

lich werden häufig Ansatzpunkte für interessante zukünftige Untersuchungen gegeben. Das Buch ist somit für die von den Herausgebern angesprochene Zielgruppe (Studenten kurz vor dem Examen sowie aktiv an der Festkörperforschung beteiligte Wissenschaftler) wirklich empfehlenswert.

Eine wichtige Voraussetzung aller experimentellen Untersuchungen an chemischen Verbindungen ist die präparative Chemie. Leider wird diesem wichtigen Thema im vorliegenden Buch nur wenig Platz eingeräumt. Eine auffallend positive Ausnahme ist hier das umfassend informierende und übersichtliche Kapitel über Zeolithe, in dem auf knapp 50 Seiten ein abgerundeter Überblick über Zusammensetzung, Strukturen, Synthesen, Eigenschaften, Charakterisierung und Anwendung dieser wichtigen Substanzgruppe gegeben wird. In den meisten anderen Kapiteln hingegen fehlen Hinweise auf Synthesemöglichkeiten der angegebenen Verbindungen. Demgegenüber nehmen theoretische Aspekte einen beachtlichen Anteil des Buches ein. So besteht das Kapitel über Supraleiter annähernd zur Hälfte aus lehrbuchüblichen theoretischen Abhandlungen (BCS-Theorie, thermodynamische Aspekte etc.). Im zweiten Teil dieses Kapitels folgt aber eine nach Verbindungsklassen geordnete Zusammenstellung bekannter supraleitender Materialien. Hier wird der chemische und strukturelle Variationsreichtum bei den Supraleitern deutlich, und es schließt sich eine kurze zusammenfassende Diskussion der strukturellen und atomaren Parameter an, die für das Phänomen Supraleitung von Bedeutung sein könnten.

Auch in dem sehr informativen und kompakten Abschnitt über Metallcluster ist es gelungen, die charakteristischen strukturellen und chemischen Gemeinsamkeiten für das Auftreten von metallreichen Verbindungen herauszuarbeiten. Auch hier werden nicht bloß Verbindungen aufgezählt, sondern Zusammenhänge und Analogien verdeutlicht.

Insgesamt bietet sich dem Leser mit dem vorliegenden Buch ein interessanter Einblick in neueste Entwicklungen und Erkenntnisse der modernen Festkörperchemie. Obwohl mit den präsentierten Themen keine flächendeckende Darstellung der gesamten Festkörperchemie möglich ist, werden doch allgemein interessierende und wichtige Teilespekte vorgestellt. Der interessierte Leser wird also schon jetzt auf einen von den Herausgebern im Vorwort angekündigten Folgeband mit weiteren Beiträgen (z.B. Festkörperelektrolyte, magnetisch und optoelektronisch relevante Materialien) gespannt sein.

Wolfgang Schnick
Institut für Anorganische Chemie
der Universität Bonn

NMR-Spektroskopie. Grundlagen, Konzepte und Anwendungen der Protonen- und Kohlenstoff-13-Kernresonanz-Spektroskopie in der Chemie. 3., neubearbeitete und erweiterte Auflage. Von H. Günther. Thieme, Stuttgart, 1992. XIII, 520 S., Broschur 98.00 DM. – ISBN 3-13-487503-9

Mittlerweile ist die dritte Auflage dieses Klassikers der NMR-Literatur erschienen. Die vorige Auflage hatte etwas unter ihrem unglücklichen Erscheinungsdatum (1983) gelitten. Damals waren die „modernen“ NMR-Techniken (z. B. die zweidimensionalen) kurz davor, auch in die Labors von Nichtspezialisten einzuziehen. Ihre Verbreitung war aber noch nicht so groß, daß sich dies schon im Buch hätte niederschlagen können. Inzwischen hat sich die Situation deutlich geändert. Kein ernst zunehmender Betreiber eines NMR-Labors verzichtet heute auf moderne NMR-Techniken, weil sie

vielfältige Informationen über Molekülstruktur und -dynamik liefern können. Die stürmische Entwicklung der Kernresonanz-Spektroskopie muß daher auch bei der Lehre berücksichtigt werden. Günther hat dem dadurch Rechnung getragen, daß er sein Buch für die neue Auflage teils überarbeitet, teils erheblich um entsprechendes neues Material ergänzt hat. Der Umfang des Buches ist um ca. 160 Seiten gewachsen.

Behandelt werden die physikalischen Grundlagen des Kernresonanz-Experiments (Kap. 1 und 7) und wichtige experimentelle Aspekte (Kap. 3). Hierbei wird nun auch ausführlich auf die Puls-Fouriertransform-Spektroskopie eingegangen. Die wichtigen spektroskopischen Meßgrößen werden zunächst vorgestellt (Kap. 2), und anschließend wird die Strukturabhängigkeit der ^1H -chemischen Verschiebung und der Spin-Kopplung mit ^1H genauer besprochen (Kap. 4). Kapitel 5 befaßt sich mit der Analyse hochaufgelöster NMR-Spektren erster und höherer Ordnung, Kapitel 6 mit den Zusammenhängen zwischen Spektren und Molekülsymmetrie. Im achten Kapitel führt der Autor in die zweidimensionale NMR-Spektroskopie ein, wobei, wenn möglich, Vektorbilder der Magnetisierung zum Verständnis der Experimente gezeigt werden. Darüber hinaus wird – wohl erstmalig in einem Lehrbuch – der Produktoperator-Formalismus von R. R. Ernst und Mitarbeitern vorgestellt, mit dem auch Experimente beschrieben werden können, auf die die Vektorbilder nicht anwendbar sind (z. B. COSY), und mit dem z. B. in übersichtlicher Form die Funktion von Phasencyclen dargestellt werden kann. Die Diskussion weiterer 2D-Verfahren ist in die Kapitel 10 (Besondere experimentelle Techniken, dort: NOESY) und 11 (Kohlenstoff-13-NMR, dort: 2D-C,H-Verschiebungskorrelation und C,C-INADEQUATE) integriert. Nachdem das ^{13}C -NMR-Kapitel in der zweiten Auflage gefehlt hatte, wurde es nun in erweiterter Form wieder aufgenommen. Dies war nicht nur wegen der stark gewachsenen Bedeutung der ^{13}C -NMR-Spektroskopie notwendig, sondern auch zur Erklärung vieler neuerer NMR-Experimente, die den Polarisations-Transfer zwischen Protonen und Heterokernen nutzen. Im zehnten Kapitel wurde erfreulicherweise der Abschnitt über den Kern-Overhauser-Effekt erweitert, und es wurden Abschnitte über Festkörper-NMR und über NMR in Biologie und Medizin eingefügt. Schade, daß bei den Doppelresonanz-Methoden die lehrreiche Besprechung des Spin-Ticklings am Beispiel des AMX-Energie niveaudiagramms der 2,3-Dibrompropionsäure den Übergang zur dritten Auflage nicht überlebt hat! Schließlich werden in Kapitel 9 dynamische Effekte in der NMR-Spektroskopie behandelt, und Kapitel 12 bildet einen Anhang aus verschiedenem Material, das offensichtlich der besseren Lesbarkeit wegen aus dem laufenden Text hierher transferiert wurde. Zu erwähnen sind davon besonders die Tabellen mit ^1H - und ^{13}C -Verschiebungen sowie mit $^1\text{H},^1\text{H}$ -Kopplungskonstanten. Sehr lobenswert ist der Abdruck der ASTM-Empfehlungen für die Darstellung von NMR-Ergebnissen in der Literatur. Etliche Zeitschriften zitieren diese Empfehlungen in ihren Hinweisen für Autoren; vielleicht trägt dieser Anhang dazu bei, daß die Autoren sie besser beherzigen (und daß Redakteure und Gutachter darauf bestehen).

Die Abbildungen und die chemischen Formeln sind dort, wo es sinnvoll erschien, der Thieme-Tradition folgend im Zweifarbdruk (schwarz/rot) gefertigt. Der erhöhte Fertigungsaufwand bedingt eine größere Fehleranfälligkeit, auf die nicht immer mit peniblerer Kontrolle reagiert wurde. So fehlen z. B. die (eigentlich roten) Kreuzpeaks in der Konturdarstellung des COSY-Spektrums von Abbildung 7b (S. 7), und die roten Teile einer Abbildung sind gegen die schwarzen verschoben (Abb. 2.4). Auch sonst wurde beim Lesen der Korrekturfahnen einiges übersehen. Die linke Hälfte von Tabelle 4.4 ist leer geblieben; bei der Aufzählung der substi-

tuenteninduzierten ^{13}C -chemischen Verschiebungen in Benzolderivaten (Tab. 11.3) dürfen natürlich diejenigen der *para*-Position nicht fehlen. Das Einfügen neuen Materials verlief ebenfalls nicht immer problemlos; Beispiele: Übungsaufgabe 4.2 wurde durch eine andere ersetzt, bei den Lösungen steht aber noch die alte Version; durch Einfügen neuer Gleichungen wurde umnumeriert, was bei den Textverweisen manchmal nicht berücksichtigt wurde. Im Literaturanhang hätte konsequent stets auf die neueste Auflage von Büchern und Datensammlungen verwiesen werden sollen.

Der Autor nennt sein Werk mehrfach bescheiden einen einführenden Text. Ich glaube, daß es doch ein bißchen mehr ist, da es auch den schon mit NMR-Spektroskopie vertrauten Leser noch auf manchen nicht bedachten Aspekt dieses Gebietes aufmerksam machen kann. Der größte Teil des Stoffes wird recht gründlich besprochen, und die Zusammenhänge werden meist von den elementaren Prinzipien her abgeleitet. Die Art der Darstellung ist klar und die Gliederung logisch. Hilfreich sind die ca. 60 Übungsaufgaben samt Lösungen, mit Hilfe derer der Leser seine gewonnenen Kenntnisse überprüfen kann. Die erwähnten Mängel sind geringfügig im Vergleich zu den vielen positiven Seiten des Buches, so daß „der Günther“ jedem, der ernsthaft an der NMR-Spektroskopie interessiert ist, wärmstens empfohlen werden kann. Er steht zwar vom Thema her in Konkurrenz zu dem nachstehend besprochenen Buch von Friebohl, richtet sich aber wegen des höheren Niveaus nicht unbedingt an dieselbe Leserschaft.

Ludger Ernst

NMR-Laboratorium der Chemischen Institute
der Technischen Universität Braunschweig

Ein- und zweidimensionale NMR-Spektroskopie. Eine Einführung., 2. Auflage. Von H. Friebohl. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1992. XX, 365 S., Broschur 58.00 DM.
– ISBN 3-527-28507-5

Seit seinem Erscheinen vor etwa vier Jahren hat das oben genannte Buch schnell Verbreitung gefunden, so daß nun eine zweite Auflage erforderlich wurde. Friebohl hat die Gelegenheit genutzt, kleinere Korrekturen anzubringen sowie verschiedene Ergänzungen vorzunehmen. Die 1. Auflage erfuhr durchweg positive Rezensionen, u.a. in dieser Zeitschrift^[*].

Das Buch ist für Anfänger auf dem Gebiet der NMR-Spektroskopie gedacht und befaßt sich hauptsächlich mit Anwendungen auf die Organische Chemie. Während jedoch die 1. Auflage ausschließlich die Kerne ^1H und ^{13}C berücksichtigte, findet man nun einige Einfügungen zum Thema „Andere Kerne“: Auf wenigen Seiten werden deren Besonderheiten erwähnt (lange oder kurze Relaxationszeiten, Quadrupolmoment, große Linienbreiten, große Verschiebungsbereiche, geringe Empfindlichkeit) sowie – eigentlich zu kurz, um von Nutzen zu sein – chemische Verschiebungen von $^{10}\text{B}/^{11}\text{B}$, $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$, ^{17}O , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P , ^{57}Fe , ^{119}Sn und ^{195}Pt und Spin-Kopplungen mit Heterokernen angesprochen. Einer sehr einfach gehaltenen Einführung in die physikalischen Grundlagen der NMR-Spektroskopie folgt ein Kapitel über ^1H - und ^{13}C -NMR-Verschiebungen sowie eines über H,H- und C,H-Kopplungskonstanten. Die zugehörigen Tabellen hätte ich mir etwas ausführlicher gewünscht, weil das gebotene Datenmaterial für die praktische Anwendung doch zu knapp ist. Das Kapitel „Spektrum und Molekülstruktur“ befaßt sich in sehr verständlicher Form mit Äqui-

valenz, Symmetrie, Chiralität und verwandten Begriffen, deren Bedeutung vom Anfänger leicht unterschätzt wird. Die Kapitel 4 bis 7 behandeln Spektrenanalyse, einfache Doppelresonanz-Experimente, Signalzuordnungstechniken sowie Relaxation. Eindimensionale NMR-Experimente mit komplexen Impulsfolgen und zweidimensionale NMR-Spektroskopie bilden den Inhalt der nächsten beiden Kapitel, die den Leser auf anschauliche Weise mit so wichtigen Verfahren bekannt machen wie DEPT, 1D- und 2D-INADEQUATE, 2D-H,H- und C,H-COSY (und deren Relay-Varianten), *J*-aufgelöster 2D-NMR und 2D-Austausch-Spektroskopie. In deutschsprachigen Lehrbüchern wurden diese Techniken bislang nur vereinzelt abgehandelt, obwohl sie der Kernspektroskopie eine zuvor nicht bekannte Aussagekraft verliehen haben. Eingefügt wurde ein ausführlicher Abschnitt über das *J*-modulierte Spin-Echo-Verfahren, das für Signalzuordnungen sehr nützlich und zudem leicht verständlich ist. Entsprechend ihrer Bedeutung wird der DEPT-Technik mehr Raum als zuvor gewidmet. Neu aufgenommen wurde auch die Beschreibung der relativ neuen invers (d.h. ^1H -detektierten Hetero-Korrelations-Experimente, die wegen ihrer gesteigerten Empfindlichkeit interessant sind und auf neueren Spektrometern bereits standardmäßig durchgeführt werden können. Ein kurzes Kapitel über den Kern-Overhauser-Effekt schließt sich an, gefolgt von der Besprechung der dynamischen NMR-Spektroskopie, von Verschiebungsreagentien, von NMR an Polymeren sowie der Anwendung der NMR-Spektroskopie in Biochemie (Biosynthesen mit ^{13}C -markierten Vorläufern) und Medizin (*in-vivo*-Spektroskopie und NMR-Tomographie).

Liest man die Rezensionen der 1. Auflage und vergleicht dann die beiden Auflagen des Buches, so stellt man erfreut fest, daß der Autor sich Kritik an kleineren Unzulänglichkeiten, soweit sie gerechtfertigt war, zu Herzen genommen und gewissenhaft Abhilfe geschaffen hat. So wurde das von einem Rezessenten gewünschte, in der 1. Auflage fehlende Beispiel für ein ^{13}C -DEPT(135)-Spektrum eingefügt, welches ja für die tägliche Praxis von großem Nutzen ist.

Da sich das Buch an Einsteiger richtet, ist die Art der Darstellung elementar; mit Mathematik oder detaillierten physikalischen Herleitungen wird der Leser nicht behelligt. Der Schwierigkeitsgrad des „Friebohl“ liegt deutlich unter demjenigen des Buches von Günther (vgl. die voranstehende Rezension), ebenso unter dem der beiden (englischsprachigen) Bücher von Sanders/Hunter und Derome, die aber beide ein etwas anderes Ziel verfolgen, indem sie sich auf die Darstellung der Experimente beschränken und auf die Begründung spektroskopischer Parameter wie chemische Verschiebungen und Spin-Spin-Kopplungskonstanten verzichten.

Ein Text von mehreren hundert Seiten kann schwerlich fehlerfrei sein, und hier soll keine Fehlerliste aufgestellt werden. Weil jedoch auf Seite 167 ausführlich auf den Einfluß von Deuterium auf die Relaxationsgeschwindigkeiten von C-4a/4b („C-12“) und C-8a/10a („C-11“) in 4,5-Dideuterio-phenanthren eingegangen wird, sei angemerkt, daß die Zuordnung der chemischen Verschiebungen der quartären Kohlenstoffkerne in der Phenanthren-Formel auf Seite 62 vertauscht werden muß, wie zwar nicht aus dem zitierten Review, wohl aber aus der Originalliteratur hervorgeht.

Insgesamt ist dies ein gelungenes Buch: Lobenswert sind die anschaulichkeit der gewählten Beispiele, der angenehme Stil des Verfassers, die gute Qualität der Abbildungsvorlagen und des Drucks. Ungewöhnliches, aber Erfreuliches ist zum Preis zu sagen: Obwohl der Umfang des Buches im Vergleich zur ersten Auflage um ca. 50 Seiten zugenommen hat, wird das Buch zu demselben Preis verkauft, der schon vor vier Jahren für die 1. Auflage verlangt wurde. – Prädikat: emp-

[*] Angew. Chem. 1989, 101, 104.