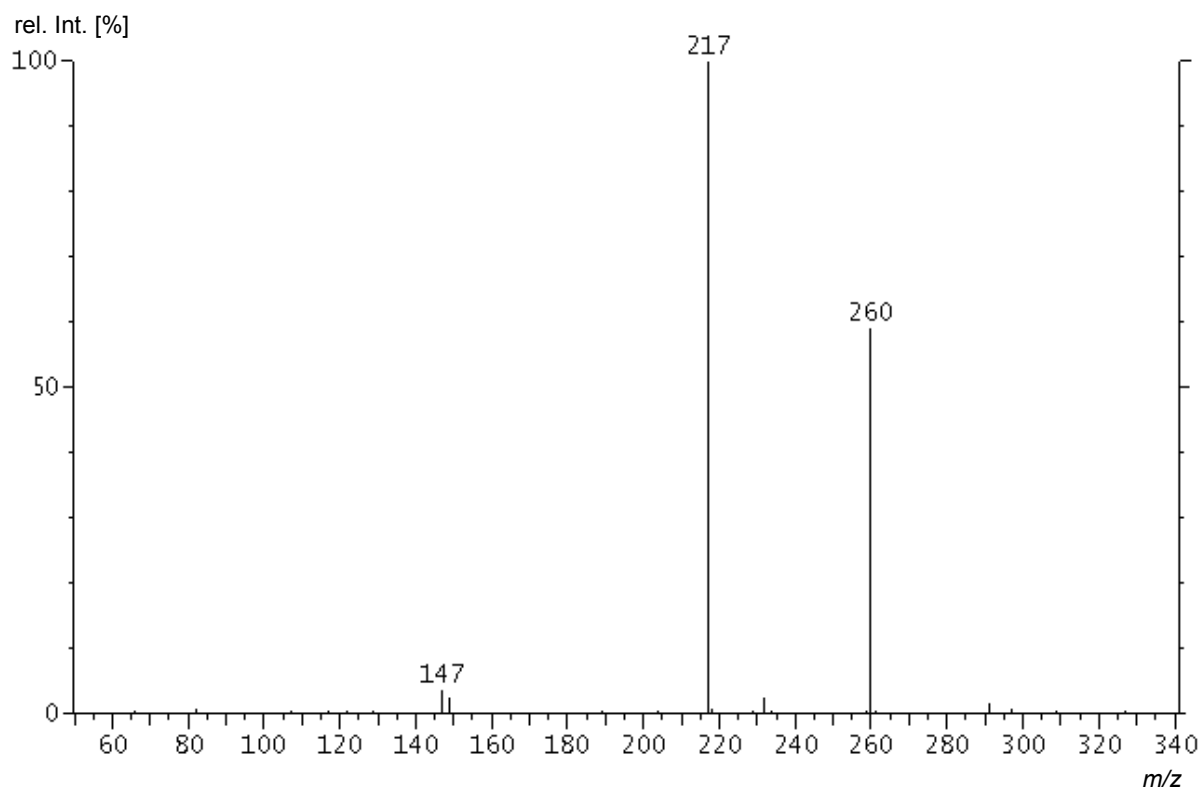
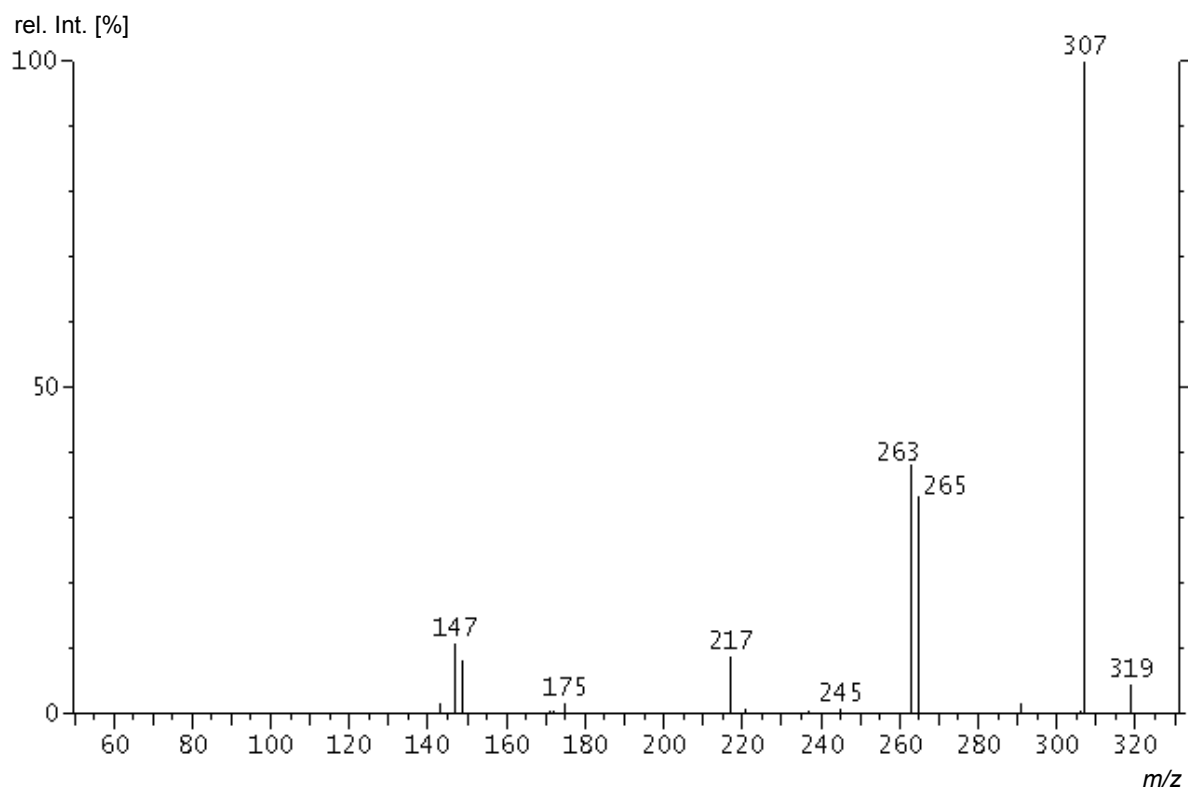
Tab. 21: Mischung K.

Mar- kierung	Fragment-Ionen mit 2,3,4-Position						
	<b>d</b> ( <i>m/z</i> 307)		<b>c</b> ( <i>m/z</i> 233)		Mittel	Theor.	Fehler
Unmark.	76,7	(2,3)	76,0	(2,6)	76,3	76,0	0,3
1-fach	21,6	(3,1)	22,7	(2,6)	22,2	22,0	0,2
2-fach	1,8	(2,1)	1,2	(1,4)	1,5	2,0	0,5
3-fach	-0,1	(1,1)	0,1	(0,7)	0,0	0,0	0,0

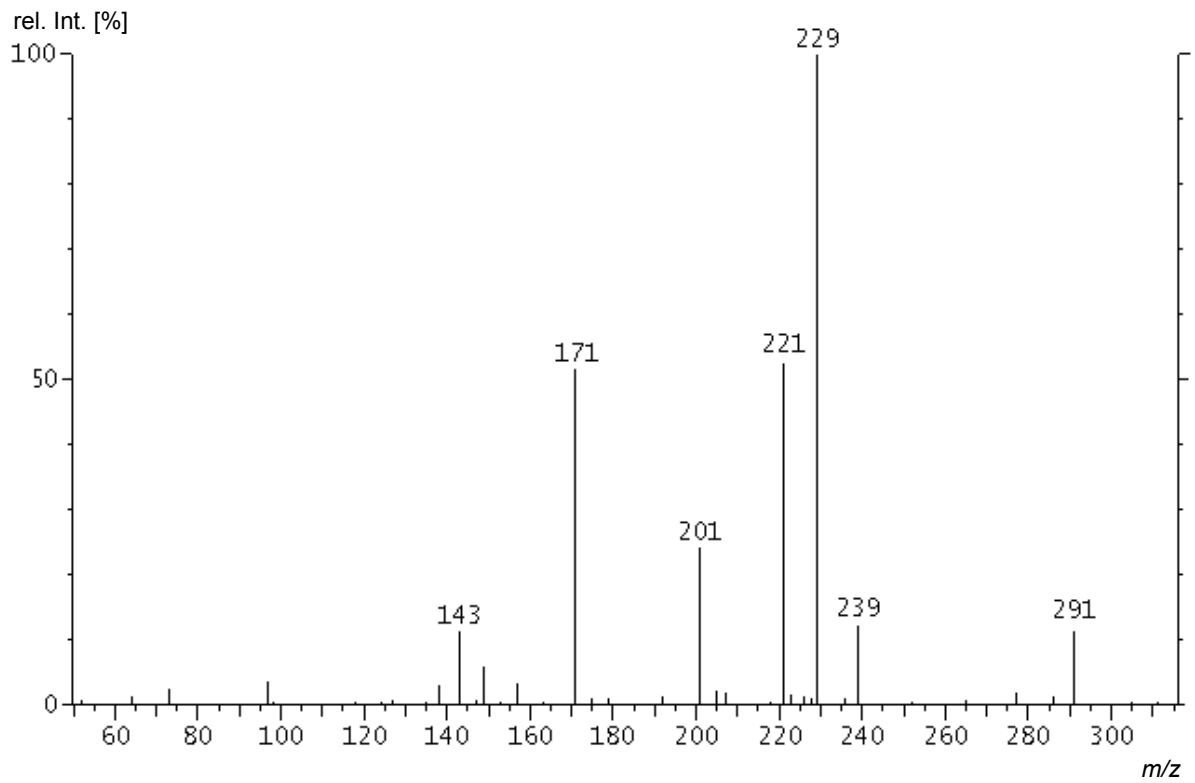
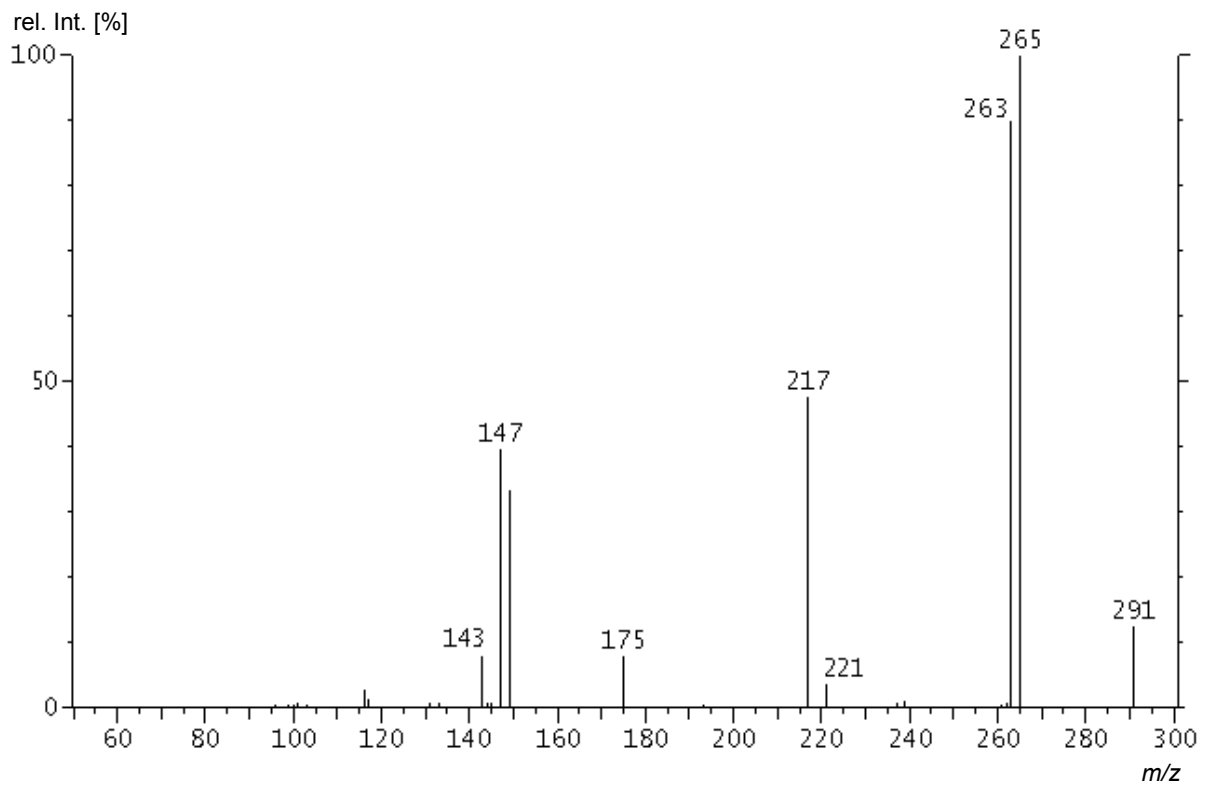
Tab. 22: Mischung K.

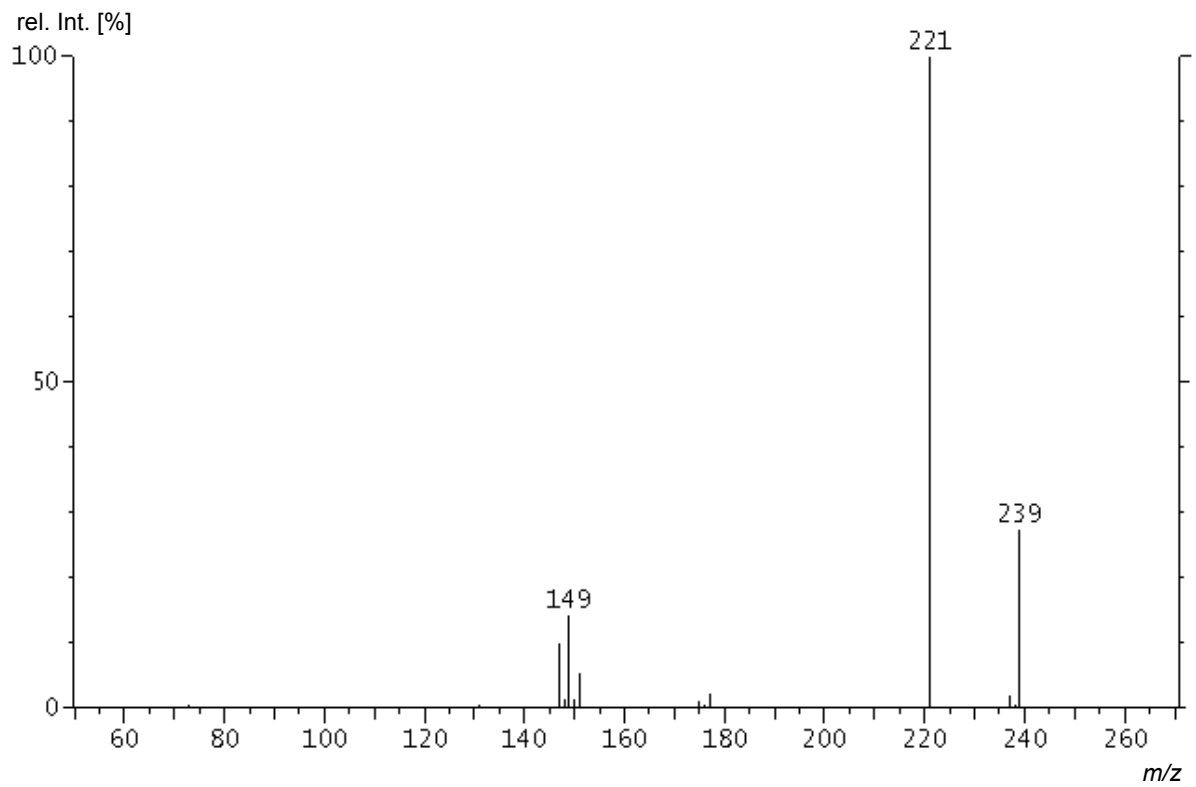
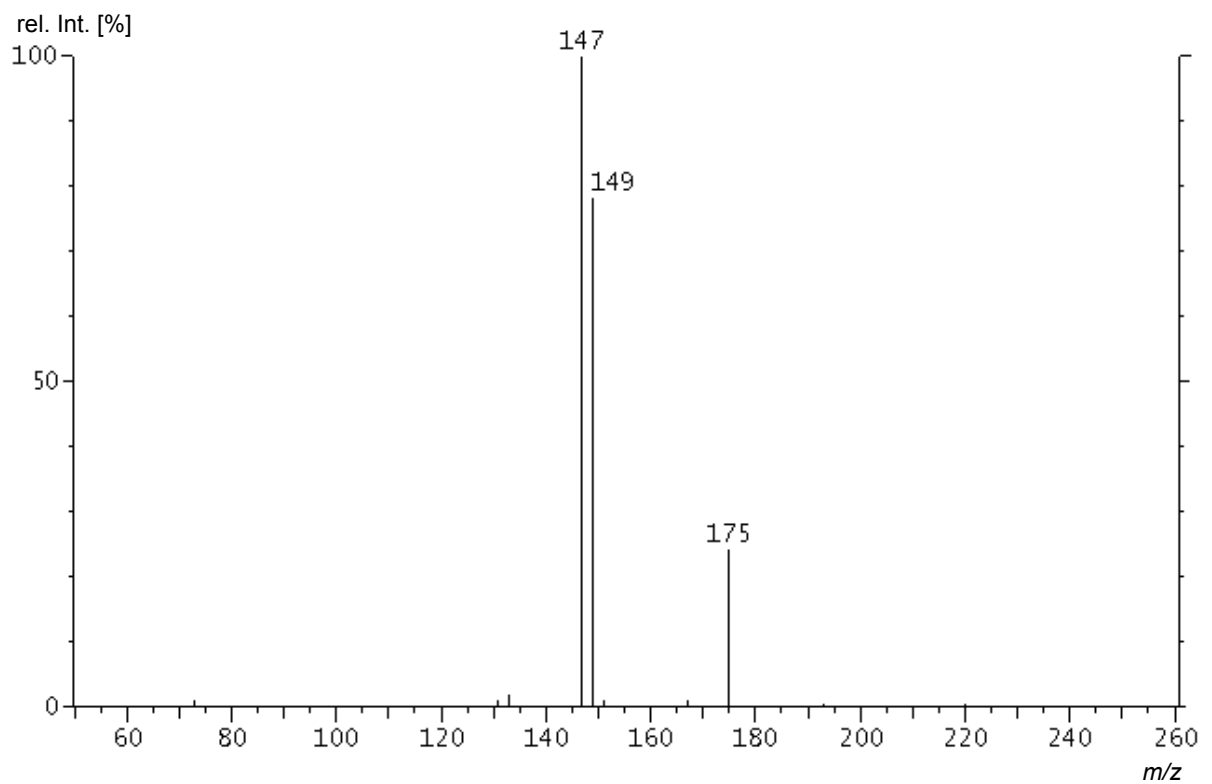
%-Anteile <sup>13</sup> C-markierter Äpfelsäuren	Gemessen	Theor.	Fehler
1-fach und in 1-Position markiert (PR1f1m = PR1)	11,5	11,0	0,5
1-fach und nicht in 1-Position markiert (PR1fn1m)	14,7	15,0	0,3
2-fach und in 1-Position markiert (PR2f1m)	7,5	7,0	0,5
2-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR2fn1m)	-0,2	0,0	0,2
3-fach und in 1-Position markiert (PR3f1m)	1,7	2,0	0,3
3-fach und <b>nicht</b> in 1-Position markiert (PR3fn1m)	0,0	0,0	0,0

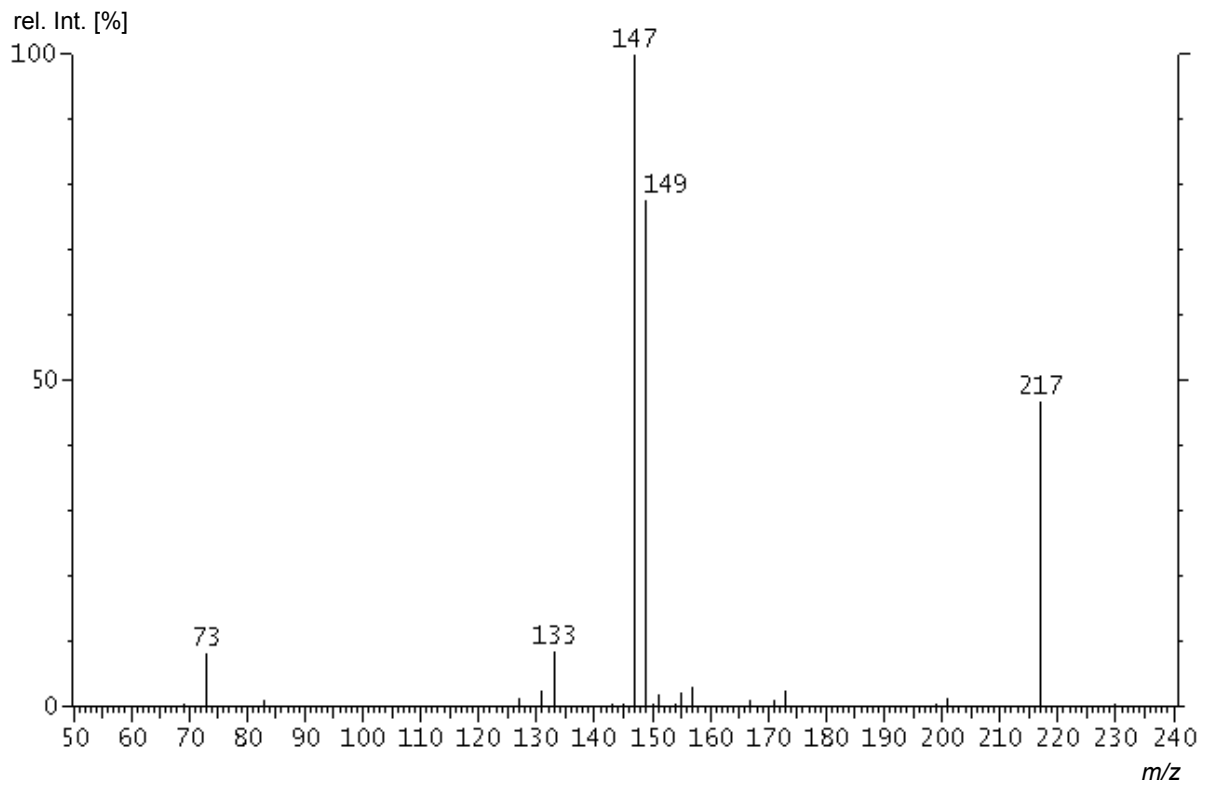
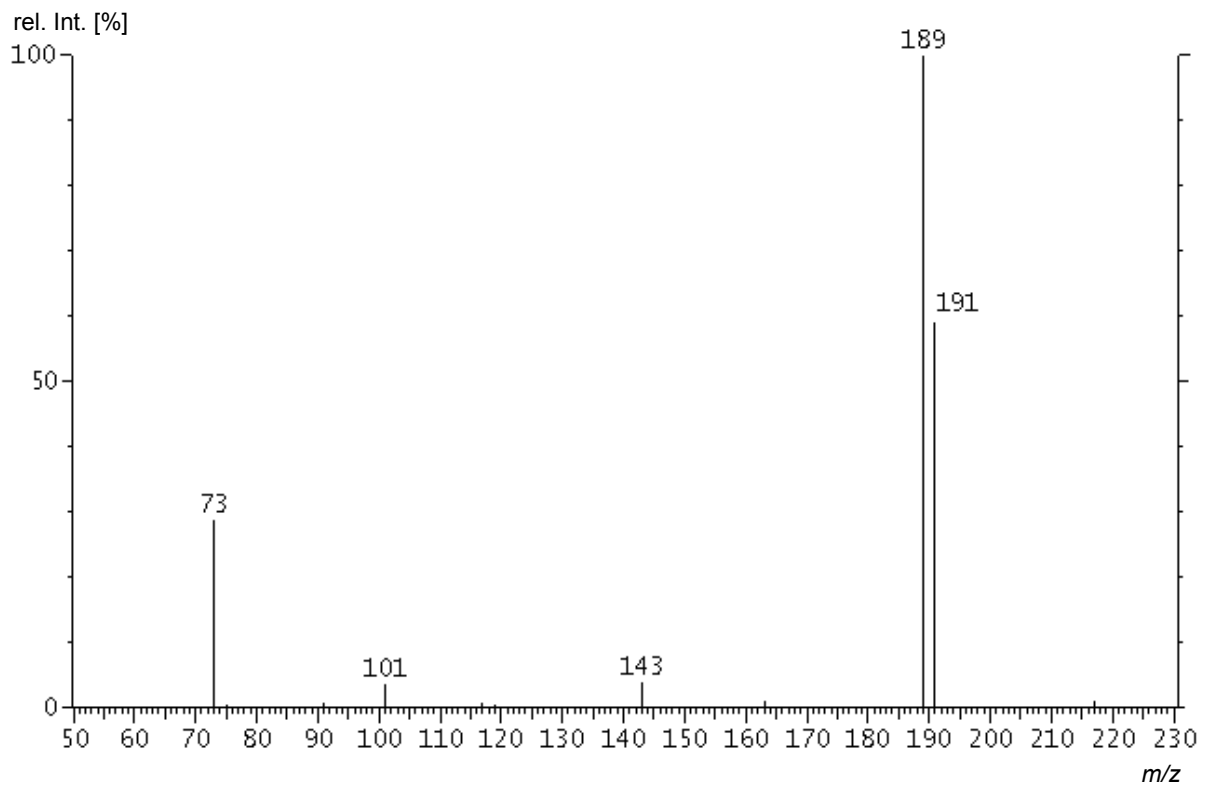
Tab. 23: Mischung K.

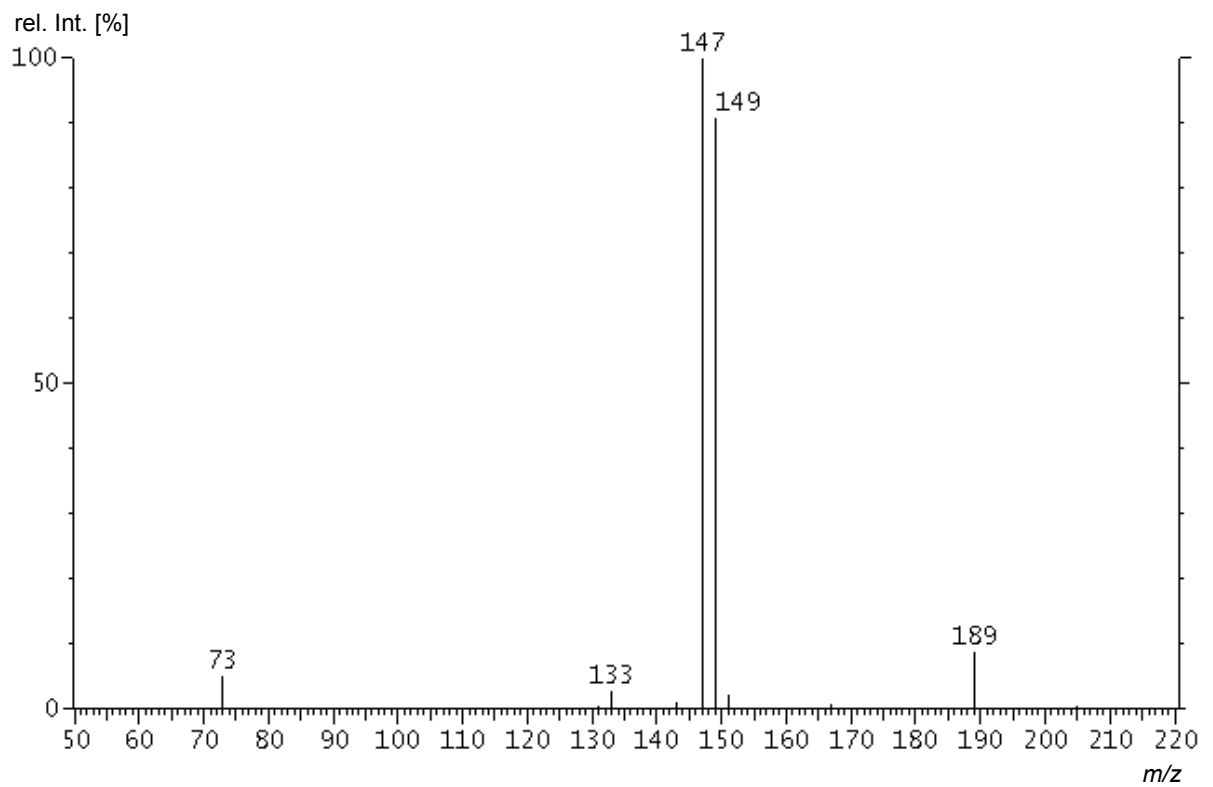
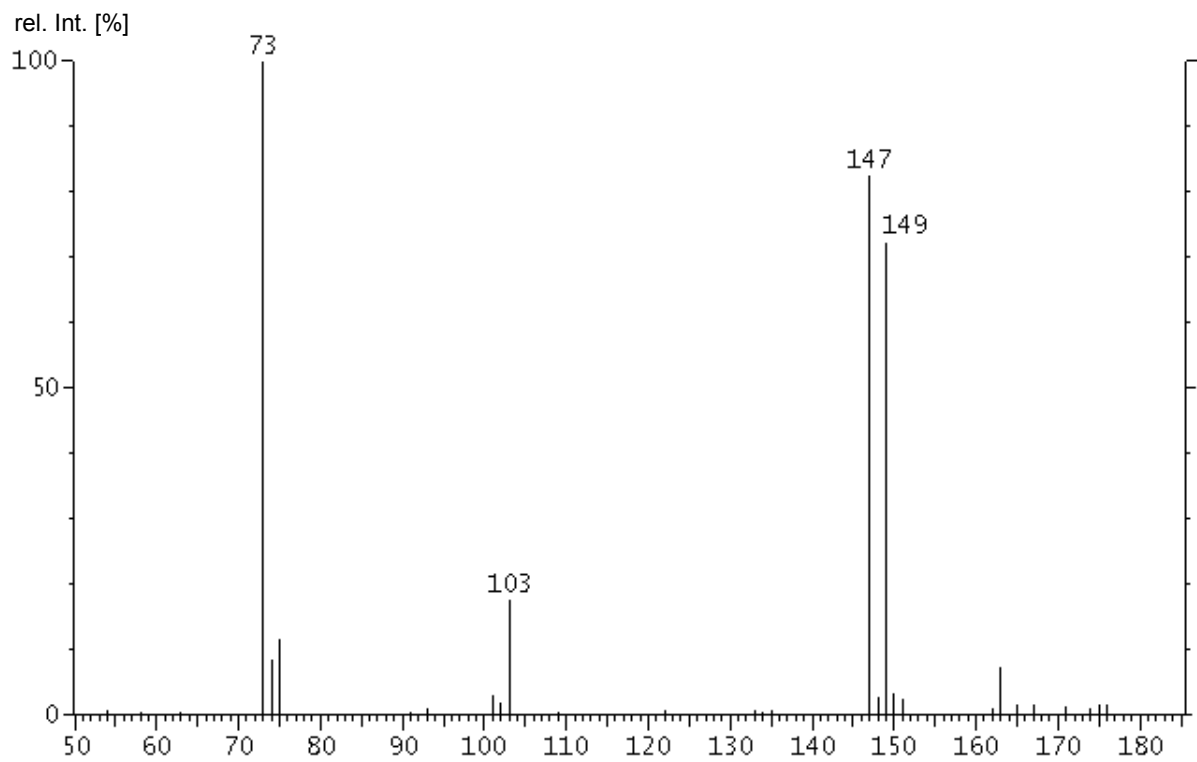
**IV Produkt-Ionen-Spektren**Abb. 11: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **a** ( $m/z$  350).Abb. 12: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **b** ( $m/z$  335).

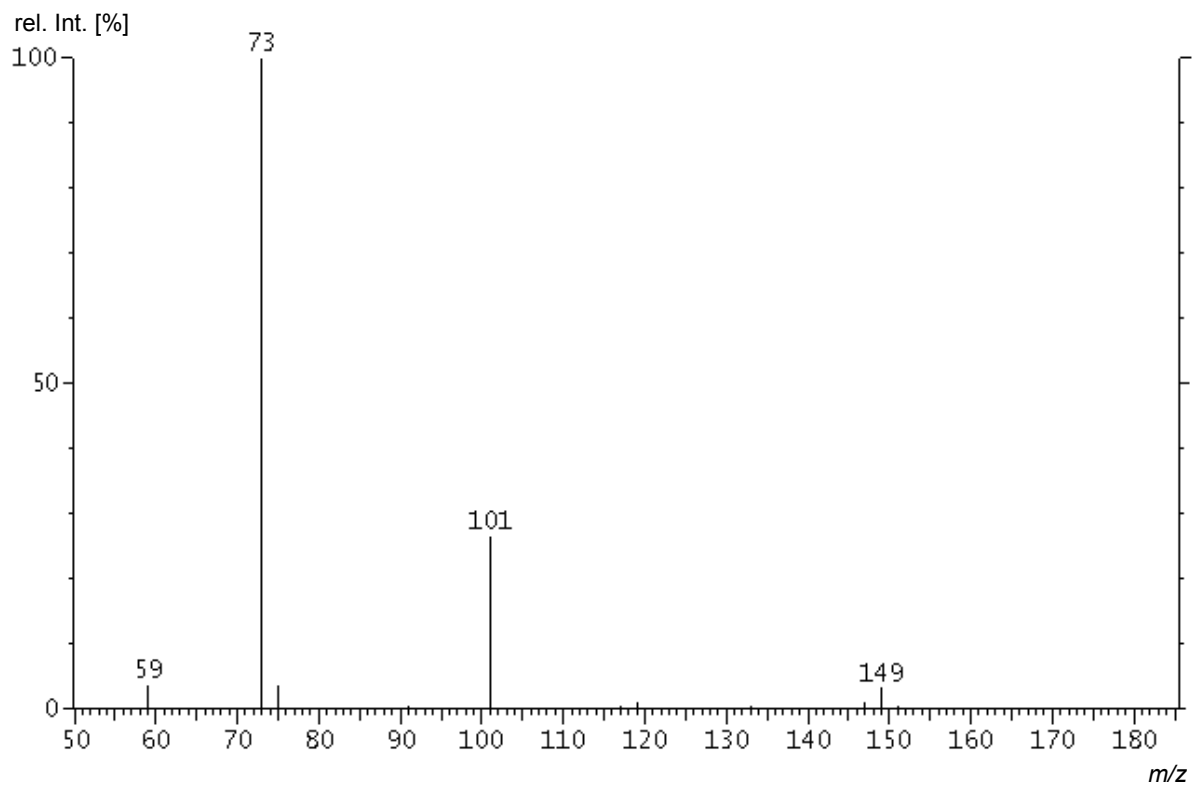
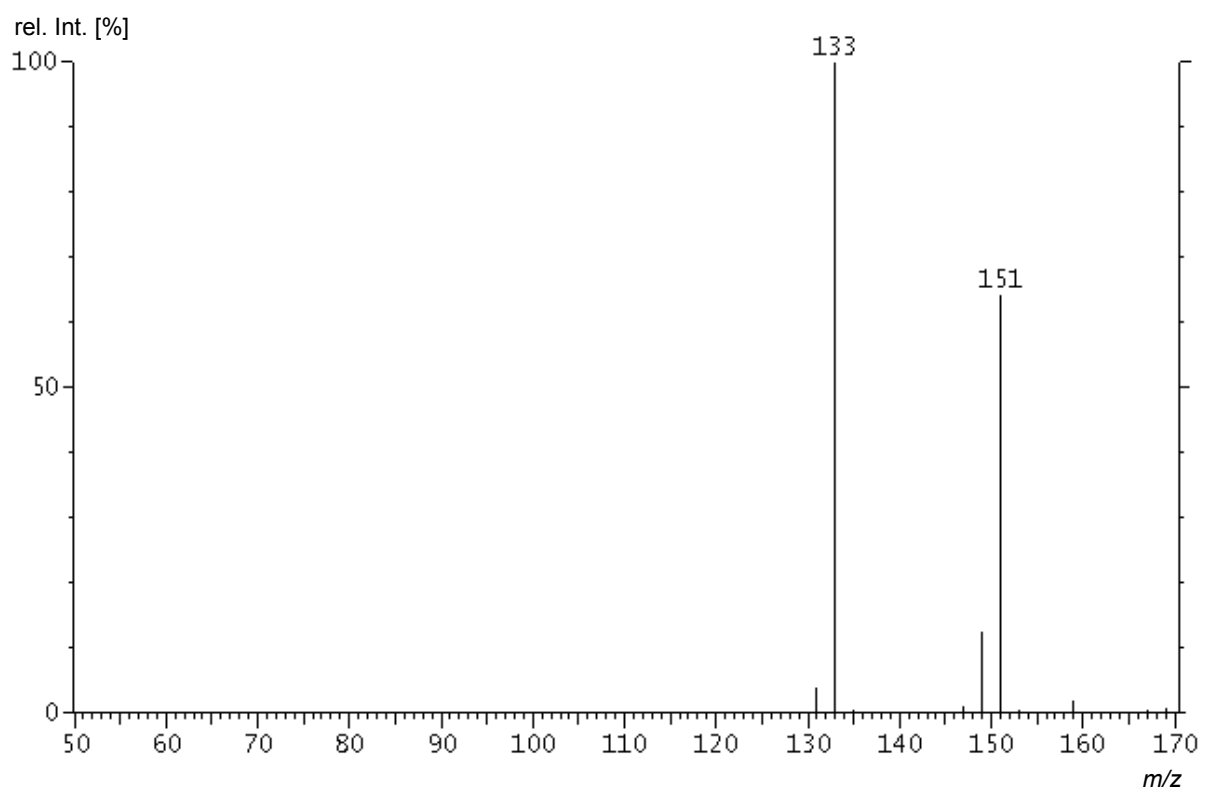


Abb. 13: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **g** ( $m/z$  319).Abb. 14: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **d** ( $m/z$  307).

Abb. 15: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **e** ( $m/z$  265).Abb. 16: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **f** ( $m/z$  263).

Abb. 17: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **h** ( $m/z$  245).Abb. 18: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **c** ( $m/z$  233).

Abb. 19: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions bei  $m/z$  217.Abb. 20: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **i** ( $m/z$  191).

Abb. 21: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions **j** ( $m/z$  189).Abb. 22: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions bei  $m/z$  175.

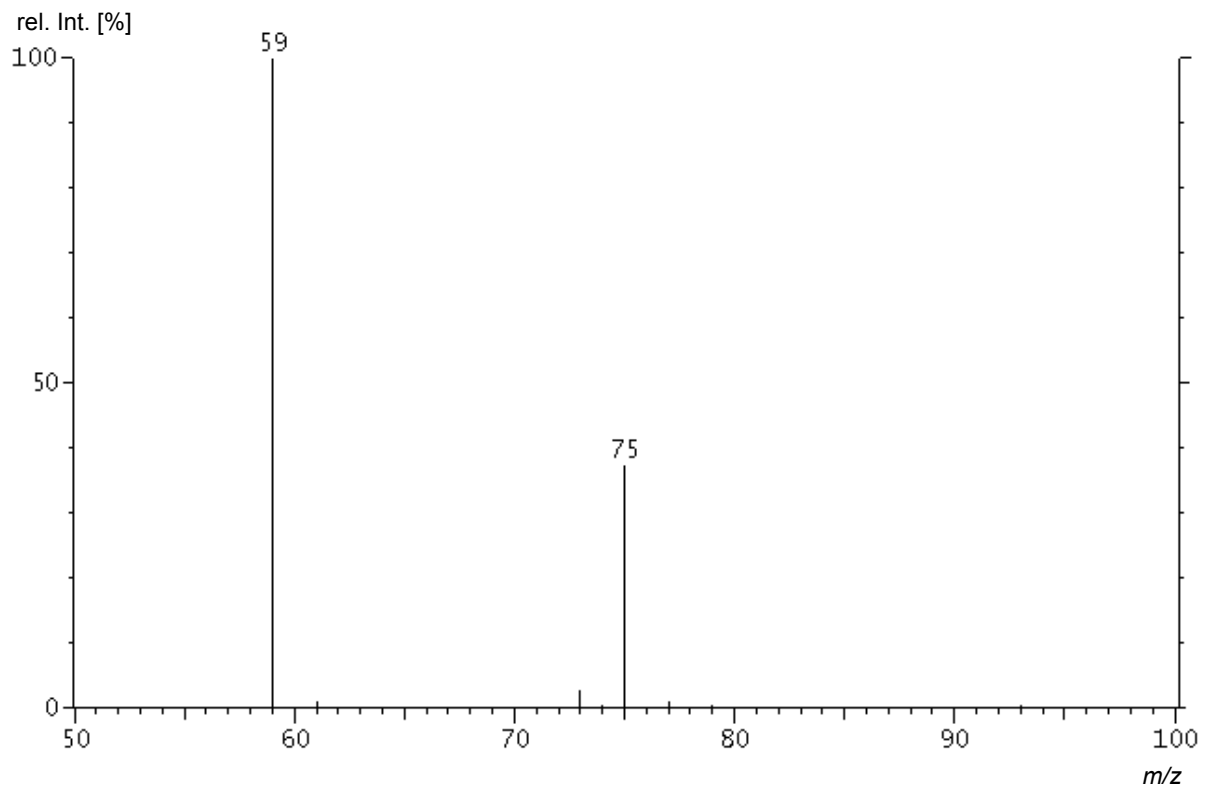


Abb. 23: Produkt-Ionen-Spektrum des Ions bei *m/z* 101.

## V Natürliche Häufigkeit der Isotomere charakteristischer Fragment-Ionen unmarkierter und positionsspezifisch markierter TMS-Äpfelsäuren

Die folgenden Tabellen enthalten die zur Berechnung der Wahrscheinlichkeitsfaktoren  $W$  benötigten Isotopenhäufigkeiten der relevanten Vorläufer-Ionen, Neutralteilchen und Produkt-Ionen.

Markierung durch nat. Isotopengehalt $x$	NH0fach $(\mathbf{b}_{335})_x$	NH1fach $([^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{336})_x$	NH2fach $([^{13}\text{C}_2]\mathbf{b}_{337})_x$	NH3fach $([^{13}\text{C}_3]\mathbf{b}_{338})_x$
0	67,299	68,036	68,785	69,551
1	19,550	19,016	18,469	17,909
2	10,411	10,314	10,228	10,140
3	2,100	2,014	1,919	1,829

Tab. 24: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Ions  $\mathbf{b}$  ( $m/z$  335).

Markierung durch nat. Isotopengehalt $x$	NH0fach $(\text{CO})_x$	NH1fach $(^{13}\text{CO})_x$
0	98,715	99,762
1	1,086	0,038
2	0,197	0,200
3	0,002	-

Tab. 25: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Neutralteilchens  $\text{CO}$ .

Markierung durch nat. Isotopengehalt $x$	NH0fach $(\mathbf{d}_{307})_x$	NH1fach $([^{13}\text{C}]\mathbf{d}_{308})_x$	NH2fach $([^{13}\text{C}_2]\mathbf{d}_{309})_x$
0	68,176	68,932	69,686
1	19,055	18,508	17,944
2	10,199	10,105	10,021
3	1,977	1,889	1,798

Tab. 26: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Ions  $\mathbf{d}$  ( $m/z$  307).

Markierung durch nat. Isotopengehalt x	NH0fach (CO <sub>2</sub> ) <sub>x</sub>	NH1fach ( <sup>13</sup> CO <sub>2</sub> ) <sub>x</sub>
0	98,518	99,524
1	1,084	0,076
2	0,394	0,399

Tab. 27: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Neutralteilchens CO<sub>2</sub>.

Markierung durch nat. Isotopengehalt x	NH0fach (C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O) <sub>x</sub>	NH1fach ( <sup>13</sup> CCH <sub>2</sub> O) <sub>x</sub>
0	97,643	98,715
1	2,148	1,086
2	0,205	0,197

Tab. 28: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Neutralteilchens C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O.

Markierung durch nat. Isotopengehalt x	NH0fach (e <sub>265</sub> ) <sub>x</sub>	NH1fach ([ <sup>13</sup> C]e <sub>266</sub> ) <sub>x</sub>
0	69,827	70,586
1	17,980	17,399
2	9,901	9,818
3	1,766	1,680

Tab. 29: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Ions e (*m/z* 265).

Markierung durch nat. Isotopengehalt x	NH0fach (f <sub>263</sub> ) <sub>x</sub>	NH1fach ([ <sup>13</sup> C]f <sub>264</sub> ) <sub>x</sub>
0	69,209	69,959
1	18,583	18,014
2	9,869	9,780
3	1,820	1,735

Tab. 30: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Ions f (*m/z* 263).



Markierung durch nat. Isotopengehalt x	NH0fach ( <b>c</b> <sub>233</sub> ) <sub>x</sub>	NH1fach ([ <sup>13</sup> C] <b>c</b> <sub>234</sub> ) <sub>x</sub>
0	76,017	76,846
1	15,561	14,885
2	7,237	7,154
3	0,981	0,914

Tab. 31: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Ions **c** (*m/z* 233).

Markierung durch nat. Isotopengehalt x	NH0fach ( <b>j</b> <sub>189</sub> ) <sub>x</sub>	NH1fach ([ <sup>13</sup> C] <b>j</b> <sub>190</sub> ) <sub>x</sub>
0	77,154	78,003
1	14,944	14,250
2	6,874	6,794
3	0,856	0,796

Tab. 32: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Ions **j** (*m/z* 189).

Markierung durch nat. Isotopengehalt x	NH0fach ( <b>i</b> <sub>191</sub> ) <sub>x</sub>	NH1fach ([ <sup>13</sup> C] <b>i</b> <sub>192</sub> ) <sub>x</sub>
0	77,839	78,703
1	14,221	13,513
2	6,935	6,863
3	0,825	0,755

Tab. 33: Prozentuale natürliche Häufigkeit der Isotopomeren des Ions **i** (*m/z* 191).

## VI Korrektur der Intensitätsverhältnisse

### Produkt-Ionen f (*m/z* 263 und 264), Vorläufer-Ion b (*m/z* 336)

$$\text{IAP}(\text{PR0}(263,264)_{336}) = (\text{Int}(263) + \text{Int}(264)) \cdot \text{IAV}(\text{PR0}_{336})$$

$$R_{\text{kor}}(263,264)_{336} = \frac{\text{Int}(263) - W(\mathbf{b}_{336}, \mathbf{f}_{263})_{1,1,0} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(263,264)_{336})}{\text{Int}(264) - W(\mathbf{b}_{336}, \mathbf{f}_{264})_{1,0,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(263,264)_{336})}$$

$$R_{\text{kor}}(263,264)_{336} = \frac{\text{Int}(263) - 0,075 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(263,264)_{336})}{\text{Int}(264) - 0,924 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(263,264)_{336})} = \frac{\text{PR1} + \text{PR4}}{\text{PR2} + \text{PR3}}$$

### Produkt-Ionen e (*m/z* 265 und 266), Vorläufer-Ion b (*m/z* 336)

$$\text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{336}) = (\text{Int}(265) + \text{Int}(266)) \cdot \text{IAV}(\text{PR0}_{336})$$

$$R_{\text{kor}}(265,266)_{336} = \frac{\text{Int}(265) - W(\mathbf{b}_{336}, \mathbf{e}_{265})_{1,1,0} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{336})}{\text{Int}(266) - W(\mathbf{b}_{336}, \mathbf{e}_{266})_{1,0,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{336})}$$

$$R_{\text{kor}}(265,266)_{336} = \frac{\text{Int}(265) - 0,113 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{336})}{\text{Int}(266) - 0,886 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{336})} = \frac{\text{PR1} + \text{PR3} + \text{PR4}}{\text{PR2}}$$

### Produkt-Ionen d (*m/z* 307 bis 309), Vorläufer-Ion b (*m/z* 337)

$$\text{IAV}(\text{PR0}_{337}) = \frac{\text{PR0} \cdot \text{NH0fach}(\mathbf{b}_{337})_2}{N} \quad \text{IAV}(\text{PR1}_{337}) = \frac{\text{PR1} \cdot \text{NH1fach}([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{337})_1}{N}$$

$$\text{IAV}(\text{PR1fn1m}_{337}) = \frac{\text{PR1fn1m} \cdot \text{NH1fach}([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{337})_1}{N}$$

Mit:

$$N = \text{Int}(337) = \text{PR0} \cdot \text{NH0fach}(\mathbf{b}_{337})_2 + \text{PR1fach} \cdot \text{NH1fach}([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{337})_1 + \text{PR2fach} \cdot \text{NH2fach}([\text{}^{13}\text{C}_2]\mathbf{b}_{337})_0$$

$$\text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309)_{337}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309)) \cdot \text{IAV}(\text{PR0}_{337})$$

$$\text{IAP}(\text{PR1}(307,308,309)_{337}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309)) \cdot \text{IAV}(\text{PR1}_{337})$$

$$\text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309)_{337}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309)) \cdot \text{IAV}(\text{PR1fn1m}_{337})$$

$$R(308,309)_{337} = \frac{\text{Int}(308)_{\text{korr}}}{\text{Int}(309)_{\text{korr}}} = \frac{\text{PR12} + \text{PR13} + \text{PR14}}{\text{PR23} + \text{PR24} + \text{PR34}}$$

Mit:

$$\begin{aligned} \text{Int}(308)_{\text{korr}} = & \text{Int}(308) - \\ & W(\mathbf{b}_{337}, \mathbf{d}_{308})_{2,1,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309)_{337}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{337}, \mathbf{d}_{308})_{1,0,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR1}(307,308,309)_{337}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{337}, [\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{d}_{308})_{1,1,0} \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309)_{337}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(308)_{\text{korr}} = & \text{Int}(308) - \\ & 0,020 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309)_{337}) - \\ & 0,999 \cdot \text{IAP}(\text{PR1}(307,308,309)_{337}) - \\ & 0,039 \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309)_{337}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(309)_{\text{korr}} = & \text{Int}(309) - \\ & W(\mathbf{b}_{337}, \mathbf{d}_{309})_{2,0,2} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309)_{337}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{337}, [\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{d}_{309})_{1,0,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309)_{337}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(309)_{\text{korr}} = & \text{Int}(309) - \\ & 0,967 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309)_{337}) - \\ & 0,961 \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309)_{337}) \end{aligned}$$

**Produkt-Ionen d (m/z 307 bis 310), Vorläufer-Ion b (m/z 338)**

$$IAV(PR0_{338}) = \frac{PR0 \cdot NH0fach(\mathbf{b}_{338})_3}{N}$$

$$IAV(PR1_{338}) = \frac{PR1 \cdot NH1fach([^{13}C]\mathbf{b}_{338})_2}{N}$$

$$IAV(PR1fn1m_{338}) = \frac{PR1fn1m \cdot NH1fach([^{13}C]\mathbf{b}_{338})_2}{N}$$

$$IAV(PR2f1m_{338}) = \frac{PR2f1m \cdot NH2fach([^{13}C_2]\mathbf{b}_{338})_1}{N}$$

$$IAV(PR2fn1m_{338}) = \frac{PR2fn1m \cdot NH2fach([^{13}C_2]\mathbf{b}_{338})_1}{N}$$

Mit:

$$N = \text{Int}(338) = PR0 \cdot NH0fach(\mathbf{b}_{338})_3 + PR1fach \cdot NH1fach([^{13}C]\mathbf{b}_{338})_2 + \\ PR2fach \cdot NH2fach([^{13}C_2]\mathbf{b}_{338})_1 + PR3fach \cdot NH3fach([^{13}C_3]\mathbf{b}_{338})_0$$

$$IAP(PR0(307,308,309,310)_{338}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309) + \text{Int}(310)) \cdot IAV(PR0_{338})$$

$$IAP(PR1(307,308,309,310)_{338}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309) + \text{Int}(310)) \cdot IAV(PR1_{338})$$

$$IAP(PR1fn1m(307,308,309,310)_{338}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309) + \text{Int}(310)) \\ \cdot IAV(PR1fn1m_{338})$$

$$IAP(PR2f1m(307,308,309,310)_{338}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309) + \text{Int}(310)) \\ \cdot IAV(PR2f1m_{338})$$

$$IAP(PR2fn1m(307,308,309,310)_{338}) = (\text{Int}(307) + \text{Int}(308) + \text{Int}(309) + \text{Int}(310)) \\ \cdot IAV(PR2fn1m_{338})$$

$$R(308,309)_{337} = \frac{\text{Int}(309)_{\text{korr}}}{\text{Int}(310)_{\text{korr}}} = \frac{\text{PR123} + \text{PR134} + \text{PR124}}{\text{PR234}}$$

Mit:

$$\begin{aligned} \text{Int}(309)_{\text{korr}} = & \text{Int}(309) - \\ & W(\mathbf{b}_{338}, \mathbf{d}_{309})_{3,1,2} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{338}, \mathbf{d}_{309})_{2,0,2} \cdot \text{IAP}(\text{PR1}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{338}, [\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{d}_{309})_{2,1,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}_2]\mathbf{b}_{338}, [\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{d}_{309})_{1,0,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR2f1m}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}_2]\mathbf{b}_{338}, [\text{}^{13}\text{C}_2]\mathbf{d}_{309})_{1,1,0} \cdot \text{IAP}(\text{PR2fn1m}(307,308,309,310)_{338}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(309)_{\text{korr}} = & \text{Int}(309) - \\ & 0,053 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & 0,986 \cdot \text{IAP}(\text{PR1}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & 0,019 \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & 0,999 \cdot \text{IAP}(\text{PR2f1m}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & 0,041 \cdot \text{IAP}(\text{PR2fn1m}(307,308,309,310)_{338}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(310)_{\text{korr}} = & \text{Int}(310) - \\ & W(\mathbf{b}_{338}, \mathbf{d}_{310})_{3,0,3} \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{b}_{338}, [\text{}^{13}\text{C}]\mathbf{d}_{310})_{2,0,2} \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & W([\text{}^{13}\text{C}_2]\mathbf{b}_{338}, [\text{}^{13}\text{C}_2]\mathbf{d}_{310})_{1,0,1} \cdot \text{IAP}(\text{PR2fn1m}(307,308,309,310)_{338}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(310)_{\text{korr}} = & \text{Int}(310) - \\ & 0,929 \cdot \text{IAP}(\text{PR0}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & 0,967 \cdot \text{IAP}(\text{PR1fn1m}(307,308,309,310)_{338}) - \\ & 0,959 \cdot \text{IAP}(\text{PR2fn1m}(307,308,309,310)_{338}) \end{aligned}$$

**Produkt-Ionen f (*m/z* 263 und 264), Vorläufer-Ion d (*m/z* 308)**

$$IAV(PR0_{308}) = \frac{PR0 \cdot NH0fach(\mathbf{d}_{308})_1}{N}$$

$$IAV(PR1_{308}) = \frac{PR1 \cdot NH0fach(\mathbf{d}_{308})_1}{N}$$

$$IAV(PR2_{308}) = \frac{PR2 \cdot NH1fach([^{13}C]\mathbf{d}_{308})_0}{N}$$

$$IAV(PR3_{308}) = \frac{PR3 \cdot NH1fach([^{13}C]\mathbf{d}_{308})_0}{N}$$

$$IAV(PR4_{308}) = \frac{PR4 \cdot NH1fach([^{13}C]\mathbf{d}_{308})_0}{N}$$

Mit:

$$N = (PR0 + PR1) \cdot NH0fach(\mathbf{d}_{308})_1 + (PR1fn1m + PR2f1m) \cdot NH1fach([^{13}C]\mathbf{d}_{308})_0$$

$$IAP(PR0(263,264)_{308}) = (Int(263) + Int(264)) \cdot IAV(PR0_{308})$$

$$IAP(PR1(263,264)_{308}) = (Int(263) + Int(264)) \cdot IAV(PR1_{308})$$

$$IAP(PR2(263,264)_{308}) = (Int(263) + Int(264)) \cdot IAV(PR2_{308})$$

$$IAP(PR3(263,264)_{308}) = (Int(263) + Int(264)) \cdot IAV(PR3_{308})$$

$$IAP(PR4(263,264)_{308}) = (Int(263) + Int(264)) \cdot IAV(PR4_{308})$$

$$R(263,264)_{308} = \frac{Int(263)_{\text{korr}}}{Int(264)_{\text{korr}}} = \frac{PR14}{PR12 + PR13}$$

Mit:

$$Int(263)_{\text{korr}} = Int(263) - W(\mathbf{d}_{308}, \mathbf{f}_{263})_{1,1,0} \cdot (IAP(PR0(263,264)_{308}) + IAP(PR1(263,264)_{308})) - IAP(PR4(263,264)_{308})$$

$$Int(263)_{\text{korr}} = Int(263) - 0,039 \cdot (IAP(PR0(263,264)_{308}) + IAP(PR1(263,264)_{308})) - IAP(PR4(263,264)_{308})$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(264)_{\text{kor}} &= \text{Int}(264) - \\ &\quad W(\mathbf{d}_{308}, \mathbf{f}_{264})_{1,0,1} \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(263,264)_{308}) + \text{IAP}(\text{PR1}(263,264)_{308})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR2}(263,264)_{308}) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR3}(263,264)_{308}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(264)_{\text{kor}} &= \text{Int}(264) - \\ &\quad 0,961 \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(263,264)_{308}) + \text{IAP}(\text{PR1}(263,264)_{308})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR2}(263,264)_{308}) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR3}(263,264)_{308}) \end{aligned}$$

### Produkt-Ionen e (*m/z* 265 und 266), Vorläufer-Ion d (*m/z* 308)

IAV(PR0)<sub>308</sub>, IAV(PR1)<sub>308</sub>, IAV(PR2)<sub>308</sub>, IAV(PR3)<sub>308</sub> und IAV(PR4)<sub>308</sub> werden übernommen.

$$\begin{aligned} \text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{308}) &= (\text{Int}(265) + \text{Int}(266)) \cdot \text{IAV}(\text{PR0}_{308}) \\ \text{IAP}(\text{PR1}(265,266)_{308}) &= (\text{Int}(265) + \text{Int}(266)) \cdot \text{IAV}(\text{PR1}_{308}) \\ \text{IAP}(\text{PR2}(265,266)_{308}) &= (\text{Int}(265) + \text{Int}(266)) \cdot \text{IAV}(\text{PR2}_{308}) \\ \text{IAP}(\text{PR3}(265,266)_{308}) &= (\text{Int}(265) + \text{Int}(266)) \cdot \text{IAV}(\text{PR3}_{308}) \\ \text{IAP}(\text{PR4}(265,266)_{308}) &= (\text{Int}(265) + \text{Int}(266)) \cdot \text{IAV}(\text{PR4}_{308}) \end{aligned}$$

$$R(265,266)_{308} = \frac{\text{Int}(265)_{\text{kor}}}{\text{Int}(266)_{\text{kor}}} = \frac{\text{PR14} + \text{PR13}}{\text{PR12}}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(265)_{\text{kor}} &= \text{Int}(265) - \\ &\quad W(\mathbf{d}_{308}, \mathbf{e}_{265})_{1,1,0} \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{308}) + \text{IAP}(\text{PR1}(265,266)_{308})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR4}(265,266)_{308}) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR3}(265,266)_{308}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(265)_{\text{kor}} &= \text{Int}(265) - \\ &\quad 0,079 \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{308}) + \text{IAP}(\text{PR1}(265,266)_{308})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR4}(265,266)_{308}) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR3}(265,266)_{308}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(266)_{\text{korr}} &= \text{Int}(266) - \\ &W(\mathbf{d}_{308}, \mathbf{e}_{266})_{1,0,1} \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{308}) + \text{IAP}(\text{PR1}(265,266)_{308})) - \\ &\text{IAP}(\text{PR2}(265,266)_{308}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(266)_{\text{korr}} &= \text{Int}(266) - \\ &0,921 \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(265,266)_{308}) + \text{IAP}(\text{PR1}(265,266)_{308})) - \\ &\text{IAP}(\text{PR2}(265,266)_{308}) \end{aligned}$$

**Produkt-Ionen j ( $m/z$  189 und 190), Vorläufer-Ion c ( $m/z$  234)**

$$\text{IAV}(\text{PR0}_{234}) = \frac{\text{PR0} \cdot \text{NH0fach}(\mathbf{c}_{234})_1}{N} \qquad \text{IAV}(\text{PR1}_{234}) = \frac{\text{PR1} \cdot \text{NH0fach}(\mathbf{c}_{234})_1}{N}$$

$$\text{IAV}(\text{PR2}_{234}) = \frac{\text{PR2} \cdot \text{NH1fach}([\text{C}^{13}]\mathbf{c}_{234})_0}{N} \qquad \text{IAV}(\text{PR3}_{234}) = \frac{\text{PR3} \cdot \text{NH1fach}([\text{C}^{13}]\mathbf{c}_{234})_0}{N}$$

$$\text{IAV}(\text{PR4}_{234}) = \frac{\text{PR4} \cdot \text{NH1fach}([\text{C}^{13}]\mathbf{c}_{234})_0}{N}$$

Mit:

$$N = (\text{PR0} + \text{PR1}) \cdot \text{NH0fach}(\mathbf{c}_{234})_1 + (\text{PR1fn1m} + \text{PR2f1m}) \cdot \text{NH1fach}([\text{C}^{13}]\mathbf{c}_{234})_0$$

$$\text{IAP}(\text{PR0}(189,190)_{234}) = (\text{Int}(189) + \text{Int}(190)) \cdot \text{IAV}(\text{PR0}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR1}(189,190)_{234}) = (\text{Int}(189) + \text{Int}(190)) \cdot \text{IAV}(\text{PR1}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR2}(189,190)_{234}) = (\text{Int}(189) + \text{Int}(190)) \cdot \text{IAV}(\text{PR2}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR3}(189,190)_{234}) = (\text{Int}(189) + \text{Int}(190)) \cdot \text{IAV}(\text{PR3}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR4}(189,190)_{234}) = (\text{Int}(189) + \text{Int}(190)) \cdot \text{IAV}(\text{PR4}_{234})$$

$$R(189,190)_{234} = \frac{\text{Int}(189)_{\text{korr}}}{\text{Int}(190)_{\text{korr}}} = \frac{\text{PR14}}{\text{PR12} + \text{PR13}}$$



Mit:

$$\begin{aligned} \text{Int}(189)_{\text{korr}} = & \text{Int}(189) - \\ & W(\mathbf{c}_{234}, \mathbf{j}_{189})_{1,1,0} \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(189,190)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(189,190)_{234})) - \\ & \text{IAP}(\text{PR4}(189,190)_{234}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(189)_{\text{korr}} = & \text{Int}(189) - \\ & 0,053 \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(189,190)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(189,190)_{234})) - \\ & \text{IAP}(\text{PR4}(189,190)_{234}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(190)_{\text{korr}} = & \text{Int}(190) - \\ & W(\mathbf{c}_{234}, \mathbf{j}_{190})_{1,0,1} \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(189,190)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(189,190)_{234})) - \\ & \text{IAP}(\text{PR2}(189,190)_{234}) - \\ & \text{IAP}(\text{PR3}(189,190)_{234}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(190)_{\text{korr}} = & \text{Int}(190) - \\ & 0,947 \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(189,190)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(189,190)_{234})) - \\ & \text{IAP}(\text{PR2}(189,190)_{234}) - \\ & \text{IAP}(\text{PR3}(189,190)_{234}) \end{aligned}$$

### Produkt-Ionen i (*m/z* 191 und 192), Vorläufer-Ion c (*m/z* 234)

IAV(PR0<sub>234</sub>), IAV(PR1<sub>234</sub>), IAV(PR2<sub>234</sub>), IAV(PR3<sub>234</sub>) und IAV(PR4<sub>234</sub>) werden übernommen.

$$\text{IAP}(\text{PR0}(191,192)_{234}) = (\text{Int}(191) + \text{Int}(192)) \cdot \text{IAV}(\text{PR0}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR1}(191,192)_{234}) = (\text{Int}(191) + \text{Int}(192)) \cdot \text{IAV}(\text{PR1}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR2}(191,192)_{234}) = (\text{Int}(191) + \text{Int}(192)) \cdot \text{IAV}(\text{PR2}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR3}(191,192)_{234}) = (\text{Int}(191) + \text{Int}(192)) \cdot \text{IAV}(\text{PR3}_{234})$$

$$\text{IAP}(\text{PR4}(191,192)_{234}) = (\text{Int}(191) + \text{Int}(192)) \cdot \text{IAV}(\text{PR4}_{234})$$

$$R(191,192)_{234} = \frac{\text{Int}(191)_{\text{korr}}}{\text{Int}(192)_{\text{korr}}} = \frac{\text{PR14} + \text{PR13}}{\text{PR12}} = R(265,266)_{308}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(191)_{\text{korr}} &= \text{Int}(191) - \\ &\quad W(\mathbf{c}_{234}, \mathbf{j}_{191})_{1,1,0} \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(191,192)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(191,192)_{234})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR4}(191,192)_{234}) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR3}(191,192)_{234}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(191)_{\text{korr}} &= \text{Int}(191) - \\ &\quad 0,107 \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(191,192)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(191,192)_{234})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR4}(191,192)_{234}) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR3}(191,192)_{234}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(192)_{\text{korr}} &= \text{Int}(192) - \\ &\quad W(\mathbf{c}_{234}, \mathbf{j}_{192})_{1,0,1} \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(191,192)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(191,192)_{234})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR2}(191,192)_{234}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Int}(192)_{\text{korr}} &= \text{Int}(192) - \\ &\quad 0,893 \cdot (\text{IAP}(\text{PR0}(191,192)_{234}) + \text{IAP}(\text{PR1}(191,192)_{234})) - \\ &\quad \text{IAP}(\text{PR2}(191,192)_{234}) \end{aligned}$$

## **Danksagung**

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. J. J. Veith für die interessante Themenstellung, und die Freiheit sie weitgehend selbständig ausformen und bearbeiten zu dürfen. Außerdem danke ich ihm für die vielen wertvollen Diskussionen und für seine Aufgeschlossenheit gegenüber meinen „Nebentätigkeiten“ im EDV-Umfeld.

Herrn M. Fischer † danke ich für die Hege und Pflege unserer Sektorfeld-Massenspektrometer und für seine stets freundliche und aufmunternde Art. Weiterhin danke ich Frau Christiane Rudolph, die mir mit ihrem reichen Erfahrungsschatz in GC-MS-Methoden immer einen Rat geben konnte und den „Sonnenschein“ in unseren Arbeitskreis brachte.

Den ehemaligen Vertiefungspraktikanten Herrn Dipl.-Ing. Jürgen Thormann und Herrn Dipl.-Ing. Hans-Peter Dornik danke ich für ihre präparative Arbeit.

Herrn Dr.-Ing. Jürgen Gross danke ich für vielen Stunden, die er für die Korrektur des Manuskriptes opferte.

Herrn Dipl.-Ing. Heiko Schleinkofer, Herrn Dipl.-Ing. Sven Baum, Herrn Dipl.-Ing. Frank Runge und den weiteren ehemaligen und jetzigen Mitgliedern des Arbeitskreises danke ich für die vielen weiterführenden Diskussionen und für ihr freundschaftliches Verhalten auch über die Institutsgrenzen hinaus.

## **Abriß des Lebens- und Bildungsganges**

### **Angaben zur Person:**

Name: Robert Koob  
Geburtsdatum: 09.09.1967  
Geburtsort: Bensheim  
Staatsangehörigkeit: deutsch  
Familienstand: verheiratet

### **Schulbildung:**

1974 – 1978: Grundschule, Schloßberg-Schule in Bensheim-Auerbach  
1978 – 1987: Gymnasium, Goethe-Gymnasium in Bensheim  
1987: Abitur  
  
Juli 1987 – Oktober 1988: Grundwehrdienst

### **Studium und Beruf:**

WS 1988/89: Studiengang Chemieingenieurwesen an der TU Karlsruhe  
SS 1989 – SS 1995: Studiengang Chemie (Diplom) an der TH Darmstadt  
April 1991: Diplom-Vorprüfung  
Juni 1995: Diplom-Hauptprüfung  
  
August 1995 – Juli 2000: Promotion am Institut für Organische Chemie der TU Darmstadt  
  
Seit November 1997: Dozententätigkeit für Chemie-Datenbanksysteme in der chemischen Industrie  
Seit Dezember 1999: Angestellter der SLAT Training GmbH, Waldems

## **Eidesstattliche Erklärung**

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, daß ich meine Dissertation selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Darmstadt, den