

gierungen und Verbindungen: Wismut (Bismut) (17 S.), Wolfram (32 S.), Zink (47 S.), Zinn (39 S.), Zirkonium (22 S.), aus der Organischen Chemie Xylole (20 S.) und Zucker, Zuckeralkohole und Gluconsäure (45 S.), aus der Lebensmitteltechnologie Rüben- und Rohrzucker (46 S.) und Wein (50 S.) sowie folgende anwendungsorientierte Produkte und Produktgruppen: Wachse (49 S.), Wachstumsregulatoren (11 S.), Weichmacher (32 S.), Wolle (18 S.) und Zündhölzer (10 S.).

Auch in diesem Band besticht wieder die übersichtliche und klare Art der Darstellung. Beim Blättern ist man immer wieder erstaunt, wieviel Detailwissen hier mit großer Sorgfalt zusammengetragen wurde. Selbstverständlich erwartet man, in einem lexikalischen Werk wie dem Ullmann den aktuellen Wissensstand zu finden. Daß auch der vorliegende Band dieser Forderung gerecht wird, zeigt schon die Tatsache, daß die Literaturlisten zu fast jedem Stichwort noch Zitate aus dem Jahr 1983 enthalten. Zwangsläufig sind die ersten Bände der jetzigen Auflage, die 1974 herausgekommen sind, wegen der Schnelligkeit der technischen Entwicklung nicht mehr ganz aktuell, und so hat der Verlag auch schon die nächste, also die 5. Auflage angekündigt, die im Unterschied zur jetzigen in Englisch erscheinen wird.

*Ulfert Onken* [NB 655]

Abteilung Chemietechnik  
der Universität Dortmund

**NMR and Chemistry. An Introduction to the Fourier Transform – Multinuclear Era.** 2. Aufl. Von J. W. Akitt. Chapman and Hall, London 1983. XIII, 263 S., Paperback £ 7.95.

Die vorliegende Einführung in moderne NMR-Methoden wendet sich vorwiegend an Studenten der Chemie und verwandter Naturwissenschaften sowie an NMR-Spektroskopiker in der Industrie.

In der ersten Hälfte des Buches werden in sechs Kapiteln die Grundlagen der hochauflösenden NMR-Spektroskopie gelöster Verbindungen in sehr anschaulicher Weise dargestellt. Hierzu gehören neben den physikalischen Hintergründen (Kapitel 1) die wichtigen NMR-Parameter chemische Verschiebung (Kapitel 2), Spin-Spin-Kopplung (Kapitel 3) und Relaxation (Kapitel 4). Gut gefällt, daß in diesen Abschnitten nicht nur auf Beispiele mit Protonen und Kohlenstoff-13 zurückgegriffen wird, sondern bereits die NMR-Eigenschaften anderer Kerne wie  $^{11}\text{B}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{17}\text{O}$ ,  $^{19}\text{F}$  und  $^{31}\text{P}$  gestreift werden. Das dritte Kapitel über die Analyse von Spinsystemen ist zugleich eine gelungene Einführung in die Spektreninterpretation und kommt weitgehend ohne Formeln aus. Ebenso gefällt der Abschnitt über Relaxation, da alle wesentlichen Phänomene klar dargestellt werden. Die Behandlung von Austauschphänomenen und instrumentellen Details an dieser Stelle mag jedoch manchen Leser etwas verwirren, zumal ein modernes Spektrometersystem erst im fünften Kapitel vorgestellt wird. Im sechsten Kapitel werden Anforderungen an die Beschaffenheit der Proben sowie Probleme bei der Standardisierung von Spektren besprochen.

Im zweiten Teil des Buches befaßt sich der Autor mit aufwendigeren NMR-Techniken und bringt Anwendungsbeispiele der multinuklearen NMR-Methoden. Infolge der rasanten Entwicklung in der Pulsspektroskopie sind jedoch viele der im siebten Kapitel erwähnten Doppelresonanzmethoden heute bereits überholt. Hier wäre eine ausführlichere Behandlung der  $^{13}\text{C}$ -NMR-Spektroskopie wünschenswert. Erfreulich wiederum ist, daß auch neueste NMR-Techniken (Kapitel 8) erwähnt werden. Als beson-

ders gelungen ist die kurze Vorstellung von Festkörper- und in-vivo-NMR-Methoden anzusehen. Bei der zweidimensionalen NMR-Spektroskopie ist die Wahl des Anwendungsbeispiels hingegen weniger glücklich; hier vermißt man die in der Praxis doch so bedeutenden Verschiebungskorrelationsdiagramme, aus denen sich die Verknüpfungen der C- und H-Atome in organischen Gerüsten vorinformationsfrei ableiten lassen. Im letzten Kapitel werden unmittelbare chemische Anwendungen diskutiert. Neben  $^1\text{H}$ - und  $^{13}\text{C}$ -Untersuchungen wird die chemische Relevanz der  $^7\text{Li}$ -,  $^{23}\text{Na}$ -,  $^{11}\text{B}$ -,  $^{27}\text{Al}$ -,  $^{15}\text{N}$ -,  $^{31}\text{P}$ -,  $^{17}\text{O}$ - und  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektroskopie anhand von Beispielen demonstriert. Im Anhang finden sich 18 kürzere Übungsaufgaben mit ihren Lösungen, ein allerdings zu knappes Literaturverzeichnis sowie das Stichwortverzeichnis.

Das Buch ist wertvoll für denjenigen, der sich einen Einblick in die hochauflösende NMR-Spektroskopie verschaffen möchte. Seine Stärken liegen in einer anschaulichen Darstellung der NMR-Phänomene. Dagegen ist das für den Spektroskopiker notwendige Vergleichsdatenmaterial äußerst knapp bemessen. Für Studenten, die bei ihrer Diplom- oder Doktorarbeit mit NMR-Spektroskopie in Berührung kommen, kann dieses preiswerte Buch bestens empfohlen werden.

*Reinhard Benn* [NB 648]

Max-Planck-Institut für Kohlenforschung  
Mülheim a. d. Ruhr

**Lecture Notes in Chemistry. Vol. 34: Unified Valence Bond Theory of Electronic Structures. Applications.** Von N. D. Epotis. Springer-Verlag, Berlin 1983. VIII, 585 S., Paperback, DM 96.00.

Das Gesamtwerk von Epotis über die Theorie der chemischen Reaktivität verdient Respekt: Es ist mutig, umfangreich und breit anwendbar, und es verzichtet auf traditionelle Standpunkte. Der Autor hält die am weitesten verbreitete quantenchemische Methode, die qualitative Ein-Determinanten-MO-Methode, für nicht ausreichend, und nutzt in geschickter Weise geeignete Bestandteile der beiden grundlegenden quantenchemischen Methoden, der Molekülorbital- und der Valenzbindigmethode. Sein Verfahren ermöglicht es, höchst unterschiedliche Probleme der chemischen Reaktivität im elektronischen Grundzustand und im angeregten Zustand zu analysieren. Die theoretische Begründung des Epotis-Verfahrens war Thema des 29. Bandes der Reihe. Mit diesem Verfahren lassen sich Beziehungen erkennen, die unerwartet oder zumindest nicht offensichtlich sind. Der Anwendungsbereich der Theorie ist sehr groß. Dies spiegelt sich in den Kapitelüberschriften wider, zum Beispiel: Warum haben Organolithium-Verbindungen seltsame Strukturen? Konformationsisomerie von  $\text{N}_2\text{H}_4$  und seinen Derivaten. Die Legende von „hypervalenten“ Molekülen. Warum bevorzugt Benzol die Substitution, ein Olefin dagegen die Addition? Grenzkonfiguration und eine neue Klassifizierung von Annulen. Qualitative Erklärung und Voraussage von „Korrelationseffekten“ in Molekülen mit „komplexem“ Grundzustand. Der Autor analysiert diese und zahlreiche andere Probleme in einer Weise, die formale Ähnlichkeit mit den Verfahren von Woodward und Hoffmann, Longuet-Higgins sowie Abrahamson hat; das Niveau der Verfeinerung liegt jedoch höher und entspricht dem der Konfigurations-Wechselwirkung. Alles dies ist ohne Zweifel sehr attraktiv.

Ich fürchte jedoch, daß trotz dieser positiven Aspekte Schwierigkeiten auftreten können, wenn man versucht, mit der Epotischen Theorie zu arbeiten. Es genügt nämlich

nicht, das neue Verfahren zur Kenntnis zu nehmen; um es sinnvoll anzuwenden, muß man es auch beherrschen. Leider wird es sogar guten Chemikern, die neuen Theorien gegenüber aufgeschlossen sind, zu aufwendig sein. Natürlich sind Chemiker imstande, auch mit noch komplizierteren Konzepten und Theorien umzugehen. Diese führen jedoch häufig zu numerischen Werten, die für Korrelationen nützlich sind oder mit denen sich sogar absolute physikalische Daten berechnen lassen. Auf der anderen Seite sind einfache, billige und effektive Hilfsmittel, wie sie von *Woodward* und *Hoffmann* sowie von *Fukui* eingeführt wurden, ebenfalls zuverlässig und breit anwendbar (wenn auch nicht so breit wie die vorliegende Theorie). Ungeachtet dieser Einwände ist das Epitoxis-Verfahren ein bedeutender Beitrag. Man sollte nicht zögern, das Buch zu lesen.

Rudolf Zahradník [NB 647]

J.-Heyrovský-Institut für Physikalische Chemie  
und Elektrochemie,  
Tschechoslowakische Akademie der Wissenschaften, Prag

**Environmental Carcinogens: Polycyclic Aromatic Hydrocarbons.** Von G. Grimmer. CRC Press, Boca Raton, FL, USA 1983. 261 S., geb. \$ 81.50.

Das vorliegende Buch, an dem 13 Autoren mitgewirkt haben, ist unter der Leitung von G. Grimmer, einem international anerkannten Experten auf dem Gebiet der Analytik polycyclischer aromatischer Kohlenwasserstoffe (PAKs), entstanden und faßt in acht Kapiteln den derzeitigen Wissensstand über PAKs als Umweltcancerogene zusammen. Es ist im wesentlichen eine aktualisierte Übertragung der „Luftqualitätskriterien für ausgewählte polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe“ (Umweltbundesamt, Berlin 1979) in die englische Sprache.

Nach einem Vorwort von H. von Lersner und einer kurzen Einführung von D. Schmähle wird im ersten Kapitel (G. Grimmer und J. Misfeld) ein Überblick über die Strategie zur Identifizierung von PAKs als Umweltcancerogene gegeben. Das zweite Kapitel, aus der Feder des Herausgebers, bietet neben einer ausführlichen Einführung in die Nomenklatur die Erörterung mechanistischer Aspekte der Entstehung von PAKs durch unvollständige Verbrennungsprozesse und gibt einen Einblick in das umfangreiche Gebiet der PAK-Analytik. Im einzelnen werden folgende Methoden diskutiert: 1. Extraktion von PAKs aus Umweltproben von Fetten, Ölen, Eßwaren, Ruß und Wasser, 2. Anreicherungsverfahren wie Flüssig-Flüssig-Verteilung und Chromatographie an festen Trägern, 3. Trennverfahren, insbesondere qualitative und quantitative Bestimmungen mit GC-, TLC- und HPLC-Techniken. Das dritte Kapitel (G. Grimmer) ist dem Vorkommen von PAKs in der Umwelt gewidmet. Nach einer detaillierten Darstellung der PAK-Profilen in Abhängigkeit von den Erzeugungsprozessen (Haushaltsfeuerungen, Kraftfahrzeuge, Zigarettenrauch) werden dem Leser in übersichtlicher Form ausführliche Informationen über die Belastung von Luft, Boden, Erdöl, Klärschlamm und geräucherten Nahrungsmitteln mit PAKs gegeben. Im vierten Kapitel wird nach einer Beschreibung der Aufnahme und der Verteilung von PAKs im Organismus (F. Pott und G. Oberdörster) ihr Metabolismus (G. Grimmer und J. Jacob) behandelt. Es werden sowohl die wichtigsten Metabolitklassen wie Phenole, Arenoxide, Catechol, Dihydrodiol und Dihydrodiolepoxide – die heute als die eigentlich cancerogenen Substanzen diskutiert werden – als auch die fremdstoffmetabolisierenden Enzyme (Monooxygenasen, Epoxid-Hydrolase, Glutathion-Transferasen, Sulfo-Transferasen und UDP-Glucuronosyl-Transferasen) vorgestellt. Das fünfte und

längste Kapitel (D. Schmähle et al.) befaßt sich mit den Testsystemen zur Prüfung der biologischen Aktivität von PAKs. Es werden sowohl Kurzzeittests (Ames-Test, Zelltransformationstests und Talgdrüsenschwundtest) mit ihrem Voraussagewert für die cancerogene Wirkung von PAKs diskutiert als auch Langzeittests am Tiermodell (Unterscheidung nach Applikationsort) in einer gut gegliederten Übersicht vorgestellt. Es folgt im sechsten Kapitel (J. Misfeld) nach einer allgemeinen Abhandlung über die Problematik epidemiologischer Untersuchungen eine kritische Darstellung von Studien, die sich dem Thema „Lungenkrebs und Luftverunreinigung“ unter besonderer Berücksichtigung von PAKs widmen. Im siebten Kapitel (D. Schmähle) wird ausführlich die Frage der Übertragbarkeit experimenteller Ergebnisse von Kurz- und Langzeittests auf den Menschen diskutiert. Das letzte Kapitel (S. Dobbertin) gibt eine „Quintessenz“ aus den vorangegangenen Kapiteln insbesondere im Hinblick auf die Diskussion über Immissionsbegrenzungen von PAKs.

Ein Register erleichtert das Auffinden von Informationen auf diesem interdisziplinären Forschungsgebiet sehr. Jedes Kapitel enthält ein Literaturverzeichnis. Allerdings ist die Literatur nur bis 1979 (vereinzelt bis 1980/81) berücksichtigt. Für eine zweite Auflage ist neben der Beseitigung einiger Druckfehler – z. B. sind in Kapitel 8 die Konzentrationen für Benzo[a]pyren in der Luft in ng/cm<sup>3</sup> statt in ng/m<sup>3</sup> angegeben – auch eine Korrektur der Abbildung auf S. 149 und des im Text auf S. 138 aufgeführten Verweises auf Figur 47 zu empfehlen. Das vorliegende Buch füllt ohne Zweifel eine Lücke und wird für jeden Toxikologen und Wissenschaftler, der sich mit polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen beschäftigt, eine reichhaltige Fundgrube sein. Der Informationsgehalt des aus vielen Teildisziplinen der Toxikologie exzellent zusammengestellten Buches rechtfertigt den überdurchschnittlich hohen Preis.

Albrecht Seidel [NB 646]  
Institut für Toxikologie  
der Universität Mainz

### Neuerscheinungen

Die im folgenden angezeigten Bücher sind der Redaktion zugesandt worden. Nur für einen Teil dieser Werke können Rezensionen erscheinen, da die Seitenzahl, die dafür zur Verfügung steht, begrenzt ist. Alle aufgeführten Werke können über W & P Buchversand für Wissenschaft und Praxis, Boschstraße 12, D-6940 Weinheim, bezogen werden. Tel. (06201) 606-0, Telex 465 516 vchwh d, Telefax (06201) 602 328.

**Identification and Analysis of Organic Pollutants in Air.** Herausgegeben von L. H. Keith. Butterworth Publishers, London 1984. XXI, 486 S., geb. £ 55.00. – ISBN 0-250-40575-X

**Plasma Chromatography.** Herausgegeben von T. W. Carr. Plenum Publishing Corporation, New York 1984. XIII, 259 S., geb. \$ 37.50. – ISBN 0-306-41432-5

**Advances in Infrared and Raman Spectroscopy. Vol. 11.** Herausgegeben von R. J. H. Clark und R. E. Hester. John Wiley, Chichester 1984. XIX, 383 S., geb. £ 49.50. – ISBN 0-471-26267-6