

Nutzungskonzept

Massenspektrometrie

Fachbereich Chemie und Pharmazie

an der WWU Münster

Stand: 15.04.2021

Inhaltsverzeichnis

	Seite
A. Organisation	3
A.1 Allgemeine Beschreibung	3
A.2 Nutzungsordnung	6
B. Massenspektrometrische Routine- und Servicemessungen	9
B.1 Institut für Anorganische und Analytische Chemie	9
B.2 Organisch-Chemisches Institut	9
C. Massenspektrometrische Forschungsschwerpunkte	11
C.1 Institut für Anorganische und Analytische Chemie (IAAC)	11
C.1.1 AG Prof. Hayen	11
C.1.2 AG Prof. Karst	12
C.2 Institut für Biochemie	14
C.3 Institut für Lebensmittelchemie	15
C.4 Institut für Pharmazeutische Biologie	16
C.5 Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie (IPMC)	16
C.6 Münster Electrochemical Energy Technology Battery Research Center (MEET)	17

A Organisation

A.1 Allgemeine Beschreibung

Der Fachbereich Chemie und Pharmazie der WWU Münster gehört mit derzeit 50 Arbeitsgruppen, davon 40 Professuren und 10 Nachwuchsgruppen, zu den größten Fachbereichen seiner Art in Deutschland. Innerhalb des Fachbereiches wurde in den letzten Jahren eine äußerst produktive und breitgefächerte massenspektrometrische Kompetenz aufgebaut, die mit über 50 Geräten nahezu alle Bereiche der Massenspektrometrie abdeckt (vgl. **Tabelle 3-11**). Aufgrund der hohen Anzahl an Systemen und unterschiedlichen fachlichen Kompetenzen sind die vorhandenen Geräte dezentral über die einzelnen Institute bzw. Arbeitsgruppen im Fachbereich verteilt, die räumlich in direkter Nachbarschaft im Naturwissenschaftlichen Zentrum angesiedelt sind. Auf diese Weise ist eine möglichst große Nähe zum Nutzer bzw. Auftraggeber gewährleistet und eine enge Zusammenarbeit wird gefördert. So müssen empfindliche Proben nur über kurze Wege transportiert werden und es kann eine optimale und individuelle Beratung und Betreuung vor Ort erfolgen. Der regelmäßige, intensive Austausch zwischen den Leitern der einzelnen Bereiche/Einrichtungen wird durch gemeinsame Treffen sowie gegenseitige Besuche gewährleistet. So ist sichergestellt, dass bei technischen Problemen eine schnelle gegenseitige Unterstützung erfolgt und Anfragen von (externen) Nutzern zu dem für die jeweilige Fragestellung optimalen Bereich/Institut gelangen.

Die massenspektrometrischen Kompetenzen und Schwerpunkte werden im Folgenden nach der überwiegenden Nutzung in die Bereiche **Service/Routine** und **Forschung** aufgeteilt. Zum Bereich **Service/Routine** gehören die zentralen Serviceeinheiten im Institut für Anorganische und Analytische Chemie sowie im Organisch-Chemischen Institut (**Tabelle 1**). Eine Detailbeschreibung der vorhandenen Geräte und Methodenschwerpunkte findet sich in **Teil B**.

Tabelle 1: Massenspektrometrische Kompetenzen im Bereich Service/Routine

Bereich/Institut	Verantwortlicher Hochschullehrer	Ansprech-partner	Schwerpunkte
Zentrale Serviceeinheit im Institut für Anorganische und Analytische Chemie	Prof. Dr. Müller Tel.: 0251 83-36006	Dr. Hebenbrock Tel.: 0251 83-36005	Charakterisierung von Metallkomplexen und deren Liganden sowie akkurate Massen zur Bestätigung von Identität und Elementarzusammensetzung
Zentrale Serviceeinheit im Organisch-Chemischen Institut	Prof. Dr. Studer Tel.: 0251 83-33291	Dr. Letzel Tel.: 0251 83-33299	Analyse von Syntheseprodukten akkurate Massen zur Bestätigung von Identität und Elementarzusammensetzung

Schwerpunkt bildet die Charakterisierung von organischen und anorganischen Syntheseprodukten, insbesondere die Bestätigung von Identität und Elementarzusammensetzung.

Zum Bereich **Forschung** gehören die in **Tabelle 2** genannten Institute des FB12 mit den entsprechenden Schwerpunkten im Bereich der Massenspektrometrie sowie das Münster Electrochemical Energy Technology Battery Research Center (MEET). Beim MEET handelt es sich um eine zentrale wissenschaftliche Einrichtung der WWU (vgl. Statut vom 23.05.2013, [Amtliche Bekanntmachungen WWU](#)), die wissenschaftlich eng mit dem FB12 kooperiert.

Tabelle 2: Massenspektrometrische Kompetenzen im Bereich **Forschung**

Bereich/Institut	Verantwortliche Hochschullehrer	Ansprech-partner/Leiter	Schwerpunkte
Institut für Anorganische und Analytische Chemie AG Prof. Hayen	Prof. Dr. Hayen Tel.: 0251 83-36576	Prof. Dr. Hayen Tel.: 0251 83-36576	(1) Charakterisierung und Quantifizierung von Lipiden, Metaboliten und Biotensiden mittels LC-MS/MS (2) Profiling von Lipiden und Metaboliten mittels HR-MS und MS/MS nach chromatographischer Trennung durch HPLC, überkritische Fluidchromatographie u. Ionenchromatographie
Institut für Anorganische und Analytische Chemie AG Prof. Karst	Prof. Dr. Karst Tel.: 0251 83-33141	Dr. Vielhaber Tel.: 0251 83-33173	(1) Speziationsanalytik (2) Massenspektrometrische Bildgebung (3) Elektrochemie-MS-Kopplung
Institut für Biochemie AK Prof. Mootz	Prof. Dr. Mootz Tel.: 0251 83-33005	Dr. Dörner Tel.: 0251 83-33302	(1) Protein- und Peptidanalytik (2) Synthesekontrolle
Institut für Biochemie AK Prof.-in Rentmeister	Prof.-in Dr. Rentmeister Tel.: 0251 83-33204	N.N.	(1) Identifizierung und Quantifizierung von RNA und modifizierten Nukleosiden, (2) Synthesekontrolle
Institut für Lebensmittelchemie	Prof.-in Dr. Esselen Prof. Dr. Humpf Tel.: 0251 83-33391	Dr. Cramer Tel.: 0251 83-33878	Lebensmittelinhaltsstoffe, Lebensmittel- und Umweltkontaminanten, Sekundärmetaboliten aus Pilzen und Mikroorganismen: (1) Quantifizierung mittels HPLC-MS/MS (2) Identifizierung und Charakterisierung von unbekannten Verbindungen (3) Metabolomics, Lipidomics und Proteomics
Institut für Pharmazeutische Biologie und Phytochemie (IPBP)	Prof. Dr. Hensel Prof. Dr. Schmidt Tel.: 0251 83-33380	Dr. Sendker Tel.: 0251 83-33379	(1) Metabolisches Profiling pflanzlicher Materialien (2) Identifizierung/Charakterisierung von unbekannten Verbindungen (3) Metabolomics

Fortsetzung Tabelle 2

Bereich/Institut	Verantwortlicher Hochschullehrer	Ansprechpartner/Leiter	Schwerpunkte
Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie (IPMC)	Prof. Dr. Wünsch Tel.: 0251 83-33310	Dr. Fabian Tel.: 0251 83-33326	Medizinische Chemie, Pharmakologie und Klinische Pharmazie: (1) Quantifizierung kleiner Moleküle (2) Metabolomics/Lipidomics (3) Identifizierung/Charakterisierung von unbekannten Verbindungen (4) Synthesekontrolle (5) Bestimmung der akkurate Massen zur Bestätigung von Identität und Elementarzusammensetzung
Münster Electrochemical Energy Technology Battery Research Center (MEET)	Prof. Dr. Winter Tel.: 0251 83-36033	Dr. Nowak Tel.: 0251 83-36735	Materialcharakterisierung von Batterieinhaltsstoffen: (1) Quantifizierung (2) Identifizierung/Charakterisierung von unbekannten Verbindungen (3) Metallspeziation (4) Oberflächen-, Imaging- und Bulkuntersuchungen

Im **Institut für Anorganische und Analytische Chemie** werden in der AG Hayen Lipide und Biotenside sowie deren Metaboliten untersucht. Schwerpunkte in der AG Karst sind die Speziationsanalytik, massenspektrometrische Bildgebung sowie die Kopplung von Elektrochemie und Massenspektrometrie. Im **Institut für Biochemie** stehen Untersuchungen an Proteinen und Nukleotiden im Vordergrund. Das **Institut für Lebensmittelchemie** ist spezialisiert auf Lebensmittelinhaltstoffe, Lebensmittel- und Umweltkontaminanten sowie auf die Identifizierung und Charakterisierung von Sekundärmetaboliten von Pilzen und weiteren Mikroorganismen. Schwerpunkte im **Institut für Pharmazeutische Biologie** sind Arzneipflanzen und deren Metabolitenprofile. Am **Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie** werden unterschiedliche Aspekte pharmakologisch aktiver Verbindungen bearbeitet. Im Münster Electrochemical Energy Technology Battery Research Center (**MEET**) steht die Materialcharakterisierung im Vordergrund. Eine Detailbeschreibung der vorhandenen Geräte und Methodenschwerpunkten befindet sich in **Teil C**.

Wissenschaftliche Kooperationen aller in den **Tabelle 1** und **2** genannten Serviceeinheiten und Institute im Rahmen der genannten massenspektrometrische Kompetenzen bestehen innerhalb des Fachbereiches Chemie und Pharmazie, mit den Fachbereichen Biologie, Geowissenschaften und Medizin der WWU, insbesondere im Rahmen koordinierter Verfahren (z.B. Chembion, CiMiC, SFB 1450, SFB 1459), sowie extern mit verschiedenen Arbeitsgruppen an anderen Universitäten und Forschungseinrichtungen im In- und Ausland sowie mit Industriepartnern.

A.2 Nutzungsordnung

Verbindlichkeit

Die vorliegende Nutzungsordnung gilt für alle Nutzer, die die im Nutzungskonzept genannten MS-Geräte (**Tabelle 3-11**, sortiert nach Anschaffungsjahr) im FB12 nutzen.

Ansprechpersonen

Die in **Tabelle 1** und **2** genannten Leiter*innen der dezentralen massenspektrometrischen Abteilungen in den einzelnen Instituten sind zentrale Ansprechpartner*innen für alle Fragen im Zusammenhang mit der Nutzung der MS-Geräte. Sie sind innerhalb und außerhalb des Fachbereiches sehr gut vernetzt und treffen sich regelmäßig zum wissenschaftlichen Austausch und zum Erfahrungsaustausch. Weiterhin bieten Sie Lehrveranstaltungen und Schulungskurse, auch unter Beteiligung von externen Wissenschaftler*innen, an.

Sie sind verantwortlich für folgende Punkte:

- Betrieb der in ihrem Verantwortungsbereich vorhandenen MS-Geräte
- Organisation des Messbetriebes
- Vergabe und Dokumentation der Messzeit (Bei Überbuchung der Messzeit entscheidet der Leiter in Absprache mit dem*der verantwortlichen Hochschullehrer*in über die Vergabe der Messzeit nach Dringlichkeit, wobei interne Messungen aus dem FB12 in der Regel eine höhere Priorität haben).
- Speicherung und Archivierung der Rohdaten
- Reparaturen und Ersatzbeschaffungen
- Einarbeitung von Mitarbeiter*innen (Doktoranden*innen, technische Mitarbeiter*innen, Masterstudierende, etc.), die eigenständig an den MS-Geräten Messungen durchführen.

Buchung/Messzeitvergabe

Die Buchung der Geräte/Messzeit erfolgt derzeit individuell über die Ansprechpersonen der einzelnen Abteilungen, wobei in den Serviceeinheiten mit sehr hohem Probenaufkommen teilweise bereits eigene Softwarelösungen genutzt werden. Langfristig wird die Einführung fachbereichsübergreifender Buchungssysteme angestrebt.

An allen dezentralen Standorten werden auf Anfrage auch Messungen aus anderen Instituten innerhalb und außerhalb des Fachbereiches bzw. der WWU durchgeführt. Neben reinen Servicemessungen handelt es sich überwiegend um Forschungskooperationen. Sofern Anfragen nach MS-Messungen eingehen, werden diese – nach entsprechender wissenschaftlicher Beratung unter Einbeziehung der verantwortlichen Hochschullehrer*innen - entweder direkt am jeweiligen Standort durchgeführt bzw. je nach verfügbarer Messzeit bzw. Methodenkompetenz an andere Abteilungen, auch außerhalb des FB12, weitergeleitet. Kommt z.B. eine Anfrage aus dem Fachbereich Biologie an

die Serviceeinheit im Organisch-Chemischen Institut und ist für die Messung eine vorherige chromatographische Trennung notwendig wird die Anfrage an eine MS-Abteilung weitergeleitet, die auf die Technik der HPLC-MS/MS spezialisiert ist. Diese Vorgehensweise hat sich in den letzten Jahren sehr bewährt und lässt sich anhand von zahlreichen gemeinsamen Publikationen belegen.

Die Vergabe der Messzeit erfolgt bei externen Anfragen analog wie oben beschrieben durch die Leiter der MS-Abteilungen nach Verfügbarkeit der Messzeit.

Nutzungskosten

Die laufenden Kosten für den Betrieb der o.g. Geräte (Personal, Energiekosten, Gase etc.) sowie notwendige Reparaturkosten werden jeweils von den Instituten bzw. verantwortlichen Arbeitsgruppen übernommen. Eine Weitergabe/Umlage von Reparaturkosten und Abrechnung der Nutzungskosten erfolgt derzeit nicht bzw. nur in Ausnahmefällen, wenn z.B. größere Probenserien gemessen werden.

Sofern bei größeren Messreihen Nutzungskosten anfallen, erfolgt die Berechnung nach den Hinweisen zu Gerätenutzungskosten der DFG (Vordruck 55.04 – 12/20).

Für die Gerätenutzung können derzeit Kosten in Höhe von € 25 pro Stunde Nutzungszeit veranschlagt werden. Diese Kosten beinhalten die reine Gerätenutzung. Kosten für spezifische Verbrauchsmaterialien wie HPLC-Säulen oder eine zeitaufwändige Probenvorbereitung werden ggfs. separat berechnet.

Für weiteren wissenschaftlichen Support (z.B. Auswertung von Metabolomics-Daten) können zusätzlich pauschal € 25-50/Stunde angesetzt werden. Dies gilt einheitlich sowohl für eine interne als auch eine externe Nutzung der Geräte.

Die hier genannten Nutzungskosten gelten nur für öffentliche wissenschaftliche Forschungseinrichtungen und Institutionen. Bei Industrieprojekten erfolgt die Kostenkalkulation im Rahmen einer Vollkostenkalkulation nach den Vorgaben der WWU.

Wartung, Reparatur und Ersatzbeschaffung

Neben dem wissenschaftlichen Austausch der MS-Abteilungsleiter arbeiten diese auch intensiv bei der Wartung und Reparatur der MS-Geräte zusammen, so dass kostenintensive Einsätze von Servicetechnikern reduziert und Kosten gespart werden können. In diesem Zusammenhang wurden in der Vergangenheit auch spezielle Auswertesoftware sowie Verbrauchsmaterialien gemeinsam beschafft. Für eine optimale Auslastung sowie zur Fehlerdiagnostik werden einzelne Komponenten von Massenspektometern innerhalb des FB 12 ausgeliehen bzw. gegenseitig zur Verfügung gestellt (Ionenquellen, Steuerboards, etc.).

Ersatzbeschaffungen von MS-Geräten erfolgen in der Regel über einen Großgeräteantrag nach Art. 91b Grundgesetz über das Land NRW und die DFG. Eine Gerätebeschaffung ist auch im DFG-Normalverfahren bzw. auch durch andere Drittmittelgeber und Industriepartner möglich. Weiterhin stehen bei neuen Gebäuden auch Erstausstattungsmittel zur Verfügung. Geräte können auch über das Geräteinvestitionsprogramm (GIP, maximal 50 k€, 2/3 Eigenanteil) des Fachbereiches, über spezielle Programme zum Einsatz in der Lehre sowie auch über Institutsmittel beschafft werden.

Datenverarbeitung, -weitergabe und Archivierung

Die Rohdaten von massenspektrometrischen Messungen werden in der Regel zunächst dezentral von der jeweiligen Serviceeinheit bzw. vom jeweiligen Institut gespeichert und dann auf zwei Standorte in der IVV4 gespiegelt. Von diesen Daten wird täglich ein Snapshot über den Volume Shadow Copy Service erstellt, um bei Bedarf auf verschiedene Versionsstände zurückgreifen zu können. Die auf den IVV4-Systemen gespeicherten Daten werden zusätzlich täglich auf die TSM-Systeme der WWU-IT gesichert, dort werden sieben Versionen von aktiven Daten gespeichert, gelöschte Daten werden für 100 Tage gespeichert. Eine längerfristig zu erwartende Zunahme des Datenvolumens ist über die WWU-IT abgedeckt. Mit der **WWU Cloud** steht den Massenspektrometrie-Arbeitsgruppen der IVV4 ein Speichersystem zur Verfügung, dass auch die Speicherung von hunderten von TB pro Jahr ermöglicht (mehr Informationen dazu unter: <https://confluence.uni-muenster.de/display/osc>).

Die Rohdaten werden dem Nutzer auf Anfrage zur weiteren Auswertung zur Verfügung gestellt. Eine Weitergabe der Daten an Dritte ist ausgeschlossen bzw. nur mit Zustimmung des Nutzers möglich. Hier sind im Rahmen des Forschungsdatenmanagement der WWU Initiativen auf Basis der Empfehlungen von NFDI und FDM.nrw zur Umsetzung der FAIR-Prinzipien in Vorbereitung (mehr Informationen dazu unter: <https://www.uni-muenster.de/Forschungsdaten/>).

Auf den o.g. IT-Systemen erfolgt in der Regel keine Archivierung der Daten (Aufbewahrung für 10 Jahre entsprechend der DFG-Richtlinien). Die einzelnen Serviceeinheiten und Institute sind für eine Archivierung selbst verantwortlich. Für eine Archivierung von Nutzerdaten wird der Service **datasafe** der WWU empfohlen. Mit Hilfe von datasafe können Wissenschaftler*innen ihre Forschungsdaten mit beschreibenden Metadaten anreichern und den resultierenden Datensatz für zehn Jahre auf Servern der WWU Münster kostenfrei archivieren (Zugang und Info: das <https://www.uni-muenster.de/Forschungsdaten/angebote/datasafe/>). Für die dauerhafte Archivierung auch sehr großer Datenmengen wird von der WWU-IT ein einfacherer Zugriff von WWU-Systemen zu existierenden Speicherdiensten wie Zenodo (<https://zenodo.org/>) und die geplanten Repositorien der NFDI-Konsortien (NFDI4Chem etc.) angestrebt, z.B. im Rahmen von sciebo.RDS (mehr Informationen dazu auf <https://www.research-data-services.org/>).

B Massenspektrometrische Routine- und Servicemessungen

B.1 Institut für Anorganische und Analytische Chemie

An den Massenspektrometern im **Institut für Anorganische und Analytische Chemie** werden Servicemessungen durchgeführt. Schwerpunkt der Messungen ist die routinemäßige **Charakterisierung von Metallkomplexen und deren Liganden**. Insgesamt ist der Gerätepark schon etwas älter, so dass bei den Herstellern keine Ersatzteile mehr verfügbar sind. Daher ist für das Jahr 2022 die Neubeschaffung eines Massenspektrometers geplant mit dem insbesondere auch die Bestimmung akkurate Massen zur Bestätigung von Identität und Elementarzusammensetzung möglich ist.

Tabelle 3: MS-Geräte in der Serviceeinheit im Institut für Anorganische und Analytische Chemie.

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung	Besonderheiten	Anschaffung
GC-MS, GCQplus (Thermo Quest Finnigan)	EI/CI	GC	Ion Trap	2007 (Bj. 1998)
MAT95 (Finnigan)	EI/CI		für luftempfindliche Proben	2007 (Bj. 1995)
MALDI-TOF Reflex III (Bruker Daltonik GmbH)	MALDI			2001

Verantwortlicher Leiter: Dr. Marian Hebenbrock

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Jens Müller

B.2 Organisch-Chemisches Institut

Die zentrale Serviceeinheit am **Organisch-Chemischen Institut** stellt für die OC sowie für Nachbarinstitute einen Querschnitt an Routinemethoden - im Wesentlichen für die Analyse von organisch chemischen Syntheseprodukten - zur Verfügung. Trennmethoden werden hier seltener (außer bei GC-MS) eingesetzt. Ein Schwerpunkt liegt auf der Bestimmung von akkurate Massen zur Bestätigung von Identität und Elementarzusammensetzung, wobei dies mit ESI (Orbitrap LTQ XL) im Hochdurchsatz ohne Trennung erfolgt.

Tabelle 4: MS-Geräte in der Serviceeinheit im Organisch-Chemischen Institut.

Typ (Hersteller)	Ioni-sierung	Einlass	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber
Orbitrap VelosPro (Thermo Fisher Scientific)	ESI, APCI	nanoSpray oder „In flow“, HPLC möglich	hohe Massenauflösung, hohe Massenpräzision	2020 (Bj. 2009)
Exactive GC (Thermo Fisher Scientific)	EI	GC	GC-MS und Schubstange	2018 DFG, Art. 91b
ISQ 7000 (Thermo Fisher Scientific)	EI	GC	Single Quadrupol-GC-MS	2018 WWU Münster
Autoflexspeed (Bruker Daltonik GmbH)	MALDI- TOF	Probenplatte	schneller Laser, hohe Auflösung, Imaging möglich	2011 DFG, Art. 91b
Orbitrap LTQ XL (Thermo Fisher Scientific)	ESI	„In flow“	hohe Massenauflösung, hohe Massenpräzision	2008 DFG, Art. 91b
TSQ-Classic (Thermo Fisher Scientific)	EI	Direkt	Triplequad Direkteinlass Schubstange, Verdampfungsprofil	2008 (Bj. 1999)
HP1200/6110 (Agilent Technologies)	HPLC-ESI	HPLC	HPLC Kopplung, niederaufgelöst	2007 Arbeitsgruppen- gerät
Micromass, Quattro micro (Waters Corporation)	EI	GC	GC-MS, Probenwechsler Tripple-Quadrupol	2004 WWU Münster

Verantwortlicher Leiter: Dr. Matthias Letzel

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Armido Studer

C. Massenspektrometrische Forschungsschwerpunkte

C.1 Institut für Anorganische und Analytische Chemie (IAAC)

C.1.1 Arbeitskreis Prof. Hayen

Das Tätigkeitsfeld der **Arbeitsgruppe von Prof. Hayen** umfasst sowohl grundlagen- als auch anwendungsorientierte Forschungsarbeiten in der Bioanalytik mittels **massenspektrometrischer Kopplungstechniken** und der **hochauflösenden Massenspektrometrie (HR-MS)**. Die Schwerpunkte liegen im Bereich der instrumentellen Methodenentwicklung zur Identifizierung und Quantifizierung von **Metaboliten** (z.B. Lipide, Redox-Cofaktoren, Biotenside) unter Einsatz hochauflösender ein- und mehrdimensionaler Trenntechniken auf Basis der Hochleistungsflüssigchromatographie (HPLC), der Überkritischen Fluidchromatographie (SFC), der Kapillar-Ionenchromatographie (Cap-IC) und der Gaschromatographie (GC).

Folgende Forschungsschwerpunkte werden mittels **Massenspektrometrie** bearbeitet: (1) Identifizierung und Charakterisierung von Lipiden und Biotensiden, (2) Quantifizierung mittels HPLC-MS/MS im Spurenbereich mittels Stabilisotopenverdünnungsanalyse, sowie (3) differenzielles Profiling von Lipiden und Metaboliten mittels HR-MS und MS/MS nach chromatographischer Trennung (reversed phase HPLC, HILIC, SFC, Cap-IC).

Im Fokus stehen Proben biologischer Herkunft (Zellkulturüberstände, Zellextrakte, Urin, Plasma, Lebensmittel), wobei die Analyten teilweise mittels online-Festphasenextraktion (online-SPE) aufgereinigt und konzentriert werden.

Tabelle 5: Tabelle 3: MS-Geräte im Institut für Anorganische und Analytische Chemie (AG Hayen).

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung*	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber
GC-MS-System QP 2020 NX (Shimadzu)	EI/CI	GC	Split/Splitless-Injektion, Kaltaufgabesystem	2019 WWU
Quadrupol-Orbitrap-System Q Exactive plus (Thermo Fisher Scientific)	ESI/APCI, statisches Nanospray	HPLC, SFC, Cap-IC	erhöhte Auflösung von 280.000, < 3 ppm rel. Massenabweichung	2017 DFG, Art. 91b
Quadrupol-Ionenfallen-System LTQ XL (Thermo Fisher Scientific)	ESI/APCI, APPI (Eigenbau)	HPLC, SFC, Cap-IC	MS ⁿ für Strukturaufklärung	2014 (Bj. 2006)

Verantwortlicher Ansprechpartner: Prof. Dr. Heiko Hayen

Verantwortliche Hochschullehrer: Prof. Dr. Heiko Hayen

C.1.2 Arbeitskreis Prof. Karst

Die Massenspektrometer der Arbeitsgruppe **Prof. Karst** am **Institut für Anorganische und Analytische Chemie** werden vorwiegend für die forschungsorientierte Methodenentwicklung und -optimierung (Imaging, Speziation, technische Entwicklung und Elektrochemie-MS-Kopplung) eingesetzt.

Die Forschungsgebiete der organischen und der elementselektiven Massenspektrometrie (MS) gliedern sich in mehrere Unterbereiche. Am häufigsten werden die Systeme zur Beantwortung **(1)** biomedizinischer oder **(2)** umweltanalytischer Fragestellungen eingesetzt. **Technische Entwicklungen** im Bereich der Ionisierung der Analyten **(3)** und des Probeneintrags sind ein weiterer Schwerpunkt der Forschungsaktivitäten.

Neben der Quantifizierung bekannter Analyten ist auch eine sichere Identifizierung unbekannter Analyten aufgrund massenspektrometrischer Daten wesentlich. Hierbei kommen neben der Bestimmung der exakten Masse zur Herleitung einer Summenformel auch die mit einigen Instrumenten durchführbaren Fragmentierungsexperimente zum Einsatz. Vorwiegend in medizinischen Proben ist auch die Lokalisation der Analyte in Gewebestrukturen wichtig, sodass hier bildgebende MALDI- oder Laserablations-ICP-MS-basierte Kopplungstechniken genutzt werden. Wie auch nach chromatographischen Trennungen werden bei den bildgebenden Methoden die organische und die elementselektive Massenspektrometrie komplementär genutzt, um die **Speziationsanalytik** nicht nur in der Flüssigphase, sondern auch in der bildgebenden Analytik (**Imaging**) zu ermöglichen.

Die Probenmaterialien sind vielfältig. Bei den medizinisch-orientierten Fragestellungen werden beispielsweise Vollblut, Plasma/Serum, Urin **(1a)** oder auch Gewebe **(1b)** humanen oder tierischen Ursprungs untersucht. In verschiedenen Kooperationsprojekten werden auch *in vitro*-Proben **(1c)**, Zelllysate, Mikrosomen) analysiert. Eine sehr gut etablierte Methode ist die Simulation des Metabolismus mittels **Elektrochemie** gekoppelt mit der MS. Die in den vergangenen Jahren entwickelten Protokolle werden immer weiter optimiert und auf neue Fragestellungen ausgeweitet, um den Phase I- **(1d)** und den Phase II-Metabolismus **(1e)** im Modell zu verstehen. Das Spektrum der Analyten reicht in der Mehrzahl der Forschungsarbeiten von niedermolekularen Verbindungen bis hin zu Protein-Addukten im mittleren kDa-Bereich. Bei den untersuchten Umweltproben handelt es sich oftmals um Oberflächen- oder Trinkwasser **(2a)**, aber auch um eine im Labor simulierte Degradation von Xenobiotika unter UV-Licht oder durch Ozon-Eintrag **(2b)**. Die technische Grundlagenforschung erfolgt beispielsweise im Bereich der Ionisierung mittels Niedertemperaturplasmen wie bei der FAPA-**(3a)** oder der DBD-Quelle **(3b)**.

Tabelle 6: MS-Geräte im Institut für Anorganische und Analytische Chemie (AG Karst).

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber Preis
timTOF Pro (Bruker Daltonik GmbH)	ESI/APCI/ MALDI	HPLC	Ionenmobilität + hochauflösendes TOF	2017 DFG, Art. 91b
iCAP TQ Triple Quadrupole ICP-MS (Thermo Fisher Scientific)	ICP	LA / HPLC	Elementanalytik / Triple Quadrupol ICP	2017 WWU
iMScope TRIO (Shimadzu)	MALDI- (MS/MS)	-	Hochauflösendes MALDI- TOF	2016 DFG, Art. 91b
EVOQ Elite (Bruker Daltonik GmbH)	ESI/APCI	HPLC	TQ-MS	2015 WWU
ELEMENT 2/XR ICP-MS (Thermo Fisher Scientific)	ICP		Sektorfeld-ICP-MS	2011 DFG, Art. 91b
Exactive mit HCD (Thermo Fisher Scientific)	ESI/APCI	2D-HPLC	Hochauflösendes Orbitrap-MS	2011 DFG, Art. 91b
Esquire 6000 (Bruker Daltonik GmbH)	ESI	HPLC	Ionenfalle	2010 WWU
Quadrupol ICP-MS-Geräte diverse Hersteller	ICP	LA / HPLC	Elementanalytik	2009-2017 WWU/Industrie
μToF (Bruker Daltonik GmbH)	ESI/APCI	HPLC	ToF-MS	2007 – DFG Normalprogr.

Verantwortlicher Ansprechpartner: Dr. Torsten Vielhaber

Verantwortliche Hochschullehrer: Prof. Dr. Uwe Karst

C.2 Institut für Biochemie

Am Institut für Biochemie werden zwei **Forschungsschwerpunkte** mittels Massenspektrometrie bearbeitet. Im Arbeitskreis von Prof. Mootz (AKM) steht die Protein- und Peptidanalytik im Vordergrund der angewandten MS-Methoden. Dabei werden Massenbestimmung intakter Proteine ebenso durchgeführt wie solche von Crosslink-Peptiden und von komplexen Peptidgemischen aus Pulldown-Experimenten mit Säugerzelllysaten zwecks Teilproteomanalyse. Außerdem kommt das Single Quad-LC-MS-System zur Reaktionskontrolle und Produktcharakterisierung bei organisch-chemischen Synthesen von modifizierten Aminosäuren zum Einsatz. Sämtliche Methoden sind ESI-basiert und beruhen entweder auf direkter Injektion der Analytlösung oder auf der vorgelagerten chromatographischen Trennung, wobei als stationäre Phasen sowohl Umkehrphasen (C3, C4, C8 und C18) als auch HILIC-, SEC- und Ionentauscher-Phasen eingesetzt werden.

Im Arbeitskreis von Prof.-in Rentmeister (AKR) dienen ESI-LC-MS-Messungen der sicheren Identifizierung und Quantifizierung von RNA und modifizierten Nukleosiden und der Synthesekontrolle mittels Umkehrphasen (C18) und MRM.

Proben und Analyten

- Gereinigte rekombinante Proteine, Proteingemische, chemisch modifizierte Proteine
- Peptidmischungen aus tryptischen Verdauen von Zelllysaten, gereinigten Proteinen, Proteingemischen und quervernetzten Proteinen
- RNA und modifizierte Nukleoside
- Reaktionsgemische und Produkte organisch-chemischer Synthesen

Tabelle 7: MS-Geräte im Institut für Biochemie.

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber
Ultivo Triple Quadrupole LC/MS (Agilent Technologies)	ESI	UHPLC	Q3	2018 DFG / CIM (AKR)
maXis II qToF (Bruker Daltonik GmbH) an UltiMate® 3000 RSLCnano LC system bzw. an Ultimate® 3000 RS (Thermo Fisher Scientific)	ESI	UHPLC / nano-LC	Hochauflösendes qToF MS und MSMS	2015 DFG, Art. 91b (AKM)
Infinity 1260 HPLC mit 6130B Single Quad MSD (Agilent Technologies)	ESI	HPLC		2015 GIP FB12 (AKM)

Verantwortlicher Ansprechpartner: Dr. Wolfgang Dörner (AKM), N.N. (AKR)

Verantwortliche Hochschullehrer: Prof. Dr. Henning Mootz, Prof.-in Dr. Andrea Rentmeister

C.3 Institut für Lebensmittelchemie

Am **Institut für Lebensmittelchemie** werden im Bereich Lebensmittelinhaltstoffe sowie Lebensmittel- und Umweltkontaminanten folgende **Schwerpunkte mittels Massenspektrometrie** bearbeitet: (1) Identifizierung und Quantifizierung von Umweltkontaminanten sowie bioaktiven Lebensmittelinhaltstoffen in Lebensmitteln, (2) (Hochdurchsatz-)Analytik zur Bestimmung von Metaboliten von Lebensmittelinhaltstoffen und Kontaminanten in physiologischen Proben. (3) Identifizierung und Quantifizierung von Naturstoffen und Sekundärmetaboliten aus Pilzen und Mikroorganismen sowie (4) Metabolomics, Lipidomics und Proteomics-basierte Untersuchungen sowohl flüchtiger als auch nichtflüchtiger Verbindungen.

Neben Lebensmitteln werden insbesondere die Probenmatrices physiologische Proben (Blut, Plasma, Serum, Dried Blood Spots, Urin), *in vitro* Proben (Zelllysate, Mikrosomen, Schweine-Caecum-Modell) sowie Naturstoffextrakte analysiert.

Tabelle 8: MS-Geräte im Institut für Lebensmittelchemie.

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber
Impact II Q-TOF (Bruker Daltonik GmbH)	ESI GC-APCI	UHPLC/GC	Hochauflösendes QToF-System GC-APCI-Kopplung	2018 DFG, Art. 91b
HPLC-MS/MS-System QTrap 5500 (AB Sciex)	ESI/APCI	UHPLC	Q3 als Ionenfalle (u.a. MS ³) Ionenmobilität (DMS) Autosamper für 96-Well	2016 (Bj. 2012) GIP FB12
HPLC-MS/MS-System QTrap 6500 (AB Sciex)	ESI/APCI	UHPLC	Hohe Empfindlichkeit Q3 als Ionenfalle (u.a. MS ³) Ionenmobilität (DMS) Autosamper für 96-Well	2014 DFG, Art. 91b
GC-MS-System 5975C (Agilent Technologies)	EI/CI	GC,	Kaltaufgabesystem Headspace/SPME Sampler	2009 Institut
HPLC-LTQ Orbitrap XL (Thermo Fisher Scientific)	ESI/APCI	UHPLC mit DAD und FLD	Hochauflösendes System MS ⁿ mit hoher Auflösung Autosamper für 96-Well	2008 DFG, Art. 91b
HPLC-MS/MS API 3200 (Applied Biosystems)	ESI/APCI	HPLC		2007 Industrie
HPLC-MS/MS API 3200 QTrap (Applied Biosystems)	ESI/APCI	HPLC	Q3 als Ionenfalle (u.a. MS ³)	2015 Industrie (Bj. 2007)

Verantwortlicher Ansprechpartner: Dr. Benedikt Cramer

Verantwortliche Hochschullehrer: Prof.-in Melanie Esselen, Prof. Dr. Hans-Ulrich Humpf

C.4 Institut für Pharmazeutische Biologie und Phytochemie (IPBP)

Am **Institut für Pharmazeutische Biologie und Phytochemie (IPBP)** werden im Bereich pflanzlicher Naturstoffe folgende **Schwerpunkte mittels Massenspektrometrie** bearbeitet: (1) Messung metabolischer Profile von Materialien pflanzlichen Ursprungs durch UHPLC-MS/MS und GC-HRMS, (2) Identifizierung/Charakterisierung von unbekannten Verbindungen mittels UHPLC-HRMS und GC-HRMS (3) Metabolomics-basierte Untersuchungen mittels UHPLC-HRMS.

Tabelle 9: MS-Geräte im Institut für Pharmazeutische Biologie und Phytochemie (IPBP).

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber
GCMS-System 7250 GC/Q-TOF (Agilent Technologies)	EI	GC	Headspace Sampler, Multimode Inlet mit Optionen Pulsed Injection und Solvent Vent	2019 DFG, Art. 91b
micrQTOF-QII* (Bruker Daltonik GmbH)	ESI/APCI DirectProbe	(U)HPLC	Hochauflösendes QToF-System Direkteinlass möglich	2010 DFG, Art. 91b

*Die Anlage wird zur Hälfte durch das IPBP und zur Hälfte durch das IPMC (s. unten) genutzt und unterhalten.

Verantwortlicher Ansprechpartner: Dr. Jandirk Sendker

Verantwortliche Hochschullehrer: Prof. Dr. Andreas Hensel, Prof. Dr. Thomas Schmidt

C.5 Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie (IPMC)

Die massenspektrometrischen Untersuchungen werden am Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie (IPMC) für die Bearbeitung folgender Fragestellungen eingesetzt: (1) Quantifizierung kleiner Moleküle mittels HPLC-MS/MS, (2) Metabolomics-/Lipidomics-basierte Untersuchungen mittels HPLC-HRMS und HPLC-QTrap-MS/MS, (3) Identifizierung/Charakterisierung von unbekannten Verbindungen mittels HPLC-HRMS und HPLC-QTrap-MS/MS, (4) Summenformelbestätigung mittels HRMS-Direkteinlassmessungen

Das Probenmaterial der einzelnen Forschungsbereiche ist vielfältig. Neben Proben aus in vivo-Untersuchungen (Blut, Plasma, Serum, Dried Blood Spots, Urin) werden auch Proben aus in vitro-Untersuchungen der präklinischen Pharmakokinetik (Metabolisierung (S9-Fraktion/CYP-Mikrosomen), LogD-Wert, CACO-2 Modell, Dialyse, Proteinbindung, Permeabilität, Löslichkeit, etc.) analysiert. Einen weiteren Schwerpunkt bilden Proben aus Enzym-Assay-Untersuchungen bzw. Rezeptorbindungsstudien. Aus dem Bereich der Synthesechemie von potentiellen Wirkstoffen bilden Reaktionskontrollen von Synthesen und Analyse von Synthese-Reinsubstanzen zur

Summenformelbestätigung weiteres Untersuchungsmaterial. Darüber hinaus werden auch Fragestellungen von Proben aus Fertigarzneimitteln oder Rohstoffen bearbeitet.

Tabelle 10: MS-Geräte im Institut für Pharmazeutische und Medizinische Chemie (IPMC).

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber Preis
HPLC-MS/MS-System QTrap 6500 (AB Sciex)	ESI/APCI	UHPLC	Hohe Empfindlichkeit Q3 als Ionenfalle (u.a. MS^3) LC-Anlage mit automatisierter Probenvorbereitung	2017 DFG, Art. 91b
LC-2020 Single-Quadrupol (Shimadzu)	ESI/APCI	(U)HPLC	LC-Anlage mit automatisierter Probenvorbereitung	2014 Erstausstattung Land NRW
G 6120B Single-Quadrupol (Agilent Technologies)	ESI/APCI	HPLC		2013 Erstausstattung Land NRW
ISQ Single Quadrupol (Thermo Fisher Scientific)	EI/CI	GC	Direkteinlassmessungen möglich	2013 Institutsmittel
MicrQTOF-QII* (Bruker Daltonik GmbH)	ESI/APCI DirectProbe	(U)HPLC	Hochauflösendes QToF-System Direkteinlass möglich	2010 DFG, Art. 91b

*Die Anlage wird zur Hälfte durch das IPMC und zur Hälfte durch das IPBP (s. oben) genutzt und unterhalten.

Verantwortlicher Ansprechpartner: Dr. Jörg Fabian

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Bernhard Wünsch

C.6 Münster Electrochemical Energy Technology Battery Research Center (MEET)

Die massenspektrometrischen Untersuchungen am **MEET** sind überwiegend **forschungsorientiert** und im Bereich der Materialcharakterisierung (Lithium-Ionen-Batterien und Nachfolger) angesiedelt. Folgende **Schwerpunkte werden mittels Massenspektrometrie** bearbeitet: **(1)** Quantifizierung mittels GC-MS und LC/GC-ICP-MS im Spurenbereich, **(2)** Identifizierung/Charakterisierung von unbekannten Verbindungen mittels IC-MS, CE-MS, LC-MS/MS und GC-MS/MS und **(3)** Metallspezies mittels CE-ICP-MS. **(4)** Weiter werden qualitative und quantitative Oberflächen-, Imaging- und Bulkuntersuchungen mittels LA-ICP-MS, GD-MS, ToF-SIMS und ICP-MS durchgeführt. **(5)** Zusätzlich werden auch Routinemethoden zur Ein- und Ausgangskontrolle für die vorhandenen Materialien eingesetzt (MEET, HIMS).

Tabelle 11: MS-Geräte im MEET.

Typ (Hersteller)	Ionisierung	Kopplung	Besonderheiten	Anschaffung Mittelgeber
TOF.SIMS 5 – 100 (IONTOF)			Glovebox, Transferbox, FIB Option, verschiedene Ionenquellen	2017 BMBF
ICP-MS 7900 (Agilent Technologies)		LA, HPLC, CE, 2D-IC		2017 BMBF
LC-MS-IT-TOF (Shimadzu)	ESI, APCI	2D-HPLC, 2D-IC	Ionenfalle MS ⁿ	2017 BMBF
GCMS-QP2010 Ultra (Shimadzu)	EI		Direkteinlass (Gase)	2017 BMBF
Q Exactive™ GC Orbitrap™ GC-MS/MS (Thermo Fisher Scientific)	EI		Headspace	2016 BMBF
ElementXR (Thermo Fisher Scientific)		HPLC, GC	Hochauflösendes ICP- MS mit drei wählbaren Auflösungen	2016 BMBF
ElementGD (Thermo Fisher Scientific)			Hochauflösendes GD- MS mit drei wählbaren Auflösungen und Pulsfunktion	2016 BMBF
QTOF 6530 (Agilent Technologies)	ESI, APCI	CE, GC (APCI)		2015 Drittmittel
GCMS-QP2010 Ultra (Shimadzu)	EI, NCI, PCI		Headspace, SPME, FID, AOC5000+	2014 BMBF
LC-MS 2020 (Shimadzu)	ESI	HPLC, IC		2014 Drittmittel
2D-Pyrolyse-QP2010 Ultra GC-MS (Shimadzu)	EI		Pyrolyse Einheit EGA/PY-3030D/	2012 BMBF
ICP-MS 7700x (Agilent Technologies)		LA; GC		2011 BMBF
QTRAP3200 (AB Sciex)	ESI, APCI, APPI	HPLC, 2D-IC		2011 BMBF
Clarus 600 GC-MS (Perkin Elmer)	EI, NCI, PCI		FID, (Headspace)	2009 MKW NRW

Verantwortlicher Ansprechpartner: Dr. Sascha Nowak

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr. Martin Winter

Unterschriften:

Prof. Dr. J. Müller

Prof. Dr. Studer

Prof. Dr. Hayen

Prof. Dr. Karst

Prof. Dr. Mootz

Prof.-in Dr. Rentmeister

Prof.-in Dr. Esselen

Prof. Dr. Humpf

Prof. Dr. Hensel

Prof. Dr. Schmidt

Prof. Dr. Wünsch

Prof. Dr. Winter

Verabschiedet vom Fachbereichsrat am 15.04.2021

Prof. Dr. Joachim Jose (Dekan)