

**Massenspektrometrische Strukturanalyse organischer Verbindungen. Eine Einführung.** Von *G. Spiteller*. Verlag Chemie GmbH., Weinheim/Bergstr. 1966. 1. Aufl., XII, 355 S., 91 Abb. u. 2 Tab., GL DM 44.—.

Mit dem vorliegenden Buch liegt nunmehr auch ein deutschsprachiges Werk vor, das als Einführung Grundlagen vermittelt und zugleich eine Einarbeitung in die Praxis dieses modernen physikalischen Verfahrens ermöglicht, das nicht nur für die Strukturanalyse organischer Moleküle im letzten Jahrzehnt eine unschätzbare Bedeutung erlangt hat. Kombinationen mit den gleichfalls hochentwickelten Trenntechniken der Gaschromatographie, der Dünnschichtchromatographie und Pyrolyse, ferner die damit erhältlichen Einsichten in Fragmentierungsvorgänge haben die Massenspektrometrie zu einem Spezialgebiet mit großen Aussagemöglichkeiten für weite Bereiche der gesamten Chemie werden lassen, so daß das Erscheinen einer Monographie der vorliegenden Art besonders zu begrüßen ist.

Der 1. Abschnitt behandelt kurz die physikalischen Grundlagen und apparativen Einzelheiten. Es ist zu begrüßen, daß das Schwergewicht auf praktischen Anweisungen für die Zuführung der Proben, für die Mengenverhältnisse und Reinheit der Proben, für das Auszählen der Spektren und dgl. liegt. Dies ist von großem Wert, denn die Schwierigkeiten beginnen für den Ungeübten nach eigenen Erfahrungen bereits beim Lesen des vom Massenspektrometer gelieferten Registrierstreifens.

Im 2. Abschnitt werden die Mechanismen der Ionen-Bildung und die Abbaureaktionen organischer Moleküle im Massenspektrometer sehr ausführlich behandelt.

Es folgen dann im 3. Abschnitt die Darlegung und Erörterung der Massenspektren der wichtigsten chemischen Verbindungsklassen. Hierbei bewährt sich die Einteilung in aliphatische Kohlenwasserstoffe und solche mit Substituenten 1. und 2. Ordnung, aromatische Stoffgruppen, heterocyclische Verbindungen sowie aliphatische Substanzen mit mehreren funktionellen Gruppen. Es werden zahlreiche Beispiele behandelt, an denen die für eine Verbindungsklasse typischen „Schlüsselselfragmente“ übersichtlich dargestellt werden.

Im 4. Abschnitt findet man die Massenspektren von Naturstoffen. An charakteristischen Beispielen werden typische Zerfallsreaktionen unter Heranziehung von Literaturzitate n dargelegt.

Der abschließende 5. Abschnitt ist den Anleitungen für die Auswertung von Massenspektren unbekannter Substanzen gewidmet. Hierzu sind Tabellen für die im ersten Zerfallsschritt herausgespaltenen neutralen Fragmente und für die Schlüsselselfragment-Ionen recht hilfreich und wertvoll. Weiterhin gegebene Arbeitsanweisungen für chemische Umwandlungen im Mikromaßstab, die es ermöglichen, für die Messungen jeweils besonders geeignete Derivate herzustellen, dürften sich als besonders nützlich erweisen.

Die große Erfahrung des Verfassers bei massenspektrometrischen Strukturaufklärungen ist aus vielen wertvollen und praktischen Hinweisen ersichtlich. Das Werk vermittelt eine ausgezeichnete Grundlage für den Chemiker, der sich mit der Massenspektrometrie organischer Verbindungen zu befassen hat.

*K. Heyns* [NB 662]

**Kernmagnetische Resonanz.** Von *H. Sillescu*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 1966. 1. Aufl., VIII, 136 S., 19 Abb., GL DM 32.—.

In den Kernresonanzspektren — insbesondere den hochauflösten Spektren organischer Flüssigkeiten — findet der Chemiker besonders übersichtliche Zusammenhänge mit den Parametern seines Moleküls; die Vermutung, daß theoretische Berechnungen gerade hier fruchtbar sein werden, hat sich in den letzten Jahren ja auch als richtig erwiesen. Zum tieferen Verständnis benötigt man aber Kenntnisse aus einigen Teilbereichen der theoretischen Physik, die aus umfassen-

den, für Physiker geschriebenen Lehrbüchern mühsam zusammengesucht werden mußten. Hier nun füllt das vorliegende Buch für den deutschen Sprachraum eine Lücke, indem es die klassischen Beziehungen kurz resümiert und in den Operatoren-Formalismus der Quantenmechanik überträgt, daraus die für die Kernresonanzspektroskopie geltenden Folgerungen ableitet, und zwar in einer Breite und Ausführlichkeit, die den mathematisch nicht immer sehr versierten Chemiker nicht mit der „nach kurzer Rechnung zeigt sich“-Floskel im Stich läßt.

Neben der hochauflösenden Technik wird auch die Theorie der Breitlinien-Kernresonanzspektroskopie recht ausführlich behandelt, wogegen die besonders für den Organiker so wichtigen Doppelresonanzmethoden kaum erwähnt sind. Kapitel über Quadrupol-Kopplung und Relaxationserscheinungen bilden den Schluß des physikalischen Teils. Der mathematische Anhang dürfte für den normalgebildeten Chemiker dagegen immer noch zu kurz sein. Trotz seines didaktisch sauberen Aufbaus verlangt das Buch von dem Ungeübten eine konzentrierte Lektüre, dem Erfahrenen wird es ein willkommenes Repetitorium sein. Die Ausstattung ist gut, sie hätte zugunsten eines niedrigeren Preises ruhig etwas sparsamer sein dürfen (Paperback).

*E. G. Hoffmann* [NB 667]

**Introduction to Practical High Resolution Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy.** Von *D. Chapman* und *P. D. Magnus*. Academic Press Inc., London-New York 1966. 1. Aufl., IX, 112 S., 30 Abb., zahlr. Tab., geh. 25 s/\$ 5.45.

Das vorliegende Buch soll dem Studenten sowie dem mit Strukturuntersuchungen organischer Moleküle beschäftigten Chemiker eine erste Einführung in die Kernresonanzspektroskopie und deren Möglichkeiten, aber vor allem eine Anleitung zur praktischen Durchführung von Untersuchungen geben. Aus diesem Grunde verzichten die Autoren bewußt auf jede theoretische Ableitung.

Mit wenigen Worten werden die Grundbegriffe wie Chemische Verschiebung und Spin-Spin-Kopplung eingeführt und anhand von Beispielen anschaulich erklärt. Für tiefergehende Studien wird auf ausführliche Monographien verwiesen. Etwas ausführlicher ist der Abschnitt über die experimentelle Technik. Die Anwendung der  $^{19}\text{F}$ -,  $^{31}\text{P}$ -,  $^{14}\text{N}$ - und  $^{13}\text{C}$ -Kernresonanzen in der organischen Strukturanalyse sowie fünf gut ausgewählte Beispiele beschließen den ersten Teil.

Der zweite Teil besteht aus 37 sehr übersichtlich angeordneten Tabellen mit  $\tau$ -Werten und Kopplungskonstanten aus der neueren Literatur.

Für den Chemiker, der die Kernresonanzspektroskopie zur Bestimmung von Strukturen anwenden will, ist dieses Buch als knappe Einführung in die Methode und die experimentelle Technik sowie zur Analyse der Spektren zu empfehlen.

*H. Friebohn* [NB 665]

**High Resolution Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy.** Von *J. W. Emsley*, *J. Feeney* und *L. H. Sutcliffe*. Pergamon Press, Oxford 1965 und 1966. 1. Aufl., 2 Bände, XXIII, 1154 S., zahlr. Abb. u. Tab., Ganzl. £ 5 s 5.

Dieses zweibändige Handbuch beginnt mit einer ausführlichen Beschreibung der physikalischen Grundlagen, an die sich zwei Kapitel (zusammen 79 S.) über die Berechnung von chemischen Verschiebungen und Kopplungskonstanten mit Hilfe verschiedener Theorien anschließen. Für den Praktiker werden die einzelnen Teile eines Spektrometers behandelt, ebenso die experimentellen Methoden bei der Probenvorbereitung, bei der Standardisierung und bei der eigentlichen Messung. Diese Informationen mußte man bisher aus verschiedenen Quellen zusammensuchen und durch mündliche Überlieferung oder eigene Erfahrung ergänzen. Das reichhaltige Kapitel über Spektrenanalyse, d.h. über die Ermitt-