

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}B , ^{15}N , ^{17}O , ^{19}F und ^{31}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}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 ^1H - und ^{13}C -Untersuchungen wird die chemische Relevanz der ^7Li -, ^{23}Na -, ^{11}B -, ^{27}Al -, ^{15}N -, ^{31}P -, ^{17}O - und ^{19}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 N_2H_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