

4.2.	Fragmentionen	40
4.3.	Metastabile Ionen	42
4.4.	Mehrfach geladene Ionen	44
4.5.	$[M + 1]^+$ -Ionen	45
5.	Theoretische Deutung der Bruchstückbildung	45
5.1.	Quasi-Gleichgewichtstheorie	46
5.2.	Physikalisch-chemische Theorie	47
5.3.	Konzept der lokalisierten Ladung	48
6.	Zusammenhang zwischen Struktur und Massenspektrum	48
6.1.	Bruchstückbildung durch Spaltung einer Bindung	49
6.1.1.	Alkylspaltung	49
6.1.2.	Allylspaltung	50
6.1.3.	Oniumspaltung	52
6.1.4.	Tropyliumspaltung	52
6.2.	Bruchstückbildung durch Spaltung mehrerer Bindungen	53
6.2.1.	Retro-DIELS-ALDER-Reaktion	55
6.2.2.	Retro-1,4-Addition	56
6.3.	Umlagerungen	57
6.3.1.	Statistische Umlagerungen	57
6.3.2.	Spezifische Umlagerungen	58
6.3.2.1.	McLAFFERTY-Umlagerung	58
6.3.2.2.	Radikalwanderung	59
7.	Massenspektren einzelner Verbindungsklassen	60
7.1.	Alkane	60
7.2.	Alkene	62
7.3.	Alkine	63
7.4.	Alicyclen	64
7.5.	Arene (benzoide Kohlenwasserstoffe)	65
7.5.1.	Alkylbenzole	65
7.5.2.	Kondensierte Arene	67
7.6.	Alkanole	67
7.6.1.	Primäre Alkanole	67
7.6.2.	Sekundäre Alkanole	70
7.6.3.	Tertiäre Alkanole	71
7.6.4.	Cycloalkanole	72
7.7.	Phenole	72
7.8.	Äther	74

7.9.	Ketone	75
7.10.	Alkanale	80
7.11.	Carbonsäuren	82
7.12.	Carbonsäureester	84
7.13.	Amine	86
7.14.	Nitrile und Isonitrile	91
7.15.	N-Oxide	93
7.16.	Nitroverbindungen	93
7.17.	Halogenverbindungen	95
7.18.	Thiole	99
7.19.	Thioäther	100
7.20.	Heterocyclische Verbindungen	102
7.20.1.	Furane	103
7.20.2.	Thiophene	104
7.20.3.	Pyrrole	105
7.21.	Organometallische Komplexe	106
7.22.	Naturstoffe	110
8.	Interpretation von Massenspektren	111
8.1.	Vorkenntnisse	112
8.1.1.	Herkunft der Probe	112
8.1.2.	Reinheit der Probe	112
8.1.3.	Elementaranalyse	114
8.1.4.	Informationen aus anderen Spektren	114
8.2.	Molmasse	115
8.3.	Bestimmung der Summenformel	115
8.4.	Spektrenvergleiche	116
8.5.	Allgemeiner Spektrencharakter	119
8.5.1.	Schlüsselbruchstücke	120
8.5.2.	$[M - X]$ -Ionen	120
8.6.	Fragmentierungswege	123
9.	Chemische Umwandlung von Verbindungen	124
10.	Ionisations- und Auftrittspotentiale	129
11.	Quantitative Analyse	137
12.	Hochauflösende Massenspektrometrie	142
13.	Andere Methoden der Ionisierung	144
13.1.	Feldionisation	145
13.2.	Chemische Ionisation	148