

Interpretation von Massenspektren.
Von F. W. McLafferty und F. Tureček.
Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 1995. 380 S., geb. 78.00 DM.
– ISBN 3-86025-148-1

Dieses Buch ist die deutsche Übersetzung der 4. Auflage des amerikanischen Originaltitels „*Interpretation of Mass Spectra*“, der 1993 erschien. In ihm gibt Fred W. McLafferty (McLafferty-Umlagerung) zusammen mit dem neuen Co-Autor František Tureček eine grundlegende Einführung in die „Kunst“ der Interpretation von Massenspektren. Dabei werden hauptsächlich 70-eV-EI-Massenspektren kleinerer organischer Moleküle behandelt, aus denen sich anhand der dominierenden Fragmentierungsreaktionen besonders viele Strukturinformationen entnehmen lassen. Das Buch wendet sich sowohl an interessierte Studenten als auch an erfahrene Praktiker. Es gliedert sich in zehn Textkapitel, ein umfangreiches Literaturverzeichnis und einen Anhang mit mehreren nützlichen Tabellen, die auch dem erfahrenen Massenspektrometiker willkommen sein werden. In dem Text sind 86 gut ausgewählte Übungsaufgaben eingestreut, die die Anwendung des Gelesenen ermöglichen. Die Bearbeitung dieser Aufgaben wird empfohlen, da sich Spektreninterpretation am besten durch häufiges Üben erlernen lässt. In einem abschließenden Kapitel werden die Lösungen ausführlich



und mit wenigen Ausnahmen (z.B. 4.11) klar dargelegt.

Das erste kurze Kapitel erklärt die grundlegenden Verfahren zur Erzeugung von Massenspektren und stellt das Standardinterpretationsverfahren vor, einen Leitfaden zur Identifizierung unbekannter Verbindungen. Das zweite Kapitel befaßt sich mit der Elementarzusammensetzung und der Häufigkeit von Isotopen, aus denen sich Summenformel und Doppelbindungsanzahl von Molekülen und Fragmenten ableiten lassen. Im dritten Kapitel wird das Problem der Erkennung des Molekül-Ions behandelt. Außerdem sind 27 Massenspektren verschiedener Verbindungsklassen abgebildet, auf die im Buch immer wieder verwiesen wird. Sehr nützlich ist dabei die Markierung der Ionen mit Symbolen, die unterschiedliche Bildungsweisen der Fragmente und Ionenserien anzeigen. Grundlegende Fragmentierungsreaktionen werden im vierten Kapitel vorgestellt: radikalisch und ionisch induzierte Zerfälle und Umlagerungen, Ringspaltungen und Dissoziation einer σ -Bindung. Erstmals im fünften Kapitel wird auf die Bestimmung der Molekülstruktur eingegangen. Dabei stehen Ionen-Serien, charakteristische Ionen und die Abspaltung kleiner Neutralteilchen im Vordergrund. Im sechsten Kapitel werden sehr kurz Hilfstechniken wie chemische Ionisierung (CI), Hochauflösung oder Tandem-Massenspektrometrie vorgestellt. Damit ist der einleitende Teil des Buches abgeschlossen (S. 115).

Im siebten Kapitel folgt eine Einführung in die Theorie des monomolekularen Ionen-Zerfalls, der das Erscheinungsbild von EI-Massenspektren bestimmt. Dieses sehr wichtige Thema ist etwas kurz geraten, so daß von den Autoren auf weiteren

führende Literatur verwiesen wird. Die Kapitel 8 und 9 bilden das Herzstück des Buches. Zunächst werden auf 80 Seiten die Fragmentierungsmechanismen umfassend diskutiert, die in Kapitel 5 bereits kurz vorgestellt wurden. Durch diese Wiederholung wird methodisch sinnvoll eine Vertiefung des Stoffes erreicht. Hervorzuheben ist die häufige Verknüpfung der Mechanismen mit Ionisierungsenergien und Elektronenaffinitäten. Dies hilft dem Leser, die Grundlage der Fragmentierung zu erkennen und deren Ablauf nachzuvollziehen. Im neunten Kapitel (57 Seiten) werden 11 wichtige Verbindungsklassen ausführlich behandelt. Auf diesen sehr informativen Teil greifen sicherlich auch erfahrene Massenspektrometiker gern als Referenz zurück. Das abschließende zehnte Kapitel beschäftigt sich mit der Anwendung von Computern bei der Interpretation von Massenspektren. Dabei wird auf die Spektrensuche (PBM-Systeme) und auf die computergestützte Spektreninterpretation eingegangen (STIRS). Diese Verfahren erleichtern die Arbeit heutzutage sehr. Es bleibt jedoch anzumerken, daß eine erfolgreiche Anwendung die grundlegenden Kenntnisse erfordert, die in diesem Buch didaktisch geschickt vermittelt werden.

Leider sind Kenntnisse der Massenspektrometrie bei Organikern weit weniger verbreitet als solche der NMR-Spektroskopie. Es bleibt zu hoffen, daß das vorliegende Buch einen weiten Leserkreis erreicht und so diese Lücke zu schließen hilft, denn die Massenspektrometrie ermöglicht weit mehr als nur die Bestimmung der Molekülmasse.

Stefan Schulz
Institut für Organische Chemie
der Universität Hamburg