

Kunststoff aus Milchsäure und Schaumstoff aus Ricinusöl von S. Horn, H. J. Bader und K. Buchholz beschrieben. Experimente werden auch im Kapitel „Energieeintrag durch Mikrowelle und Ultraschall“ von A. Lühken und H. J. Bader vorgestellt. Die Lösungsmittelproblematik im Labor wird am Beispiel der Rückstandsanalytik von Pflanzenschutzmitteln von A. Eickhoff und R. Kreuzig diskutiert.

Diese Kapitel der deutschen Ausgabe, die als Material für den Lehrer einzuordnen sind, fehlen in der amerikanischen und sind in der englischen als Zusatzmaterial bereitgestellt. Möglicherweise deshalb, weil es sich bei den angloamerikanischen Ausgaben explizit um Material für Schüler ab etwa 16 Jahren handelt. Dafür werden den amerikanischen Schülern zur Erläuterung des Prinzips „Using safer materials for chemical reactions“ ein sehr schönes Experiment, bei dem Vitamin C anstelle eines Quecksilbersalzes benutzt wird, und zur Verdeutlichung des Prinzips „Using renewable resources“ einige Experimente zum Biodiesel angeboten. Das Prinzip „Safer solvents for chemical processes“ wird am Beispiel des Einsatzes von flüssigem CO₂ in der chemischen Reinigung verdeutlicht, das auch unter dem Titel „Neue Verfahren in der chemischen Reinigung“ in die GDCh-Ausgabe aufgenommen wurde. Anhand von Schülerexperimenten werden die Grundlagen der Wirkung von Seifen und Tensiden, der chemischen Reinigung und der in Europa sträflich vernachlässigten Methode der Reinigung mit flüssigem CO₂ erläutert. Ein wichtiges Prinzip der „Green Chemistry“ ist die Vermeidung von Abfällen bei chemischen Prozessen durch die Auswahl der richtigen Reaktion unter Berücksichtigung der Atomökonomie. Dieses Prinzip wird in allen drei Publikationen zunächst an einfachen und schließlich einem komplexen Beispiel, der Synthese von Ibuprofen, sehr anschaulich dargestellt, wobei der Schüler beim Durcharbeiten der verschiedenen Aktivitäten eine Menge über Stöchiometrie lernt. Das Ibuprofen-Beispiel wird in der RSC-Variante noch wesentlich ausführlicher behandelt.

Dem Thema „Using lower amounts of energy for chemical processes“ ist nur in der ACS-Ausgabe ein Kapitel gewid-

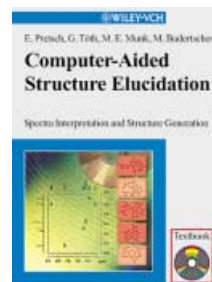
met, während „Returning safe substances to the environment“ mit dem Kapitel „The need to green our wastes“ in der ACS- und der RSC-Ausgabe behandelt wird. Die Internet-Version der RSC, die übrigens frei zugänglich und gut organisiert ist, bietet als einzige ein sehr informatives Glossar, das mit den Begriffen in den Texten über Links verbunden ist, sodass Schüler und Lehrer komfortabel damit arbeiten können.

Den einheitlichen Abschluss bilden die zwölf Prinzipien der „Green Chemistry“ von P. Anastas und J. C. Warner. Leider hat sich gerade hier in der deutschen, leider nur mäßigen Übersetzung ein schwerwiegender Fehler eingeschlichen, der korrigiert werden muss. Da steht doch tatsächlich als 9. Prinzip: „Katalytische Reaktionen sind stöchiometrischen vorzuziehen.“ Auch „Green Chemistry“ hat noch nicht das Gesetz von der Erhaltung der Masse aufgehoben. Anastas und Warner haben ganz schlicht gesagt: „Catalytic reagents are superior to stoichiometric reagents.“ Das stimmt zwar auch nicht generell, widerspricht aber wenigstens nicht den Grundlagen der Chemie.

Es ist zu hoffen, dass dieses gemeinsame Projekt der drei wichtigsten chemischen Gesellschaften nicht nur an Schulen und Hochschulen der ganzen Welt intensiv in den Grundkursen der Chemie genutzt wird, indem seine Inhalte zunehmend in die Curricula eingebaut werden, sondern auch national und international intensiv weiterentwickelt wird. Ein abschließendes Wort in eigener Sache: Im Jahr 1997 habe ich in meiner Besprechung von *Green Chemistry. Designing Chemistry for the Environment* (Angew. Chem. 1997, 109, 812; Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1997, 36, 783) die Auffassung vertreten, im Deutschen könne man nicht „Grüne Chemie“ sagen, da dieser Begriff politisch belastet sei. Darüber ist die Zeit hinweggegangen. „Green Chemistry“ hat sich weltweit durchgesetzt.

Jürgen O. Metzger
Institut für Reine und
Angewandte Chemie
der Universität Oldenburg

Computer-Aided Structure Elucidation



Spectra Interpretation and Structure Generation. Von Ernő Pretsch, Gábor Tóth, Morton E. Munk und Martin Badertscher. Wiley-VCH, Weinheim 2002. XI + 279 S., Boschur, 42.90 €.—ISBN 3-527-30640-4

Jeder in der organischen Synthese tätige Chemiker wird spätestens ab der Diplomarbeit das Problem kennen, dass eine Reaktion nicht stets so läuft wie geplant. Die Strukturaufklärung einer neuen, unerwarteten Verbindung wird dann zum Puzzlespiel. Je nach Gemüt und Fantasie bereitet dieses Spiel Vergnügen oder auch nicht. In jedem Fall aber ist es mit einem oft erheblichen Zeitaufwand verbunden, der im Computerzeitalter nicht mehr gerechtfertigt erscheint. Zur Lösung solcher Probleme bei der Strukturaufklärung bietet dieses Buch eine wertvolle Hilfe.

Auf insgesamt 279 Seiten findet sich eine Kombination aus Anleitung und Beispielen, unterstützt durch die mitgelieferte Software Assemble des Schweizer Unternehmens Upstream, die das Kernstück des Buches bildet. Assemble ist ein Strukturgenerierungsprogramm, das als Eingabe die Summenformel der Verbindung benötigt (die z. B. aus dem Massenspektrum erhalten wurde). Das Buch beginnt mit einer Erklärung der Eingabemasken des Programms. Es schließen sich als zentraler Teil 18 Darstellungen ausgearbeiteter Probleme an, mit denen auf didaktisch geschickte Weise erläutert wird, wie sich eine klassische Spektreninterpretation (IR, ¹H- und ¹³C-NMR, DEPT, COSY, HMQC/HSQC, HMBC) mit Assemble kombiniert lässt, um in kürzester Zeit zur eindeutigen Konstitution der gesuchten Verbindung zu gelangen. Die Qualität der Spektren ist erstklassig. Die Lösungen zu den Problemen sind am Buchende in einer Übersicht tabellarisch zusammengefasst. Es schließt

sich ein Kapitel „Additional Remarks“ an, in dem grundlegende Konzepte noch einmal umrissen werden: Doppelbindungsäquivalente, Massenspektrometrie, NMR-Spektroskopie. Hier werden auch die Begriffe homotop, enantiotop und diastereotop sauber definiert, und es werden Beispiele für die Nomenklatur von Spinsystemen gegeben. Das abschließende 45-seitige Kapitel ist ein ausführlicher, sehr gut gelungener Übungskurs zur Anwendung von Assemble. Hier erst werden die vielfältigen Möglichkeiten erkennbar, mit denen man die Suche nach der richtigen Struktur gemäß den vorhandenen funktionellen Gruppen und Fragmenten einschränken und damit zeitlich beschleunigen kann (z.B. durch Mindest- und Höchstzahl von Ringen, Zahl der Signale im ^{13}C -Spektrum und damit Molekülsymmetrie, Hybridisierung einzelner Atome, primäre, sekundäre, tertiäre und quartäre Kohlenstoffatome). Der Leser lernt, wie durch „Postprocessing“ die Zahl der möglichen Strukturen über weitere Randbedingungen soweit reduziert werden kann, bis am Schluss eine oder einige wenige Verbindungen übrigbleiben, unter denen dann tatsächlich auch die gesuchte Verbindung zu finden ist. Die erhaltenen Verbindungen können einzeln dreidimensional darge-

stellt und gemeinsam im 2D-Format (sdf) abgespeichert werden.

Als weitere Software wird NMR-Prediction mitgeliefert. Mithilfe des Editors JUME (der sowohl für NMR-Prediction als auch für Assemble verwendet wird) kann eine Struktur gezeichnet und anschließend ihre ^1H - und ^{13}C -chemischen Verschiebungen berechnet werden. Die Abschätzungen beruhen auf Inkrementensystemen, die jedoch sorgfältig und aufwändig programmiert sind. Die Ergebnisse sind überraschend genau und sicher besser als die der meisten Freeware-Tools. Dass die Software natürlich nicht mit großen Paketen konkurrieren kann, die auch auf Datenbanken zurückgreifen, liegt auf der Hand. Auch werden diastereotope Atome/Gruppen nicht unterschieden.

Die Softwarepakete Assemble und NMR-Prediction sind als Demoversionen enthalten und damit in ihrer Funktionalität eingeschränkt. So können maximal 15 Nichtwasserstoffatome eingegeben werden, und die Tools sind teilweise auf die Beispiele im Buch beschränkt. Die Vollversion von Assemble kostet 2400 € (Industrie) und 1200 € (nichtkommerziell) pro Einzellicenz, die entsprechenden Preise für NMR Prediction sind 490 € und 245 €.

Das Arbeiten mit diesem Buch macht selbst dem erfahrenen Spektroskopiker viel Spaß. Wenn man glaubt, für eine einfache Verbindung „per Hand“ alle möglichen und sinnvollen Konstitutionen ermittelt zu haben – Assemble belehrt einen stets eines Besseren und zeigt die Grenzen der eigenen Intuition auf. Dieses Buch erachten wir wegen seines didaktischen Aufbaus als sehr nützlich für die Lehre und wegen der Vielzahl an praktischen Tipps und Hinweisen als wertvolles Hilfsmittel zur Problemlösung im organischen Labor. Als Kritik ließe sich anführen, dass die „Selected References“ in der Tat stark selektiert sind und gerade mal sechs Zitate umfassen. Hier hätte man sich deutlich mehr gewünscht, unter anderem auch Hinweise auf andere Softwarepakete wie ACD oder SpecInfo. Trotzdem: ein ausgezeichnetes Buch, das eine Marktlücke schließt und in keiner Bibliothek fehlen sollte.

Walter Bauer, Anselm H. C. Horn
Institut für Organische Chemie
Computer-Chemie-Centrum
Universität Erlangen-Nürnberg

DOI: 10.1002/ange.200385101