



GC-MS Kopplung heute

*Dr. Andreas A. Stämpfli
F. Hoffmann-La Roche AG, CH-4070 Basel*

In fast jedem Synthese Labor steht heutzutage HPLC-UV System oft gekoppelt mit einem Massenspektrometer, welches zur Syntheseverfolgung, Strukturbestätigung und Identifikation von Nebenprodukten gebraucht wird. Aufgrund der vermeintlichen Einfachheit der erhaltenen Massenspektren wird auch in der Qualitätskontrolle vermehrt nur noch auf die HPLC-UV-MS gesetzt. Auch für die Strukturaufklärung wird öfters nur noch die LC-MS herangezogen, da sich polare und thermisch labile Substanzen ohne Derivatisierung ionisieren lassen. Dieser Umstand liess die GC-MS mehr und mehr in den Hintergrund verschwinden oder gar vergessen.

Aber die moderne GC-MS existiert. Mit einer Vielzahl von verschiedenen Probeaufgaben, nahezu ballistisch aufheizenden Gaschromatographen und den immer schneller werdenden Massenspektrometern ist es heute möglich, komplizierteste Gemische von Substanzen innert kürzester Zeit aufzutrennen und zu charakterisieren. Im Gegensatz zur LC-MS, bei der in den meisten Fällen „nur“ Molekülonen und ihre Addukt Ionen beobachtet werden können und deshalb erst mit LC-MS/MS die relevanten Strukturinformationen erhalten werden, liefert die GC-MS in nur einem Schritt die gesamte Information. In der EI-MS stehen heute über 300'000 Spektren in verschiedenen Datenbanken (Wiley, NIST u.a.) zur Strukturaufklärung zur Verfügung. Diese können nicht oder nur beschränkt zur Strukturaufklärung in der LC-MS/MS herangezogen werden. Für die LC-MS stehen erst wenige und nur sehr spezifische Datenbanken käuflich zur Verfügung und können so zur Strukturaufklärung nur in sehr beschränkter Masse herangezogen werden. Der Vortrag soll Einsicht in die heutige GC-MS bringen. Ausserdem sollen Vor- und Nachteile der GC-MS mit denjenigen der LC-MS und LC-MS/MS zu verglichen werden.