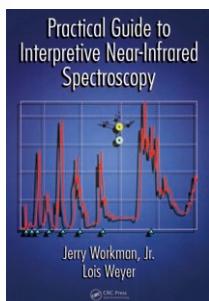


Practical Guide to Interpretive Near-Infrared Spectroscopy



Von Jerry Workman, Jr. und Lois Weyer.
CRC/Taylor & Francis, Boca Raton
2008. 332 S., geb.,
139.95 \$.—ISBN
978-1-574444-78-4-2

Wer interpretiert Ihre Messwerte? Viele moderne Laborgeräte erzeugen immense Ströme digitaler Messwerte. Um physikalische oder chemische Eigenschaften aus diesen Datenmengen abzuleiten, ist meist der Einsatz chemometrischer Techniken nötig. In der Regel werden zu Laborgeräten nutzerfreundliche Software-Pakete gleich mitgeliefert. Mit wenigen Mausbewegungen lassen sich diese Pakete benutzen, ohne dass man die Wirkung der Algorithmen auf unsere Messwerte wirklich verstehen muss. Kann man solchen Versuchungen widerstehen? Interpretieren wir unsere Daten wirklich noch selbst oder überlassen wir das der Einfachheit halber einfach der Software? Ist es nicht effektiver, die berechneten Korrelationskoeffizienten zu beurteilen als zunächst zeitaufwändig die physikalischen oder chemischen Eigenschaften in unseren Daten zu überprüfen? Dabei haben wir alle irgendwann einmal gelernt, dass eine verlässliche Voraussage zwingend auf einer etablierten Ursache-Wirkung-Beziehung basieren muss.

NIR-Spektroskopie, der Gegenstand dieses Buchs, ist ein typisches Beispiel für die eben genannten Versu-

chungen. Der Titel des Buchs *Interpretive Near-Infrared Spectroscopy* umreißt den Inhalt und das Anliegen der Autoren, Ursache-Wirkung-Beziehungen in den NIR-Spektren zusammenzutragen. Ohne bestätigte Ursache-Wirkung-Beziehungen bleiben die Messwerte eben erst einmal nur Zahlen ohne Aussagekraft. Erst die Interpretation der spektralen Merkmale schafft die Grundlage für das Verständnis von Ursache und Wirkung der molekularen Strukturen. Spektreninterpretation ist die intellektuelle Kernleistung hin zum analytischen Verständnis der Messergebnisse. Dieser Sachverhalt ist im Vorwort des Buchs deutlich herausgearbeitet.

NIR-Spektrometer erschienenen in den 1920ern auf dem Markt, lange bevor die Spektrometer des Mittleren Infrarot (MID) die Labore eroberten. Später haben die Arbeiten von Karl Norris in der US Drug Administration das Interesse am NIR-Bereich wieder belebt, jedoch fanden die bevorzugt landwirtschaftlichen Anwendungen des NIR praktisch keine Beachtung in den akademischen Forschungseinrichtungen. Erst nach vielen weiteren Jahren entstand die Theorie, mit deren Hilfe schließlich das spezielle Schwingungsverhalten im NIR verstanden werden konnte. Heute können die NIR-Spektren sowohl auf empirischer als auch auf theoretischer Basis interpretiert werden.

Dieses Buch wendet sich eindeutig an den praktisch arbeitenden Spektroskopiker. Der Titel *Practical Guide to Interpretive Near-Infrared Spectroscopy* ist völlig korrekt. Von den 334 Seiten des Buchs enthalten die ersten 111 Seiten Text, angereichert mit vielen Spektren und Tabellen. Der große verbleibende Teil beinhaltet eine Reihe von Anhängen und einen ausführlichen Index. Von den Anhängen zeigt der erste eine kurze NIR-Korrelations-tabelle. Die folgenden drei sehr umfangreichen Anhänge enthalten die NIR-Spektren zahlreicher Verbindungen, einige davon sogar als Verdünnsreihen. Der erste dieser Anhänge gibt die Spektren zwischen 10500 und 6300 cm^{-1} wieder, der zweite zwischen 7200 und 3800 cm^{-1} , der dritte zeigt den vollständigen Bereich von 10500 bis 3800 cm^{-1} . Alle drei Anhänge enthalten die gleichen Substanzen, manchmal in

etwas anderer Reihenfolge, manchmal unter anderer Überschrift. Auf alle Fälle sind die Spektren aller 244 Verbindungen leicht auffindbar, entweder über den alphabetischen Index (Anhang 6) oder über die Molekülformel (Kohlenstoffzahl, Anhang 7). Die zwei restlichen Anhänge enthalten sehr umfangreiche Spektren-Struktur-Korrelations-tabellen, eine nach Wellenzahlen geordnet, die andere nach funktionellen Gruppen in alphabetischer Ordnung.

Wie die Aufzählung der Anhänge zeigt, erfüllt der Inhalt des Buchs das im Titel Versprochene: Es ist ein Leitfaden für die Praxis. Sowohl die Materialien in den Anhängen wie auch die Beschreibungen der unterschiedlichen Strukturgruppen im vorhergehenden Teil sind auf die Bedürfnisse des Praktikers ausgerichtet. Als Strukturgruppen sind beschrieben: Alkane und Cycloalkane, Alkene und Alkine, aromatische Gruppierungen, Hydroxy-enthaltende Gruppen, Wasser, Carbonyle, Amide, P-H und S-H, Kohlenhydrate, Aminosäuren, Peptide und Proteine, synthetische Polymere und Gummi. Jeder Gruppierung ist ein eigenes Kapitel mit Spektren, Tabellen und einer Literaturliste gewidmet. Einige dieser Kapitel sind sehr kurz (S-H und P-H), das längste Kapitel ist das über die Hydroxy-enthaltenden Gruppen.

Wer jemals versucht hat, ein Schwingungsspektrum zu interpretieren, musste erfahren, wie leicht man durch unkritische Übertragung der umfangreich verfügbaren Daten von Bandenpositionen auf das untersuchte Spektrum auf Abwege gerät. Das gilt vor allem, wenn es am grundsätzlichen Verständnis des Schwingungsverhaltens eines Moleküls mangelt. Solches Grundwissen wird üblicherweise in einer mindestens einsemestrigen Vorlesungsreihe vermittelt. Die Autoren dieses Buchs haben den Stoff, der sonst eine Monographie füllt, in ein Kapitel von 21 Seiten gepresst. Dieses Kapitel ist in 26 Abschnitte unterteilt und erfasst tatsächlich alle Themen vom Lambert-Beerschen Gesetz bis hin zur Fermi-Resonanz. Die richtige Auswahl der theoretischen Aspekte, die für den Praktiker wirklich unverzichtbar sind, ist außergewöhnlich schwierig. Die Aufgabe wurde von den Autoren sehr gut bewältigt. Ich vermisste lediglich eine

NOVACORE LIBRARY

A diversity-driven library based upon novel scaffolds and ADME-Tox/predictive considerations

zufriedenstellende Erklärung des Lokalschwingungsverhaltens, das gerade so typisch für die NIR-Schwingungen ist. Im Vergleich zur Auswahl der Themen ist deren Kompression weniger gut gelungen. Die gewählten Begriffe sind nicht immer einheitlich oder eindeutig. Einzelne Erklärungen sind nicht ganz korrekt. Echt verwirrend ist die Darstellung der Schwingungs-Quantenzahl. Dafür werden innerhalb weniger Zeilen drei unterschiedliche Zeichen verwendet.

Welche Position hat dieses Buch im Vergleich zur Monographie *Near-Infrared Spectroscopy – Principles, Instruments, Applications* (Wiley-VCH, 2002)? In dieser Monographie von H. W. Siesler werden genau die im Untertitel aufgeführten Problemkreise beschrieben: Grundlagen, Geräte, Anwendungen. Diese Monographie enthält also weder eine Spektrensammlung

noch verallgemeinerte Regeln für die Spektreninterpretation. Aus diesem Grund haben beide Bücher ihren berechtigten Platz im Regal des NIR-Praktikers. Der *Practical Guide* erfasst alle jene Strukturgruppen, die Beiträge zu NIR-Spektren liefern, und er behandelt exklusiv die Interpretation. Er sollte von allen, die ihre NIR-Spektren mit chemometrischen Techniken auswerten, vor der Ausarbeitung der Schlussfolgerungen konsultiert werden. Damit lässt sich die chemische Ursache-Wirkung-Beziehung verifizieren, die vom gewählten Software-Paket auf der Basis der gemessenen Zahlenwerte vorgeschlagen wurde.

Reiner Salzer

Institut für Analytische Chemie
Technische Universität Dresden

DOI: [10.1002/ange.200885575](https://doi.org/10.1002/ange.200885575)

● LEADLIKE PARAMETERS:

- MW Average= 380
- Hydrogen Bond Acceptors: ≤ 9
- Hydrogen Bond Donors: <4

● DIVERSITY:

- Over 80 druglike, medicinally relevant templates

● NOVELTY:

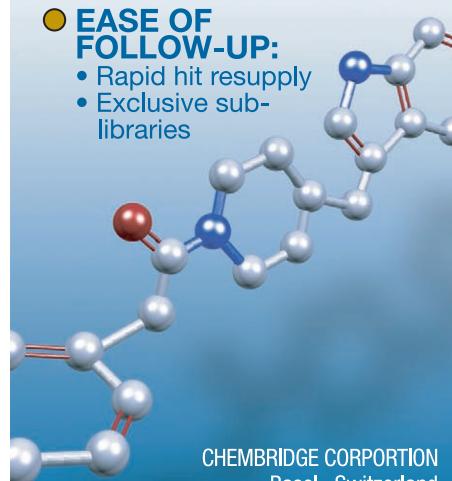
- Internal R&D driven scaffold production

● PROPERTIES:

- 90,000 final compounds
- QC: purity $\geq 95\%$ via LCMS/ELSD for 80% of compounds
- 100% of compounds:
 - Obey Lipinski's Rule of 5
 - Obey published solubility parameters
 - Pass leadlike structural, property, & med chem filters

● EASE OF FOLLOW-UP:

- Rapid hit resupply
- Exclusive sub-libraries



WWW.CHEMBRIDGE.COM