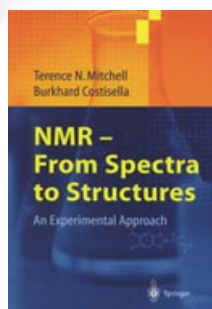




### NMR – From Spectra to Structures



An Experimental Approach. Von Terence N. Mitchell und Burkhard Costisella. Springer Verlag, Berlin 2004. 137 S., Broschur, 42.75 €.—ISBN 3-540-40695-6

Auch wenn die Zahl der NMR-Lehrbücher inzwischen kaum noch überschaubar ist, kann ein handliches, mit den notwendigen Werkzeugen zur Spektrinterpretation versehenes Arbeitsbuch für die NMR-Spektroskopie nur begrüßt werden. Derartige Literatur ist dünn gesät und kann für Chemiestudenten und technische Mitarbeiter in NMR-Laboratorien, an die sich dieses Buch auch in erster Linie richtet, eine wertvolle Hilfe oder Auffrischung sein. *NMR – From Spectra to Structures* von Terence N. Mitchell und Burkhard Costisella verfolgt das Ziel, dem Leser nur mit dem notwendigen Minimum an theoretischem „Ballast“ einen praxisorientierten Lehrgang zur Strukturaufklärung durch NMR-spektroskopische Methoden zu vermitteln. Gegliedert in einen 50-seitigen Methodenteil und eine knapp doppelt so umfangreiche Aufgabensammlung samt kurzer Anleitung zur Zuordnung hinterlässt das fast durchweg flüssig geschriebene und mit überwiegend sorgfältig lektorierten Spektren und Formeln versehene Buch einen guten ersten Eindruck. In der Einleitung wird allerdings versucht den Anschein zu erwecken, dass heutzutage Strukturen mit NMR-Spektroskopie allein gelöst werden können und der

kombinierte Einsatz spektroskopischer Methoden damit weitgehend überflüssig sei – eine Aussage, deren Gültigkeit die Autoren selbst zu bezweifeln scheinen, da sie bei den eigentlichen Aufgaben stets Summenformel und IR-Banden mit angeben.

Im ersten Teil des Buches werden zunächst 1D-NMR-Spektren sowie einige in der Praxis wichtige Aspekte vorgestellt. Es folgen eine Einführung in die 2D-NMR-Spektroskopie, ein Kapitel zur NMR-Spektroskopie mit Quadrupolkernen und eines über gekoppelte HPLC-NMR-Techniken. Auch wenn die Autoren anfangs betonen, auf theoretischen Ballast zugunsten der Praxisnähe verzichtet zu haben, ist nicht einzusehen, warum z.B. der Ernst-Winkel ausführlich diskutiert wird, während etwa für simple, in der Praxis wichtige Grundlagen wie die  $n+1$ -Regel für Multiplizitäten, das Pascalsche Dreieck zur Intensitätsbestimmung von Multipletts oder für Begriffe wie chemische Äquivalenz, Phasierung und Spinsystem auf weiterführende Literatur verwiesen wird. Ohne weitere Erklärung werden Begriffe wie  $T_2$ -Zeit und Karplus-Beziehung verwendet und die Bedeutung der Molekülsymmetrie für  $^{13}\text{C}$ -Spektren angeführt. Zwar wird der mittlerweile gängige Kanon an praxisrelevanten 1D- und 2D-NMR-Experimenten behandelt, es bleibt aber etwas unklar, warum z.B. im Rahmen der Heterokern-NMR-Spektroskopie nur  $^{31}\text{P}$ -Experimente ausführlich besprochen werden, andererseits aber vergleichsweise „exotischen“ Techniken wie INADEQUATE, P,C- und P,P-Korrelation,  $^{17}\text{O}$ -NMR und P,O-Korrelation (obwohl als nicht durchführbar bezeichnet) unverhältnismäßig viel Platz eingeräumt wird. Andere nützliche Heterokern-Experimente werden nicht einmal erwähnt. Die Begeisterung der Autoren für ihr Fachgebiet schwingt mit, wenn sie der HPLC-NMR-Kopplung gleich fünf Unterkapitel widmen. Die Literaturliste am Ende des ersten Teils ist sehr kurz (das Tabellenwerk von Pretsch wird doppelt zitiert) und nicht auf dem aktuellsten Stand (zusätzlich zum „Derome“ sollte auch der „Claridge“ aufgeführt werden).

Im zweiten Teil wird nach einem kurzen Überblick über andere strukturanalytische Methoden zunächst anhand

eines Beispiels die Vorgehensweise bei der Aufklärung einer Struktur mithilfe von Summenformel, IR-Banden und NMR-Spektren ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , DEPT oder APT, H,H-COSY und C,H-Korrelation) erläutert. Daran schließen sich 35 Aufgaben gleichen Typs mit steigendem Schwierigkeitsgrad an. Es fehlt allerdings eine Liste der gelösten Strukturen, stattdessen wird empfohlen, die Autoren per E-Mail zu kontaktieren. Im knapp gehaltenen ersten Kapitel wird auf die unterstützende Verwendung anderer Methoden in der Strukturanalyse eingegangen. Elementaranalyse und IR-Spektroskopie werden dabei lediglich erwähnt, sodass man sich fragen muss, wie der ungeübte Leser aus den in den Beispielen angeführten Wellenzahlen Rückschlüsse auf funktionelle Gruppen ziehen soll. Etwas ausführlicher wird die Massenspektrometrie besprochen, in erster Linie jedoch als Vehikel zur Einführung in die Bestimmung von Doppelbindungsäquivalenten. Die eigentliche Anleitung zu den kombinierten Übungen findet sich im zweiten Kapitel und setzt mehr auf intuitive Kenntnis von Spektren, als dass auf eine generelle Strategie verwiesen und der Anfänger an der Hand genommen würde. Die Auswertung von H,H-Kopplungskonstanten wird gänzlich unterschlagen, was im Zeitalter einer routinemäßigen H,H-COSY-Spektroskopie vielleicht auch die Realität widerspiegelt – allerdings sollte auch dann zumindest auf eine Betrachtung der Kopplungskonstanten zur Unterscheidung von *cis*- und *trans*-konfigurierten Olefinen nicht verzichtet werden.

Das Buch bietet sich trotz des Anspruchs, den Leser ohne weitere Hintergrundinformationen zur Auswertung von NMR-Spektren zu befähigen, eher als praxisorientierte Aufgabensammlung zur Begleitung einer Vorlesung oder weiterführender Literatur an. Hier kann es, vor allem wegen der systematischen Miteinbeziehung von 2D-Spektren, sicher gute Dienste leisten.

Nils Schlörer  
Institut für Organische Chemie  
Universität zu Köln

DOI: 10.1002/ange.200385178