

Comprehensive Chiroptical Spectroscopy

Wenn man mich nach einer guten Einführung in chiroptische Methoden fragt, empfehle ich gewöhnlich ein lehrreiches Kapitel aus der „Bibel“ der organischen Stereochemie von E. L. Eliel und S. H. Wilen.^[1] Wer mehr wissen will, wird auf ein ausführliches Kompendium über Circular Dichroismus (CD) und dessen Anwendungen verwiesen,^[2] das N. Berova, K. Nakanishi und R. W. Woody zwar schon vor über zehn Jahren herausgaben, doch es ist immer noch maßgeblich für sein Gebiet. Nun haben diese drei Herausgeber, gemeinsam mit Prasad L. Polavarapu, eine nachgerade enzyklopädische Abhandlung chiroptischer Spektroskopiearten in zwei Bänden erstellt. Dieses Nachschlagewerk ist gedacht nicht nur für Wissenschaftler, die sich mit chiralen Molekülen und asymmetrischen Prozessen beschäftigen (oder dies planen), sondern allgemein für Forscher, die ihr Wissen über chiroptische Eigenschaften vertiefen möchten.

In Band 1 geht es vor allem um Methoden und Instrumentierung. Es wird folglich eine beträchtliche Menge an theoretischem Hintergrundwissen vermittelt, gelegentlich aufgelockert durch Beispiele. Ein einführendes Kapitel macht den Leser mit der Wechselwirkung zwischen Licht und Materie und mit den Ursachen chiroptischer Phänomene vertraut. Dieser Abschnitt und der übrige theoretische Part können allerdings andere ausführliche Werke wie Barrons Buch über optische Aktivität und Lichtstreuung^[3] nicht ganz ersetzen, auch nicht dadurch, dass jedes Kapitel eine gute Auswahl an Literaturstellen zur Vertiefung vor schlägt.

Teil II dieses Bands konzentriert sich in 18 Kapiteln auf die unterschiedlichen CD-Spektroskopien, wobei ein Schwerpunkt auf der vibratorischen optischen Aktivität liegt, die sich in den vergangenen Jahren von einer Laborkuriosität zu einer hoch informativen Technik entwickelt hat. Mittlerweile sind neue Instrumente für sowohl CD- als auch Raman-Messungen der vibratorischen optischen Aktivität verfügbar. Dieser Mittelteil deckt auch Gebiete ab, die den meisten Anwendern chiroptischer Methoden neu sein dürften und auch nicht in anderen Büchern behandelt sind; Beispiele hierfür wären Festkörper-CD, chiroptische Kristallbildung, magnetochiraler Dichroismus, optische Aktivität im Röntgen-Bereich sowie nichtlineare Spektroskopie. Diese Kapitel liefern auch praktische Informationen über experimentelle Messtechniken sowie über die Vermeidung von Fehlinterpretationen und sonstigen Fall-

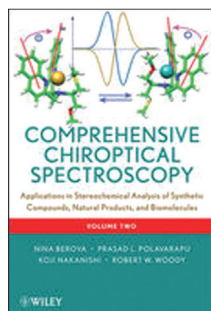
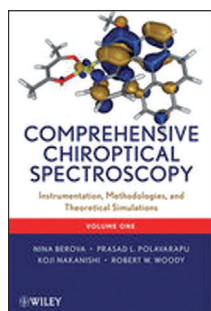
stricken. Die Autoren dieser Kapitel sind führende Experten, die viel zu dem Wissen auf ihren jeweiligen Fachgebieten beigetragen haben.

Der dritte Teil von Band 1 befasst sich in 7 Kapiteln mit theoretischen Simulationen von chiroptischen Spektren und Eigenschaften. Dieser Part führt uns auch vor Augen, wie wir vom rechten Pfad abkommen können, wenn wir uns bei der Bestimmung von Absolutkonfigurationen und Molekülkonformationen alleine auf chiroptische Spektroskopie stützen. Grundsätzlich sollte ein experimentell beobachtbares Spektrum eines Stereoisomers zufriedenstellend durch quantenchemische Rechnungen vorherzusagen sein. Diese auszuführen kann aber eine große Herausforderung darstellen, weil eine Reihe von elektronischen Übergängen, alle möglichen Konformationen und Lösungsmittelleffekte zu berücksichtigen sind; überdies hängt das Resultat natürlich vom verwendeten theoretischen Niveaus ab.

Band 2 beginnt mit einem Rückblick auf die Entdeckung des Cotton-Effekts und die darauf folgende Entwicklung von Methoden, um CD- und ORD-Kurven (optische Rotationsdispersion) zu erhalten. Dieses Kapitel ist interessant, hätte meines Ansicht nach aber in Band 1 gehört, um die Präsentation des historischen und konzeptuellen Hintergrunds der chiroptischen Spektroskopie dort abzurunden.

Der Rest von Band 2, die Kapitel 2–25, bildet eine herausragende Sammlung von Informationen, die Leistungsfähigkeit und Nutzwert von chiroptischen Methoden in der Strukturaufklärung und bei der Untersuchung dynamischer Aspekte von Molekülwechselwirkungen vor Augen führt. Die Themen schließen organische Verbindungen mit ausgedehnter Konjugation, supramolekulare Aggregate und Naturstoffe ein. Die Beschreibung der chiroptischen Spektroskopie von anorganischen und Metall-Koordinationsverbindungen ist etwas zerstückelt; Band 2 enthält zwei getrennte Kapitel (7 und 13) zu diesen Themen, und Kapitel 9 in Band 1 behandelt Lanthanoidkomplexe. Im letzten Kapitel werden Wirkstoff-Rezeptor-Wechselwirkungen besprochen; dieses Kapitel schafft einen würdigen Abschluss, indem es das Potenzial chiroptischer Methoden für biomedizinische Studien aufzeigt. Im Allgemeinen sind die Beiträge ausführlich und reichlich mit Literaturstellen versehen, und in einigen Kapiteln werden experimentelle Daten mit den Ergebnissen theoretischer Rechnungen verglichen.

Was hätte sonst noch besprochen werden können oder sollen? ich hätte es beispielsweise gerne gesehen, wenn ein wenig mehr auf den magnetischen Circular Dichroismus (zu unterscheiden von magnetochiralem Dichroismus und Doppelbrechung) eingegangen worden wäre, weil diese Technik ergänzende Informationen über elektro-



Comprehensive Chiroptical Spectroscopy
2 Bände. Herausgegeben von Nina Berova, Prasad L. Polavarapu, Koji Nakanishi und Robert W. Woody. John Wiley & Sons, Hoboken, 2012. 1840 S., geb., 339,00 €. — ISBN 978-0470641354

nische Zustände und Molekülorbitale liefert, besonders in paramagnetischen Systemen, und weil sie, nach Anlegen eines Magnetfelds parallel zur Richtung der Lichteinstrahlung, auf achirale Moleküle angewendet werden kann.^[4]

Ungeachtet dieser Anmerkungen und kleineren Kritikpunkte empfehle ich *Comprehensive Chiroptical Spectroscopy* als ein Werk, aus dem Forscher und Doktoranden großen Nutzen ziehen können. Die beiden Bücher werden ihre Aktualität mit Sicherheit über Jahre hin behalten.

Pedro Cintas

Departamento de Química Orgánica e Inorgánica
Universidad de Extremadura, Badajoz (Spanien)

DOI: 10.1002/ange.201206736

- [1] E. L. Eliel, S. H. Wilen, *Stereochemistry of Organic Compounds*, John Wiley & Sons, New York, **1994**, Kap. 13, S. 991–1118.
- [2] N. Berova, K. Nakanishi, R. W. Woody, *Circular Dichroism: Principles and Applications*, 2. Aufl., John Wiley & Sons, New York, **2000**.
- [3] L. Barron, *Molecular Light Scattering and Optical Activity*, 2. Aufl., Cambridge University Press, Cambridge, **2004**.
- [4] W. R. Mason, *A Practical Guide to Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy*, John Wiley & Sons, New York, **2007**.



GERD WEDLER und
HANS-JOACHIM FREUND

**Lehrbuch der
Physikalischen Chemie**
6., vollst. überarb. u. aktualisierte Auflage

ISBN: 978-3-527-32909-0
Juli 2012 1146 S. mit 250 Abb.
Gebunden. € 89,90

- Der Fokus liegt auf dem Verstehen der grundlegenden Begriffe und Zusammenhänge
- Das bewährte Konzept wurde verfeinert, aktualisiert und ergänzt
- Zahlreiche Rechenbeispiele helfen beim Verstehen der Sachverhalte
- Alle Kernaussagen und -inhalte sind am Ende jedes Kapitels kompakt zusammengefasst
- Ausgerichtet auf die aktuellen Bedürfnisse von Bachelor- und Masterstudenten

Präzise, exakt,
bewährt und jetzt
rundum
erneuert!



GERD WEDLER und
HANS-JOACHIM FREUND

**Arbeitsbuch
Physikalische Chemie**
Lösungen zu den Aufgaben der 6. Auflage

ISBN: 978-3-527-33426-1
Juli 2012 202 S. mit 20 Abb.
Broschur. € 19,90

**Erstmals ergänzt ein Arbeitsbuch den
Lehrbuchklassiker!**

- Enthält ausführliche Lösungswege zu den Aufgaben aus dem Lehrbuch
- Mathematisch exakt und präzise
- Ideal zum Selbststudium und zum Überprüfen des Kenntnisstandes vorder Prüfung
- Die perfekte Ergänzung zur sechsten Auflage des Lehrbuches



**Set aus Lehrbuch
und Arbeitsbuch**

ISBN: 978-3-527-33428-5
Juli 2012 1336 S. mit 250 Abb.
Gebunden
€ 99,90

www.wiley-vch.de

Wiley-VCH • Postfach 10 11 61 • D-69451 Weinheim
Tel. +49 (0) 62 01-606-400 • Fax +49 (0) 62 01-606-184 • E-Mail: service@wiley-vch.de
44955 • Irrtum und Preisänderungen vorbehalten. Stand der Daten: Juli 2012

 **WILEY-VCH**