

nach einem standardisierten Schema detailliert in folgender Reihenfolge beschrieben: Zweck des Experiments, wichtige Literaturzitate, Pulsfolge und Phasencyclus, Aufnahmebedingungen für eine konkrete Probenlösung, Verarbeitung der aufgenommenen Daten, Resultat mit Abbildung (in guter Qualität) des erhaltenen Spektrums, Erläuterungen. Jedes Kapitel ist in sich abgeschlossen, so daß der interessierte Leser es verstehen kann, ohne die vorhergehenden Abschnitte gelesen zu haben.

Die ersten fünf Kapitel befassen sich mit grundlegenden Arbeiten am Spektrometer wie dem Abstimmen des Probenkopfes der Optimierung der Magnetfeldhomogenität, der Pulslängenbestimmung sowie mit der Durchführung einfacher NMR-Experimente, beispielsweise der Aufnahme von Standard-¹H- und ¹³C-NMR-Spektren, mit Entkopplungstechniken und dynamischen Kernresonanzmethoden. In Kapitel sechs erfährt man etwas über Multiplizitätsselektion („editing“), also APT, INEPT, DEPT, über Bausteine komplizierterer Pulssequenzen (BIRD-Filter etc.) und Wassersignal-Unterdrückung. Kapitel sieben ist Experimenten mit selektiven Pulsen, Kapitel acht Experimenten mit Hilfsreagentien und quantitativen Messungen und Kapitel neun der heteronuclearen NMR-Spektroskopie gewidmet. Die letzten drei Kapitel behandeln zweidimensionale Meßmethoden (H,H-Verschiebungskorrelationen, ¹³C- und ¹H-detektierte C,H-Korrelationen), NMR-Experimente mit gepulsten Feldgradienten und 3D-NMR-Experimente. Das Buch schließt mit einem Anhang, in dem die Nomenklaturen der verschiedenen Gerätehersteller für die Aufnahmeparameter einander gegenüber gestellt werden, und einem Anhang mit den grundlegenden Regeln des Produktoperator-Formalismus.

Die Autoren haben die wichtigsten NMR-Methoden berücksichtigt und die Experimente für die Zielgruppen passend ausgewählt. Im Kapitel „Heteronukleare NMR-Spektroskopie“ haben wir allerdings Angaben zur ³¹P-NMR-Spektroskopie vermisst. Dieses Nuklid ist sicherlich wichtiger als die behandelten Kerne ¹¹B oder ¹⁷O. Positiv fiel der pädagogisch geschickte Aufbau der Kapitel sechs („1D Multipulse Sequences“) und zehn („The Second Dimension“) auf. Alle Experimente werden an leicht zu beschaffenden Testsubstanzen durchgeführt. Bei der 3D-H,C,P-Korrelation hätten aber die Anwendungsmöglichkeiten der Technik überzeugender dargestellt werden können, wenn statt Triphenylphosphoran eine Probe verwendet worden wäre, die in je-

der Dimension mehr als eine chemische Verschiebung aufweist.

Die einzelnen Methoden sind verständlich beschrieben und lassen sich gut nachvollziehen. Interessenten mit wenig praktischer Erfahrung an NMR-Spektrometern werden jedoch einige Schwierigkeiten mit dem Nacharbeiten haben, insbesondere wenn sie ein Gerät eines anderen Herstellers benutzen als die Autoren – trotz der Übersetzungshilfe im Anhang. Auch wäre bei der Erläuterung der Pulssequenzen, wenn möglich, ein Verzicht auf den Produktoperator-Formalismus zugunsten der Vektordarstellung der Magnetisierung für den theoretisch weniger geübten Leser anschaulicher gewesen.

Dieses auf die praktische Durchführung von NMR-Experimenten ausgerichtete Buch füllt eine Lücke zwischen Bedienungsanleitungen der Spektrometerhersteller und überwiegend theoretisch ausgerichteten Fachbüchern und kann jedem NMR-Labor zur Anschaffung bestens empfohlen werden.

Kerstin Ibrom
Königstein im Taunus

Ludger Ernst
NMR-Laboratorium
der Chemischen Institute
der Technischen Universität
Braunschweig

Solving Problems with NMR Spectroscopy. Von *Atta-ur-Rahman* und *M. I. Choudhary*. Academic Press, San Diego, 1996. 430 S., Broschur 34.95 \$. – ISBN 0-12-066320-1

Die Intention der Autoren dieses Buches ist es, „Forschern praktische Kenntnisse in der Benutzung NMR-spektroskopischer Techniken für die Strukturaufklärung organischer Moleküle zu vermitteln“. Es sind alle Anstrengungen unternommen worden, das Buch nicht zu technisch werden zu lassen und die den Experimenten zugrunde liegenden Prinzipien nichtmathematisch zu beschreiben. Ebenso wie bei dem vorstehend besprochenen Buch von Braun et al. geht es um die Durchführung von NMR-Experimenten, aber das Gewicht liegt hier mehr auf der Analyse der Resultate. Das Buch beginnt mit einem langen Kapitel (89 S.) über „Die Grundlagen der modernen NMR-Spektroskopie“. Hier werden wichtige Spektrometer-Bestandteile, grundlegende Operationen am Gerät, der Einfluß von Radiofrequenz-Impulsen auf die Magnetisierung, die Verarbeitung der Meßdaten und zugehörige technische Ge-

sichtspunkte besprochen. Das zweite Kapitel (57 S.) behandelt „Spin-Echo und Polarisations-Transfer“, Stichworte: APT, INEPT und DEPT. Im dritten Kapitel (37 S.) werden die Grundzüge der zweidimensionalen NMR-Spektroskopie in Bezug auf Datenaufnahme und -verarbeitung beschrieben, ohne daß bereits auf einzelne Experimente eingegangen wird. Kapitel vier (25 S.) widmen die Autoren dem Kern-Overhauser-Effekt (NOE) und praktischen Aspekten bei der Aufnahme von NOE-Differenz-Spektren. Das eigentliche Herzstück des Buches ist Kapitel fünf: „Wichtige 2D-NMR-Experimente“ (131 S.). Hier geht es um homo- und heteronukleare J-aufgelöste Spektren, homo- und heteronukleare Verschiebungskorrelationen, zweidimensionale Kern-Overhauser- (NOESY, ROESY, HOESY) und Austausch-Spektroskopie (EXSY), TOCSY- und INADEQUATE-Experimente sowie protonendetektierte heteronukleare Korrelationen (HMQC, HMBC). Das Prinzip der 3D-NMR-Spektroskopie wird in Kapitel sechs (19 S.) zusammen mit einigen der vielen möglichen Experimente vorgestellt, und das siebte Kapitel (26 S.) über „Neuere Entwicklungen in der NMR-Spektroskopie“ hat Experimente mit frequenzselektiven Anregungsimpulsen zum Thema und erwähnt kurz die Verwendung von Feldgradienten-Impulsen zur Unterdrückung unerwünschter Kohärenzen. Schließlich gibt das achte Kapitel (19 S.) allgemeine Empfehlungen zu der Frage, welche Experimente in welcher Reihenfolge bei der Ermittlung unbekannter Molekülstrukturen durchgeführt und ausgewertet werden sollten. An zwei Beispielen aus ihrer eigenen Forschung, einem Lupinen- und einem Steroid-Alkaloid, führen die Autoren dann den Gang von Strukturanalysen vor. Ein Glossar wichtiger, in der NMR-Spektroskopie benutzter Termini (10 S.) und ein ebenso langes Stichwortverzeichnis beschließen das Buch.

Der Text ist leicht verständlich, gut zu lesen und erläutert die wichtigsten heutzutage benutzten NMR-Verfahren. Allerdings wird nicht ganz klar, wer die wirklichen Adressaten sind: Für Anfänger ohne Vorkenntnisse sind die Beschreibungen oft nicht ausführlich genug, für Fortgeschrittene hingegen ist ein Großteil der dargestellten Materie selbstverständlich. Das Buch hält nicht ganz, was der Titel verspricht. Strukturprobleme zu lösen, ohne Kenntnis von chemischen Verschiebungen oder Kopplungskonstanten zu haben, die beide nicht besprochen werden, ist zwar oft möglich, aber meist nicht die ökonomischste Vorgehensweise. Auch werden wichtige ältere etablierte Techni-

ken, z.B. die Entkopplung, nicht besprochen. Ehrlicher wäre ein Buchtitel wie „Modern NMR Spectroscopic Techniques“ oder ähnliches gewesen.

Lobenswert ist, daß zu jedem Kapitel Übungsaufgaben samt Lösungen vorhanden sind. Leider sind die Fragen nicht immer von großem didaktischem Wert (Beispiel: „The signal-to-noise ratio can be increased by ... (applying) proper apodization functions. What would happen ... without apodization?“) und belegen die bisweilen eigenwilligen Ansichten der Autoren. So wird die Frage nach dem geeignetesten Probenkopf für eine präparativ arbeitende Gruppe, bei der Substanzmangel keine Rolle spielt, mit „Probenkopf für 10–15 mm-Röhrchen“ beantwortet. Der gravierendste Mangel des Buches besteht in der düftigen Qualität vieler Abbildungen. Dies betrifft vor allem die Wiedergabe von Spektren, von denen etliche offensichtlich handgezeichnet sind. Viele 2D-Spektren sind viel zu klein dargestellt. Bisweilen fehlen die eindimensionalen Spektren an einer der Achsen oder sind so skaliert, daß Methyl-Singulets gerade vollständig abgebildet sind (4 mm hoch!) und deshalb von Kopplungsmultiplets nichts zu erkennen ist, da deren Höhe nur den Bruchteil eines Millimeters beträgt. Dies geschieht durchaus auch auf Seiten, die nicht einmal voll ausgenutzt sind. Ein größeres Format und ein sorgfältigeres Layout wären bei einer Überarbeitung wünschenswert.

Ludger Ernst

NMR-Laboratorium
der Chemischen Institute
der Technischen Universität
Braunschweig

Kerstin Ibrom

Königstein im Taunus

Polycyclische Aromaten. (Reihe: Teubner Studienbücher Chemie). Von M. Zander. B. G. Teubner, Stuttgart, 1995. 264 S., Broschur 34.80 DM. – ISBN 3-519-03537-5

Die Motivation, sich mit polycyclischen Aromaten zu beschäftigen, röhrt von ihrer großen Bedeutung in so unterschiedlichen

und interdisziplinär miteinander verflochtenen Bereichen wie denen der industriellen Chemie, der Materialwissenschaften, der Umweltanalytik, der medizinischen Forschung und nicht zuletzt der organischen Synthese. All diese Forschungsbereiche sind in jüngster Zeit von der Entdeckung der Fullerene und der Entwicklung ihrer Chemie bereichert worden, und so ist es nicht verwunderlich, daß der Autor des vorliegenden Buches auch dieses hochaktuelle Thema mit berücksichtigt hat. Ob dies eine so glückliche Aktualisierung war, sei dahingestellt. Die Tatsache jedoch, daß das Erscheinen von Monographien zu polycyclischen Arenen entweder viele Jahre zurückliegt oder sie sich aber nur sehr speziellen Teilgebieten widmen, ließ auf diese zusammenfassende Darstellung, die in zehn in sich abgeschlossene Kapitel gegliedert ist, gespannt sein.

Das einleitende Kapitel (25 Seiten) gibt anhand einiger Beispiele einen kurzen Überblick über ausgesuchte Aromatizitätskriterien, wobei anzumerken ist, daß der Leser von der Problematik dieses Themas und von der gegenwärtigen Diskussion um die Ursache der Aromatizität weitgehend unbelastet bleibt. Im Anschluß daran werden im zweiten Kapitel (24 Seiten) die allgemeinen Bauprinzipien der polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (PAHs) vorgestellt. Neben der Einteilung in kondensierte und nicht-kondensierte, alternierende und nicht-alternierende, kata- und perikondensierte PAHs, sowie in „Kekulians“, und „Non-Kekulians“, finden hier auch nichtplanare PAHs Erwähnung, jedoch gehen Beispiele dafür nicht über die Familie der Helicene hinaus. Dieser Verbindungsklasse begegnet man erneut in Kapitel drei (35 Seiten), das sich exemplarisch mit der Vielfalt aromatischer Polycyclen befaßt. Hier werden die Strukturen und Eigenschaften von allbenzoiden PAHs, Acenen, angular anellierte PAHs, Circumarenen und nicht-alternierenden PAHs skizziert. Das Kapitel schließt mit einer Diskussion der Entstehungsprozesse der Fullerene sowie einem kurzen Einblick in ihre Reaktionsweisen.

Gegenstand des vierten Kapitels (25 Seiten) sind theoretische Untersuchungen der PAHs. Neben semiempirischen Methoden werden graphentheoretische An-

sätze und das qualitative Modell des Clarischen Elektronensextetts diskutiert und in ihren Aussagen den experimentellen Befunden gegenübergestellt. Das folgende Kapitel (20 Seiten) behandelt die Wechselwirkung der PAHs mit Licht. Dabei werden die charakteristischen UV-Absorptions der einzelnen PAH-Klassen ebenso erläutert wie die Phänomene der Fluoreszenz und Phosphoreszenz.

Auf den sich anschließenden 14 Seiten des sechsten Kapitels werden die klassischen Reaktionstypen der PAHs (Substitutions- und Additionsreaktionen, Isomerisierungen) beschrieben. Darauf baut das siebte Kapitel (29 Seiten) auf, in dem die allgemeinen Syntheseprinzipien zur Herstellung von PAHs im Mittelpunkt stehen. Dieser präparative Teil wird durch Abschnitte über die Reinigung und die experimentelle Konstitutionsermittlung der PAHs abgerundet.

Das sehr gelungene achte Kapitel (24 Seiten) vermittelt Eindrücke sowohl von der historischen Entwicklung der industriellen PAH-Chemie als auch von ihrer aktuellen Bedeutung. Interessant ist dabei ein Ausflug in die Welt der technischen Kohlenstoffprodukte mit einer ausführlichen Darstellung von Pechmesophasen. Das Buch schließt mit zwei Kapiteln (20 und 1 Seite) zur Rolle der PAHs in der Umwelt bzw. im interstellaren Raum. Neben umweltanalytischen Aspekten (Vorkommen, Emissionsquellen, Nachweismöglichkeiten) werden auch Mechanismen der PAH-induzierten Cancerogenese diskutiert.

Sicherlich hätte man bei der großen Breite des Themas den einen oder anderen Schwerpunkt anders wählen können. Besonders die Übergänge von der zumeist planaren Welt der PAHs zu der der Fullerene ist häufig sehr sprunghaft und so erscheinen die entsprechenden Passagen recht isoliert. Insgesamt jedoch bietet das Buch gerade für Studierende der Chemie einen guten Einstieg in das Gebiet der polycyclischen Arene, nicht zuletzt wegen der umfangreichen Literaturhinweise (angereichert mit einigen Exoten aus der Privatbibliothek des Autors) und einem guten Stichwortverzeichnis.

Rüdiger Faust

Pharmazeutisch-Chemisches Institut
der Universität Heidelberg