

von spektroskopischen und magnetischen Eigenschaften sowie der Strukturen von Komplexen liegt. Sowohl Interessenten aus Nachbardisziplinen wie auch – angesichts des Preises – Studierende können mit diesem Buch auf angenehme Weise eine Wissenslücke schließen.

Wolfgang Kaim

Institut für  
Anorganische Chemie  
Universität Stuttgart

### Resorcinol. Its Uses and Derivatives

(Topics in Applied Chemistry). Von H. Dressler. Plenum Press, New York, 1994. 500 S., geb., 115.00 \$ – ISBN 0-306-44850-5

Der Autor des vorliegenden Buches ist offensichtlich (ehemaliger) Industriechemiker. Dies merkt man im Positiven wie im Negativen, Kapitel für Kapitel, Seite für Seite, ja beinahe Satz für Satz.

Bereits auf den ersten sieben Seiten des zweiten Kapitels (das erste ist eine den Inhalt mehr oder weniger aufzählende „Introduction“), von denen drei mit ganzseitigen Abbildungen des IR-, <sup>1</sup>H-NMR- (60 MHz!) und <sup>13</sup>C-NMR-Spektrums von Resorcin gefüllt sind, findet man vier deutliche Verweise auf seine Firma einschließlich der Feststellung „this plant has had a good record as to the safety and health of its employees for many years“. Über „The Properties and Chemistry of Resorcinol“, so die Überschrift dieses Kapitels, wird man dagegen unzureichend informiert. Als charakteristisches Beispiel sei das Unterkapitel 2.6. „Methods of Analysis“ genannt, das aus genau fünf Sätzen besteht.

Die nächsten zehn Kapitel beschäftigen sich mit industriellen und kommerziellen Aspekten von Resorcin in allen erdenklichen Varianten, und man wird dem Buch am besten gerecht, indem man diese Kapitel aufzählt: 3. „Processes for Making Resorcinol“, 4. „The Use of Resorcinol in Rubber Compositions“, 5. „Resorcinol/Formaldehyde Resins—Adhesives for Wood and Other Nonrubber Applications“, 6. „*m*-Aminophenol“, 7. „Agricultural Chemicals, Including Veterinary Products“, 8. „Pharmaceuticals, Over-the-Counter Medications, and Diagnostic Aids“, 9. „The Uses of Resorcinol/Derivatives in Polymers“, 10. „Dyes, Fluorescent Chemicals, Optical Bleaches, Laser Dyes, and Imaging/Recording Technologies“, 11. „Additives of Many Types“ und 12. „Other Uses of Resorcinol“.

Dabei handelt es sich in allen Kapiteln um eine Aneinanderreihung einer Un-

menge (man kann das in jedem Sinne wörtlich nehmen) von Informationen, die aber fast immer an der Oberfläche bleiben („A large number of ... were prepared, and shown to be ...“ oder „A preparation of ... was patented ...“ oder „A similar patent ... covered the use of ...“). Einige Querverweise (an sich begrüßenswert) erscheinen mehr oder weniger zufällig. Eine wertende Durchdringung und Aufbereitung des in breiter Fülle gebotenen Materials ist kaum zu erkennen, am ehesten noch bei der Beschreibung der großtechnischen Herstellung der Grundchemikalien Resorcin und *m*-Aminophenol in Form von Flußdiagrammen (Kapitel 3 und 7). Die in den Kapiteln 3–12 zitierte Literatur besteht zu ca. 90 % aus Patenten. Eingestreut sind Hinweise auf Produktionszahlen und Umsätze. Trotzdem erachtet der Autor auch noch ein Kapitel über „Selected Business Aspects“ (13) für notwendig.

Daran schließen sich zwei Kapitel an (14. „Occurrence in Nature – A Domain of Academic Researchers“ und 15. „Other Examples of Mostly Academic Work with Resorcinol“), zu denen auch rund 400 Zitate (insgesamt enthält das Buch mehr als 1800 Zitate) zusammengetragen sind, die nicht der Patentliteratur entstammen. Zu diesen recht unausgewogenen Kapiteln ist in der Einleitung bemerkt: „The placement ... near the end of the book is not intended as an indication of the lesser importance of these topics, but rather as an intent to finish with a note of enthusiasm, to show the burst of ideas and the connection to the whole fabric.“ Man möchte dem Autor hier, wie überhaupt, die gute Absicht glauben.

Das Buch ist auf den ersten Blick äußerlich ansprechend aufgemacht. Es enthält eine Vielzahl das Verständnis erleichternde Strukturformeln, deren Auswahl allerdings merkwürdig ist. Während das Kapitel 5 ganz ohne chemische Formeln auskommt, sind die Formeln von *m*-Fluorphenol und ähnlichen Verbindungen sicher entbehrlich. Überwiegend sind diese Formeln klar und einheitlich gesetzt, manchmal allerdings nur schlecht reproduziert (z.B. 15-4, 15-5) bzw. auch gedankenlos übernommen (11-44, ein [1.1]Metacyclophan!). Ähnliches gilt für die wenigen, auch qualitativ nicht überzeugenden Schwarz-Weiß-Photographien (z.B. die eines mit Flechten bewachsenen Felsens oder eines Minenräumbootes). Und sicher hätte man ein besseres <sup>1</sup>H NMR Spektrum von Resorcin auftreiben können, als die schlechte Kopie aus dem Sadler-Katalog.

Insgesamt gibt das Buch aus der Sicht eines für sein Spezialgebiet engagierten

Chemikers eine Zusammenstellung über die im wesentlichen technisch-kommerzielle Verwendung von Resorcin. Die Frage erhebt sich, ob eine solche willkürliche Konzentration auf eine chemische Verbindung sinnvoll ist. Wer sie bejaht und das Buch erwirbt, erhält einen äußerst umfangreichen, ja vermutlich umfassenden Überblick über die betreffende Patentliteratur. Dies hat sicher seinen Wert. Wer allerdings mehr erwartet, wird enttäuscht sein.

Volker Böhmer

Fachbereich Chemie  
der Universität Mainz

### Two Dimensional NMR Spectroscopy.

Applications for Chemists and Biochemists. 2. Auflage. Herausgegeben von W. R. Croasmun und R. M. K. Carlson. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1994. 958 S., geb. 199.00 DM. – ISBN 3-527-89664-3/1-56081-664-3

Die zweite Auflage (1994) dieses von William R. Croasmun und Robert M. K. Carlson herausgegebenen Werkes präsentiert sich gegenüber der ersten (1987) nicht nur in erweiterter und dem heutigen Stand der NMR-Technik angepaßter Form, sondern es muß als ein überwiegend neu geschriebenes Buch bezeichnet und deshalb auch demjenigen empfohlen werden, der bereits Besitzer der ersten Ausgabe ist. Die meisten Autoren haben erkannt, daß sich die zwei- und mehrdimensionalen NMR-Techniken in den neunziger Jahren wieder einmal radikal geändert haben und daß sie neue Beispiele mit vor allem inversen heteronuclearen Experimenten schuldig waren, um den gewaltigen Schub dieser neuen Methoden auf die bereits bestehenden Strategien zur Strukturaufklärung aufzuzeigen.

In Kapitel 1 gibt G. A. Gray seine bewährte Einführung in die Möglichkeiten der mehrdimensionalen NMR-Spektroskopie in Lösung, wobei inverse heteronucleare Korrelationsexperimente, Spin-Lock-Pulse und gepulste Feldgradienten neu einbezogen sind. Grays Text ist für praktizierende Chemiker geschrieben, die mit der traditionellen NMR-Spektroskopie vertraut sind. Dieses Publikum wird allerdings bei der Lektüre der Kapitel 2 bis 4 überfordert sein, die aber dennoch das Herz dieses Buches sind. W. E. Hulls Artikel „Experimentelle Aspekte der zweidimensionalen NMR“ ist vollkommen umorganisiert, auf über 357 Seiten angewachsen und bildet zusammen mit den neuen Kapiteln von C. Griesinger und

Mitarbeitern „Proton-detektierte heteronukleare und multidimensionale NMR“ sowie von H. R. Kalbitzer „Rechner-unterstützte Analyse von multidimensionalen NMR-Spektren“ über 50 % des Buchumfangs. Diese Kapitel lohnen sich aber unbedingt für den praktizierenden NMR-Spektroskopiker! Selbst dieser wird über die Fülle der Informationen erstaunt sein und sich vielleicht wundern, wieviel davon er in den letzten Jahren versäumt hat. W. E. Hull beschreibt alle technischen Aspekte: Shimsysteme, Lock, Vibrationseffekte, Probenköpfe, Amplituden-, Phasenmodulation von RF-Pulsen zur selektiven Anregung, Lösungsmittelunterdrückung, Gradientenecho-Spektroskopie. Dann folgt die Darstellung der Prinzipien der 2D-NMR-Spektroskopie sowie aller wesentlichen homonuklearen und direkt detektierten heteronuklearen Experimente. Hervorzuheben ist die vergleichende Beschreibung der unterschiedlichen Acquisition-Methoden für phasenempfindliche Experimente. Da außerdem versucht wird, von jeglicher Firmen-Software-Nomenklatur loszukommen, ist dieses Kapitel 2 hochwillkommen. Mir scheint, daß auf dem Markt nichts ähnlich Detailliertes und Vollkommenes zu finden ist. Griesinger und Mitarbeiter runden Kapitel 3 mit der Präsentation der gegenwärtigen Hits ab, der protondetektierten heteronuklearen Spektroskopie und der 3D-NMR-Methoden. Ihre Einführung in den Produktoperator-Formalismus scheint etwas zu kurz geraten zu sein und läßt sich in der Originalliteratur besser verstehen. Die inversen Verfahren (HMQC, HMBC, HSQC, Doppel-INEPT) und ihre Abwandlungen für empfindlichkeitsverbesserte Korrelationen, Constant-Time-Experimente und spek-

trales Editieren sind dagegen sehr ausführlich dargestellt, wobei das Spinsystem in entscheidenden Punkten der Sequenz durch Produktoperatoren beschrieben wird. Die Effizienz von Phasencyclen und gepulsten Feldgradienten zur Unterdrückung der Signale von Lösungsmittel- und <sup>12</sup>C-gebundenen Protonen werden miteinander verglichen. 3D-NMR-Techniken helfen Zuordnungsprobleme überwinden und erhöhen die Qualität der Messung von homo- und heteronuklearen *J*-Kopplungskonstanten.

Die Kapitel 5 bis 11 sind den Anwendungen von vielen der beschriebenen NMR-Techniken auf spezielle Strukturprobleme gewidmet, wobei besonders die substantielle Empfindlichkeitssteigerung der inversen Verfahren hervorgehoben wird. Leider sind noch keine Beispiele mit gepulsten Feldgradienten enthalten, um den Zeitgewinn oder die Reduzierung des *t*<sub>1</sub>-Rauschens zu demonstrieren. Diese sieben Kapitel sind wohl dem im entsprechenden Gebiet praktizierenden Biochemiker/Chemiker wieder ausreichend verständlich und führen ihn hervorragend in die jeweiligen Möglichkeiten und Grenzen der NMR-Spektroskopie ein. Kapitel 5 ist ein völlig neu gestalteter Abschnitt von H. Kessler und S. Seip über die Konformationsanalyse von Peptiden, der allgemein gehalten und nicht mehr auf Cyclosporin A festgelegt ist. Einige schöne Beispiele für DEPT-HMQC-Sequenzen sind gezeigt. Allerdings mangelt es etwas an Abstimmung mit dem nächsten Kapitel von H. J. Dyson und P. E. Wright, das sich mit Proteinstrukturberechnungen aus NMR-Constraints befaßt; z.B. ist die Nomenklatur zur Beschreibung des NOE-Effekts in beiden Texten völlig verschieden. Interessant ist die Diskussion über die ma-

ximale Größe eines Proteins, dessen Struktur NMR-spektroskopisch noch bestimmt werden kann (mit 30 000 Dalton angegeben) und die Folgerung, daß nicht etwa die starken Resonanzüberlagerungen, sondern die Zunahme der Korrelationszeit für die molekulare Reorientierung das schwer überwindbare Problem ist. Lesenswerte Artikel folgen über die Strukturanalyse von Nucleinsäuren (I. Goljer und P. H. Bolton), Oligo- und Polysacchariden (J. Dabrowski) sowie Steroiden (W. R. Croasmun und R. M. K. Carlson). In Kapitel 10 werden synthetisch-organische Strukturprobleme (P. L. Rinaldi) anhand einer metallorganischen Verbindung, eines Diels-Alder-Produkts und eines Polymers besprochen und unterschiedliche NMR-Strategien diskutiert. Tripelresonanzexperimente werden vorgestellt, durch die die Signale von <sup>1</sup>H- oder <sup>13</sup>C-Kernen in der Nachbarschaft eines eingebauten Labels (z.B. <sup>2</sup>H) oder eines dritten NMR-aktiven Kernes (<sup>19</sup>F, <sup>31</sup>P, Metallnuclide) selektiv detektiert werden können. In Kapitel 11 sind Beispiele zur Strukturaufklärung von Naturstoffen und pharmazeutisch interessanten Verbindungen (G. E. Martin und R. C. Crouch) gegeben. Auf eine weitere mögliche Verringerung der erforderlichen Substanzmenge durch die Verwendung von Mikroprobenköpfen wird aufmerksam gemacht. Inverse 2D-NMR-Spektren von 10 µg-Mengen sind gezeigt, die in vernünftigen Meßzeiten erhalten wurden. Ein Glossar mit nahezu 300 von den NMR-Spektroskopikern so heißgeliebten Acronymen bildet den Abschluß dieses sehr empfehlenswerten Buches.

Jürgen Lauterwein  
Organisch-chemisches Institut  
der Universität Münster