

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.