

schwierig macht, auf dem aktuellen Stand der Gesetzgebung und Richtlinien zu bleiben.

Axel Kretschmer
Bayer AG, Wuppertal

Resumé:

Die detaillierten Besprechungen der vier Bände zeigten, daß die ersten drei in Form und Inhalt den selbst gesetzten hohen Ansprüchen genügen. Konzeptionell bilden diese Bände eine logische Einheit; sie können jedoch auch ohne Abstriche einzeln als Handbücher empfohlen werden. Für den vierten Band muß bereits jetzt eine Aktualisierung der Beiträge gefordert werden.

[NB 786]

Applications of Dynamic NMR Spectroscopy to Organic Chemistry. Von M. Oki. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1985. XII, 423 S., geb. DM 208.00. – ISBN 3-527-26166-4

Warum wird ein neues Buch über dynamische NMR-Spektroskopie veröffentlicht, wenn doch, neben einer Reihe von Übersichtsartikeln, bereits drei Titel in Buchform erschienen sind: das Standardwerk von Jackman und Cotton (1975), das eher theoretisch ausgerichtete Buch von Kaplan und Fraenkel (1980) und die jüngste Publikation von Sandström (1983), eine Einführung in die DNMR-Analyse. Der Titel des vorliegenden Bandes kündigt Anwendungen in der Organischen Chemie an. Reicht der Inhalt aus, um eine neue Publikation zu rechtfertigen?

Ein einführender Abschnitt beschreibt das Phänomen der Austauschverbreiterung von NMR-Signalen, zeigt dann Methoden (vor allem Näherungen), mit denen Geschwindigkeitskonstanten ermittelt werden, und führt typische Beispiele für Mechanismen an, die zum Spin-Austausch führen können. Als nächstes werden Rotationen um Bindungen (von sp^2-sp^2 bis sp^3-sp^3) ausführlich vorgestellt (fünf Kapitel). Es folgen Abschnitte über flexible Konformationen bei Ringen, über die Inversion und Rotation von Aminen und Iminen sowie über Anwendungen auf das Studium chemischer Reaktionen.

Sicher kann eine derartige Zusammenstellung heute nicht mehr vollständig sein. Doch wurde hier immerhin eine erstaunliche Vielfalt von Beispielen aus den unterschiedlichsten Bereichen der Organischen Chemie zusammengetragen. Das entspricht dem gegenwärtigen Stand der DNMR-Spektroskopie; es gibt kaum noch prinzipielle Neuerungen, und sie ist zu einem wichtigen Werkzeug des Chemikers geworden. Das Buch erfüllt seinen Zweck, da es dem Leser die Augen für mögliche Anwendungen in der eigenen Forschung öffnet und gleichzeitig als Nachschlagewerk für die Literatur bis etwa 1983 dienen kann.

Dennoch vermißt man einige Themen, z. B. Ligandenpermutationen an Zentralatomen, DNMR-Phänomene in Festkörpern, Hinweise auf die mechanistischen Aussagemöglichkeiten in Multisite-Exchange-Systemen oder 2D-DNMR-Techniken. Auch wird die Computersimulation der Spektren sehr kurz abgehandelt, während Näherungslösungen im Eingangskapitel immerhin sechs Seiten gewidmet sind. Das unterschätzt doch etwas die Flexibilität eines Organikers in der Adaptation neuer Techniken.

Eine Reihe von sprachlichen Ungenauigkeiten fallen bei der Durchsicht auf. So heißt es z. B. im Eingangskapitel „... , the lifetime of a nucleus in one site, ... , is a function of the external magnetic field.“ Das kann nicht sein; gemeint ist: die untere Grenze von Halbwertszeiten, bei de-

nen austauschende Kerne noch getrennt beobachtet werden können, ist eine Funktion des Magnetfeldes. Später werden die diastereotopen CH_2 -Protonen in einem Molekül $XYZC-CH_AH_BW$ betrachtet und die drei möglichen staggered Konformationen abgebildet. Es folgt "If the free energies of the three conformations are equal, it will be seen readily that the magnetic environments of H_A and H_B are completely equivalent on the average because ...". Das ist nicht richtig; diastereotopie Protonen bleiben diastereotop; die Verschiebungsdifferenz zwischen H_A und H_B kann je nach Population der Konformere sehr klein oder praktisch null werden, gleiche Energie der Konformere ist dafür aber weder notwendig noch hinreichend.

Diese kritischen Anmerkungen sollen nicht den positiven Gesamteindruck des Buches verwischen. Zunächst meint man ein nützliches Literaturkompendium vor sich zu haben, dann beginnt vielleicht ein einzelnes Thema zu fesseln, und zuletzt bleibt die gelungene Aufforderung, nicht die Augen vor den Möglichkeiten der DNMR-Spektroskopie in der eigenen Forschung zu verschließen.

Martin Feigel [NB 748]

Institut für Organische Chemie der
Universität Erlangen-Nürnberg

Chemistry of Hydrocarbon Combustion. Von D. J. Hucknall. Chapman & Hall, London 1985. VIII, 415 S., geb. £ 39.50. – ISBN 0-412-26110-3

Die Fragestellungen und Untersuchungsmethoden in der Chemie der Kohlenwasserstoff(KW)-Verbrennung sind analytischer Natur. Die Fragen sind: Über welche Reaktionstypen und Zwischenstufen läuft die Verbrennung ab? Wie schnell sind die einzelnen Reaktionsschritte? Wie beeinflussen sie sich hinsichtlich Stoff- und Energieumsatz gegenseitig? Antworten darauf möchte das vorliegende Buch geben. Es läßt sich etwa in drei Abschnitte gliedern:

1. Vorstellung der Produkte, die durch Oxidation oder thermische Zersetzung von KW bei unterschiedlichen Brennbedingungen gebildet werden können (Kapitel 1, 2 und zum Teil 6).
2. Beschreibung des Handwerkszeugs des Verbrennungschemikers nach „hardware“ (Untersuchungsmethoden und Apparate) und „software“ (Reaktionsmechanismen und Geschwindigkeitskonstanten) getrennt.
3. Versuch, den gesamten Verbrennungsvorgang und seine makroskopischen Phänomene aus dem Mechanismus und den kinetischen Daten mit Hilfe eines Computers zu simulieren und zu verstehen.

Der erste Themenkreis wird weitgehend unter historischen Aspekten behandelt. Den Ergebnissen für verschiedene Brennstoffe folgen die zur KW-Oxidation vorgeschlagenen Theorien der zwanziger und dreißiger Jahre. Gemeinsamkeiten der Verbrennung verschiedener KW (Induktionszeiten, autokatalytisches Verhalten, negativer Temperaturkoeffizient etc.) werden aufgezeigt und wichtige Stationen der theoretischen Interpretation (OH-Chemie, Semenows Reaktionskettenverzweigung, Peroxid-Theorie) erläutert. Die Entwicklung hochempfindlicher Analysenmethoden (Massenspektrometrie, Gaschromatographie) einerseits und die Einführung der Kurzzeit-Meßmethoden andererseits spiegelt sich wider in der Fülle der analytischen Daten und der detaillierter werdenden Vorschläge zu Reaktionsmechanismen aus den sechziger und siebziger Jahren (Kapitel 2). Bei diesem historisch orientierten Vorgehen nimmt der Autor in Kauf, daß ohne