

MASS SPECTRAL AND GC DATA OF DRUGS, POISONS AND  
THEIR METABOLITES

Part I: Introduction, Tables, GC Data

K. PFLEGER, H. MAURER und A. WEBER

VCH Verlagsgesellschaft Weinheim  
744 p. ISBN 3-527-26303-9 and ISBN 0-89573-430-3, 1985

Für die forensische und klinische toxikologische Chemie ist das vorliegende 2-bändige Werk zumindest für die nächsten 10 Jahre als ein unentbehrliches Rüstzeug und Hilfsmittel für alle Analytiker anzusehen, die in der toxikologischen Chemie die kombinierte GC/MS für die Lösung ihrer Probleme einsetzen. In der seit einigen Jahren in Vorbereitung befindlichen Monographie haben die Verfasser all ihre tausendfältigen praktischen Erfahrungen einfließen lassen, die sie insbesondere bei vielen tausend klinisch-toxikologischen Untersuchungen erarbeitet haben. Die vorliegenden Daten, ganz gleich, ob es GC Indices oder Massenspektren sind, wurden, von wenigen Ausnahmen abgesehen, nicht mit Testsubstanzen aufgenommen. Sie sind vielmehr fast ausschließlich Ergebnisse unzähliger Untersuchungen im Rahmen von akuten Vergiftungsfällen, bei denen es erforderlich war, in möglichst kurzer Zeit dem behandelnden Arzt durch Angabe des Giftes eine möglichst gezielte Therapie zu ermöglichen.

Die kurze Einführung im ersten Band enthält einen gestrafften Rückblick zur Entwicklung der analytischen Methoden in der toxikologischen Chemie und weist dabei auch auf die besonderen Probleme der sogenannten "general unknown analysis" hin, aus denen sich ein nicht unbeträchtlicher Teil aller toxikologischen Untersuchungen zusammensetzt. Noch vor wenigen Jahren war es nur durch Kombination der verschiedensten Methoden bei schwierigen Untersuchungen möglich, verwertbare Resultate zu erzielen. Erst mit Hilfe der kombinierten GC/MS gelang es, auch in solchen Analysenfällen zu einem brauchbaren und vor allem auch sicherem Ergebnis zu kommen. Früher war eine eindeutige analytische Befunderhebung fast ausschliesslich mit Hilfe der Infrarotspektrometrie möglich, die sich aber häufig als zu unempfindlich erwies. Vor Einführung der Computertechnik konnten auch mittels GC/MS nicht immer innerhalb kurzer Zeit brauchbare Ergebnisse erhalten werden, so dass die eigentliche und wichtigste Aufgabe der klinisch-toxikologischen Analyse, der schnelle Nachweis von potentiellen Giften, nicht erfüllt werden konnte. Aber auch die computerisierte GC/MS führte in einigen wenigen Fällen nicht zu einem optimalen Resultat. Es wurde deshalb von den Autoren für die Aufarbeitung und Vorbereitung des biologischen Materials für die massenspektrometrische Analyse eine einfache Methode entwickelt, die es ermöglicht, ohne aufwendige Apparaturen fast alle denkbaren Gifte und Arzneimittel anzureichern und zu isolieren.

In einem weiteren Abschnitt des 1. Bandes werden genaue Anweisungen für die Handhabung verschiedener Derivatisierungsreagentien angegeben, anschliessend wird das Vorgehen bei der Ermittlung der gaschromatographischen Retentionsindices angegeben und die technischen Einzelheiten der verwendeten computerisierten GC/MS-Apparatur beschrieben. Für die Erfassung verschiedener organischer Arzneigruppensubstanzen mit einheitlicher chemischer Grundstruktur wurden von den Verfassern "Computer Drug Monitoring" Programme ausgearbeitet, die durch ein praktisches, sehr komplexes Beispiel erläutert werden. Auch die genaue Massenbestimmung mit Hilfe der Hochauflösungsmassenspektrometrie wird erklärt, ebenso auch die Prinzipien der E.I. Massenspektrometrie. Ein weiteres praktisches Beispiel befasst sich mit der Interpretation eines Massenspektrums und seiner Metaboliten.

Als besonders wichtig für die Praxis ist der Abschnitt 4 des ersten Bandes anzusehen, der sich mit den vielseitigen Möglichkeiten einer Artefaktbildung während der Analyse, vor allem auch durch thermische Einflüsse befasst und so die Lösung eines derartigen Problems erleichtert. Im Kapitel 7 ist das technische Vorgehen bei Benutzung der vorliegenden Monographie erläutert, variiert entsprechend der verschiedenen Aufgaben, die gelöst werden sollen. Nach einem speziellen, nur auf wichtige Arbeiten beschränkten Literaturverzeichnis ist eine alphabetische Tabelle der erfassten organischen Substanzen angeschlossen, die ausser dem Stoffnamen und seiner Derivate die Retentionsindices und wichtigsten Massenfragmente sowie dem Auffindungshinweis für das Massenspektrum dieser Verbindung im 2. Band enthalten. Die nächste Linie enthält die Retentionsindices der untersuchten Stoffe in aufsteigender Linie, ansonsten die gleichen Angaben wie voranstehend. Die letzte Liste des 1. Teils der Monographie enthält die Namen von 6000 Arzneimitteln, Pestiziden und Chemikalien, nach ihrem steigenden Molekulargewicht geordnet. Weiter finden sich in diesen Tabellen, die überwiegend von Frau Dr. Hildgard Pflieger zusammengestellt wurden, die empirische Summenformel der einzelnen Verbindungen einschliesslich ihres Namens und ein Hinweis für die Verwendung der einzelnen Substanzen, so dass bei Kenntnis der klinischen Symptomatik eine weitere Zuordnung möglich ist. Ist ein Massenspektrum für die betreffende Verbindung im 2. Bandteil vorhanden, ist dies durch ein "MS" gekennzeichnet.

Der 2. Band der Monographie enthält 1550 Massenspektren von über 600 Arzneimitteln, Pestiziden und anderer einschlägiger Giftstoffe nebst ihrer Derivate und Metaboliten einschliesslich Kunstprodukten, die entsprechend ihrer wichtigsten Massenfragmente (meist Basis-Peak) aufsteigend geordnet sind. Jedes dieser Massenspektren ist weiter gekennzeichnet durch die Struktur- und Summenformel, das Molekulargewicht, den gaschro-

matographischen Retentionsindex. Weiter sind Angaben über seine Verwendung vorhanden. Den Massenspektren nach geordnet ist eine alphabetische Liste der massenspektrometrisch aufgenommenen Substanzen, mit Angabe der Seitenzahl für das zugehörige Massenspektrum. Anschliessend finden sich ebenfalls alphabetisch geordnete Listen der vorstehenden Substanzen (ohne Metaboliten und Derivate), die die Summenformeln der Verbindungen, ihre CAS (Chemical Abstract Service)-Registernummern und System-Formeln enthalten.

Ich möchte an den Schluss meines Referates die Worte der Autoren auf der rückwärtigen äusseren Einbandseite stellen:

Mit dieser Sammlung von GC-Daten und Massenspektren ist es möglich, die Ursachen der meisten Vergiftungen festzustellen. Es ist ein unentbehrliches Werkzeug für pharmakologische und toxikologische Laboratorien aller Art.

Jeder erfahrene Toxikologe kann dies nur bestätigen.

Wolfgang Arnold (Hamburg)

\* \* \* \*

### GIFTPILZE

A. BRESINSKY und H. BRESL

Wissenschaftl. Verlagsgesellschaft mbH, Stuttgart, 1985,  
295 Seiten, Preis: DM 136.- (bis zum 15. Januar 1986 DM 98.-)

Mit diesem hervorragend gestalteten Buch ist eine Lücke in einem vielschichtigen toxikologischen Arbeitsgebiet geschlossen worden. Es hat schon immer gute Monographien gegeben, doch haben sich diese entweder an einen Spezialisten gewandt oder an den wissenschaftlich-medizinischen Laien. Es hat aber meines Erachtens nach keine solche deutschsprachige Uebersichtbarkeit gegeben, die sowohl die Toxikologie der Pilzvergiftungen als auch eine ausführliche Beschreibung der wichtigsten Pilzarten berücksichtigt.

Eine allgemeine Einleitung über das Verhalten bei Pilzvergiftungen wird gefolgt von einigen Ratschlägen zum Pilzsammeln und Zubereiten von Pilzen. Eine moderne Darstellung der 10 häufigsten Vergiftungssyndrome, gegliedert nach der Chemie und der Pharmakologie der Giftstoffe, umfaßt die wichtigsten Symptome, die Chemie der Giftstoffe (Analytik), die Pharmako-