

salts“, besser „Wurster salts“, Zeile 1 von Abschnitt 10.1.4, S. 176). Bisweilen scheinen Satzteile verloren gegangen zu sein: „...have performed ellipsometric studies the proton injection into... films...“ (S. 64, Zeile 11 von unten); „...thiophene units are chemically bonded rather than by physically mixed“ (S. 163, letzte Zeile). In Abbildung 9.1 sind am Rande einige Symbole abgeschnitten, auf S. 177 ist statt eines Pyrazolins ein Pyrazolderivat abgebildet. Einige weitere Ungenauigkeiten seien nur kurz aufgezählt: In der Abkürzungsliste hätte man besser die alphabetische Anordnung durchgehend beibehalten (S. XXII unten, XXIII oben); der Begriff „reversibility“ sollte im Zusammenhang mit cyclischen Voltammogrammen nicht mit dem der „superimpossibility“ verwechselt werden (S. 32); i_0 wird als „standard exchange current“ mit der Einheit „ μAcm^{-2} “ angegeben, letzteres ist aber die Einheit einer Stromdichte (S. 32/33); die in Tabelle 2.1 erwähnte Chronoamperometrie wird nicht erklärt; in Abbildung 6.1 wird das Potential gegen eine – nicht erläuterte – „SSCE“-Ver gleichselektrode angegeben; auf Abbildung 8.4 fand ich im Text keinen Verweis; unter dem Titel „Pulsed Potentials“ (Abschnitt 8.4.2) werden Experimente mit „Pulses of current...“ beschrieben; Aniline (S. 143) sind natürlich keine Heterocyclen, und *o*-Toluidin (S. 147) ist kein *N*-substituiertes Anilin; in Tabelle 9.11 sucht man den Diederwinkel, von dem Absorptionsmaximum und Oxidationspotential abhängen sollen, vergeblich.

Ob „anyone wishing to enter the field“ (man bedenke das angestrebte breite Auditorium!) mit diesem Buch gedient ist, wage ich zu bezweifeln. Hierzu hätten sicherlich die grundlegenden Kapitel in Teil I exakter bearbeitet und in Teil II die Literatur kritischer bewertet und eingordnet werden müssen. Der Wissenschaftler, der sich mit elektrochromen Systemen konkret beschäftigt, sei es in der Grundlagenforschung oder in der Anwendung, wird aber darüber wie über die genannten kleineren Fehler hinwegsehen können. Er wird in Teil II eine reiche Ausbeute an weiterführenden Literaturstellen finden.

Bernd Speiser

Institut für Organische Chemie
der Universität Tübingen

NMR-Spektroskopie für Anwender. Von *W.-D. Herzog und M. Messerschmidt*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1995. 194 S., Broschur 58.00 DM. – ISBN 3-527-28690-X

NMR – Konzepte und Methoden. Von *D. Canet*. Springer, Heidelberg, 1994. 245 S., Broschur 48.00 DM. – ISBN 3-540-58204-5

Im Vorwort nennt das Buch „NMR-Spektroskopie für Anwender“ als Zielgruppe „Laboranten, Studienanfänger, Techniker und Ingenieure“. Es versucht eine Einführung in die NMR-Spektroskopie über anwendungsbezogene Beispiele ohne „komplizierte physikalische Betrachtungsweisen“. Das Buch ist in zehn Teile gegliedert, beginnend mit physikalischen und mathematischen Grundlagen; es folgen praktische Aspekte, je ein Kapitel über die Auswertung, Lösungsmitteleffekte, Störungen im ^1H -NMR-Spektrum, eine Übersicht über die Parameter eines Protonenspektrums, Grundlagen der ^{13}C -NMR-Spektroskopie und schließlich ein Anhang mit ^1H -NMR-Spektren.

Kapitel 1 und 2 führen behutsam in die Grundlagen ein, wobei die Autoren sich auf das zum Verständnis Notwendige beschränken. Jeweils ein bis zwei Seiten beschreiben elektrische, magnetische und elektromagnetische Felder; mit Hilfe der als vertraut vorausgesetzten UV-Spektroskopie werden Energieaustausch, -umwandlung und Strahlung näher erläutert. Mit Gedankenexperimenten und Analogien werden die möglichen Zustände eines Spins verdeutlicht. Eine Erklärung, welche Kerne weshalb NMR-spektroskopisch beobachtbar seien, schließt sich an, und danach wird die Signalerzeugung erklärt. In den mathematischen Grundlagen wird auf die Boltzmann-Verteilung als Formel eingegangen; es folgt ein kurzer „vorher-nachher“-Vergleich einiger FID aus einer einzelnen Sinusschwingung mit deren Fourier-Transformierten. Ein Höhepunkt des Buches ist die Erklärung des harten Rechteckpulses, die ohne die Heisenbergsche Unschärferelation auskommt. Die vorher erörterten Grundlagen sind ausreichend, um ohne quantenmechanische Kenntnisse die Prinzipien der NMR-Spektroskopie nachzu vollziehen.

Im dritten Kapitel gehen die Autoren auf das Spektrometer und den Magneten ein, beschreiben den Umgang mit Proben und führen die ppm-Skala ein. Daß ein Kryostat mit „Thermosflasche“ gleichgesetzt wird, ist etwas platt, da keinerlei weitere Erläuterung folgt, ansonsten liefert dieses Kapitel eine gute und knappe Einführung. Die für die Qualität einer NMR-

Probe interessanten Fragen wie Salzgehalt, Füllhöhe und Lösungsmittel werden besprochen.

Nach der Lektüre des vierten Kapitels ist der Leser in der Lage, einfache 1D-Spektren auszuwerten. Neben groben Einteilungen, an welcher Stelle eines Spektrums die Signale welcher Protonenspezies zu erwarten sind, werden auch die physikalischen Hintergründe der Verschiebungen und Aufspaltungen der Signale anschaulich und in ausreichendem Maße nähergebracht.

Es folgen dreieinhalb Seiten über „Quantitative ^1H -NMR-Spektroskopie“, in denen kurz und präzise gezeigt wird, wie man über den Vergleich von Signalen Anteile von einzelnen Substanzen in Gemischen herausfinden kann.

Vier Seiten mit kommentierten Parameterlisten schließen sich an – leider wurden bis zu diesem Punkt die in einer der Listen vorkommenden Dummy-Scans nie erwähnt. Daß eine solche Liste einen Einblick in die Vielzahl der Parameter eines modernen Spektrometers gibt, sei unbestritten; ob man ihnen ein gesondertes Kapitel widmen sollte, ist eine andere Frage.

Das letzte Kapitel vor den Beispielspektren geht kurz auf die Grundlagen der ^{13}C -NMR-Spektroskopie ein. Auch hier wird der Leser anwendungsbezogen auf diese Spektroskopie hingeführt; Lösungsmittel, Probenmengen und Interpretation der Spektren stehen im Vordergrund. Dabei leisten sich die Autoren einen groben Fehler, indem sie Uracil als „Aminosäure der DNS“ bezeichnen.

Der etwa 50 Seiten starke Anhang mit ^1H -NMR-Spektren rundet dieses Buch ab. Er beginnt mit einfachen Spektren von Methanol und Diisopropylether und geht bis zu einem Aminocephalosporin-Derivat. Zu jedem der abgebildeten Spektren gehört eine Zuordnungstabelle und ein Hinweis auf Besonderheiten, z.B. auf Spinsysteme oder mesomere Effekte. Der Leser erhält so die Möglichkeit, die im vierten Kapitel beschriebenen Signalmuster in „richtigen“ Spektren wiederzufinden.

Zusammenfassend ist dieses Buch für den interessierten Studenten nur minder geeignet; die physikalischen und mathematischen Grundlagen sind nicht tiefgehend genug, der völlige Verzicht auf alles, was über 1D-Spektren hinausgeht, ist sehr bald limitierend. Dieses Buch ermöglicht dem *völligen* Neuling einen allerersten Einstieg in die NMR-Spektroskopie. Die Texte sind gut lesbar und die Abbildungen ausreichend. Die wenigen Fehler (falsche Skalierung bei -OH auf S. 107, Tabelle falsch bezeichnet auf S. 28) ändern nichts am guten Gesamteindruck.

Das zweite Buch zum Thema Kernresonanzspektroskopie, „NMR – Konzepte und Methoden“ von D. Canet, ist die offensichtlich nicht aktualisierte Übersetzung des französischen Originals von 1991. Es hat eine breite Zielgruppe, angefangen von Studenten nach dem Vordiplom bis zu Doktoranden; auch für „Forscher, die in die umfangreichen Gebiete der Spindynamik und der Multipuls- und multidimensionalen Verfahren eindringen wollen“, sei es geschrieben. Das Buch gliedert sich in Kapitel über Kernresonanz und Struktur, eine Einführung in die physikalischen und quantenmechanischen Konzepte, FT-NMR-Spektroskopie und Signalverarbeitung, dynamische Phänomene und schließlich Multipuls- und multidimensionale Verfahren. Dabei versucht der Autor, eine „zweite Ebene der Lektüre“ einzuführen, indem er komplexere Abschnitte seines Buches mit einem grauen Balken am Rand kennzeichnet. Ebenso sind Abschnitte, die nicht für das grundsätzliche Verständnis notwendig sind, mit dem Balken gekennzeichnet.

Bereits im ersten Kapitel setzt der Autor Kenntnisse der Quantenmechanik voraus; fehlen diese, verliert man schnell den Anschluß, wenn man die Grundlagen etwas tiefer verstehen will. Ist man allerdings einigermaßen firm, dann erfreut die knappe und präzise Darstellung homonuklearer und heteronuklearer *J*-Kopplung. Im Detail und mit quantenmechanischen Ansätzen werden die Modelle der schwachen und der starken Kopplung gezeigt. Ausführlich wird in diesem ersten Kapitel auch auf anisotrope Umgebungen und deren Einflüsse eingegangen.

Im zweiten Kapitel, in dem zusammengefaßt die physikalischen und mathematischen Konzepte der Kernresonanz behandelt werden, werden ausgehend von den Blochschen Gleichungen die einzelnen Bausteine eines NMR-Experiments er-

klärt. Es schließen sich die quantenmechanischen Beschreibungen der NMR-Spektroskopie an, Begriffe wie Dichtematrix und Dichteoperator werden eingeführt, der Produktoperatorformalismus wird mathematisch hergeleitet und verdeutlicht. Dem Potential des Produktoperatorformalismus wird der Autor durch einen Abschnitt über praktische Regeln der Multipuls-NMR-Spektroskopie ge- reicht.

Im dritten Kapitel und nach knapp der Hälfte des Buches wird die Signalverarbeitung, im besonderen die Fourier-Transformation, erschöpfend dargestellt. In diesem Rahmen werden die Prinzipien zur Erzeugung einer zweiten Frequenzdomäne und phasensensitiver Spektren gezeigt. Begrüßenswert ist die Erläuterung der Fast-Fourier-Transformation; sie wird in anderen gängigen Büchern in der Tiefe nicht erklärt. Zum Schluß dieses Kapitels werden auf wenigen Seiten Lineare Vorhersage und Entropiemaximierung beschrieben. Diese Erklärungen sind bei aller Kürze äußerst prägnant und informativ.

Im vierten Kapitel werden dynamische Phänomene der NMR-Spektroskopie behandelt. Dabei werden die verschiedenen Relaxationsarten eingeführt und die Möglichkeiten gezeigt, deren Parameter zu bestimmen. In der ansonsten sehr guten Beschreibung des NOESY-Experimentes im Rahmen der Behandlung der Kreuzrelaxation wird so gut wie überhaupt nicht auf die Möglichkeiten der Strukturberechnung aus experimentellen Daten eingegangen.

Im letzten Kapitel über Multipuls- und mehrdimensionale NMR-Spektroskopie werden neben den heute als „Bausteine“ verwandten DANTE-, INEPT- und BIRD-Experimenten lediglich COSY und HMQC als Beispiele für zweidimensionale Sequenzen vorgestellt; TOCSY wird in einem Abschnitt über Polarisationstrans-

fer kurz erwähnt. Insgesamt ist dieser Teil mit etwa 20 Seiten recht kurz geraten, und man vermißt gerade beim TOCSY die quantenmechanischen Grundlagen. Ein Verweis auf den Originalartikel am Ende des Kapitels kann da nicht vertrösten.

Bedauerlich ist, daß das Buch nicht auf einem neueren Stand ist. So wird der Produktoperatorformalismus zwar gut und ausführlich eingeführt, doch findet er nicht die konsequente Anwendung, die für das Verständnis moderner Pulssequenzen vonnöten ist. Die heutige Nutzung der NMR-Spektroskopie zur Konformationsbestimmung fällt in diesem Buch fast vollständig unter den Tisch.

Das Buch behandelt alle grundlegenden Aspekte der modernen NMR-Spektroskopie, es ist eine sehr gute Einführung mit der Betonung auf quantenmechanischer Herleitung. Gelungen ist dem Autor die Trennung von komplexeren mathematischen und quantenmechanischen Herleitungen und dem Haupttext, der anschaulich in die Problematiken der NMR-Spektroskopie einführt. Manches könnte man wohl mit guten Argumenten auch dem abgesetzten Text zurechnen, so sicherlich einen Teil der sehr ausführlichen Relaxationsrechnungen; anderes könnte hinausgenommen und damit in den normalen Text integriert werden, wie etwa die zwei Seiten über die Fensterfunktionen.

Das Buch ist gut lesbar; die Schreibfehler beschränken sich auf kleine Fehler im Satz [zwei Vertauscher (S. XIII, S. 113) und eine Literaturstelle (S. 140) sind aufgefallen]. Gerade eine gute und ausführliche quantenmechanische Herleitung vermißte man bislang in deutscher Sprache; dieses Buch schließt die Lücke. Ich kann es uneingeschränkt empfehlen.

Peter Gröschke

Institut für Organische Chemie
der Universität Frankfurt