

tionsvorgänge im Detail erörtert werden. In Kapitel 9 werden Spinecho-Experimente wie das bekannte Hahn-Echo behandelt. Unter anderem werden Echo-Sequenzen behandelt, die unter dem Namen „Rotary, Driven, Stimulaten, Quadrupolar, Solid Magic Echo“ Eingang in die Literatur gefunden haben und als Bausteine in vielen Pulsprogrammen verwendet werden. Kenntnis dieser elementaren Konzepte ist die Voraussetzung für das Design neuer Pulssequenzen. Die Autoren behandeln dieses Thema auf beinahe 60 Seiten sehr umfassend. Doppelresonanz-Techniken wie ENDOR, DNP, SEDOR und CP werden in Kapitel 10 abgehandelt. Diese Experimente werden am Beispiel eines Dreiniveausystems und eines Vielniveausystems erläutert. Schwerpunktmaßig werden Doppelresonanzexperimente behandelt unter Berücksichtigung elektronischer Übergänge. Das 11. Kapitel beschäftigt sich mit Multipulssequenzen und den Problemen der homonuklearen Entkopplung. Sequenzen wie CPMG, WAHUHA, LG und die Varianten MREV-8 und BR-24 werden vorgestellt. Eine Einführung in die Mehrquanten-Spektroskopie wird in Kapitel 12 gegeben. Leider werden hier wichtige Methoden wie MQ-MAS- und „double quantum local field separated“-Spektroskopie nicht besprochen. In Kapitel 13 werden die Grundlagen der zweidimensionalen Spektroskopie kurz erläutert.

Die Möglichkeit, das Prinzip der magnetischen Kernresonanz in einem Quantencomputer zu nutzen, hat in letzter Zeit großes Aufsehen erregt. Ein solcher Computer verwendet Quantenzustände als Speicher, die als Überlagerungen mehrerer verschiedener Zahlen angesehen werden können. Nach Rechnungen mit diesen Quantenzuständen muss eine Dekonvolution durchgeführt werden, um ein eindeutiges Ergebnis zu erhalten; ein Quantencomputer hat das Potential, um vieles leistungsfähiger zu sein als ein herkömmlicher Computer gleicher Größe. Das Kapitel 14 beschäftigt sich intensiv mit diesem Thema. Somit ist die Brücke zwischen Objekt-orientierter Computerprogrammierung und der Programmierung von NMR-Impulssequenzen geschlagen. Im letzten Kapitel werden analytische Rechenverfahren behandelt, die für eine quantitative

Beschreibung jedes MR-Experiments unentbehrlich sind. Das Kapitel bietet Einblick in das Floquet-Verfahren, Störungstheorie und die Prinzipien der Sekulärglättung.

Darüber hinaus enthält das Buch eine knappe Einführung in Simulationsprogramme zur Berechnung von MR-Phänomenen. Die entsprechende Software GAMMA und NMRMAT wird zusammen mit einigen Anwendungsbeispielen auf der CD-ROM mitgeliefert. Dies ist meines Erachtens eine sehr schöne Idee, denn bei vielen Festkörper-NMR-Experimenten sind mehr oder weniger intensive Berechnungen notwendig, um die Spektren in einer Multispinumgebung richtig zu analysieren.

Michael Mehring veröffentlichte 1983 die 2. Auflage seines Buchs *High Resolution NMR in Solids* (Springer), die mittlerweile leider vergriffen ist. Im Vergleich zu diesem Buch hat das vorliegende wesentliche Erweiterungen erfahren: So sind die Ausführungen über die quantenchemische Natur des Spins, die Relaxation, Spinechos und Quantencomputer auf der Basis von NMR weit aus umfassender. Durch diese Aktualisierung ging allerdings der klare Aufbau des Inhalts, der das ältere Buch auszeichnet, teilweise verloren. Außerdem wurde das Kapitel über magnetische Abschirmungstensoren, in dem Probleme und Beispiele aus der Praxis zur Anisotropie chemischer Verschiebungen erörtert wurden, nicht in das neue Buch übernommen. Weiterhin ist bedauerlich, dass Entwicklungen, die aus der Zeit nach 1983 stammen, mit Ausnahme des NMR-Quantencomputers nicht thematisiert wurden. Allgemein wird die Theorie zu sehr überbetont, was die Erwartungen eines Lesers, der mehr an praktischen Anwendungen interessiert ist, enttäuschen könnte. Ein Kapitel oder Abschnitt über „Recoupling“-Phänomene im Festkörper findet sich beispielsweise nicht. Da die Ent- und Rückkopplung eng miteinander verbunden sind, hätte man dieses Thema im Kapitel 11, wo über die homonukleare Entkopplung berichtet wird, aufnehmen können. Auch ein Kapitel über NMR-Anwendungen bei Polymeren und Biomolekülen fehlt leider. Wahrscheinlich ist es nicht möglich, alle interessanten Themen dieses Forschungsgebiets in nur einem Buch umfassend zu behandeln.

Das Buch kann dennoch jedem empfohlen werden, der sich für die physikalischen Grundlagen der magnetischen Kernresonanz und Elektronenspinresonanz interessiert. Es sollte in der Bibliothek eines jeden Wissenschaftlers, der sich mit NMR-Spektroskopie beschäftigt, zu finden sein.

Bernd Reif

Institut für Organische Chemie und
Bochemie II
der Technischen Universität München

Structure and Bonding in Crystalline Materials. Von *Gregory S. Rohrer*. Cambridge University Press, Cambridge 2000. 539 S., Broschur 29.95 €.—ISBN 0-521-66379-2

Das vorliegende Lehrbuch nähert sich auf etwa 550 Seiten den Zusammenhängen von Struktur und Bindung in kristallinen Festkörpern an. Bewusst ist hier der Begriff „Annäherung“ verwendet, denn angesichts des Themas und spätestens beim Lesen des Buches wird einem klar, dass der Umfang dieses Stoffgebiets nahezu grenzenlos ist. Eine Gesamtdarstellung käme somit eher der Quadratur des Kreises gleich. Dennoch wurde von Gregory Rohrer eine gute Arbeit geleistet, selbst in Anbetracht einiger Schwachstellen, die eine erste Auflage so mit sich bringt.

Thema und Stoff des Buches entstammen einem Vorlesungszyklus für graduierte Studenten (Niveau von Diplomanden und Doktoranden) im Bereich Materials Science and Engineering an der Carnegie Mellon University. Der Autor lehrt den Inhalt des Buches im Rahmen einer ein-semestriegen Veranstaltung mit etwa 52 Vorlesungsstunden. In seinem Vorwort stellt er explizit fest, dass es seine Absicht sei, die vorhandenen Bücher der Spezialliteratur über Kristallographie, Festkörperphysik und anorganische Strukturchemie in einer ansprechenden und für Studierende nützlichen Weise zusammenzufügen. Dabei will er die vorhandene Literatur keineswegs ersetzen, sondern verwendet sie sogar durch entsprechende Verweise für weiterführendes Lesen und vertiefendes Arbeiten.

Das Buch besteht aus 10 Kapiteln. In einer Einführung werden die elementar-

sten Begebenheiten, Konzepte und Trends im Periodensystem erklärt. Danach wird in drei Kapiteln auf die Grundlagen der Kristallographie eingegangen. Ausgehend vom Bravais-Gitter werden die Raumgruppen erläutert und letztendlich die grundlegenden Strukturelemente (Packungen, Füllung von Zwischengitterplätzen, Klassifizierungsschemata) sowie zahlreiche Strukturprototypen vorgestellt. An Ausführungen über Beugungsmethoden schließen sich vier Kapitel über verschiedene Bindungsarten in Kristallen an, wobei (ungewöhnlicherweise) zuerst über die schwächeren, so genannten sekundären Wechselwirkungen berichtet wird. Daran anschließend werden die ionische, metallische und kovalente Bindung behandelt. Der Aufbau dieser Kapitel über Bindungen in Festkörpern ist jeweils gleich: der Phänomenologie folgt ein physikalisches Modell, mit dem, wenn möglich, messbare Größen ermittelt werden. Das letzte Kapitel ist der Vorhersage von Strukturen gewidmet. Ein ausführlicher Anhang mit speziellen Daten zu einzelnen Kapiteln (Raumgruppen, Atomformfaktoren, Ionenradien und weitere kristallographische Daten) schließen das Buch ab.

Am Ende eines jeden Kapitels stehen Aufgaben (10–30 an der Zahl) mit recht unterschiedlichem Niveau, die den vorgestellten Inhalt in Übungen vertiefen und zum besseren Verständnis beitragen. Zudem findet sich eine Liste von Literaturquellen, auf die bereits im Text verwiesen wird. Besonders hilfreich ist

hierbei die genaue Seitenangabe, die ein ausuferndes Suchen in den Quellen verhindert und dieses Buch als Primärliteratur für das Studium lesenswert macht.

Sicherlich bedürfen einige Diagramme noch der Überarbeitung. Wünschenswert wäre ein verbesserter Satz sowie ein einheitliches Schriftbild. Zudem benötigen die Kurvendiagramme ein kohärentes Layout, und in vielen Fällen erkennt man den Export des Diagramms aus einer Vorlage mit niedrigerer Auflösung. Seiner möglichen Kompetenz als Referenzbuch abträglich ist das leider sehr kurz ausgefallene Stichwortverzeichnis. Hier sollte man unbedingt einen separaten Index der beschriebenen Strukturen ausgliedern und das eigentliche Verzeichnis der besprochenen und verwendeten Begriffe erheblich ausweiten. Aber dies ist, zusammen mit den eher ästhetischen Aspekten des Druckbildes, kein gravierender Nachteil und kann zudem bei einer Neuauflage ohne wesentliche Mühen verbessert werden. Dann hat der Autor auch die Möglichkeit, in den Kapiteln zur Bindung bei der Berechnung der Stabilität von Strukturen ein wenig ausführlicher auf den Begriff der Elektronenstruktur einzugehen. Hier mangelt es dem Buch doch an Aktualität sowie an der Integration neuerer Forschungsergebnisse. Gerade im Hinblick auf das letzte Kapitel darf man sagen, dass moderne quantentheoretische Methoden den rein phänomenologischen Konzepten von Miedema und anderen Wissenschaftlern nunmehr eine solide

Grundlage bereitstellen und sogar Vorstellungen entwickeln, die darüber hinaus gehen. Insbesondere bei der Entwicklung neuartiger Materialien sind solche Konzepte vielmals für das Verständnis unabdingbar.

Letztendlich entpuppt sich das Buch als reich an grundlegendem Wissen und Informationen. Obwohl der Autor darlegt, dass sich der Inhalt dieses Buches auch aus einem guten Dutzend anderer sehr guter Bücher ergibt (und dort wahrscheinlich ausführlicher dargestellt wird), bietet sein Werk doch den Vorteil, dass es mit detaillierter Angabe der Quellen das Wesentliche über Struktur und Aufbau von Materialien in einem Buch vereint. Hier liegt ein nicht unbedeutender Teil seiner Stärke. Der konzeptionelle und didaktische Aufbau der einzelnen Kapitel sollte Studierenden sehr entgegenkommen und auch dem Lehrenden einen guten Überblick über den zu vermittelnden Stoff geben. Die Fülle von Strukturdaten, die zahlreichen Tabellen und Tafeln verschiedener physikalischer Größen im Text und im Anhang machen das Buch aber auch für erfahrene Forscher sehr nützlich. Insofern bietet es sich für alle, die sich mit kristallinen Festkörpern im weitesten Sinne beschäftigen, als nützliches und aktuelles Kompendium und somit als wertvoller Begleiter bei der Arbeit an.

Peter Kroll

Institut für Anorganische Chemie
der Technischen Hochschule Aachen