

Im fünften Kapitel werden ENDOR-spektroskopische Resultate für eine Reihe von Radikaltypen in Lösung systematisch behandelt, geordnet nach der Art des Zentralatoms. Es ist eine übersichtliche und kritische Zusammenfassung der Ergebnisse; zahlreiche Literaturzitate helfen dem interessierten Leser weiter. Das letzte Drittel des Buches umfaßt vier Kapitel, in denen spezielle Anwendungen der ENDOR-Spektroskopie besprochen werden: Untersuchungen von intramolekularen dynamischen Prozessen, von freien Radikalen in Flüssigkristallen, von organischen Multispinsystemen und von biologischen Systemen.

Das Buch wird sicherlich ein unentbehrlicher Bestandteil jeder Bibliothek werden, die einen Überblick über die Anwendungen spektroskopischer Methoden in der Organischen Chemie geben will. Es versteht sich nicht als Alternative, sondern als Ergänzung zu einer Monographie über die ESR-Spektroskopie freier Radikale in Lösung. Es wäre daher begrüßenswert, wenn auch zu diesem Thema ein neues umfassendes Werk erscheinen würde – beispielsweise eine Neubearbeitung des Standardwerkes aus dem Jahr 1970 von Scheffler und Stegmann. Derzeit bleibt jemandem, der sich für die ESR-Spektroskopie freier Radikale in Lösung interessiert, sonst nur das umfangreiche Tabellenwerk des Landolt-Börnstein.

Manfred Lehnig [NB 932]
Institut für Organische Chemie
der Universität Dortmund

The Chemistry of Sulphones and Sulfoxides. Herausgegeben von S. Patai, Z. Rappoport und C. Stirling. Wiley, Chichester 1988. XVI, 1210 S., geb. £ 235.00. – ISBN 0-471-91588-2

In der bekannten und verdienstvollen Buchreihe „The Chemistry of Functional Groups“, deren erster Band vor 25 Jahren – bereits von S. Patai – herausgebracht wurde, ist nun erstmals eine umfassende Darstellung der Chemie der Sulfoxide und Sulfone erschienen. Damit ist nicht nur eine Lücke in der Reihe geschlossen, sondern überhaupt einem Mangel abgeholfen worden, da eine neuere Monographie über diese Substanzklassen von diesem Umfang und Anspruch fehlte. Sie war überfällig, denn Sulfoxide und Sulfone nehmen mittlerweile einen bedeutenden und festen Platz im Repertoire der Organischen Chemie ein, wie z. B. die Kapitel 12 und 16 über Sulfinyl-Carbanionen und asymmetrische Synthesen, die Kapitel 13 und 14 über Umlagerungsreaktionen oder Kapitel 22 und 23 über elektrochemische und Elektronentransfer-Reaktionen deutlich erkennen lassen.

Da es den Herausgebern gelungen ist, sehr renommierte Autoren für die einzelnen Kapitel des Bandes zu gewinnen und sie natürlich auch genügend Erfahrung besitzen, um individuelle Beiträge zu einem konsistenten Gesamtwerk zusammenzufügen, nimmt es nicht wunder, daß nun ein vorzügliches Buch vorliegt – regelrecht ein Handbuch und nicht (nur) eine Sammlung von Aufsätzen.

In den ersten sechs Kapiteln werden auf insgesamt 165 Seiten die theoretischen und physikalisch-chemischen sowie – von großem Wert für die Praxis – die Analytik der Sulfoxide und Sulfone behandelt. Dabei ist auch der Chiralität von Sulfoxiden, die für die präparative Chemie von großer Bedeutung ist, ein eigener Abschnitt gewidmet. Es folgen drei umfangreiche Kapitel über die Darstellung offenkettiger Sulfone (K. Schank, 68 S.), Sulfoxide (J. Drabowicz, P. Kielbasinski, M. Mikołajczyk, 146 S.) und der ent-

sprechenden Heterocyclen (U. Zoller, 104 S.), wobei dem Arbeitsgebiet des Autors gemäß die bemerkenswerten dreigliedrigen Ringsysteme besonders ausführlich behandelt werden.

Nach zwei Kapiteln über Substituenteneffekte, Wasserstoffbrücken und Komplexbildung werden dann auf insgesamt 435 Seiten die chemischen Reaktionen behandelt. Für den synthetisch orientierten Organiker sind hierbei besonders die Kapitel von S. Oae und Y. Uchida sowie von G. H. Posner über α -Sulfinyl- und α -Sulfonyl-Carbanionen als wertvolle CC-Verknüpfungsreagentien von Interesse, die sich bei asymmetrischen Synthesen bestens bewährt haben. Auch die Abschnitte über Umlagerungsreaktionen (S. Bravermann, 94 S.) – man denke an die wichtige Pummerer-Reaktion – über Reduktionsreaktionen (J. S. Grossert, 43 S.) mit einer Beschreibung der interessanten Julia-Reaktion zur Darstellung von Carbonylverbindungen aus Sulfonen und über Sulfinyl- und Sulfonyl-Radikale (C. Chatgilialoglu, 34 S.) sind Fundgruben für präparativ nutzbare Reaktionen; im letztgenannten Kapitel findet sich z. B. (ein bißchen versteckt) die für die Cyclophanchemie wichtige SO_2 -Extrusions-Reaktion.

Die sehr zahlreichen Literaturzitate reichen in einzelnen Kapiteln bis 1987, im allgemeinen aber nur bis 1986; eine größere Aktualität ist wegen der langen Produktionszeit ein solchen Buchs wohl nur schwer zu erreichen.

Der vorliegende Band darf selbstverständlich in keiner Bibliothek fehlen. Wegen seiner vorzülichen Qualität möchte man ihn darüber hinaus auch dem einzelnen Organiker (und nicht nur dem Schwefelchemiker) zur Anschaffung empfehlen, aber der Preis von mehr als 700 DM ist natürlich fast prohibitiv.

Jürgen Voß [NB 947]
Institut für Organische Chemie
der Universität Hamburg

Biomedical Magnetic Resonance Imaging. Principles, Methodology and Applications. Herausgegeben von F. W. Wehrli, D. Shaw und J. B. Kneeland. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York 1988. XVIII, 601 S., geb. DM 195.00. – ISBN 3-527-26701-8/0-89573-349-8

Das Buch beschreibt auf 600 Seiten physikalische Grundlagen, klinische Anwendungen und neuere Entwicklungen (bis 1986) auf dem Gebiet der NMR-Tomographie und der in-vivo-NMR-Spektroskopie. Es ist in 13 Kapitel gegliedert, die von insgesamt 18 erfahrenen Physikern und Medizinern verfaßt wurden.

Im methodischen Teil werden grundlegende Aspekte der magnetischen Kernresonanz sowie der Techniken zur räumlichen Zuordnung von NMR-Signalen vorgestellt. Die entsprechenden Kapitel sind besonders gelungen, da sie nicht einfach klassische Einführungen in die NMR-Spektroskopie wiederholen, sondern stets die besonderen in-vivo-Verhältnisse berücksichtigen. Behandelt werden beispielsweise die räumliche Auflösung, der Bildkontrast, Relaxationsphänomene, die Möglichkeiten paramagnetischer Kontrastreagentien, (schnelle) bildgebende Techniken und Gradientenschaltungen, Techniken zur Wasser-Signalunterdrückung, Effekte der chemischen Verschiebung, die Darstellung von Flußvorgängen, Probleme durch Bewegungen und der Einsatz von Oberflächenspulen. Weitere Abschnitte beschäftigen sich mit spezielleren Themen wie der NMR-Tomographie mit Nicht-Wasserstoffkernen (Fluor, Phosphor, Natrium), der Lokalisationsproblematik

in der in-vivo-NMR-Spektroskopie und der spektroskopischen Bildgebung. Ein Kapitel ist Sicherheitsaspekten gewidmet.

Da insbesondere die in-vivo-NMR-Spektroskopie sich zur Zeit besonders schnell entwickelt, sind hier einige Einschätzungen und Erwartungen bereits überholt. So ergibt eine durch die frühe Fertigstellung des Buches bedingte Beschränkung der Spektroskopie auf Untersuchungen zum Energiestoffwechsel mit der ^{31}P -NMR-Spektroskopie bereits heute ein verzerrtes Bild. Wichtige Fortschritte der bildkontrollierten lokalisierten ^1H -NMR-Spektroskopie mit wissenschaftlichen und medizinischen Anwendungen zum Hirnstoffwechsel von Aminosäuren und Neurotransmittern am Menschen sind erst im vergangenen Jahr verzeichnet worden.

Klinische Anwendungen werden im Bereich des zentralen Nervensystems, des cardiovasculären Systems, des Abdomens und Beckens und der Skelettmuskulatur diskutiert. Einige Beispiele stützen sich dabei jedoch auf älteres Bildmaterial. Die Hauptanwendungen am Gehirn und der Wirbelsäule werden eher zu knapp dargestellt und bei den Herzuntersuchungen sind die durch schnelle EKG-synchronisierte NMR-Filme erheblich erweiterten Möglichkeiten unberücksichtigt geblieben. Dennoch vermitteln die klinischen Kapitel dem Nicht-Mediziner wichtige Eindrücke von der medizinischen Bedeutung der Methode, während für rein klinisch interessierte Anwender auch andere, umfangreichere Bilddatensammlungen zur Verfügung stehen.

Insgesamt folgt das Buch erfreulicherweise dem „mainstream“ der Entwicklungen und Anwendungen. Dies ist sicher mit der engen Verbundenheit der Herausgeber und Autoren mit der Industrie und der klinischen Praxis zu erklären. In diesem sich ständig verändernden Forschungsgebiet ist der Bezug zur Realität der in-vivo-NMR-Spektroskopie, gegeben durch die Anwendung am Menschen, eine wesentliche Voraussetzung für eine erfolgreiche und intelligente Umsetzung „klassischer“ NMR-Techniken. Die einzelnen Texte sind für eine Einführung ausführlich, aber nicht langatmig, und mit Kompetenz geschrieben. Das Buch ist sehr übersichtlich strukturiert und vor allem in den methodischen Abschnitten didaktisch ausgezeichnet aufbereitet. Umfangreiche Literaturangaben am Ende jedes Kapitels erleichtern den Einstieg in die Originalliteratur. Ich halte dieses Buch im Gegensatz zu einigen anderen „schnell geschriebenen“ Werken zur NMR-Tomographie für eine wirkliche Bereicherung. Es ist für Chemiker, Physiker, Biologen und Mediziner geeignet, die sich in dieses Gebiet einarbeiten wollen, ihr Verständnis vertiefen möchten, oder einfach nur ein weiterverweisendes Nachschlagewerk für die tägliche Arbeit wünschen.

Jens Frahm [NB 942]

Max-Planck-Institut für
biophysikalische Chemie, Göttingen

Math/Chem/Comp 1987. Herausgegeben von R. C. Lacher.
Elsevier Science Publishers. Amsterdam (NL) 1988. 378
S., geb. \$ 144.75. – ISBN 0-444-42930-1

Dieses Buch mit dem etwas abstoßenden Titel „Math/Chem/Comp 1987“ sind die „Proceedings“ einer Konferenz über die Berührungsflächen zwischen Mathematik, Chemie und der Computerwissenschaft, die im Juni 1987 in Dubrovnik stattfand. Zwei Institutionen, die Florida State University und das Ruder-Bošković-Institut in Zagreb, wirken bei der Organisation dieser Konferenzen zu-

sammen; gemäß Vorwort soll das Treffen interdisziplinäre und longitudinale (?) Studien fördern. Das Buch enthält insgesamt 24 Beiträge, die sich grob in folgende Themenkreise gliedern lassen: 1) Supercomputer und Chemie, 2) Knotentheorie, 3) Graphentheorie und 4) Polymere. Der Schwerpunkt liegt nicht, wie man aufgrund der Abkürzung „Comp“ vermuten könnte, bei der numerischen Quantenchemie, sondern bei topologischen Methoden zur Charakterisierung ganz unterschiedlicher chemischer Strukturen.

Die ersten beiden Artikel (*D. Edelson, D. Edelson et al.*) über Supercomputer (Vektorrechner) versuchen, die heutige Situation und mögliche Entwicklungen für die Zukunft bei der numerischen Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme darzustellen. Diesem Thema wurde im letzten Jahr in anderen Publikationen schon sehr viel Raum gewidmet; der zweite Artikel berichtet speziell über das Projekt eines Expertensystems für Chemie an der Florida State University.

Interessanter ist der zweite Teil: Er enthält eine lesewerte Einführung in die Knotentheorie (*J. Simon*), ein Teilgebiet der Topologie, das in der letzten Zeit bei der Charakterisierung nichtstarrer cyclischer Polymere nützliche Anwendung fand. Auch in der Mathematik ist die Knotentheorie ein paar Schritte vorangekommen; so gelingt es jetzt beispielsweise, die beiden chiralen Formen des Kleeballknotens durch die zugehörigen topologischen Invarianten („Jones-Polynom“) zu unterscheiden. Für den an Chemie und Anwendungen interessierten Leser fehlt jedoch an dieser Stelle ein Beitrag z. B. über verknotete Stränge von cyclischen DNA-Molekülen, die gerade in letzter Zeit dank neuer experimenteller Techniken sichtbar gemacht werden konnten.

Ein wesentlicher Teil des Buches beschäftigt sich mit Anwendungen der Graphentheorie in der Chemie. Ziel der Graphentheorie ist es, Struktureigenschaften von Molekülen in (mathematisch definierte) Eigenschaften von Graphen zu übersetzen und diese dann mit physikalisch-chemischen Eigenschaften zu korrelieren (Artikel von *N. Trinajstić*). Besonders gut geeignet ist das Verfahren für planare Strukturen wie konjugierte Ketten, die im Artikel von *M. Randić* und *N. Trinajstić* behandelt werden. Dem Band ist zu entnehmen, daß man sich auch um eine „dreidimensionale Graphentheorie“ bemüht (*M. Randić*), um große Moleküle – synthetische und natürliche Polymere – zu charakterisieren. Ein Literaturzitat von 1985 weist sogar auf graphentheoretische Beiträge zur Krebsforschung hin – das scheint dem Rezessenten nun doch etwas hoch gegriffen. Zwei Artikel von *R. Randell* befassen sich mit sogenannten Konformationsräumen, mit denen man versucht, flexible Strukturen in der Chemie zu beschreiben. Eine typische Frage lautet hier: Ab welcher Anzahl von Atomen kann man cyclische Strukturen (mit oder ohne Vorgabe von Bindungswinkeln) verknoten?

Das letzte Hauptthema des Buches und der Konferenz, Polymere, bringt die auf diesem Gebiet heute üblichen Schlagwörter ins Spiel: wiederum Knotentheorie, „random walk“, auch in eingeschränkten Geometrien (Polymere in porösen Materialien), „lattice animals“, Skalierung und kritische Exponenten, Ising-Modelle. Eine Ausnahme ist der Übersichtsartikel von *L. Mandelkern* und *A. J. Peacock*, der die Beziehung zwischen Struktur und mechanischen Eigenschaften von kristallinen Polymeren rein phänomenologisch behandelt. Eine analytische topologische Invariante für verschlungene Polymersysteme, die Windungszahl, wird von *M. G. Brereton* beschrieben. Die als Pfadintegral definierte Windungszahl unterscheidet zwar topologisch verschiedene Situationen nicht so gut wie die Polynome der Knotentheorie, ihre Änderung oder Erhal-