

Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie. 5. überarbeitete Auflage. Von *M. Hesse, H. Meier, B. Zeeh*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 1995. 364 S., Broschur 82.00 DM – ISBN 3-13-576105.3

1979 erschien die erste Auflage des oben genannten Buches, das schnell weite Verbreitung fand. Das hatte vor allem zwei Gründe: Auf der einen Seite vereinigte es in sich eine kurzgefaßte Darstellung der wichtigsten spektroskopischen Methoden zur Strukturaufklärung organischer Moleküle, die aus dem modernen Labor nicht mehr wegzudenken sind (UV/Vis-, IR- bzw. Raman-, NMR-Spektroskopie und Massenspektrometrie). Zum anderen war das Buch mit einer Fülle von tabellarischem Material ausgestattet, das einem bei dem alltäglichen Kampf mit der Interpretation von Spektren äußerst hilfreich zur Seite stand. Dieses Konzept war erfolgreich genug, um bis in die nun erschienene fünfte Auflage hinein zu überdauern. Gegenüber der vorigen Auflage aus dem Jahre 1991 sind vor allem einige Ergänzungen vorgenommen worden. Nicht überraschend, finden sich diese hauptsächlich in den beiden Kapiteln über „neuere“ Methoden, d. h. der NMR-Spektroskopie und Massenspektrometrie.

Relativ straff (27 S.) wird die UV/Vis-Spektroskopie dargestellt: Nachdem die physikalischen Grundlagen gelegt, die Probenvorbereitung und apparative Aspekte abgehandelt sind, werden die wichtigsten Chromophore und zum Abschluß dieses Kapitels einige Anwendungsbeispiele vorgestellt, wobei auch chiroptische Methoden nicht zu kurz kommen.

Ausführlicher ist das Kapitel über die IR- und Ramanspektroskopie (42 S.). Auch hier werden erst die theoretischen Fundamente gelegt, ehe auf experimentelle Aspekte eingegangen wird: Dem apparativen Fortschritt wird durch die eingehende Beschreibung des FT-IR-Spektrometers und der klaren Darstellung seiner Vorteile gegenüber dem klassischen Gerät Rechnung getragen. Übersichten über charakteristische IR-Absorptionen, einige instruktive Beispielspektren und ein kurzer Ausflug in die Raman-Spektroskopie runden dieses Kapitel ab.

Die stark anwachsende und noch immer zunehmende Bedeutung der NMR-Spektroskopie spiegelt sich im Umfang des nächsten Kapitels wider (138 S.). Hier werden hauptsächlich die ^{13}C - und ^1H -NMR-Spektroskopie behandelt, aber auch dem ^{19}F -, ^{31}P - und ^{15}N -Kern wird jeweils ein kurzer Abschnitt gewidmet. Eher jedoch die einzelnen Kernsorten näher erläutert werden, werden erst einmal

die physikalischen Fundamente des NMR-Experiments gelegt. Auf dieser Basis aufbauend, werden wichtige spektroskopische Parameter wie chemische Verschiebung, Spin-Spin-Kopplungskonstante, Linienbreite oder Signalintensität eingeführt. Ein weiterer Abschnitt erklärt den Zusammenhang zwischen NMR-Spektrum und Molekülstruktur, wobei auch dynamische Prozesse ausführlich erörtert werden. Erst nach dieser allgemeinen Einführung wird die ^1H -NMR-Spektroskopie im speziellen zum Thema eines umfangreichen Abschnittes. Hier werden die Faktoren, die die chemische Verschiebung eines Protons bedingen, diskutiert und die typischen Verschiebungsbereiche wichtiger Verbindungsklassen ebenso wie Inkrementsysteme zur Abschätzung der Verschiebung einzelner Protonen vorgestellt. Daneben wird die analytisch wertvolle Strukturabhängigkeit von Kopplungskonstanten zwischen Protonen und ^1H -, ^{13}C -, ^{19}F -, ^{31}P - bzw. ^{15}N -Kernen herausgearbeitet und mit zahlreichen Beispielen belegt. Auch wichtige Methoden und Tricks, z. B. der Einsatz von Verschiebungs-reagentien, Mehrfachresonanz und zweidimensionale Experimente wie COSY-, HETCOR- oder ROESY-Spektroskopie werden beschrieben. Analog ist das Unterkapitel über die ^{13}C -NMR-Spektroskopie aufgebaut, wobei hier Entkopplungs-, Polarisations-transfer- und Multiplett-Selektions-Experimente mehr Beachtung finden. Ergänzt wird dieses NMR-Kapitel schließlich durch eine umfangreiche Sammlung der ^1H - und ^{13}C -NMR-Daten exemplarischer Vertreter der wichtigsten Substanzklassen.

Das letzte große Kapitel (93 S.) hat die Massenspektrometrie zum Thema. Nur kurz werden die instrumentellen Grundlagen beschrieben, ehe die am häufigsten beobachteten Fragmentierungsreaktionen organischer Moleküle vorgestellt und anhand zahlreicher Beispiele diskutiert werden. Von praktischem Interesse sind die sich anschließenden Abschnitte, die sich mit thermischen Reaktionen im Massenspektrometer und mit den „Tücken“ von Massenspektren verunreinigter Proben befassen. Besonders hervorzuheben ist ein Kompendium, in dem auf 31 Seiten zahlreiche Ionisierungsmethoden vorgestellt, ihre Vor- und Nachteile erörtert, wichtige Methoden wie die GC/MS-Kopplung oder die Tandem-Massenspektrometrie anhand von Beispielen erläutert oder der Nutzen von Übergangssignalen zur Aufklärung von Fragmentierungsreaktionen beschrieben werden. Für den Gebrauch dieses Buches im Labor sind auch die sich anschließenden Tabellen hilfreich, in de-

nen unter anderem häufig beobachtete Ionen- und Massendifferenzen und damit korrelierende Strukturelemente aufgelistet werden.

Insgesamt ist der „Hesse/Meier/Zeeh“ auch in seiner 5. Auflage ein Buch, das man Studierenden ohne Einschränkung empfehlen kann und das auch noch Jahre später den in der Organischen Chemie Arbeitenden von Nutzen sein wird. Die Gratwanderung zwischen Lehrbuch und Datensammlung ist gut gelungen. Natürlich können die relativ kurzen Darstellungen der einzelnen Analysemethoden bei weitem nicht alle Fragen abdecken, ebenso wie dieses Buch nicht mit einem reinen Spektrenkatalog oder Tabellenwerk konkurrieren kann; dafür gibt aber ein Literaturanhang jeweils Hinweise auf mehr in die Tiefe gehende Darstellungen oder umfangreichere Kataloge. Einer der ersten Griffe aber, sei es, daß man auf der Suche nach einer geeigneten Ionisierungsmethode für eine heikle Verbindung ist oder daß man schnell mal nachschauen will, wie groß die ^1H , ^{13}C -Kopplungskonstante von Cuban ist, wird immer noch zum „Hesse/Meier/Zeeh“ gehen.

Johannes Belzner

Institut für Organische Chemie
der Georg-August-Universität Göttingen

Encyclopedia of Nuclear Magnetic Resonance. Herausgegeben von *D. M. Grant und R. K. Harris*. John Wiley & Sons, Chichester, 1996. 5323 S., geb. 2250.00 £. – ISBN 0-471-93871-8

Dieses gewichtige Werk aus acht großformatigen Bänden, das ca. 23 kg auf die Waage bringt und 0.4 Regalmeter beansprucht, erschien pünktlich zum Goldenen Jubiläum (1945/46–1996) der kernmagnetischen Resonanz. Band 1 („Historical Perspectives, 728 Textseiten, ISBN 0-471-95839-5) kann zum Preis von 125.00 £ auch separat erworben werden, ein überlegenswerter Gedanke (siehe unten), ansonsten werden die acht Bände nur zusammen abgegeben. Der Verlag bringt seit einiger Zeit weitere Chemie-Encyclopädien heraus, z. B. die in dieser Zeitschrift bereits besprochene „Encyclopedia of Inorganic Chemistry“ (*Angew. Chem.* **1996**, *108*, 1333), die ähnlich aufgemacht und vergleichbar organisiert ist. Hauptherausgeber der Encyclopedia of Nuclear Magnetic Resonance („ENMR“) sind zwei ausgewiesene Fachleute, David M. Grant (University of Utah, USA) und Robin K. Harris (University of Durham, UK), die bereits seit Ende der fünf-

ziger Jahre auf dem NMR-Gebiet arbeiten. Sie haben für sechs thematisch abgegrenzte Gebiete je einen Spezialisten als Sektions-Herausgeber benannt, und zwar E. D. Becker (NIH, USA) für „Historical Perspectives“, J. W. Emsley (University of Southampton, UK) für die Sektion „Inorganic Applications; Polymer and Liquid Crystalline Solutions; Quadrupolar Nuclei; One- and Multidimensional Spectroscopy of Solutions“, B. C. Gerstein (Iowa State University, USA) für „Physics Applications; Solid Methods; Solid-State Applications“, S. I. Chan (California Institute of Technology, USA) für „Biological Applications“, T. C. Farrar (University of Wisconsin, USA) für „Instrumentation; Organic Applications; Relaxation Topics; Theory“ sowie I. R. Young (Hammersmith Hospital, UK) für „Biomedical Applications; Imaging Principles and Applications“. Die Titel der Sektionen belegen, daß mit „Nuclear Magnetic Resonance“ nicht nur die NMR-Spektroskopie und ihre Anwendungen in der Chemie abgedeckt sind, sondern daß auch Themen wie Bilderzeugung („Imaging“), NMR-Mikroskopie, in-vivo-Spektroskopie, Datenverarbeitung und neben der Chemie so diverse Anwendungsbereiche wie Biologie (z. B. Pflanzenphysiologie), Medizin (z. B. klinische Anwendungen), Physik, Werkstoffkunde, Geologie (NMR für die Erdöl-Prospektierung) und Landwirtschaft angesprochen werden. Annähernd 630 Autoren haben die genannten Themenkreise mit etwa 520 Einzelbeiträgen über ihre Spezialgebiete abgedeckt. Die Artikel sind zwischen zwei und 30 Seiten lang und unterschiedlich anspruchsvoll, was nicht von Nachteil sein muß, da die Leserschaft ebenfalls nicht unbedingt homogen ist. Außerdem ist das Niveau der Artikel natürlich zum Teil durch ihren Inhalt bestimmt. In dieser Rezension auf einzelne Beiträge einzugehen, wäre bei deren Vielzahl ungerecht gegenüber den Autoren, die nicht erwähnt werden können.

Aufgrund der alphabetischen Anordnung stehen die zu einer Sektion gehörigen Beiträge nicht zusammen, sondern sind über die einzelnen Bände verteilt. In jedem der Teilbände 2–8 ist jedoch das Vorwort abgedruckt, das eine über sieben Seiten gehende Liste der Titel aller Artikel der ENMR enthält. Diese Liste ist nach Sektionen und Untersektionen geordnet, so daß man die thematische Verwandtschaft von Aufsätzen schnell erkennen kann. Außerdem enthält jeder Band eine komplette alphabetische Liste aller Beiträge. Des weiteren wird innerhalb der Einzelbeiträge konsequent auf verwandte Artikel verwiesen. Band 8 weist ein 205

Seiten umfassendes Stichwortregister auf, eine Liste der Autoren (33 S.) und ein Glossar medizinischer und beim Imaging benutzter Termini (11 S.). Dieses Glossar ist für den Laien sehr hilfreich. Woher sollte er sonst wissen, daß etwa MRV für „Magnetic Resonance Venography“ steht und sich hinter US nicht die Vereinigten Staaten sondern Ultraschalluntersuchungen („Ultrasonography“) verstecken? Die Liste der Autoren und der von ihnen bearbeiteten Themen liegt der ENMR in korrigierter Fassung noch einmal als separates Heft bei. Insgesamt wurde also beträchtlicher Aufwand betrieben, um dem Leser den Zugang zu gesuchten Informationen möglichst leicht zu machen.

Band 1 habe ich als einen Leckerbissen erster Güte genossen. Hier wird die Entwicklung der NMR dargestellt – von den Anfängen in den Händen weniger Physiker bis zu der Ausbildung einer eigenständigen Forschungsdisziplin und dem Heranreifen zu einer praktischen Methode mit vielfältigen Anwendungen in den unterschiedlichsten Wissenschaftszweigen. Der Band beginnt mit dem hochinteressanten ausführlichen Beitrag „The Development of NMR“ von E. D. Becker, C. L. Fisk und C. L. Khetrapal (158 Seiten und 1099 Literaturzitate), in dem unter anderem die beiden Kurzmitteilungen der Gruppen um Purcell und Bloch (*Phys. Rev.* 1946) abgedruckt sind, die letztlich zur Verleihung der Physik-Nobelpreise 1952 führten. Es folgen kurze Artikel von über 200 Autoren, in denen teilweise aus sehr persönlicher Sicht die Entwicklungen der NMR geschildert werden und in denen die Autoren ihre eigenen Beiträge dazu darstellen. Häufig ist auch anekdotisches Material eingeflossen, das andernfalls, da separat nicht publizierfähig, verloren gegangen wäre. Unter den Autoren befinden sich viele Pioniere aus der Frühzeit der NMR, aber auch Wissenschaftler, deren Namen erst in neuerer Zeit geläufig geworden sind. Diese persönlichen Erinnerungen sind faszinierende Lektüre. Allen Aufsätzen, auch den fachlichen Beiträgen in den Bänden 2–8, ist eine kurze Biographie der Verfasser beigelegt.

Die gemeinsame Arbeit der Herausgeber und der großen Zahl der Autoren hat die ENMR zu einem beeindruckenden Werk gemacht, dessen Wert sich vor allem beim Einarbeiten in neue Teilgebiete des weiten Feldes der Kernresonanz erweisen wird und ebenso beim Blick über die Grenzen des eigenen, meist relativ kleinen Arbeitsfeldes. Aufgrund des Preises wird, von Fanatikern abgesehen, eine Privatperson dieses begehrenswerte Werk wohl

kaum anschaffen. Bibliotheken aber, deren Etat trotz herrschenden Sparzwangs noch nicht erschöpft ist, sei der Kauf sehr empfohlen. Alle an der kernmagnetischen Resonanz interessierten Leser wären sicher dankbar, wenn ihnen dieses Nachschlagewerk zugänglich gemacht würde. Ein Gedanke zum Schluß: Könnte eine CD-ROM-Ausgabe – mit niedrigeren Herstellungskosten und an die Kunden weitergegebenem Preisvorteil – nicht auch Privatleute zum Kauf anregen? Der Rezensent gibt allerdings zu, daß ihm die Vorstellung des „Schmökerns“ am Bildschirm wenig attraktiv erscheint. Sehr reizvoll ist es dagegen, sich mit Band 1 der ENMR aufs Sofa zurückzuziehen.

Ludger Ernst

NMR-Laboratorium der Chemischen
Institute der Technischen Universität
Braunschweig

Multidimensional Solid-State NMR and Polymers. Von K. Schmidt-Rohr und H. W. Spiess. Academic Press, 1994, 478 S., geb. 65.00 DM – ISBN 0-12-626630-1

Kein Zweifel, die Monographie von Klaus Schmidt-Rohr und Hans Wolfgang Spiess ist beeindruckend. Obschon sie die Polymere immer im Hinterkopf haben, legen die Autoren den Schwerpunkt klar auf die Methode moderner Festkörper-NMR-Spektroskopie, deren Entwicklung im vergangenen Jahrzehnt stark von den Arbeiten von H. W. Spiess und seiner Gruppe geprägt wurde. So lautet die Überschrift von Kapitel zwei konsequenterweise Principles of NMR of organic solids, und nur ein kurzes, beschreibendes Kapitel ist der Struktur und der Dynamik fester Polymere direkt gewidmet.

Ebenso wie die Autoren könnte man danach fragen, für wen dieses Buch geschrieben wurde. Es wendet sich an eine breite Leserschaft: ebenso an die Anfänger auf dem Gebiet der Festkörper-NMR-Spektroskopie, Studenten etwa, die eine Diplomarbeit über dieses Gebiet schreiben, wie auch an Fortgeschrittene. Obwohl sich K. S.-R. und H. W. S. bemüht haben, den Text so abzufassen, daß man ihn ohne Nachschlagen in der zitierten Literatur verstehen kann – so wurde es im Vorwort formuliert – braucht ein Anfänger doch Anleitung, um diese Monographie lesen zu können, und ich beeile mich hinzuzufügen: Warum sollte nicht auch hier das Wechselspiel zwischen Lesen, Diskutieren und Experimentieren zum Fortschritt in der Wissenschaft führen.