

## Ausschreibung einer Abschlussarbeit (Masterarbeit) im SoSe 2026

### Aufbau einer hochauflösten GC-qToF-MS-Datenbank für VOC-Analysen zur Detektion von Pflanzenkrankheiten und Schaderregern

#### Beschreibung / theoretischer Hintergrund

Flüchtige organische Verbindungen (VOCs) spielen eine zentrale Rolle in der Kommunikation von Organismen und können wertvolle diagnostische Marker für biotische und abiotische Stressfaktoren liefern. In der Pflanzenforschung werden VOC-Profiles zunehmend genutzt, um Schaderregerbefall oder das Auftreten von Krankheiten frühzeitig und nicht-invasiv zu erkennen. Die Gaschromatographie gekoppelt mit Massenspektrometrie (GC-MS) ist dabei eine der wichtigsten analytischen Methoden zur Identifikation und Quantifizierung solcher Verbindungen. Am ISF steht ein (TD)-GC-qToF-MS (Quadrupol-Time-of-Flight-Massenspektrometer) zur Verfügung. Dieses System bietet im Vergleich zu klassischen GC-MS-Geräten mit einfacherem Quadrupol eine signifikant höhere Massenauflösung und eine präzisere Massengenauigkeit. Ein Problem besteht jedoch darin, dass die gängigen Referenzbibliotheken (z. B. NIST) hauptsächlich mit konventionellen GC-MS-Systemen aufgenommen wurden. Aufgrund der höheren Auflösung und teils abweichender Fragmentierungscharakteristik eines qToF-Detektors stimmen automatische Datenbankabgleiche nicht immer zuverlässig überein. Um dieses Potenzial voll auszuschöpfen, ist eine eigene hochauflöste Referenzspektrenbibliothek, die speziell für unser qToF-System erstellt wurde, notwendig.

## Call for applications for a final thesis (Master's thesis) in the summer semester of 2026

### Development of a high-resolution GC-qToF-MS database for VOC analyses for the detection of plant diseases and pests

#### Description / theoretical background

Volatile organic compounds (VOCs) play a central role in the communication of organisms and can provide valuable diagnostic markers for biotic and abiotic stress factors. In plant research, VOC profiles are increasingly being used to detect pest infestation or the occurrence of diseases at an early stage and in a non-invasive manner. Gas chromatography coupled with mass spectrometry (GC-MS) is one of the most important analytical methods for identifying and quantifying such compounds.

The Institute has a (TD)-GC-qToF-MS (quadrupole time-of-flight mass spectrometer) at its disposal. Compared to conventional GC-MS devices with a simple quadrupole, this system offers significantly higher mass resolution and more precise mass accuracy. However, one problem is that the common reference libraries (e.g. NIST) were mainly recorded using conventional GC-MS systems. Due to the higher resolution and sometimes differing fragmentation characteristics of a qToF detector, automatic database matches are not always reliable. In order to fully exploit the potential of the system, a dedicated high-resolution reference spectrum library created specifically for our qToF system is needed.

## **Ziel der Masterarbeit:**

Die Masterarbeit soll folgende Schritte umfassen:

1. Auswahl relevanter Standards, Vorbereitung und Herstellung von Standardlösungen
2. Methodenübertrag und ggfs. - optimierung von GC-Q-MS zu GC-qTOF-MS
3. Aufnahme hochauflöster Massenspektren am GC-qToF-MS
4. Datenverarbeitung und -auswertung
5. Aufbau einer strukturierten Datenbank
6. Anwendungsperspektive

## **Anforderungen:**

- Interesse an analytischer Chemie, Massenspektrometrie und/oder Pflanzenwissenschaften
- Grundkenntnisse in analytischer Laborarbeit und chromatographischen Methoden, speziell GC, wünschenswert
- selbstständiges, organisiertes Arbeiten und Freude an Datenanalyse

## **Wir bieten:**

- Intensive Betreuung und Einarbeitung in die GC-qToF-MS-Methodik
- Zugang zu modernster analytischer Instrumentierung
- Mitarbeit an aktuellen Forschungsprojekten zu biotischen Stresssignalen in Pflanzen
- Möglichkeit zur Veröffentlichung der Ergebnisse

## **Zuordnung zu Institut / Einrichtung:**

Institut für Sicherheitsforschung, AG Kaul,  
Rheinbach

## **Kontakt / Ansprechpartner**

Dr. Markus Witzler ([markus.witzler@h-brs.de](mailto:markus.witzler@h-brs.de)), Büro G129

## **Aim of the Master's thesis:**

The Master's thesis should comprise the following steps:

1. Selection of relevant standards, preparation and production of standard solutions
2. Method transfer and, if necessary, optimisation from GC-Q-MS to GC-qTOF-MS
3. Recording of high-resolution mass spectra on the GC-qToF-MS
4. Data processing and evaluation
5. Establishment of a structured database
6. Application perspective

## **Requirements:**

- Interest in analytical chemistry, mass spectrometry and/or plant sciences
- Basic knowledge of analytical laboratory work and chromatographic methods, especially GC, desirable
- Ability to work independently and in an organised manner, and enjoyment of data analysis

## **What we offer:**

- Intensive support and training in GC-qToF-MS methodology
- Access to state-of-the-art analytical instrumentation
- Collaboration on current research projects on biotic stress signals in plants
- Opportunity to publish results

## **Affiliation with institute/institution:**

Institute for Safety and Security Research,  
Group Kaul, Rheinbach

## **Contact:**

Dr. Markus Witzler ([markus.witzler@h-brs.de](mailto:markus.witzler@h-brs.de)), office: G129