

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Echtzeit Produkt- und Prozessanalyse mittels Photoionisierungsmassenspektrometrie (PI-MS). Als industrierelevante, exemplarische Beispiele werden dabei die Analysen von Rauchprodukten und Kaffeeröstgasen gezeigt.

Die Analyse der Rauchprodukte umfasst die klassische Zigarette, sowie neuartige Produkte wie Tabakerhitzer und elektronische Zigaretten. Die Produkte werden qualitativ, als auch für ausgewählte Chemikalien, quantitativ verglichen. Weiterhin wurden Orts und Zeitabhängige Messungen innerhalb einer brennenden Zigarette erstellt. Es werden Oberflächendiagramme zu den Emissionsprofilen ausgewählter Verbindungen zusammen mit der Temperatur- und Druckverteilungen über einen Zigarettenzug dargestellt.

Zudem wurde geprüft, ob sich PI-MS als Prozessanalysetool in der Kaffeeröstung eignet. Untersucht wurde der Einsatz an kleinen Röstern im Labormaßstab bis hin zu industriellen Großröstern. Es werden drei verschiedene Ionisierungswellenlängen verglichen. Es wird mithilfe eines statistischen Modells gezeigt, dass Echtzeitvorhersagen von Röstgrad, antioxidativer Kapazität und Geschmack des Kaffees während der Röstung möglich sind.

Im Anschluss ist die Instrumentierung erweitert, sodass es zu ersten Mal möglich ist die lampenbasierte Einzelphotonenionisierung und die laserbasierte Mehrphotonenionisierung simultan an einem orthogonal beschleunigtem Flugzeit-MS zu nutzen.

This thesis focuses on on-line product and process monitoring using photoionization mass spectrometry (PI-MS). The analysis of smoking products and coffee roasting gases serve as industry-relevant examples for the utilization of PI-MS in process analysis.

The analysis of smoking products includes the classic cigarette as well as novel products, such as tobacco heaters and electronic cigarettes. The products are compared qualitatively, as well as quantitatively for selected chemicals. Furthermore, spatial and temporal resolved measurements within a burning cigarette are made. Surface plots of the emission profiles are made for selected compounds along with the temperature and pressure distribution over a CC puff.

In addition, the suitability of PI-MS as a process analysis tool in coffee roasting is explored. The use of PI-MS is investigated on small roasters on a laboratory scale up to large industrial roasters. Three different ionization wavelengths are compared. Using a statistical model, it is shown that on-line predictions of roast degree, antioxidant capacity and brew taste of the coffee during roasting are possible.

Subsequently, the instrumentation is extended so that it is possible to use lamp-based single photon ionization and laser-based multiphoton ionization simultaneously on an orthogonal acceleration time-of-flight MS for the first time.

---