

Einsatz von SIFT-Massenspektrometrie zur selektiven Echtzeit-Online-Kontrolle dynamischer Prüfgasatmosphären und Messung kanistergesammelter Luftproben

C. Kaus, B. Thomas, D. Breuer

KURZFASSUNG Zur Quantifizierung von Prüfgaszusammensetzungen an der dynamischen Prüfgasstrecke kommen unterschiedliche Techniken zum Einsatz. Neben konventioneller Online-Gaschromatographie (GC) wird die Selected-Ion-Flow-Tube-Massenspektrometrie (SIFT-MS) zur selektiven Quantifizierung in Echtzeit eingesetzt. Es wurden Methoden für verschiedene Substanzklassen und Konzentrationsbereiche entwickelt. Beide Techniken wurden bereits erfolgreich bei Eignungsprüfungen eingesetzt. Die Ergebnisse zeigen, dass die Technik der SIFT-MS auch im Vergleich zu etablierteren Methoden zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Der wesentliche Vorteil dieser Technik ist die Analyse in Echtzeit, wodurch auch kurzfristige Änderungen in der Prüfgaszusammensetzung erkannt werden und somit die Qualitätssicherung weiter verbessert wird. Durch diesen Vorteil konnte ein neu konzipiertes Dosiersystem zur Prüfgaserzeugung von Substanzen mit hohem Dampfdruck mit SIFT-MS am Beispiel kurzkettiger Aldehyde verifiziert werden. Zudem bietet die SIFT-MS das Potenzial der direkten Analytik von reaktiven, kurzkettigen Very Volatile Organic Compounds (VVOC) aus Probenahmekanistern und kann damit auch für die Messung von Gefahrstoffen, z. B. Ethylenoxid an Arbeitsplätzen, genutzt werden.

1 Einleitung

Das Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (IFA) untersucht die Luft an Arbeitsplätzen auf flüchtige und partikuläre Gefahrstoffe. Die dabei eingesetzten Messverfahren werden am Institut selbst entwickelt und ihre Eignung wird durch umfassende Versuchsreihen nachgewiesen und validiert. Für flüchtige Stoffe sind dabei bevorzugt dynamische Prüfgase einzusetzen [1]. Das IFA betreibt eine dynamische Prüfgasstrecke (PGS, **Bild 1**) und nutzt die dort generierten Prüfgase sowohl für die Entwicklung von Messverfahren als auch für Qualitätssicherungsmaßnahmen wie Ringversuche.

Für die kontinuierliche Überwachung der dynamischen Prüfgase sind Analysenverfahren einzusetzen, die möglichst in Echtzeit eine zuverlässige Aussage zur quantitativen Zusammensetzung liefern können. Hierfür setzt das IFA unter anderem die Technik der Selected-Ion-Flow-Tube-Massenspektrometrie (SIFT-MS) ein. Sie wird bereits in verschiedensten Bereichen angewendet, beispielsweise als Alarmdetektor bei der Echtzeit-

Application of SIFT-MS for selective real-time online monitoring of dynamic test gas atmospheres and measurement of canister-collected whole air samples

ABSTRACT Different techniques are used to quantify test gas compositions at the dynamic test gas facility. In addition to conventional online gas chromatography (GC), selected ion flow tube mass spectrometry (SIFT-MS) is used for selective quantification in real time. Methods have been developed for different substance classes and concentration ranges. Both techniques have been successfully used in proficiency testing schemes. The results show that the SIFT-MS technique provides satisfactory results even when compared to more established methods. The main advantage of this technique is the analysis in real time whereby even short-term changes in the test gas composition can be detected and thus the quality assurance could be further improved. Due to this advantage a newly designed dosing system for test gas generation of substances with high vapor pressure could be verified with SIFT-MS using short-chain aldehydes as an example. In addition SIFT-MS offers the potential of direct analysis of reactive, short-chain Very Volatile Organic Compounds (VVOC) from sampling canisters and can also be used for the measurement of hazardous substances such as ethylene oxide at workplaces.

überwachung von Volatile Organic Compounds (VOC, flüchtige organische Verbindungen) in Reinräumen der Halbleiterproduktion [2], zur Untersuchung der Atemluft auf krankheitsinduzierende Biomarker oder in der Containersicherheit [3 bis 5]. Über die Kontrolle der Prüfgase hinaus findet das System Anwendung bei der Verifizierung neuer Systeme zur Prüfgaserzeugung und bei der Analyse von Probenahmekanistern, in denen Luftproben an Arbeitsplätzen in Edelstahlbehältern gesammelt werden.

2 SIFT-MS: Funktionsweise und Aufbau

Die SIFT-MS stellt eine Form der direkt anzeigenden Massenspektrometrie dar. Mit ihr ist unter anderem die Echtzeitanalyse von Spurengasen in Luft möglich [6 bis 8]. Zur Identifizierung und Quantifizierung werden spezifische Reaktionen der SIFT-MS zwischen den Analyten und Reagenz-Ionen genutzt [7, 9]. Allgemein lässt sich das SIFT-MS-Messprinzip dabei in drei Prozesse einteilen: Reagenz-Ionen-Erzeugung und Selektion, Analyt-Ioni-

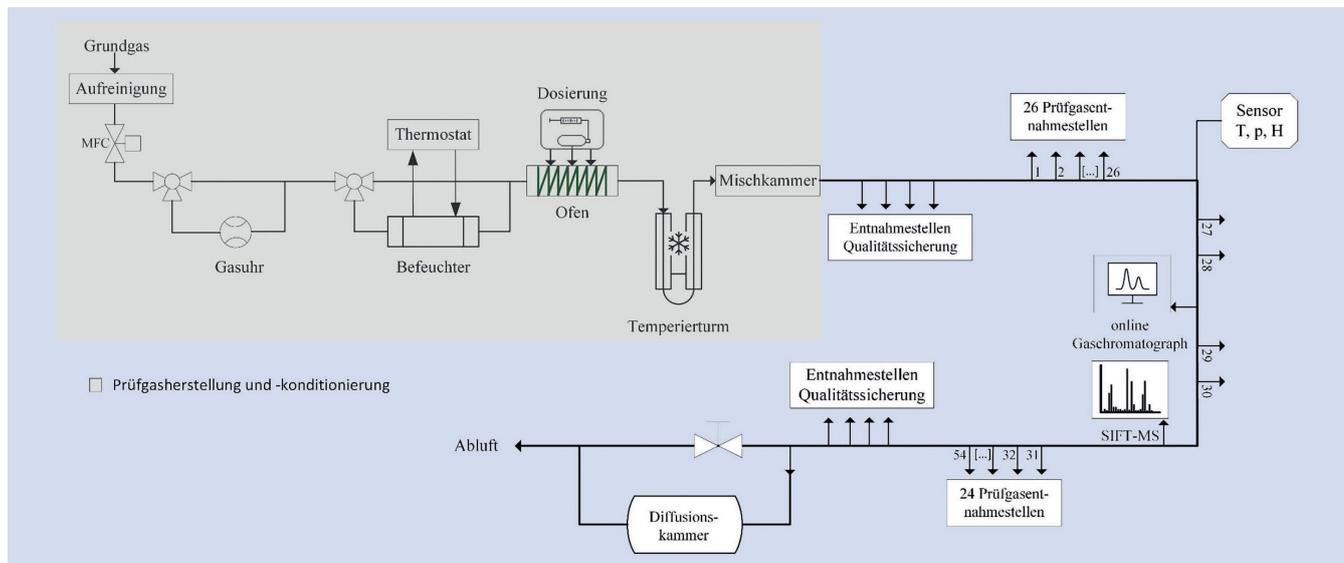


Bild 1 Dynamische Prüfgasstrecke im IFA. Grafik: IFA



Bild 2 Erzeugtes Mikrowellenplasma in einer SIFT-MS-Ionenquelle. Foto: Autoren

sierung sowie Analyt-Quantifizierung [2]. Im IFA kommt dabei das System Voice200ultra der Fa. Syft Technologies zum Einsatz.

Bei der Reagenz-Ionen-Erzeugung generiert ein Mikrowellenresonator durch Plasmaentladung aus gereinigter, angefeuchteter Luft (**Bild 2**) verschiedene Reagenz-Ionen unterschiedlicher Polarität (H_3O^+ , NO^+ , O_2^+ , O^- , O_2^- , OH^- , NO_2^- und NO_3^-) [7, 10, 11].

Der erste Quadrupol-Massenfilter (Downstream Quadrupol) selektiert diese anhand ihres definierten Masse-Ladungs-Verhältnisses und kann so – zeitlich alternierend – Reagenz-Ionen einer bestimmten Masse in die Flow Tube passieren lassen (**Bild 3**). Der Wechsel zwischen Reagenz-Ionen gleicher Polarität erfolgt dabei innerhalb weniger Millisekunden. Bei Änderung der Polarität erfolgt der Wechsel innerhalb weniger Sekunden. Die Reagenz-Ionen reagieren mit den meisten organischen Molekülen, nicht aber mit den Hauptbestandteilen der Luft [12].

Im zweiten Schritt, der Analyt-Ionisierung, dient die Flow Tube als Reaktionskammer. Hier finden kontrollierte Ionen-Molekül-Reaktionen statt. Die Einleitung der Reagenz-Ionen in die Flow Tube erfolgt mittels eines Stickstoff- oder Helium-Trägergasstroms [2]. Anschließend reagieren die Reagenz-Ionen mit den Molekülen der Probe. Die entstehenden Produkte sind aufgrund von substanzspezifischen Ionisierungsreaktionen vorhersagbar [10].

Diese Produkt-Ionen werden für die quantitative Analyse der Luftprobe benötigt. Für die selektive Bestimmung verschiedener Analyten ist es notwendig, dass die Produkt-Ionen der Analyten einzigartig sind.

Im dritten Schritt, der Analyt-Quantifizierung, werden die Produkt-Ionen und die nicht umgesetzten Reagenz-Ionen durch den zweiten Quadrupol-Massenfilter (Upstream-Quadrupol) erfasst und ein Partikelmultiplier-Detektor misst die Zählrate für selektierte Masse-zu-Ladungs-Verhältnisse (**Bild 3**). Die Quantifizierung der Substanzen in der Probe erfolgt durch den Einsatz einer Software, die unter anderem gerätespezifische Parameter, Methodenparameter sowie das Verhältnis aus den gebildeten Produkt-Ionen und nicht umgesetzten Reagenz-Ionen in die Kalkulation der Konzentration mit einbezieht [2].

3 Echtzeitanalyse an der PGS

Für die Erzeugung von Prüfgasen ist es erforderlich, dass die quantitative Zusammensetzung der Analytkonzentration, z. B. im Rahmen von Ringversuchen oder bei Methodenentwicklungen, kontrolliert ist; hierfür ist die Online-Analyse unerlässlich. Zu diesem Zweck werden im IFA zwei selektive Online-Analysetechniken eingesetzt: die Online-Gaschromatographie (GC) und SIFT-MS. Die SIFT-MS-Technik unterstützt unter anderem die Qualitätssicherung der an der PGS des IFA durchgeführten Ringversuche. Neben der Messung von VOC im $\mu\text{g}/\text{m}^3$ -Bereich werden sowohl Prüfgase flüchtiger Lösemittel im mg/m^3 -Bereich als auch Prüfgase kurzkettiger Aldehyde analysiert. Bei den Ringversuchen der VOC und Lösemittel kommt neben der SIFT-MS-Technik simultan die Online-GC zum Einsatz [13].

Gegenüber der Online-GC bietet SIFT-MS die Möglichkeit, Konzentrationsänderungen ohne Zeitverzug zu messen. Dies ist möglich, da für die Analyse keine vorhergehende Separation der Analyten nötig ist und selbst für niedrige Konzentrationen kein Aufkonzentrieren (vgl. Online-GC) erforderlich wird. So können das Equilibrierverhalten und die Langzeitstabilität des Prüfgases dynamisch überwacht werden. **Bild 4** zeigt die Equilibrierung eines VOC-Prüfgases. Die Homogenität und Stabilität des Prüfgases sind in diesem Beispiel nach ca. 1 500 Sekunden erreicht.

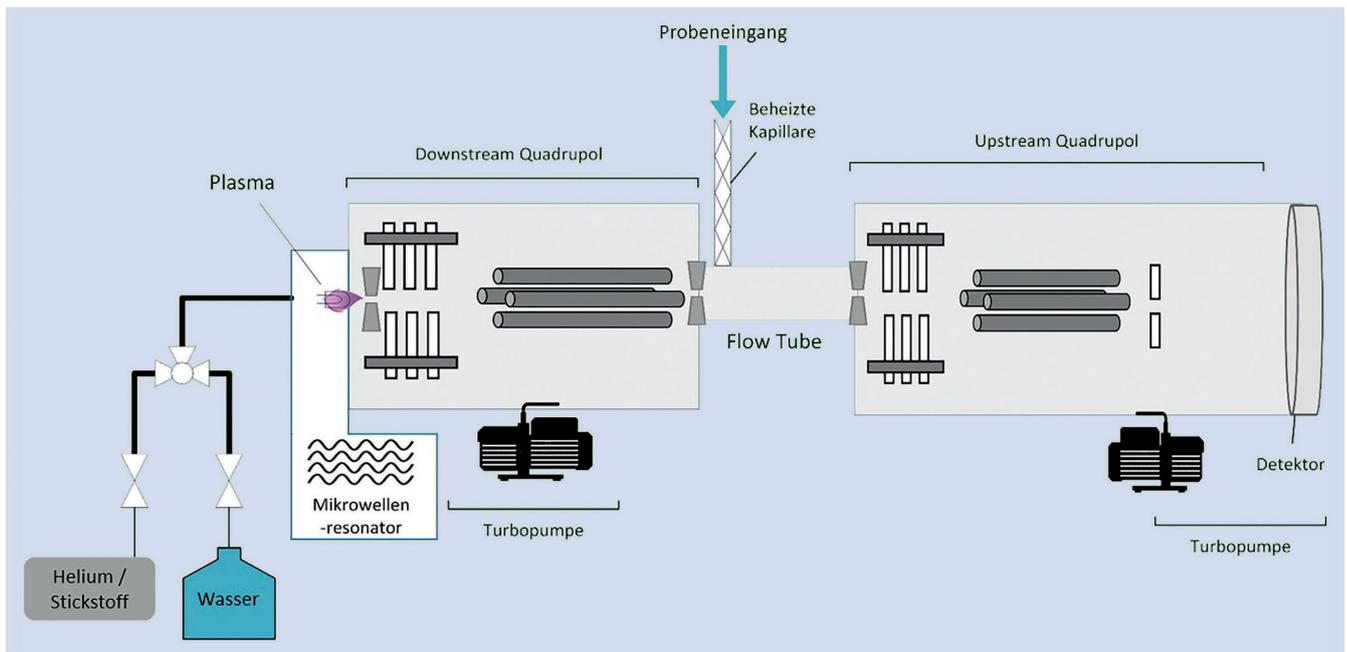


Bild 3 Schematischer Aufbau eines SIFT-MS-Systems mit Mikrowellenplasma-Ionisation. Grafik: adaptiert aus [2]

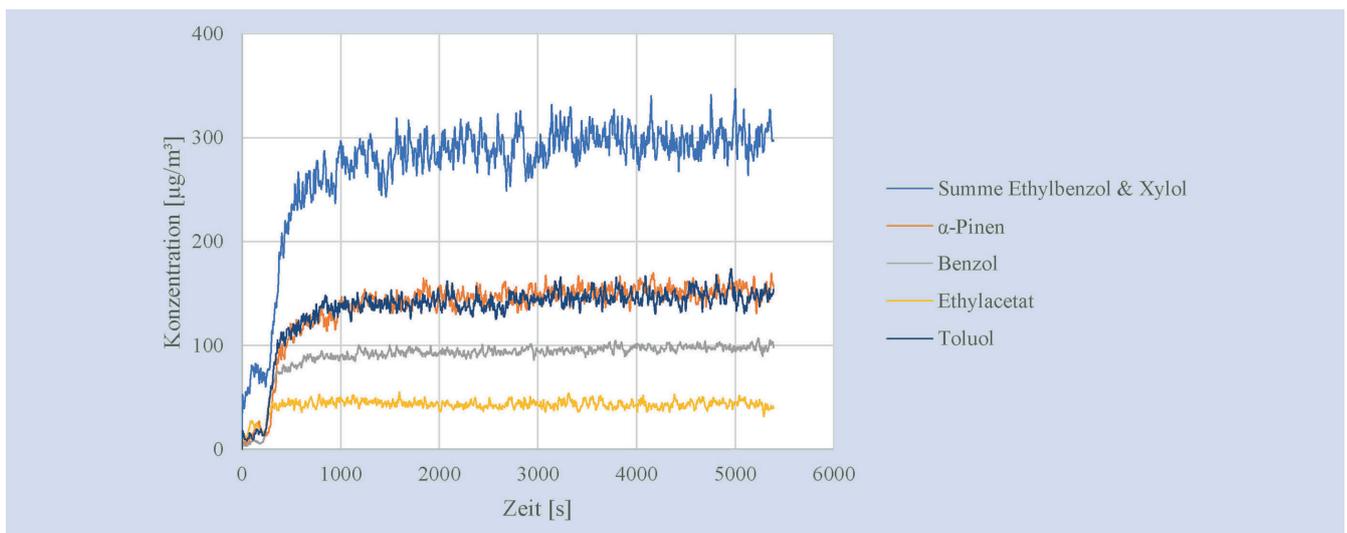


Bild 4 Equilibrierverhalten eines VOC-Prüfgases an der dynamischen Prüfgasstrecke. Grafik: Autoren

Fehler im Prozess der Prüfgasherstellung, wie Dosierfehler, z. B. Luftblasen in den Schläuchen des Spritzendosierers oder Siedeverzüge, die vor allem in der Einlaufphase auftreten können, werden sofort erkannt. Dies ist ein großer Vorteil gegenüber zeitverzögerten Messungen wie Online-GC und Offline-Messungen.

4 Online-Qualitätssicherung mittels SIFT-MS am Beispiel Ringversuch VOC

Für die Überwachung des Ringversuchs VOC an der Prüfgasstrecke des IFA werden die entsprechenden Gefahrstoffe im Bereich von 10 bis 200 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ vorab kalibriert. Die Kalibrierung erfolgt extern über entsprechend hergestellte Prüfgase. Die zur Quantifizierung ausgewählten Reagenz- und Produkt-Ionen sind in **Tabelle 1** dargestellt. 1,2,4-Trimethylbenzol und Cumol sowie Ethylbenzol und Xylol werden als Summenparameter bestimmt.

Diese sind mittels SIFT-MS nicht unterscheidbar, da die gebildeten und zur Quantifizierung herangezogenen Massen für die entsprechenden Reagenz-Ionen identisch sind. In einem solchen Fall ergänzt die GC die SIFT-MS-Technik.

Für die quantitative Bestimmung der Analyten werden die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten für die jeweilige Applikation kalibriert. Grundlage hierfür sind die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten aus der Bibliothek der SIFT-Software. Die Anpassung ist erforderlich, da diese unter abweichenden Bedingungen ermittelt wurden. Die durch die Kalibrierung angepassten Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten sind in **Bild 5** gezeigt.

In **Bild 6** sind die Wiederfindungsraten der einzelnen Stoffe und die jeweilige Messtechnik aufgetragen. Die ermittelten Ergebnisse der Qualitätssicherung des Ringversuchs können somit verglichen werden. Bei der Offline-Thermodesorption (TD)/GC-MS liegt die Wiederfindung bei allen Substanzen im ange-

Tabelle 1 Geschnittene Massen zur Quantifizierung der VOC im Prüfgas.

Analyt	Reagenz-Ion	Produkt-Ion mit Masse-zu-Ladungsverhältnis m/z
α-Pinen	NO ⁺	C ₁₀ H ₁₆ ⁺ [136]
	H ₃ O ⁺	C ₁₀ H ₁₇ ⁺ [137]
Benzol	NO ⁺	C ₆ H ₆ ⁺ [78]
	O ₂ ⁺	C ₆ H ₆ ⁺ [78]
	H ₃ O ⁺	C ₆ H ₆ H ⁺ [79]
Ethylacetat	NO ⁺	NO ⁺ -CH ₃ COOC ₂ H ₅ [118]
Okтан	O ₂ ⁺	C ₈ H ₁₈ ⁺ [114]
Summe 1,2,4-Trime-thylbenzol und Cumol	O ₂ ⁺	C ₈ H ₉ ⁺ [105]
	NO ⁺	C ₉ H ₁₂ ⁺ [120]
Summe Ethylbenzol und Xylol	O ₂ ⁺	C ₇ H ₇ ⁺ [91]
Toluol	NO ⁺	C ₇ H ₈ ⁺ [92]

streben Bereich von 90 bis 110 %. Die Analyse der Online-GC liegt einzig bei Ethylacetat mit 83 % Wiederfindung nicht im angestrebten Bereich. Abgesehen von der Einzelbestimmung von Toluol und der Summenbestimmung von Xylol und Ethylbenzol liegen die Wiederfindungen der SIFT-MS Analytik im angestrebten Bereich.

5 Einsatz der SIFT-MS Technik zur Verifizierung eines neu konzipierten Dosiersystems am Beispiel kurzkettiger Aldehyde

Da es sich bei der SIFT-MS um ein selektives direktanzeigendes Analysesystem handelt, ist es dazu geeignet, das Verhalten des erzeugten Prüfgases in Echtzeit zu erfassen und es wurde daher zur Verifizierung eines neu entwickelten Dosiersystems einge-

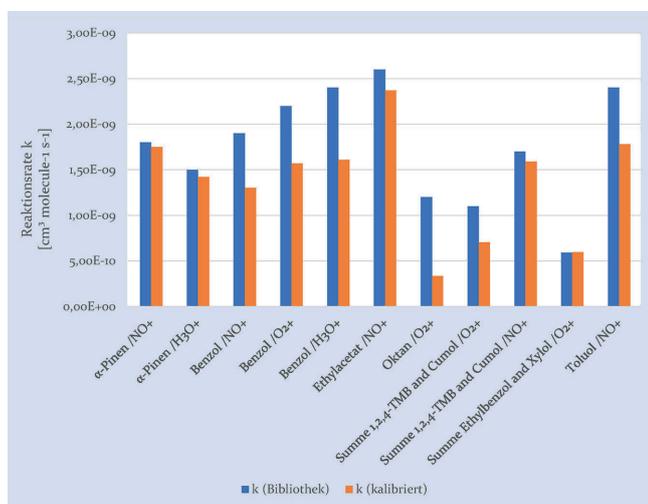


Bild 5 Anpassung der Reaktionsgeschwindigkeitskonstante an die Applikation durch Kalibrierung. Grafik: Autoren

setzt. Das Dosiersystem ist für Analyten mit hohen Dampfdrücken universell einsetzbar, wird jedoch in erster Linie zur Erzeugung von Aldehydprüfgasen aus Reinsubstanzen genutzt. Das System, bestehend aus mikrofluidischen Druckreglern (Fluigent Line UP™ Series) zur Realisierung kleiner, präziser Dosieraten, ist gekoppelt mit einem modifizierten GC-Injektor als Verdampfer. Dieser ermöglicht eine Variation der Dosiermengen über die Einstellung des Splitverhältnisses. Um ein Ausgasen der Analyten zu verhindern, befinden sich die flüssigkeitsführenden Teile in einer Temperierkammer. Eine schematische Zeichnung des Dosiersystems ist in **Bild 7** dargestellt.

Für Aldehydprüfgase in der PGS des IFA ist die Analyse mittels SIFT-MS die einzige spezifische Online-Kontrolle. Die HPLC-Analyse (HPLC: High Pressure Liquid Chromatography), die traditionell zur Qualitätssicherung im Ringversuch eingesetzt wird, ermöglicht diese Überwachungsfunktion nicht. Das Prüfgasgemisch beim Ringversuch enthält vier Aldehyde (Formaldehyd, Acetaldehyd, Propionaldehyd und Butyraldehyd), die gleichzeitig und selektiv quantifiziert werden. Formaldehyd wird dem Prüfgas mittels Permeation von Paraformaldehyd zugeführt. Für Acetaldehyd, Propionaldehyd und Butyraldehyd wird das beschriebene Dosiersystem eingesetzt. Da es sich bei dem Dosiersystem nicht um ein kommerzielles Produkt zur Prüfgaserzeugung handelt, mussten die erforderlichen Einstellungen für die Herstellung eines homogenen und langzeitstabilen Prüfgases experimentell ermittelt werden. **Bild 8** veranschaulicht, welchen Vorteil die Echtzeitanalyse dabei bietet.

Nachdem die entsprechenden Einstellungen ermittelt wurden, erfolgt die Kalibrierung und Validierung der SIFT-MS-Methode zur Qualitätssicherung für den Ringversuch.

Die Aldehyde können mit unterschiedlichen Produkt-Ionen selektiv mittels SIFT-MS bestimmt werden. Die zur Quantifizierung herangezogenen Reagenz- und Produkt-Ionen können **Tabelle 2** entnommen werden.

Zur Kalibrierung des SIFT-MS (Analysengeräts) werden Prüfgase im Bereich von 0,1 bis 4 mg/m³ erzeugt und gemessen. Dazu wurden pro Aldehyd konstant 2 µL/min dosiert und die Konzentrationsänderung für die Kalibrierreihe wurde durch Verändern des Splitverhältnisses erzielt. Die Überprüfung der Konzentration

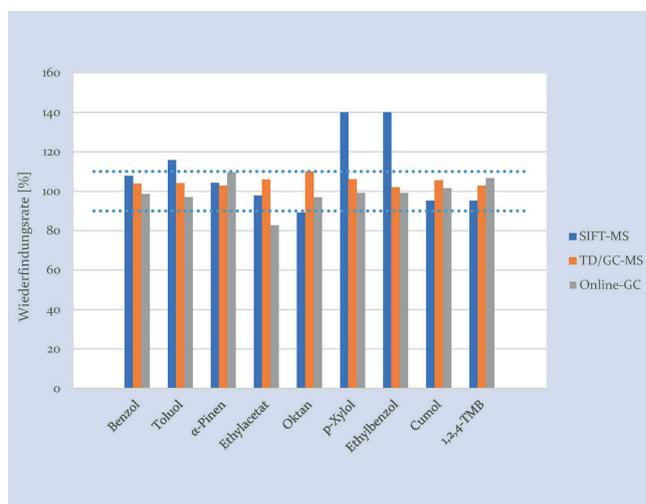


Bild 6 Ergebnisse der Qualitätssicherungs-Methoden im Vergleich: Die horizontalen Linien begrenzen den angestrebten Bereich von 90 bis 110 % Wiederfindung. Grafik: Autoren

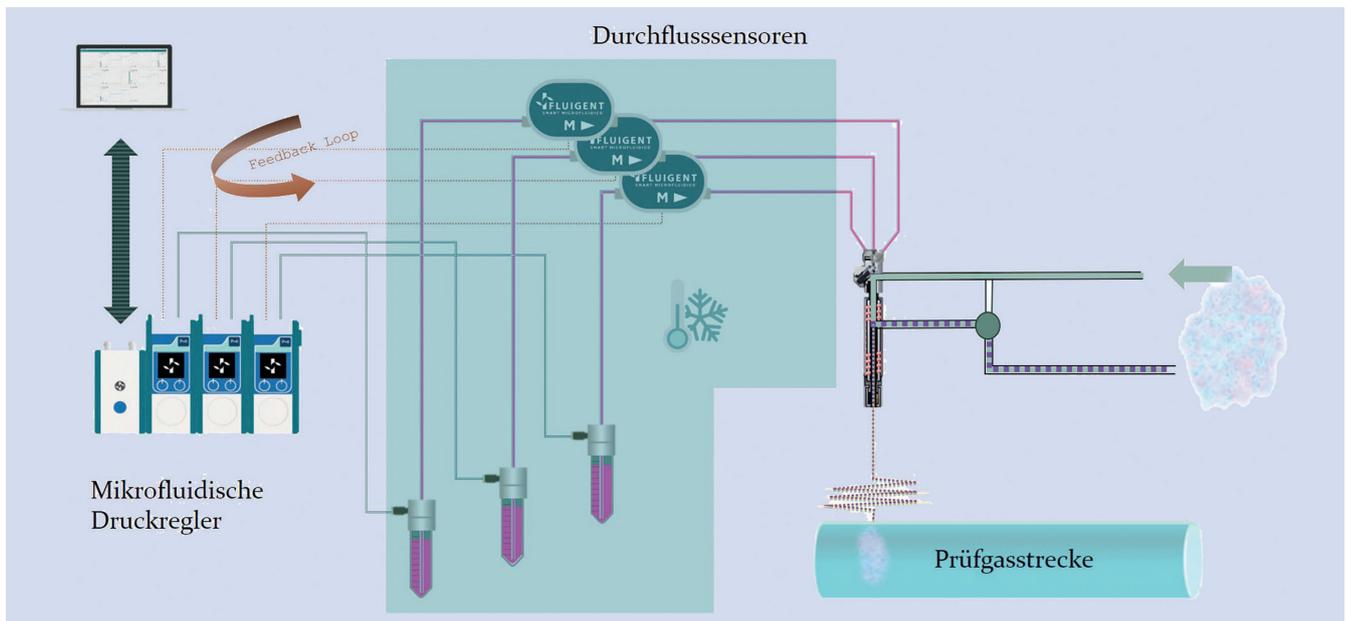


Bild 7 Neu konzipiertes Dosiersystem für Analyten mit hohen Dampfdrücken. Grafik: Autoren

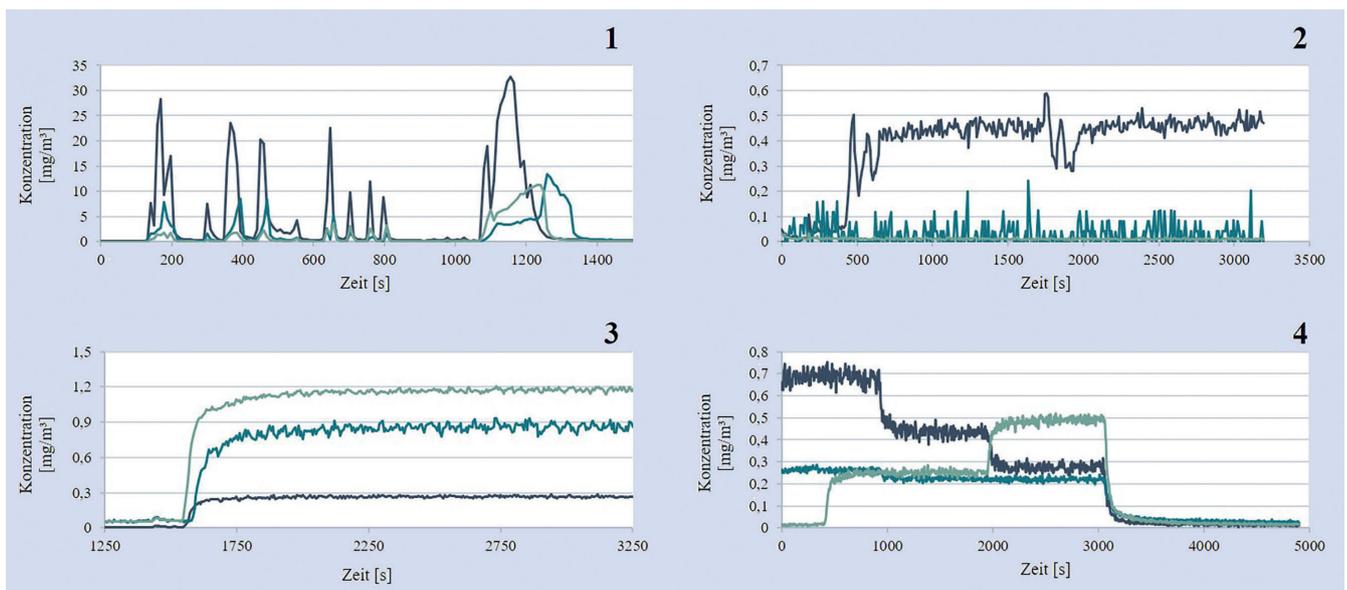


Bild 8 Messung der Konzentrationsprofile der Aldehyde im Prüfgas zur Einstellung des Dosiersystems; Abb. 1: Extreme Schwankungen der Konzentrationen über einen großen Konzentrationsbereich; Abb. 2: Inhomogenes Konzentrationsprofil, teilweise fehlende Konzentration im Prüfgas; Abb. 3: Gleichmäßige, langzeitstabile Dosierung im angestrebten Konzentrationsbereich; Abb. 4: Präzise steuerbare Konzentrationsänderung im dynamischen Betrieb. Grafik: Autoren

der erzeugten Prüfgase erfolgt mittels konventioneller HPLC-Analyse nach der IFA-Arbeitsmappe [14]. Die so ermittelten Ergebnisse werden als Referenzwert für die Kalibrierung des SIFT-MS herangezogen. Die Kalibrierung von Acetaldehyd wird beispielhaft in **Bild 9** dargestellt.

Nachdem die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten entsprechend der Kalibriergeraden angepasst wurden (vgl. VOC-Kalibrierung), wurde die SIFT-MS-Methode auf Präzision, Wiederholbarkeit, Robustheit und Einfluss der Luftfeuchte geprüft. Dabei hat sich ergeben, dass lediglich bei hohen Luftfeuchten die Reaktionen mit den Reagenz-Ionen O_2^+ und H_3O^+ zur Wasserclusterbildung neigen. Daher wurden diese Reaktionen für Ace-

taldehyd, Propionaldehyd und Butyraldehyd aus der finalen Methode entfernt.

6 Das SIFT MS als Analysenmethode bei Kanistermessungen

Das SIFT-MS eignet sich ebenfalls für Messungen aus Proben-sammelgefäßen wie Tedlar Bags oder Edelstahlkanistern.

Probenahmekanister aus Edelstahl finden häufig Anwendung, wenn Proben reaktionsfähiger, gasförmiger Substanzen kleiner Molmassen möglichst inert gesammelt und stabil bis zur Analyse gelagert werden müssen. Für die Probenahme müssen die Kanis-

Tabelle 2 Produkt-Ionen-Auswahl für die Aldehydanalytik mittels SIFT-MS.

	Reagenz-Ion	Reaktionsrate k [cm ³ molecule ⁻¹ s ⁻¹]	Masse-zu-Ladungsverhältnis m/z	Produkt-Ion
Formaldehyd	H ₃ O ⁺	1.30E ⁻⁰⁹	31	CH ₃ O ⁺
			49	H ₂ CO·H ⁺ ·H ₂ O
			61	(H ₂ CO) ₂ ·H ₂ O
			67	H ₂ CO·H ⁺ ·(H ₂ O) ₂
			79	(H ₂ CO) ₂ ·H ⁺ ·H ₂ O
Acetaldehyd	NO ⁺	3.00E ⁻¹⁰	43	CH ₃ CO ⁺
			61	CH ₃ CO ⁺ ·H ₂ O
			79	CH ₃ CO ⁺ ·2H ₂ O
	OH ⁻	7.60E ⁻¹⁰	-43	C ₂ H ₃ O ⁻
Propionaldehyd	NO ⁺	1.70E ⁻⁰⁹	57	C ₃ H ₅ O ⁺
	OH ⁻	9.60E ⁻¹⁰	-57	C ₃ H ₅ O ⁻
Butyraldehyd	NO ⁺	2.20E ⁻⁰⁹	71	C ₄ H ₇ O ⁺
	O ₂ ⁺	2.30E ⁻⁰⁹	72	C ₄ H ₈ O ⁺
	OH ⁻	8.80E ⁻¹⁰	-71	C ₄ H ₆ O ⁻

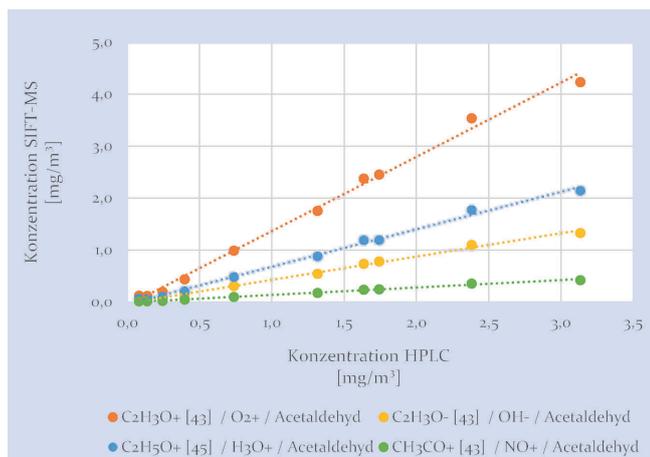


Bild 9 Kalibrierung des SIFT-MS zur Analyse von Acetaldehyd: Dargestellt sind die Kalibrierungen von vier unterschiedlichen Reaktionsprodukten. Grafik: Autoren

ter vorab evakuiert werden. Für die Probenahme werden die Kanister kontrolliert entspannt. Dies erfolgt über einen Aufsatz mit kritischer Düse und Massenflussregler (Bild 10). Je nach Wahl der Parameter können Probenahmen über mehrere Stunden erfolgen und so den messtechnischen Zeitrahmen einer repräsentativen Arbeitsplatzmessung realisieren. Eine Probenaufarbeitung von in Kanistern gesammelten Gasproben findet in der Regel nicht statt. Zur Analyse des Gemisches können die Kanister direkt mit dem SIFT-MS verbunden werden.

Die direkte massenspektrometrische Analyse mittels SIFT-MS ohne Probenvorbereitung und chromatographische Separation eignet sich besonders gut für Substanzen, die sich bei Verfahren mit Anreicherungsschritten zersetzen könnten. Insbesondere für reaktive, kleine Moleküle, wie Ethylenoxid oder Butadien, bietet der Kanister als inertes, aufarbeitungsfreies Probenahmemedium ein großes Anwendungspotenzial.

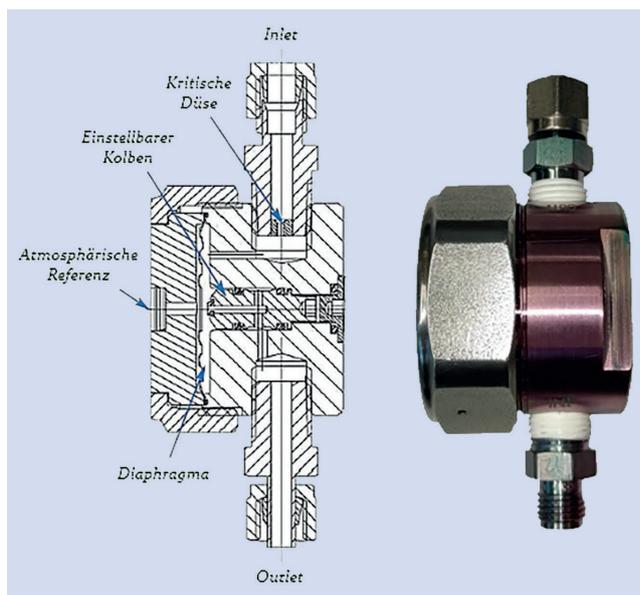


Bild 10 1L-Massenflusscontroller, der an den Kanister angeschlossen wird, um eine kontrollierte Probenahme entlang eines Druckgradienten zu ermöglichen. Grafik links: Fa. Veriflo Corp./Foto rechts: Autoren

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die SIFT-MS-Anwendung ermöglicht eine kontinuierliche Überwachung der quantitativen Prüfgaszusammensetzung in Echtzeit. Die entwickelte SIFT-MS-Methode zur Bestimmung von VOC-Konzentrationen im µg/m³-Bereich wurde erfolgreich parallel zur Online-GC-Methode eingesetzt. Die Wiederfindungsrate der kalibrierten Substanzen liegt größtenteils bei 90 bis 110 %. Es sind jedoch auch Einschränkungen in Bezug auf die Selektivität zu beachten, wenn Analyten mit einem Reagenz-Ion die gleichen Produkt-Ionenmassen erzeugen. Die betroffenen

Substanzen können nur als Summenkonzentrationen bestimmt werden.

Es konnte gezeigt werden, dass die SIFT-MS-Technik sich nicht nur eignet, um die Ringversuche an der Prüfgasstrecke des IFA quantitativ online zu überwachen, sondern auch, um neue Applikationen an der Prüfgasstrecke zu etablieren. So konnte ein neu konzipiertes Dosiersystem zur Prüfgaserzeugung von Substanzen mit hohem Dampfdruck mit der SIFT-MS-Technik verifiziert werden. Die Eignung des Systems wurde durch parallele Untersuchungen mittels SIFT-MS und klassischer HPLC-Analyse erfolgreich nachgewiesen.

Die Edelstahlkanister haben in Verbindung mit dem SIFT-MS das Potenzial zur aufarbeitungsfreien Analytik von VVOC und es wurde bereits bewiesen, dass sich SIFT-MS-Technik zur Analytik von Stoffen wie Ethylenoxid und Butadien eignet. In Zukunft soll die Kanisterprobenahme mit SIFT-MS-Detektion als Methode für VOC-Arbeitsplatzmessungen etabliert werden.

Das SIFT-MS erwies sich als vielfältig einsetzbare Technik. Es konnte bereits zur Prüfgasüberwachung bei Ringversuchen, als Unterstützung bei der Etablierung neuer Dosier- oder als Analysengerät für Edelstahlkanister erfolgreich genutzt werden. ■

Dr. rer. nat. Christiane Kaus

Benedikt Thomas, M.Sc.

**Prof. Dr. rer. nat.
Dietmar Breuer**

Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung,
Sankt Augustin.

Literatur:

- [1] DIN EN ISO 22065:2021-02: Luft am Arbeitsplatz – Gase und Dämpfe – Anforderungen an die Evaluierung von Messverfahren mit pumpenbetriebenen Probenahmeinrichtungen (ISO 22065:2020). Berlin, Beuth 2021.
- [2] SIFT-MS Primer: An introduction to the Chemistry and Methodology of SIFT-MS. Hrsg: Syft Technologies Ltd, Christchurch, New Zealand 2009.
- [3] *Span I, P.; Smith, D.*: Progress in SIFT-MS: Breath analysis and other applications. *Mass spectrometry reviews*, 30 (2011), S. 236-267.
- [4] *Dryahina, K.; Špan I, P.; Pospíšilová, V.; Sovová, K.; Hrdlička, L.; Machková, N. et al.*: Quantification of pentane in exhaled breath, a potential biomarker of bowel disease, using selected ion flow tube mass spectrometry. *Rapid communications in mass spectrometry* 27 (2013), S. 1983-1992.
- [5] *Špan I, P.; Smith, D.*: Quantification of volatile metabolites in exhaled breath by selected ion flow tube mass spectrometry, SIFT-MS. *Clinical Mass Spectrometry* 16 (2020), S. 18-24.
- [6] *Smith, D.; Špan I, P.*: SIFT-MS and FA-MS methods for ambient gas phase analysis: developments and applications in the UK. *The Analyst* 140 (2015), S. 2573-2591.
- [7] *Francis, G. J.*: SIFT-MS: Development of instrumentation and application. Canterbury: University of Canterbury 2007.
- [8] *Smith, D.; Španel, P.*: Selected ion flow tube mass spectrometry (SIFT-MS) for online trace gas analysis. *Mass spectrometry reviews* 24 (2005), S. 661-700.
- [9] *K. Ioannidis, K.; Niazi, S.; Deb, S.; Mannocci, F.; Smith, D.; Turner, C.*: Quantification by SIFT-MS of volatile compounds produced by the action of sodium hypochlorite on a model system of infected root canal content. *PloS one* 13 (2018) e0198649.
- [10] S. Technologies, The Ion Chemistry Of SIFT-MS: Reaction Mechanisms (2016), S. 1-38.
- [11] *Hera, D.; Langford, V.S.; McEwan, M.J.; McKellar, T.I.; Milligan, D. B.*: Negative Reagent Ions for Real Time Detection Using SIFT-MS. *Environments* 4 (2017), S. 16.
- [12] *Lang, P. F.; Smith, B. C.*: Ionization Energies of Atoms and Atomic Ions. *Journal of Chemical Education* 80 (2003) S. 938.
- [13] *Kaus, C.; Nürnberger, F.; Rupp, J.; Breuer, D.*: Weiterentwicklung der Online-Analytik von dynamischen Prüfgasen zur Qualitätssicherung/ Further development of the online analysis of dynamic test gases for quality assurance. *Gefahrstoffe – Reinhalt. Luft* 79 (2019), S. 159-163.
- [14] *Assenmacher-Maiworm, H.; Hahn, J. U.*: Messung von Gefahrstoffen – Aldehyde, Kennzahl 6045. In: IFA-Arbeitsmappe Messung von Gefahrstoffen, 43/2009. Hrsg: Deutsche Gesetzliche Unfallversicherung (DGUV), Berlin. Erich Schmidt, Berlin 2009.