

**Mass Spectral and GC Data of Drugs, Poisons, Pesticides, Pollutants and Their Metabolites. Vol. 1–3.** 2. Auflage. Von K. Pfleger, H. H. Maurer und A. Weber. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1992. XXIX, 4224 S., geb. 1290.00 DM. – ISBN 3-527-26989-4/0-89573-855-4

Zur Diagnose von Vergiftungserscheinungen müssen in der klinischen Toxikologie mögliche Intoxikationsgifte in kürzester Zeit eindeutig identifiziert werden, um therapeutische Maßnahmen möglichst schnell einzuleiten. Hierbei erwies sich die Massenspektrometrie in Kopplung mit der Gaschromatographie als analytische Methode der Wahl. Die Elektronenstoßionisation im „full scan mode“ liefert charakteristische Massenspektren mit strukturspezifischen Informationen, die durch den Vergleich mit Referenzspektren verifiziert werden können. Hierzu veröffentlichten die Autoren bereits 1985 in der ersten, zweibändigen Auflage eine Sammlung von mehr als 1500 Massenspektren von Drogen, Giften und deren Metaboliten. Die zweite, dreibändige Auflage ist um Datenmaterial aus weiteren toxikologischen Untersuchungen ergänzt, so daß diese Spektrensammlung insgesamt 4370 Einträge enthält: ca. 1500 Drogen und Gifte, 800 Pestizide und Umweltchemikalien sowie 2000 Metaboliten.

Die Autoren beschränken sich nicht nur auf die Veröffentlichung selbst gemessener Massenspektren der Wirkstoffe, Metaboliten und durch Probenaufbereitung oder Gaschromatographie bedingter Artefakte, sondern stellen eine direkte Beziehung zur jeweiligen Probenmatrix (Plasma, Darminhalt, Urin, Reinsubstanz) her. So beschreiben sie in Band 1 das angewendete Analysenschema einschließlich Extraktion, Derivatisierung,

Konzentrierung und Ermittlung von Retentionszeitindizes. Für den schnellen Nachweis gezielt gesuchter Verbindungen werden auch „computer monitoring programs“ vorgestellt, durch die bestimmte Substanzen in definierten Retentionszeitfenstern anhand ihrer ionenspezifischen Massenchromatogramme gesucht werden. Dieser Band wird durch Tabellen vervollständigt, in denen die Substanzen jeweils nach Substanzname (Trivialname), Wirkstoffgruppe, RT-Index, exakter Molmasse und CAS-Nummer angeordnet sind.

Mit diesen Informationen, verschlüsselt in einer ganzen Reihe von Abkürzungen, zuzüglich der Angaben von Summen- und Strukturformeln, sind die einzelnen Massenspektren versehen. Ausgewiesen wird ferner, ob für die Spektrendarstellung eine Untergrundsubtraktion herangezogen wurde, da diese die Intensitätsverhältnisse der Ionen beeinflussen kann. Wichtig ist auch der Hinweis, daß für eine eindeutige Identifizierung und speziell für die Quantifizierung die Analyse von Standardlösungen unumgänglich ist.

Da mittels Elektronenstoßionisation das Molekül-Ion als wichtigste Strukturinformation nicht bei allen Verbindungen in ausreichender Intensität detektierbar ist, werden die Massenspektren in Band 2 ( $m/z$  4 bis 221) und Band 3 ( $m/z$  222 bis 777) uneinheitlich nach steigender Masse eines charakteristischen Fragment- oder aber Molekül-Ions angeordnet. So sind z.B. die Massenspektren der Morpholinfungizide im Falle von Tridemorph (S. 491) unter dem Basispeak  $m/z$  128, im Falle von Fenpropimorph (S. 1502) dagegen trotz Basispeak  $m/z$  128 unter dem Molekül-Ion  $m/z$  303 zu finden. Damit führt eine molmassenorientierte Suche nach Substanzen unweigerlich über Tabelle 4 in Band 1, um dort die Seitenangabe für die entsprechenden Spektren in Band 2 und 3 zu erfahren. Sofern zwei Ionen mit einer Intensität größer als 80% auftreten, wird das Massenspektrum einer Substanz wegen möglicher meßtechnisch bedingter Intensitätsverschiebungen zweifach aufgeführt. So zeigen sich z.B. für den Metaboliten des Neurolepticums Promethazine-M (Nor-sulfoxid) nach Acetylierung  $m/z$  58 und  $m/z$  212 (Basispeak) als intensivste Ionen. Neben dem Eintrag unter  $m/z$  58 (S. 104) ist dann der Zweiteintrag allerdings unter dem Molekül-Ion  $m/z$  328 (S. 1634) und nicht unter dem Basispeak aufgeführt. Damit scheint der doppelte Eintrag einzelner Massenspektren wenig hilfreich, zumal im Tabellenwerk nur auf das Massenspektrum auf Seite 1634 verwiesen wird.

Da die Datensysteme von modernen MS-Geräten mit käuflichen Spektrenbi-

bliotheken (z.B. NIST, Wiley) mit bis zu 130 000 Einträgen ausgestattet sind und auch das Anlegen eigener Spektrenbibliotheken ermöglichen, stellt sich die Frage, inwiefern die vorliegende Spektrensammlung in Buchform eine Berechtigung hat. Ein Vergleich der Spektreneinträge zeigt jedoch, daß das Substanzspektrum der Pfleger/Maurer/Weber-Bibliothek, die speziell auf die systematische klinisch-toxikologische Analyse abgestimmt ist, aber auch für die gerichtsmedizinische, Arbeitsplatz-, Lebensmittel- und Umwelttoxikologie sowie die Dopingkontrolle ein wichtiges Hilfsmittel ist, nur teilweise abgedeckt wird. Im Gegensatz zu den oft reduzierten Massenspektren in den computergestützten Spektrenbibliotheken werden in den Buchbänden vollständige Spektren mit vielen hilfreichen Zusatzinformationen abgedruckt.

Da die on-line-Bibliothek durch die Berücksichtigung unterschiedlicher Suchkriterien eine höhere Flexibilität bietet, ist für die Routineanalytik der Einsatz der Pfleger/Maurer/Weber-Bibliothek als computergestütztes Instrumentarium empfehlenswert. Wegen fehlender Lizenzvereinbarungen ist aber diese Spektrensammlung nicht von allen MS-Herstellern lieferbar. Außerdem können kompatible Datenträger nicht für alle, insbesondere nicht für ältere MS-Geräte angeboten werden, so daß in diesem Segment das dreibändige Werk wertvolle Dienste leisten kann.

Robert Kreuzig und Müfit Bahadır  
Institut für Ökologische Chemie  
und Abfallanalytik der Technischen  
Universität Braunschweig

**Frontier Orbitals and Properties of Organic Molecules.** (Reihe: Ellis Horwood Books in Organic Chemistry, Reihenherausgeber: J. Mellor.) Von V. F. Traven. Ellis Horwood, Chichester, 1992. XVI, 401 S., geb. 111.00 \$. – ISBN 0-13-327487-X

Ein modernes Buch auf dem neuesten Stand der Literatur habe ich erwartet, die englische Übersetzung eines offensichtlich älteren russischen Werkes habe ich erhalten. Im wesentlichen ist Literatur der fünfziger bis siebziger, selten der achtziger Jahre verarbeitet. Das ist sicherlich für das behandelte Gebiet nicht ausreichend.

Das Buch ist in zwei größere Bereiche gegliedert. Zunächst werden auf knapp 60 Seiten Methoden erläutert, mit denen man die elektronische Struktur von Molekülen beschreiben kann. Dann beginnt der Hauptteil mit einer Einführung in



Diese Rubrik enthält Buchbesprechungen und Hinweise auf neue Bücher. Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezensenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an den Buchredakteur Dr. Gerhard Karger, Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, D-69451 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland, senden. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

Orbitalstruktur und Eigenschaften organischer Moleküle (30 Seiten), bevor systematisch einzelne Verbindungsklassen der Organischen Chemie behandelt werden (250 Seiten). Dem schließen sich ein Anhang mit HMO-Daten ausgewählter Moleküle (10 Seiten) und ein Literaturverzeichnis mit 471 Einträgen an.

Im ersten Kapitel werden sehr kurz und oberflächlich einige Grundlagen der Physikalischen Organischen Chemie gegeben. Das nützt eigentlich wenig. Die Methoden der Quantenchemie folgen dann, beginnend mit dem Bohrschen Atommodell und endend mit Konzepten der MO-Theorie. Es wird in die HMO-Theorie eingeführt, der Stand von ab-initio-Rechnungen von vor 20 Jahren beschrieben und bei semiempirischen Verfahren CNDO, NDDO und PPP angeführt. MNDO, AM1 und PM3 sind noch nicht bekannt. Anschließend gibt es eine jeweils sehr kurze Einführung in die experimentellen Methoden der Untersuchung der elektronischen Struktur organischer Moleküle (PES, ETS, ESR, UV, Polarographie). Man merkt bereits in diesem Kapitel, daß die Photoelektronenspektroskopie des Autors Hobby ist und daß ihr vermutlich in späteren Kapiteln eine zentrale Rolle zukommen wird. Der Spaß am Lesen des ersten Teils wird zum einen durch die unvollständige und oberflächliche Darstellung, zum anderen durch ein äußerst mäßiges Englisch getrübt.

Der Orbitalstruktur und der Reaktivität ist der Anfang des zweiten Teiles gewidmet, wobei den Grenzorbitalen eine wichtige Rolle zuerkannt wird. So liest man: „The rules for concerted cycloaddition reactions proposed by Woodward and Hoffmann were a further development of the frontier orbitals concept.“ Ähnlich unkritisch geht es dann weiter mit den Zusammenhängen von Orbitalstruktur und biologischer Aktivität, Farbe und Phototropie.

Bei der Abhandlung der einzelnen Verbindungsklassen folgt das Buch dem Aufbau eines Lehrbuches der Organischen Chemie. Jetzt kommt die Photoelektronenspektroskopie zum Zuge, die auch mit Rechnungen, zum Teil vom ab-initio-Typ der siebziger Jahre, garniert ist. Viele Tabellen mit Ionisationspotentialen, die man auch anderswo finden kann, werden gebracht.

Man könnte der Meinung sein, daß mit „properties of organic molecules“ im Titel nur Fragen der Struktur gemeint seien. Dies ist jedoch nicht so. So werden im Kapitel „Alkene“ selektiv einige Aspekte der Woodward-Hoffmann-Regeln diskutiert. Das attraktive Thema „Annulene“ befindet sich auf einem total veralteten Niveau.

Und so geht es weiter von Verbindungsklasse zu Verbindungsklasse. Der Fan der Photoelektronenspektroskopie mag das ein oder andere ihn Erfreuende finden, der durchschnittliche Organiker wird wenig vom Inhalt profitieren. Insgesamt muß man feststellen, daß der Titel vielversprechend klingt, das Buch aber besser nicht ins Englische hätte übersetzt werden sollen. Das 1976 von Fleming herausgegebene, hier nicht zitierte Buch „Grenzorbitale und Reaktionen organischer Verbindungen“ ist solider und moderner als dieses 1992 erschienene Buch.

Reiner Sustmann

Institut für Organische Chemie  
der Universität-Gesamthochschule Essen

**Lexikon Spektroskopie (Parat).** Von H.-H. Perkampus. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1992. XI, 803 S., geb. 124.00 DM. – ISBN 3-527-28 303-X, ISSN 0930-6862

Das „Lexikon Spektroskopie“ soll dem Chemiker einen sehr schnellen und breiten Überblick über die wichtigsten Grundlagen der Spektroskopie sowie verwendete experimentelle Methoden ermöglichen. Die wichtigsten Aspekte der Quantentheorie der optischen Spektroskopie (sowohl für die elektronische Anregung im UV-VIS-Bereich als auch bei der Infrarot- und Ramanspektroskopie) werden sehr übersichtlich und präzise dargestellt. Dasselbe gilt für die wichtigsten experimentellen Techniken, die umfassend und auf dem neuesten Stand angeführt sind. Auch der Leser, der etwas mehr ins Detail gehen möchte, findet viele sehr nützliche Darstellungen spektroskopischer Probleme. So werden z.B. die spektroskopischen Banden für lineare Moleküle, den symmetrischen, den sphärischen und den asymmetrischen Kreisel bis hin zur Rota-

tionsstruktur mit der Mikrowellen-Rotationsspektroskopie und der Raman-Streuung verständlich und klar beschrieben.

Sucht man nach modernen experimentellen Methoden, so wird man rasch fündig: Die wichtigsten linearen und nicht-linearen Spektroskopiemethoden sind angemessen beschrieben. Neben der Lochbrennspektroskopie finden sich auch hochauflösende Methoden der Laserspektroskopie wie die moderne Methode der Doppler-freien Zweiphotonen-Absorption, die sogar mit einem rotationsaufgelösten  $S_1 \leftarrow S_0$ -Spektrum des Benzols vertreten ist. Außer Methoden der Flammenspektroskopie werden auch experimentelle Fragen wie die Frequenzverdopplung zur UV-Erzeugung besprochen. Das Lexikon scheint keine Lücken zu haben – insofern gebührt dem Autor höchstes Lob für seine Darstellung. Man genießt die große experimentelle und auch pädagogische Erfahrung des Autors, der es versteht, die wichtigsten Punkte kurz und präzise darzustellen. Dabei hat der Autor es ebenso verstanden, die modernen Methoden der Laserspektroskopie auf einem für ein Lexikon sehr neuen Stand zu berücksichtigen. Der Leser findet also nicht nur einen ausgezeichneten Überblick über alle Bereiche der optischen Spektroskopie, der Massenspektrometrie und der NMR-Spektroskopie; er findet neben experimentellen Methoden auch quantenchemische Grundlagen und Verweise auf die wichtigsten Bücher oder Übersichtsartikel. Eine etwas ausführlichere Erläuterung der Gruppentheorie, auch unter Berücksichtigung der Permutations-Inversionsgruppen für die Beschreibung nicht-starrer Systeme wie molekularer Cluster, hätte man sich vielleicht noch gewünscht.

Insgesamt ist dieses Lexikon ein uneingeschränkt zu empfehlendes, ausgezeichnetes Nachschlagewerk, das in das Bücherregal jedes Chemikers gehört und seinen Nutzen im Studium und in der Praxis erweisen wird.

Klaus J. Müller-Dethlefs

Institut für Physikalische und  
Theoretische Chemie  
der Technischen Universität München  
Garching