

- L. Brehamet, *Proc. XVI Colloq. AMPERE 1970*, 317; d) ein breites  $^{25}\text{Mg}$ -NMR-Signal der Ethylmagnesiumhalogenide wurde beobachtet: C. Brevard, P. Granger: *Handbook of High Resolution Multinuclear NMR*, Wiley, New York 1982, S. 96.
- [2] H. Lehmkuhl, *Bull. Soc. Chim. Fr. II* 1981, 87, zit. Lit.
- [3] E. C. Ashby, *Q. Rev. Chem. Soc.* 21 (1967) 259.
- [4] Der  $\delta(^{25}\text{Mg})$ -Wert dieses Standards ist weitgehend unabhängig von der Konzentration und dem  $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ -Verhältnis (L. Simeral, G. E. Maciel, *J. Phys. Chem.* 80 (1976) 552). Unterschiedliche Lösungsmittel werden über ihre  $^1\text{H}$ -NMR-Signale korrigiert, z. B.  $\delta(^1\text{H}, \text{Standard}) = 4.15$  und  $\delta(\text{THF}) = 3.58$ . Aufnahmegerät: Bruker WH400-Spektrometer mit einem multinuklearen 10 mm-Probenkopf ( $90^\circ$  Puls: 40  $\mu\text{s}$ ). Typische Aufnahmezeiten liegen im Minutenbereich.

- [5] Kryoskopisch in Benzol bestimmt.
- [6] W. Bänder, E. Weiss, *J. Organomet. Chem.* 92 (1975) 1.
- [7] A. Haaland, J. Luszyk, J. Brunvoll, K. B. Starowieyski, *J. Organomet. Chem.* 85 (1975) 279.
- [8] K. Faegri, J. Almlöf, H. P. Lüthi, *J. Organomet. Chem.* 249 (1983) 303.
- [9] S. Evans, M. L. H. Green, B. Jewitt, A. F. Orchard, C. F. Pygall, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2* 1972, 1847.
- [10] M. Stähle, M. Schlosser, *Angew. Chem.* 92 (1980) 497; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 19 (1980) 487.
- [11] D. F. Evans, G. V. Fazakerley, *J. Chem. Soc. A* 1971, 184.
- [12] W. T. Ford, J. B. Grutzner, *J. Org. Chem.* 37 (1972) 2561.
- [13] G. E. Parris, E. C. Ashby, *J. Am. Chem. Soc.* 93 (1971) 1206.

## NEUE BÜCHER

**Computeranwendungen in der Chemie.** Von K. Ebert und H. Ederer. Verlag Chemie, Weinheim 1983. IX, 359 S., geb. DM 63.00.

Fast jedes wissenschaftlich abgrenzbare Gebiet braucht in vielen Fällen die Mitwirkung eines anderen. Klassisch spricht man dann von Hilfswissenschaften – ein Wort, das etwas abwertend klingt und oftmals auch so gemeint ist. Verknüpft ein Wissenschaftler sein ursprüngliches Gebiet ganz intensiv mit dieser Hilfswissenschaft, wird er oftmals zunächst als Außenseiter abgestempelt und vielleicht auch belächelt. Doch schließlich passiert es, daß die ursprüngliche Hilfswissenschaft große Teile der originären durchdringt und völlig verwandelt. Auf dem naturwissenschaftlichen Sektor sei hier nur das Vordringen der Mathematik in die Physik oder der Chemie in die Biologie angeführt. Ebenso breiten sich in jüngerer Zeit Mathematik, Informatik und Datenverarbeitung in der Chemie aus. Theoretische Chemie ohne Mathematik und instrumentelle Hochleistungsanalytik (FT-IR, GC-MS, FT-NMR usw.) ohne Datenverarbeitung sind undenkbar. Aber auch die schon als klassisch zu bezeichnende instrumentelle Analytik (IR, UV, GC usw.) wird heute über Mikroprozessoren von der Informatik und Datenbearbeitung beherrscht. Trotzdem gibt es an deutschen Universitäten kaum Ansatzpunkte in der Ausbildung der Chemiker, diesen Aspekten Rechnung zu tragen. Im Moment muß diese Lücke durch das Fortbildungsprogramm der GDCh abgedeckt werden.

Genau in diese Ausbildungslücke hinein zielt das vorliegende Buch. Die Hürde der Erlernung einer höheren Programmiersprache (in diesem Falle BASIC) wird erfolgreich umgangen. An einfachen chemisch orientierten Beispielen wird eine didaktisch sehr geschickte Einführung in die Programmierung von Arbeitsplatzrechnern („personal computer“) gegeben. Die beispielhaften Programme sind kurz und klar aufgebaut: Kommentar, Eingabe, Berechnung und Ausgabe. Sie sind in der Mindestmenge an BASIC geschrieben, über die praktisch alle billigen Tischrechner verfügen. Allerdings wären an manchen Punkten Hinweise auf komfortablere Rechner, die zwar in der Anschaffung zunächst teuer erscheinen, aber wesentlich an Programmierzeit sparen, angebracht gewesen.

Didaktisch sehr geschickt wird der Schwierigkeitsgrad sowohl der behandelten Probleme als auch der Programmiertechnik langsam gesteigert. Numerische Integration, Gleichungen, lineare Systeme, Differentialgleichungen und nichtlineare Systeme werden besprochen. An manchen Punkten hätte man sich allerdings eine etwas kritischere Darstellung des mathematischen Sachverhaltes gewünscht. Als Beispiele seien numerische Probleme bei der Matrizen-Invertierung oder das Problem der Linearisierung von Meßdaten (wird bei der Arrhenius-Gleichung angesprochen) angeführt. In anderen Fällen (z. B. Fourier-

Reihen) hätte eine etwas ausführlichere Darstellung der Problematik dem Buch sehr genützt.

Man kann das Buch jedem Studenten der Chemie wirklich als Lehr- und Arbeitsbuch, als Einführung in das Arbeiten mit Kleinrechnern nur empfehlen. Nicht empfehlen jedoch – da ohne didaktischen Wert – kann man das bloße Abschreiben der Programme. Noch unsinniger wäre es für Lernende, die Programme auf Datenträger zu kaufen. Der unumstrittene Wert dieses Buches liegt darin, daß hier die Möglichkeit gegeben wird, sich selbständig in das faszinierende Arbeiten mit Kleinrechnern einzudenken und einzuarbeiten.

J. Hocke [NB 632]

Institut für Pharmazie und Lebensmittelchemie  
der Universität Marburg

**Vitamin B<sub>12</sub>. Vol. 1: Chemistry; Vol. 2: Biochemistry and Medicine.** Herausgegeben von D. Dolphin. Wiley-Interscience, Chichester 1982. XIV, 671 S., geb./XIV, 505 S., geb., zusammen £ 90.00.

Das vorliegende zweibändige, bisher umfangreichste Werk über Vitamin B<sub>12</sub> wird dem Anspruch, Chemie, Biochemie und Medizin dieser Verbindungsgruppe umfassend darzustellen, gerecht. Für die einzelnen, jeweils in abgeschlossenen Kapiteln behandelten Themen konnten führende Wissenschaftler als Autoren gewonnen werden.

Band 1 mit fast 600 Textseiten ist der Chemie gewidmet. Nach der historischen Einleitung (Folkers) und einem Abriss der Nomenklatur (Cohn) bietet das umfangreiche (84 S.) dritte Kapitel von J. Pickworth-Glusker über die Struktur von Corrinoiden eine Fülle zum Teil immer noch nicht an anderer Stelle veröffentlichter Daten. Die zahlreichen Abbildungen und Tabellen und die ausführliche Diskussion über Struktur-Aktivitäts-Beziehungen lassen einige kleine Schwächen auf S. 77 und 78 unerheblich erscheinen. Die eindrucksvollen Fortschritte aus der jüngsten Zeit schildern Battersby und McDonald im faszinierenden Kapitel über die Biosynthese des Corrin-Makrocyclus. Es folgt Kapitel 5 über die Biosynthese der Cobalamin-Coenzyme (Huennekens et al.). Das für ein Vitamin-B<sub>12</sub>-Buch obligate Kapitel „The Total Synthesis of Vitamin B<sub>12</sub>“ von Stevens präsentiert dieses auch schon in früheren Übersichten behandelte komplexe Projekt auf sehr informative Weise. Ebenso nützlich ist die längst fällige Zusammenfassung der reichhaltigen Chemie des Corrin-Liganden durch Bonnett; auch hier finden sich zahlreiche bisher nur in Dissertationen zugängliche Ergebnisse. Darauf folgen zwei Kapitel über Synthese (K. L. Brown) und Reaktivität (Hogenkamp) von Organocobalt-Komplexen. Dem zentralen Thema der Coenzym-B<sub>12</sub>-Chemie, der Reaktivität der Co–C-Bindung, sind besonders die Kapitel 10, 14 und 15