

Zusammenfassung

Fourier Transformation Ionenzyklotronresonanz Massenspektrometrie ermöglicht durch ihre sehr hohe Massenauflösung und Massengenauigkeit das Zuweisen auf der Basis des gemessenen m/z -Verhältnisses von Summenformeln zu einzelnen Verbindungen in komplexen Mischungen. Das Ziel dieser Arbeit war es, durch die Kombination von hochauflösender Massenspektrometrie und thermischer Analyse, hoch komplexe erdölbasierte Probenmaterialien zu charakterisieren. Des Weiteren wurde diese Methode durch den Einsatz verschiedener Ionisationstechniken und das Verknüpfen verschiedener anderer analytischer Methoden erweitert. Im Rahmen dieser Arbeit konnten Kurzzeit-Alterungseffekte in Bitumen beschrieben, Zersetzungsprodukte von Polyethylenterephthalat (PET) analysiert und ein Einblick in die molekulare Architektur von Asphaltene (extrem komplexe Fraktion von Erdöl) gewonnen werden. Die hohe Komplexität hochsiedender Erdölproben kann durch den Einsatz von Trenntechniken oder selektiven Ionisationsmethoden vereinfacht werden. Teil dieser Arbeit war daher auch die Weiterentwicklung von Ionisationsmethoden. Eine Erweiterung der Atmosphärendruck-Photoionisation wurde durch die Verwendung von Xenon-Gasentladungslampen realisiert. Des Weiteren wurde eine neue Ionisationstechnik, Atmosphärendruck Einphotonen-Laserionisierung, eingeführt, welche sich durch eine hohe Sensitivität besonders für schwefelhaltige Komponenten auszeichnet.

Summary

Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry enables the attribution of sum formulae on the basis of the measured m/z ratio to single compounds in a complex mixture due to its high mass accuracy and mass resolution. The aim of this PhD thesis was the characterisation of high complex, petroleum-derived materials by combining high-resolution mass spectrometry and thermal analysis. This method was further extended by applying several atmospheric pressure ionisation techniques and the data integration of different analytical methods. In this PhD work, short-term aging of a model bitumen was investigated, the pyrolysis products of polyethylene terephthalate (PET) were analysed and an insight in to the molecular architecture of asphaltene (extremely complex fraction of crude oils) could be obtained. The high complexity of petroleum-derived material can be reduced by separation techniques or selective ionisation methods. Atmospheric pressure photoionisation was extended by the application of xenon discharge lamps. Furthermore, a new ionisation technique, atmospheric pressure single photon ionisation, was introduced, which is characterized by high selectivity especially towards sulphur-containing components.