

schungsgebiet. Es ist sicherlich auch geeignet, die Neugier derer zu wecken, die mit der Thematik nicht vertraut sind, und eine gute Grundlage für eine einführende Lehrveranstaltung im fortgeschrittenen Studium. In diesem Zusammenhang ist auch der niedrige Preis des Taschenbuches hervorzuheben. Das Sachregister enthält die wichtigsten Stichwörter. Zusammenfassend ist dem Buch daher nur noch eine große Verbreitung zu wünschen.

Arnd Vogler [NB 929]

Institut für Anorganische Chemie der
Universität Regensburg

Strukturaufklärung mit moderner NMR-Spektroskopie. Ein Übungsbuch. Von H. Duddeck und W. Dietrich. Steinkopff Verlag, Darmstadt 1988. 197 S., paperback, DM 48.00. – ISBN 3-7985-0760-0

Laboratory Guide to Proton NMR Spectroscopy. Von S. A. Richards. Blackwell Scientific Publications, Oxford 1988. 229 S., paperback, £ 10.50. – ISBN 0-632-02015-6

NMR-Spektroskopie ist ohne Zweifel die Methode zur Aufklärung der Struktur organischer Verbindungen. Die Bedeutung der NMR-Spektroskopie bei der Strukturermittlung wird in Zukunft sicher noch zunehmen, wozu insbesondere die Entwicklung der zweidimensionalen NMR-Methoden beitragen wird. Einerseits gilt es nach wie vor, den Anfänger an das Verständnis der NMR-Spektroskopie heranzuführen, andererseits ist es wichtig, das Know-how über die modernen NMR-Verfahren zu vermitteln. Das Buch von Richards widmet sich der ersten, das von Duddeck und Dietrich der zweiten Aufgabe.

Beide Bücher verzichten auf Mathematik und rotierende Kreisel – das Buch von Richards, weil es sich laut Titel pragmatisch als „laboratory guide“ versteht, als anschauliche Beschreibung dessen, was hinter Aufnahme und Interpretation von NMR-Spektren steckt, das Buch von Duddeck und Dietrich, weil es zeigen will, daß man auch ohne physikalischen Hintergrund mit relativ einfachen „Rezepten“ Strukturinformationen aus 2D-Spektren entnehmen kann.

Richards, ein Praktiker der ^1H -NMR-Spektroskopie, wendet sich an den Anfänger auf diesem Gebiet. Das Buch erklärt, wie man an einem Continuous-Wave-Spektrometer ein Protonen-NMR-Spektrum aufnimmt, wie man es interpretiert und welche Maßnahmen man ergreifen kann, falls eine eindeutige Interpretation im ersten Anlauf nicht möglich war. Das erste Kapitel („Basic Theory“; 13 S.) erläutert die Ursachen der chemischen Verschiebung, der Spin-Spin-Kopplung und der Integrale. Das Kapitel „Sample Preparation“ (8 S.) beschreibt geeignete Solventien und deren NMR-Eigenschaften. Im anschließenden Kapitel „Running your Spectrum“ (7 S.) findet ein Student, der zum ersten Mal vor einem CW-Spektrometer sitzt, die wichtigsten Hinweise zu Shimmen, Phasen-Optimierung und Integration. Es folgt das mit 53 Seiten umfangreichste Kapitel über die Interpretation von ^1H -NMR-Spektren. Mit Hilfe von Tabellen und Beispielen wird gezeigt, wie man austauschbare Protonen und Protonen in Arenen, Heterocyclen, Olefinen und an gesättigten Zentren zuordnet.

Ich kann mir gut vorstellen, daß die Absicht des Autors, die betreffenden Phänomene „anschaulich“ darzustellen, einen Studenten der unteren Semester dazu anregt, sich erstmals eigenständig mit der NMR-Spektroskopie auseinanderzusetzen. Die typische lockere Art und Weise, in der angelsächsische Autoren über Wissenschaft zu schreiben verstehen, sichert eine entspannte Lektüre.

Die anfängliche Lesefreude schwindet jedoch nach und nach (so z. B. auf Seite 68: die Olefine müssen *ungleiche* Substituenten R^1 und R^2 enthalten, oder auf Seite 75: die größte Entschirmung β zu einem Substituenten verzeichnet man *nicht* beim Ammoniumrest). Man stößt zunehmend auf schlichtweg falsche Feststellungen. *cis,trans*-isomere Olefine lassen sich *nicht* am einfachsten durch ^{13}C -NMR-Spektroskopie unterscheiden (S. 69), und die „verzerrten Triplets (!)“ im Spektrum auf Seite 73 werden nicht durch Anisochronie hervorgerufen (die betreffenden Protonen sind enantiotop), sondern sind eine Konsequenz des vorliegenden Spinsystems höherer Ordnung; auch zeigt *N*-Acetyl-*N,N*-diphenylamin entgegen der Feststellung auf Seite 76 nicht zwei, sondern nur ein Methylsignal.

Diese Tendenz setzt sich leider im fünften Kapitel („Delving deeper“; 45 S.) fort. Aus dem „Triplet“ des X-Teils von Spektrum 18 B (H_A und H_B stark gekoppelt) darf man nicht die Gleichheit von $J_{\text{A,X}}$ und $J_{\text{B,X}}$ folgern. Die Behauptung (S. 89), es sei dem Zufall (in Wirklichkeit: Enantiotopie) zu verdanken, daß die Protonen e und b in Spektrum 20 kein ABX-Signal verursachen, trifft nicht zu; auch die Methylresonanzen von Dimethylformamid sind falsch zugeordnet (S. 102). Ärgerlich sind Ungereimtheiten wie die wiederholte Verwechslung der Begriffe „chemisch äquivalent“ und „isochron“ wie in den „accidentally chemically equivalent“ Protonen von Seite 83, oder die Einführung von „full chiral centres“ (S. 89). Auch didaktisch wurde gesündigt. AB-Spektren werden besprochen, ohne daß der AX-Fall erörtert wird (S. 82), und der Begriff der diastereotopen Protonen wird ohne Stereoformel eingeführt (S. 89). Ärgerlich ist auch, daß einige Spektren nur ungenügend veranschaulichen, was sie eigentlich zeigen sollten, wie z. B. auf Seite 88, wo die chemischen Verschiebungen der Methylgruppen in Diastereomeren sich nur um den Hauch eines ppm unterscheiden, oder auf Seite 90, wo ein Anfänger sich gewiß schwer tut, trotz der Signalüberlagerungen noch die Anisochronie der diastereotopen Methylenprotonen zu erkennen.

Die nachfolgenden Kapitel „Further Techniques – Chemical“ (21 S.) und „Further Techniques – Instrumental“ (36 S.) sind passagenweise zu wenig zusammenhängend, um die hier vorgestellten komplexeren Techniken begreiflich zu machen (NOE, 2D-Spektroskopie). Auch in einem locker geschriebenen Text sollte man außerdem vermeiden, von „chiral resolving agent“ statt „chiral solvating reagent“ (S. 143), von „chiral centre of unknown rotation“ (S. 146) oder von „rotameric signals“ (S. 156) zu sprechen.

So muß der Leser eine lange Durststrecke überwinden, bis er im abschließenden Kapitel „Questions“ 20 Spektroskopieprobleme bearbeiten kann. Diese Aufgaben sind anregend. Trotzdem muß bezweifelt werden, ob der erkennbare Enthusiasmus des Autors den Kauf dieses Buches rechtfertigt. Etliche Spektren darin sind interessant, und man spürt das Reservoir strukturell vielfältiger Moleküle, die in einem Industriebetrieb im Laufe der Jahre anfallen; den spektroskopischen Hintergrund jedoch erfährt man andernorts besser.

Das Buch von Duddeck und Dietrich richtet sich an den Fortgeschrittenen, denn Routine im Umgang mit konventionellen ^1H - und ^{13}C -NMR-Spektren ist Voraussetzung zum gewinnbringenden Umgang mit diesem Buch, das als Übungsbuch gedacht ist. „Übung macht den Meister“ gilt insbesondere in der NMR-Spektroskopie, und die zweidimensionalen Varianten sind davon natürlich nicht ausgenommen.

Andere Abhandlungen über diese Thematik beschäftigen sich im allgemeinen zunächst mit den physikalischen

Grundlagen der 2D-NMR-Spektroskopie. Deren Komplexität erzeugt jedoch beim Leser schnell das Gefühl, daß die Interpretation von 2D-NMR-Spektren von mindestens gleicher, wenn nicht größerer Komplexität sein muß.

Im vorliegenden Buch verstehen es die Autoren hervorragend, mit diesem Eindruck aufzuräumen. Sie zeigen, daß *rezeptähnliche Faustregeln* genügen, um aus 2D-Spektren Informationen zu extrahieren, die man aus 1D-Spektren nur mit ungleich größerem Zeitaufwand oder überhaupt nicht hätte gewinnen können! Und wie könnte man mit Vorurteilen über den „komplizierten“ *Gebrauch* von 2D-Spektren schneller aufräumen als dadurch, daß man es einmal selbst versucht?!

Die „Rezepte“ zur Auswertung von fortgeschrittenen 1D-Experimenten (DEPT, homo- und heteronucleare NOE-Differenz-Spektren) und 2D-Experimenten (H,H-COSY, H,C-COSY, COLOC, 2D-INADEQUATE) werden auf 24 Seiten vorgestellt und an Beispielen erläutert. Danach kommt der Sprung ins kalte Wasser, denn auf den folgenden 96 Seiten gilt es, das Gelernte anzuwenden. Für 20 Verbindungen sollen Strukturen ermittelt, Fragen nach der Stereochemie beantwortet oder eine Vorzugskonformation aufgespürt werden. „Gelobt sei, was hart macht“ mutet vielleicht wie das Motto an, nach dem die Autoren ihre Übungsbeispiele auswählten: Zweifellos sind hier Nüsse zu knacken! Man merkt jedoch schnell, mit wieviel didaktischem Geschick diese Verbindungen ausgewählt wurden. Dem Leser wird immer wieder vor Augen geführt, wieviele Aussagen durch geschickte Kombination der verschiedenen Spektrentypen ermöglicht werden. Aufgabe für Aufgabe wird ein Gefühl dafür vermittelt, wie hoch heutzutage der „state-of-the-art“ der Strukturaufklärung durch NMR-Spektroskopie liegt. Das Schöne an diesen Übungsbeispielen ist meines Erachtens insbesondere die *Vielfalt* der Molekülstrukturen. Von exotischen Kohlenwasserstoffen über Adamantane, Aminosäuren, Glycoside, Steroide, Alkaloide und synthetische Heterocyclus sind die verschiedensten Substanzklassen vertreten. Hier kommt garantiert keine Langeweile auf!

Ein ausführlicher Antwortteil ermöglicht es dem Leser, seine Lösung mit der der Autoren zu vergleichen. Die schwierige Aufgabe, eine logische, lückenlos zusammenhängende Interpretation aller Spektren zu liefern, haben die Autoren mit großem Erfolg bewältigt. In Lösung 12 wird ein Verfahren zur Dokumentation der Ergebnisse von 2D-Spektren vorgeschlagen, das mancher als ebenso nützlich und nachahmenswert empfinden wird wie der Rezensent.

Die Autoren drängen den Leser vernünftigerweise, sich nicht vorzeitig um das Erfolgserlebnis einer *selbständigen* Spektreninterpretation zu bringen. Deshalb wurde zwischen Aufgaben- und Antwortteil ein Kapitel „Lösungsstrategien“ eingeschaltet, das den voreilig Aufgebenden mit wenigen allgemeinen Interpretationshinweisen im wesentlichen wieder auf die Originalfrage zurückverweist. Der Wert dieses Kapitels mag eher darin liegen, dem Leser noch einmal Mut zu machen.

In Anbetracht der Möglichkeiten, die das hier offengelegte methodische Arsenal der 2D-NMR-Spektroskopie offeriert, wird mancher Leser im Nachhinein sagen können, daß das eine oder andere Problem bei der Strukturermittlung leichter zu lösen sein wird als bisher. Und damit wäre eine Voraussetzung für die Dinge geschaffen, die dieses Buch hoffentlich bewerkstelligen wird: Erstens, als Plädoyer für die Verbreitung hochentwickelter NMR-Meßmethoden an *allen* deutschen Universitäten zu wirken (wo – außer natürlich noch in Marburg! – hat man heute routinemäßig Zugriff zu derartigen Spektren?), und zweitens, ei-

nen Standard dafür zu setzen, was die Lehre heutzutage dem Organiker an spektroskopischem Rüstzeug mit auf den Weg geben sollte. Auf diesem Gebiet dürfte überall ein beträchtlicher Nachholbedarf bestehen.

Lediglich der Vollständigkeit halber seien noch einige Kritikpunkte angeführt: Bei Aufgabe 5 wäre ein Integral in den Spreizungen des ¹H-NMR-Spektrums hilfreich; in Formel 15 auf Seite 64 (die Formelnummer fehlt übrigens) ist die Konfiguration an C-10 und C-13 falsch; das gleiche gilt für die Konfiguration an C-10 der linken Formel von Verbindung 16 auf Seite 157. Auf Seite 159 wird versehentlich mehrfach auf Abbildung 3.11.4 statt 3.11.2 verwiesen. Im Sinne einer Weiterverbreitung der Anwendung von 2D-NMR-Spektren wäre es instruktiv, bei den abgebildeten 2D-Spektren jeweils den Substanzbedarf sowie die Meß- und Rechenzeit anzugeben.

Das Positive an diesem Buch dominiert jedoch so stark, daß man diese Kritikpunkte eigentlich in Klammern setzen sollte.

Reinhard Brückner [NB 922]
Fachbereich Chemie
der Universität Marburg

The Art of Scientific Writing. From Student Reports to Professional Publications in Chemistry and Related Fields. Von H. F. Ebel, C. Bliefert und W. E. Russey. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York 1987. 493 S., geb. DM 98.00. – ISBN 3-527-26469-8; 0-89573-495-8; kartoniert, DM 48.00. – ISBN 0-527-26677-1; 0-89573-645-4

Während der letzten 40 Jahre hat sich (amerikanisches) Englisch als international anerkannte Wissenschaftssprache etabliert. Erstrebt man als Wissenschaftler internationale Anerkennung, so muß man in Englisch publizieren. Das vorliegende Buch, eine wesentlich erweiterte Übersetzung eines deutschen Vorläufers, trägt dieser Entwicklung Rechnung.

„The Art of Scientific Writing“ ist am ehesten als Handbuch zu bezeichnen, das dem Wissenschaftler bei allen Aspekten des Schreibens und Publizierens Anleitung und Orientierungshilfe bietet. Das Buch wendet sich zwar hauptsächlich an Chemiker, doch dürfte es auch für andere Naturwissenschaftler von großem Nutzen sein, sofern nicht fachbezogene Informationen erwartet werden.

Die Verfasser haben ihr Buch so gestaltet, daß es als Beispiel einer Umsetzung der darin behandelten formalen und inhaltlichen Aspekte angesehen werden kann. Es ist mit zahlreichen Querverweisen und einem detaillierten Register versehen. Durch die allzu häufige Verwendung von Fußnoten wird jedoch oft der Lesefluß beeinträchtigt. Ausgezeichnet ist die Literaturliste am Ende des Buches.

„The Art of Scientific Writing“ besteht aus zwei Teilen sowie einem in elf Kapitel gegliederten Anhang, einer Literaturliste und einem Register. Teil 1 befaßt sich mit den verschiedenen Arten naturwissenschaftlicher Manuskripte. Die ersten beiden Kapitel (56 Seiten) über Laborjournale, Laborberichte, Forschungsberichte und Dissertationen sind, abgesehen von einer kurzen Behandlung von Anträgen bei und Berichten für Förderorganisationen für Studenten gedacht. Der Rest des Buches beschäftigt sich hauptsächlich mit den im Beruf stehenden Chemiker interessierenden Themen. Dies bedingt eine Inkonsistenz hinsichtlich der Zielgruppe: Wie die Autoren selbst betonen (S. 122), muß ein Lehrbuch ganz anderen Ansprüchen gerecht werden als eine Monographie für ausgebildete Che-