

che Untersuchungsmethoden zur Verfügung stehen. Natürlich darf man das alte, gesicherte Wissen darüber nicht vergessen, doch reicht es alleine nicht aus.

Fazit: ein in begrenztem Rahmen nützliches Buch – aber an der Lehrbuch-Misere der Elektrochemie ändert es wenig.

Wolfgang Schmickler [NB 1057]  
Institut für Physikalische Chemie  
der Universität Bonn  
und  
Chemistry Department  
State University of New York  
Stony Brook, NY (USA)

#### Thermochemical Data of Pure Substances. Part I + II. Von I.

Barin. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York 1989. Part I: I-1–I 87, S. 1–816; Part II: VI, S. 817–1739; geb. DM 680.00. – ISBN 3-527-27812-5/0-89573-866-X

Wer den Nutzen eines thermochemischen Sammelwerkes wie des „Barin-Knacke-Kubaschewski“ (1973, 1977) im täglichen Bedarf erfahren hat, sei es zur Berechnung von Reaktionsgleichgewichten, zur Abschätzung von Existenzbereichen oder zur Bestimmung der Zellspannung elektrochemischer Ketten, wird dieses auf den neuesten Stand gebrachte Werk, für das *I. Barin* allein verantwortlich zeichnet, begrüßen.

Behandelt werden fast 2400 Substanzen, darunter 100 organische Materialien und Exoten unter den Anorganika wie  $C_3$ ,  $PuC_{0.88}$  und  $Th_2N_2O$ . Die Fülle der aufgeführten Verbindungen macht das Tabellenwerk zur gegenwärtig sicherlich vollständigsten Datensammlung dieser Art, was – auch in Anbetracht der attraktiven Aufmachung – den stolzen Preis von 680 DM rechtfertigt. Interessant für den Benutzer ist insbesondere, daß die thermodynamische Information als Software ebenfalls erhältlich ist (leider nicht im Preis inbegriffen). Im Vergleich zum „Barin-Knacke-Kubaschewski“ wurden nicht nur Daten revidiert und Verbindungen neu aufgenommen (was die Notwendigkeit dieser Arbeit belegt), sondern auch eine Reihe von Substanzen herausgenommen. Eine Begründung dafür wäre hilfreich gewesen, denn auch eine Revision birgt Informationen.

Eine typische Tabelle vermittelt dem Leser in 100-Grad-Schritten für Temperaturen oberhalb von Raumtemperatur die Palette der thermochemischen Daten für die jeweils bei 1 bar stabile Phase. (Bei  $B_2O_3$  reicht der Temperaturbereich bis 5000 K.) Aufgeführt werden spezifische Wärmen, Enthalpien und Entropien sowie die Hilfsfunktionen  $(G - H_{298})/T$  und  $(H - H_{298})$ . Lobenswert ist die zusätzliche Aufnahme der Bildungsenthalpien und Freien Bildungsenthalpien sowie der zugeordneten Gleichgewichtskonstanten, beruhte doch eine Hauptfehlerquelle bei der Benutzung des Vorläuferwerkes auf der Definition der Funktionen. Während etwa die Janaf-Tables konsequent Bildungsgrößen verwenden (d. h. die entsprechenden Werte sind für die Elemente bei allen Temperaturen Null), sind im Werk von *Barin, Knacke und Kubaschewski* die Enthalpien der Elemente lediglich für Raumtemperatur auf Null normiert, unterscheiden sich also bei anderen Temperaturen um Beträge, die von der spezifischen Wärme herrühren. Ebenfalls angegeben sind nun im Kopf jeder Tabelle (umständlich, aber benutzerfreundlich) die verwendeten Einheiten. Der Leser findet am Fuß die Angabe zur Herkunft (bevorzugt sorgfältig bearbeitete Quellen wie die Janaf-Tables).

Ein leidiges Thema ist die Genauigkeit und Verlässlichkeit der angegebenen Daten. Dem eingefleischten Thermodyna-

miker ist sicherlich bewußt, daß er bei wichtigen Rechnungen stets die Originalliteratur zu konsultieren hat; die Zahl der angegebenen Stellen täuscht jedoch dem Gelegenheitsanwender eine relative Genauigkeit von bis zu  $10^{-6}$  vor. So werden etwa  $H$ -Werte bis auf ein Tausendstel  $kJ\ mol^{-1}$  angegeben, während in der Literatur durchaus Diskrepanzen im  $10\ kJ\ mol^{-1}$ -Bereich zu verzeichnen sind.

Sicherlich kann man nicht verlangen, daß Fehlerangaben, Verläßlichkeiten und Widersprüchlichkeiten der thermodynamischen Literatur in allen Fällen aufgearbeitet werden, warnende Hinweise im Buch wären jedoch unbedingt erforderlich gewesen. Schließlich findet sich im ersten Band auf 87 Seiten Platz für einführende und begleitende Betrachtungen mit durchaus wichtigen Informationen und ausgearbeiteten Beispielen. Das Eingangskapitel „Basic Principles“ hat mir im Vorläuferwerk besser gefallen, weil knapper und der Aufgabe des Buches angemessener formuliert. Hier ist im wesentlichen eine Formelsammlung entstanden. Nicht streiten sollte man sich über die Schreibweise von Zahlen-Größen-Gleichungen, jedoch ist es schade, daß gerade in einem Buch dieser Art sich nicht die logische Notation der physikalisch-chemischen Literatur durchgesetzt hat: Ausdrücke der Form „ $t_c [^{\circ}C] = T[K] - 273.15$ “ sollten eigentlich der Vergangenheit angehören. Mißverständlich ist die logische Zuordnung im Kapitel „entropy“, so impliziert  $\Delta S = 0$  nicht notwendigerweise einen reversiblen adiabatischen Prozeß, sondern ist auch für einen (irreversiblen) stationären Zustand gültig. Irreführend und in der dargestellten Strenge unrichtig sind die Kapitel über die Druckabhängigkeit der Gleichgewichtskonstanten und der Normalpotentiale.

Jochim Maier [NB 1068]  
Max-Planck-Institut  
für Metallforschung, Stuttgart

#### Carbon-13 NMR of Flavonoids. (Reihe: Studies in Organic Chemistry, Vol. 39). Herausgegeben von P. K. Agrawal. Elsevier, Amsterdam 1989. 564 S., geb. Hfl. 350.00. – ISBN 0-444-87449-6

Flavonoide sind weit verbreitete Farb- und Inhaltsstoffe von Pflanzen, die nicht nur in der Lebensmitteltechnologie, Pharmakologie und Chemotherapie, sondern auch für die Chemotaxonomie der Pflanzen von großer Bedeutung sind. Die große Vielfalt der Strukturen erfordert eindeutige spektroskopische Methoden zu ihrer Identifizierung und Aufklärung. Die 1975 von J. B. Harborne und T. J. Mabry herausgegebene Monographie und Datensammlung *The Flavonoids* wird jetzt durch das Werk von P. K. Agrawal und Coautoren über die  $^{13}C$ -NMR-Daten ergänzt und aktualisiert.

Die Einführung skizziert vergleichend die wichtigsten spektroskopischen Methoden der Strukturaufklärung bei Flavonoiden (IR, UV, MS,  $^1H$ -NMR) und leitet dann mit einer Revision der Strukturen einiger bekannter Flavonoide aufgrund ihrer  $^{13}C$ -NMR-Spektren zum Thema über. Tabellen mit typischen  $^1H$ - und  $^{13}C$ -NMR-Verschiebungsbereichen sowie charakteristischen Kopplungskonstanten geben eine nützliche Orientierungshilfe. Abschnitt 2 behandelt sehr kurz die wichtigsten ein- und zweidimensionalen NMR-Methoden (Entkopplungsverfahren, Korrelationsspektroskopie) sowie chemische Methoden (Verschiebungssreagentien, Markierungen, Derivatisierungen) der Zuordnung von  $^{13}C$ -NMR-Signalen. Selbst die durch eindeutigere und empfindlichere Methoden zur Bestimmung von CH-Multiplizitäten (DEPT) völlig verdrängte „Off-Resonance-Entkopplung“ wird noch einmal ausgegraben.

Die Kapitel 3–9 (414 Seiten) sind der umfangreichste und wertvollste Teil des Buches mit über 800 verarbeiteten Literaturzitaten. Sie geben eine knapp kommentierte, tabellarische Übersicht der chemischen Verschiebungen für  $^{13}\text{C}$ -Kerne in Flavonoiden und Anthocyanidinen (Kapitel 3), Isoflavonoiden, Cumarinen, Pterocarpanoiden, Rotenoiden (Kapitel 4), Neoflavonoiden, Auronoiden, Homoisoflavonoiden (Kapitel 5), Flavonoid-Glycosiden (Kapitel 6), Chalconoiden (Kapitel 7), Flavanoiden und Flavanoid-Glycosiden (Kapitel 9). Der letzte Abschnitt gibt wertvolle Tips zur Unterscheidung der Flavonoid-Klassen, Erkennung funktioneller Gruppen und ihrer Position aufgrund typischer  $\delta(^{13}\text{C})$ -Werte. Daß durch Auswertung der Konturdiagramme zweidimensionaler Korrelationsexperimente wie CH-COSY und CH-COLOC auch mit wenig Substanz eine vollständige, exakte Strukturaufklärung gelingt, wird hier leider verschwiegen.

Die Literatur wird bis 1987 berücksichtigt. Allerdings ist die Darstellung häufig unübersichtlich, da die Formeln (meist ohne C-Bezifferungen) weit weg von den Datentabellen stehen, so daß ein ständiges Blättern notwendig wird. Es wäre benutzerfreundlicher gewesen, die Verschiebungswerte direkt an den C-Atomen in den Formeln anzugeben. Mit käuflichen Text/Grafik-Programmen wäre dies zu realisieren gewesen. Dabei hätten auch die  $\delta(^1\text{H})$ -Werte als komplementäre Parameter übersichtlich mit erfaßt werden können, zumal heute  $\delta(^{13}\text{C})$ - und  $\delta(^1\text{H})$ -Werte durch ein einziges Korrelationsexperiment (CH-COSY) rasch bestimmt werden können. Auch Hinweise auf den Nutzen der  $^3J_{\text{CH}}$ -Kopplungskonstanten bei der Identifizierung von Substitutionsmustern (S. 509f) wären sinnvoll gewesen.

Die Register (Subject und Compound Index) sind schlecht wiedergegebene 9-Nadel-Matrix-Ausdrucke. Im Compound Index hätte man besser nach Chemical Abstracts sortiert (Stammskelett, Substituenten). Schließlich sind die Formeln offensichtlich reproduzierte Handzeichnungen der Autoren. Solche technischen Unzulänglichkeiten passen nicht zum stattlichen Preis des Werkes. Insgesamt ist das Buch jedoch ein wertvolles Nachschlagewerk für alle, die sich mit der Identifizierung und Aufklärung der Struktur von Flavonoiden befassen.

*Eberhard Breitmaier [NB 1066]*  
Institut für Organische Chemie  
und Biochemie  
Universität Bonn

**Nitration. Methods and Mechanisms** (Reihe: Organic Nitro Chemistry Series). Von G. A. Olah, R. Malhotra und S. C. Narang. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York 1989. XII, 330 S., geb. DM 145.00.– ISBN 3-527-26698-4/0-89573-144-4

Mit dem vorliegenden Buch ist der dritte Band der Reihe Organic Nitro Chemistry erschienen. Er befaßt sich ausschließlich mit Aspekten der Nitrierung in der Organischen Chemie und soll dem Leser wie die beiden früheren Bände der Serie (Nitrazoles und Nitrile Oxides, Nitrones and Nitronates in Organic Synthesis) einen breiten Überblick über das Gebiet geben. In vier Kapiteln werden die verschiedenen Aspekte der Nitrierung behandelt. Nach einer kurzen Einführung in Kapitel 1 (8 Seiten, 21 Literaturzitate) wenden sich die Autoren in Kapitel 2 (108 Seiten, 264 Literaturzitate) präparativen Aspekten der Nitrierung von Arenen zu. In großer Ausführlichkeit werden hier die zahlreichen Nitrierreagentien besprochen, und der Leser erhält einen guten Überblick. Die vielen Beispiele sind meistens in Tabellen-

form bei den entsprechenden Methoden präsentiert. Viel Platz haben die Autoren dabei den Nitrierungen mit Nitronium-Ionen eingeräumt. Leider werden die Beispiele dieses Abschnitts nicht so ausführlich dargestellt wie beispielsweise diejenigen der klassischen Nitrierung mit Salpetersäure-Schwefelsäure-Mischung (Angabe der Isomerenverteilung). Des weiteren vermißt man bei einer derart ausführlichen Beschreibung auch eine Gegenüberstellung der wichtigsten Nitrierungsmethoden von Arenen anhand einiger ausgewählter Beispiele. Die beiden folgenden Abschnitte dieses Kapitels geben eine kurze Übersicht zu den radikalischen und nucleophilen Nitrierungen. Beide Methoden scheinen gemessen an ihrer Bedeutung (vor allem der nucleophilen Nitrierung) etwas lieblos behandelt. Störend fällt auch auf, daß im Literaturteil dieses Kapitels einige Patente zitiert sind, ohne einen Verweis auf das entsprechende Chem.-Abstr.-Zitat zu geben.

In Kapitel 3 (101 Seiten, 160 Literaturzitate) werden der Einteilung des vorangegangenen Kapitels folgend die Mechanismen der elektrophilen, radikalischen und nucleophilen Nitrierung von Arenen diskutiert. Dieser ebenfalls sehr ausführliche Abschnitt gibt dem Leser einen sehr guten Einblick in den aktuellen Wissensstand der Nitriermechanismen. Auch hier gilt das bereits zum Abschnitt über Reagenzien und Methoden Gesagte: Die nucleophile Nitrierung ist im Vergleich zur elektrophilen etwas kurz geraten (zwei Seiten). Den Abschluß bildet ein Überblick über Nitrierungen von aliphatischen Verbindungen (92 Seiten, 269 Literaturzitate). Auch hier sind wieder viele Beispiele übersichtlich präsentiert. Das Buch schließt mit einem Autoren- und einem Sachregister, die keine Wünsche offen lassen.

Bei dem hohen Preis hätte man bessere Formelbilder erwartet. Trotzdem ist dieser dritte Band der Serie über die Chemie organischer Nitroverbindungen wie seine Vorgänger empfehlenswert.

*Thomas Ziegler [NB 1060]*  
Institut für Organische Chemie  
Biochemie und Isotopenforschung  
der Universität Stuttgart

**Nucleotide Analogues as Antiviral Agents** (Reihe: ACS Symposium Series, Vol. 401). Herausgegeben von J. C. Martin. American Chemical Society, Washington, DC (USA) 1989. VIII, 190 S., geb. \$ 53.95. – ISBN 0-8412-1659-2

Dieses Buch ist eine Zusammenstellung von Vorträgen, die auf einem Symposium anlässlich der 196. Tagung der American Chemical Society im September 1988 gehalten wurden. Wie der Herausgeber in der Einführung anmerkt, haben die Anstrengungen auf dem Gebiet der Entwicklung von antiviralen Nucleosid- und Nucleotidanalogen als Antwort auf die AIDS-Epidemie in den letzten Jahren extrem stark zugenommen. Die meisten der bis jetzt verwendeten Nucleosidanaloge, von denen 3'-Azidothymidin und 9-(Hydroxyethoxymethyl)guanin (Acyclovir) die bedeutendsten sind, sind als 5'-Triphosphate wirksam. Diese Phosphorylierung verläuft über drei Stufen, wobei eine – wie beim Azidothymidin die Phosphorylierung vom 5'-Monophosphat zum Diphosphat – oft einen Engpaß darstellt. Es lag daher schon immer nahe zu versuchen, an Stelle von Nucleosidanalogen Nucleotidanaloge mit potentieller antiviraler Aktivität in die Zelle zu schleusen. Da eine der Barrieren der Aufnahme von Nucleotiden deren enzymatischer Abbau durch Enzyme in der Plasmamembran ist, werden nicht abbaubaren Phosphatanaloga besonders gute Chancen für die Aufnahme geben. Mehrere Kapitel des Buches behandeln deshalb