



Das Internet — lehrreiche Hilfe bei der molekularen Strukturaufklärung?

Instrumentell-physikalische Methoden der Strukturaufklärung sind in der Chemie unverzichtbar. Das Verständnis der zugrunde liegenden physikalischen Prinzipien, der Leistungsfähigkeit und Grenzen der verschiedenen analytischen Verfahren ist daher für Chemiker von großer Bedeutung. Die Recherche im Internet fördert zahlreiche kommerzielle und akademische Web-Sites und Linkssammlungen zutage. Die dort aufgefundenen Einführungen sind leider meist einfacher Natur, sodass nur die Lektüre von Lehrbüchern oder der Primärliteratur empfohlen werden kann. Daneben findet man praktische Werkzeuge und spezielle Hilfsprogramme, die wir im Folgenden für die Kernresonanz(NMR)-Spektroskopie und Massenspektrometrie (MS) auf ihren Nutzen hin untersuchen.

Die Site „NMR Resources“ von Prof. Thomas W. Shattuck am Colby College (Maine, USA) bietet einige interessante Programme. Unter „NMR spectroscopy“ findet man vier einfache Hilfen: Die chemische Verschiebung kann für aliphatische Protonen mit einem Inkrementensystem berechnet werden, mit einem „Multiplet Maker“ lassen sich Multipletts für Spektren erster Ordnung erstellen und unter dem dritten Link können Spektren höherer Ordnung berechnet werden. Die vierte Anwendung erlaubt es, die Linienform von Spektren eines Systems mit zwei chemisch austauschenden Gruppen zu simulieren. Die an ein studentisches Publikum gerichteten Programme sind meist mit Literaturverweisen und nützlichen Links kombiniert und zeigen Stärken und Schwächen: Didaktisch sinnvoll sind etwa die Simulation eines chemisch austauschenden AB-Systems (Abbildung 1), in die experimentelle Daten eingebunden werden können und die beiden Spinsystemsimulatoren. Mit dem Inkrementensystem können die chemischen Verschiebungen hingegen nur mit geringer Präzision vorausgesagt werden. Zusammenhänge werden somit verdeutlicht, allerdings können die Werkzeuge kein Ersatz für spezielle Literatur oder Software sein, was sicherlich auch nicht beabsichtigt ist. Gelungen ist auch die weiter unten auf der Seite befindliche Link-Sammlung, die jedoch ebenfalls kaum über ein studentisches Niveau hinausgeht und daher unter dem Punkt „NMR

Tutorials“ auf weiterführende Einträge (wie den Produkt-Operator-Formalismus) verzichtet. Hierzu bieten bereits früher an dieser Stelle besprochene Sites mehr.^[1] Um die Kalkulationsprogramme für die MS-Datenauswertung sinnvoll zu nutzen, wird eine gewisse Grundkenntnis der MS-Ionisationsverfahren vorausgesetzt, wenngleich die verständlich verfassten Erklärungen viele Sachzusammenhänge und Grundregeln übersichtlich erläutern. Für viele alltägliche Fragestellungen stehen benutzerfreundliche und intuitiv verständliche Programme zur Verfügung; z.B. zur Berechnung der Masse von Molekül-, Quasimolekül- und Fragmentionen, von ionischen Clustern (Lösungsmittel und Additive), metallorganischen Komplexionen, Peptiden, Oligonucleotiden und der jeweiligen Isotopenmuster.

 Für mehr Informationen besuchen Sie
[http://www.colby.edu/chemistry/
NMR/NMR.html](http://www.colby.edu/chemistry/NMR/NMR.html)
oder nehmen Sie Kontakt auf mit
twshattu@colby.edu

Die präsentierten Programme können in Kombination mit den fundierten Zusatzinformationen theoretische Zusammenhänge anschaulich und verständlich vermitteln und auch bei der manuellen Interpretation einfacher MS- und NMR-Datensätze behilflich sein. Wir wollen diese Internetressource als eine interaktive Hilfe zum Verständnis der Grundbegriffe der NMR-Spektroskopie und der Massenspektrometrie empfehlen. Vor einer sorglosen Strukturidentifikation auch nur von simplen Molekülen, Strukturvorschlägen aus elektronischen Datenbanken und der Anwendung sehr vereinfachter Simulationen sei jedoch gewarnt.

Mathias Schäfer, Nils Schlörer
Universität zu Köln (Deutschland)

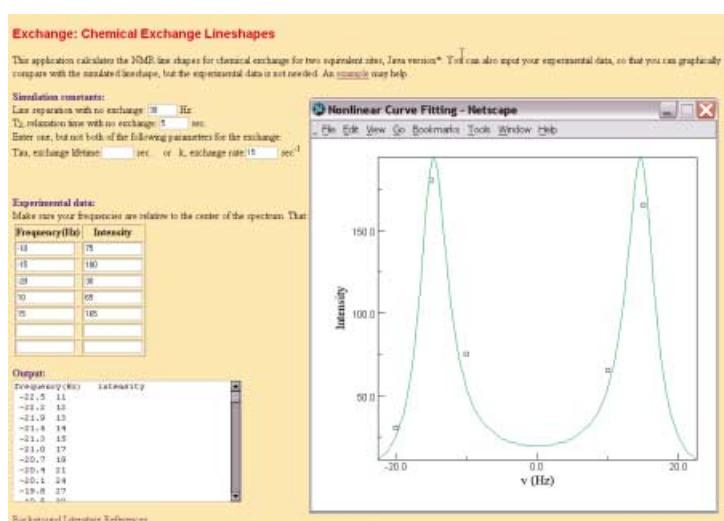


Abbildung 1. Simulation eines chemisch austauschenden AB-Systems

- [1] a) C. Bonauer, B. König, *Angew. Chem.* **2003**, *115*, 3577; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 3455; b) S. Berger, *Angew. Chem.* **2001**, *113*, 4043; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 4105; c) B. Kirste, *Angew. Chem.* **2001**, *113*, 3591; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 3483.