

## Structural Methods in Molecular Inorganic Chemistry

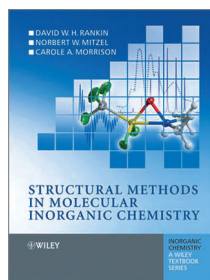
Bei dem vorliegenden Buch handelt es sich um die Neuauflage von *Structural Methods in Inorganic Chemistry* damals von Ebsworth, Rankin und Cradock, erstmals erschienen 1987 im Blackwell Science Verlag. Da sich seit dem Erscheinen der ersten Auflage viel auf dem Gebiet der anorganischen Strukturchemie getan hat, hat sich nun auch der Titel des Buchs angepasst, da der Schwerpunkt auf anorganische Molekülchemie gelegt wird. Die Strukturaufklärung in der Materialchemie bleibt damit außen vor, was die Autoren Rankin, Mitzel und Morrison auch freimütig anmerken. Das Buch will dem Leser all das für die Interpretation von Messergebnissen wichtige Wissen und Werkzeug an die Hand geben. Auf ausschweifende theoretische Einführungen in den einleitenden Passagen eines jeden Kapitels wird somit verzichtet und auf die Literatur am Ende eines jeden verwiesen.

Fachsprachlich ist das Buch äußerst gut gelungen. In fast allen Fällen werden Begriffe wie Signal, Bande, Peak, Reflex, die ja auf die Verschiedenheiten der Messmethoden bereits hinweisen, strikt unterschieden. Die Begriffe Struktur und Geometrie werden jedoch im Chemikerjargon verwendet. Die Schreibweise von Punkt- und Raumgruppen wird im ganzen Buch leider unterschiedlich gehandhabt. Das Buch enthält eine ganze Reihe an sehr gut gelungenen und übersichtlichen Abbildungen und Skizzen. Farbe hätte an der einen oder anderen Stelle allerdings sowohl zur Auflockerung als auch zur Verdeutlichung beigetragen, denn in einer Abbildung vier bis fünf verschiedene Atomsorten und zusätzlich das HOMO und das LUMO in verschiedenen Grautönen zu unterscheiden ist eine nahezu unlösbare Aufgabe für den Betrachter. Lieber Verlag, die Autoren wollten es so sicherlich nicht!

Das Buch gibt eine sehr gute Einstiegsmöglichkeit für Studierende in die zur Verfügung stehenden Techniken zur Strukturaufklärung. Nach einer historischen Einführung und Abhandlung der theoretischen und quantenchemischen Grundlagen werden die spektroskopischen Methoden der NMR-, EPR-, Mößbauer-, Rotations- und Vibrations-, UV/Vis- und PES-Spektroskopie kapitelweise ausführlich besprochen und durch die Beugungsmethoden (mit Elektronen, Neutronen und Röntgenstrahlen), sowie durch die Massenspektrometrie ergänzt. Seinen Abschluss findet das Buch in einer Reihe von konkreten Fallbeispielen („Case Histories“), welche die Anwendung der Methoden schildern, aber auch ihre Schwierigkeiten aufzei-

gen, so dass man einen insgesamt ausgewogenen Eindruck der jeweiligen Stärken und Schwächen bekommt. Jedes Kapitel wird mit einem Literaturverzeichnis abgeschlossen, allerdings haben sich in diesen gelegentlich Tippfehler eingeschlichen. Besonders positiv hervorzuheben ist, dass das Buch die beschriebenen modernen Techniken nicht als „Allheilmittel“ glorifiziert, sondern stets mahnend auf die traditionellen Techniken der qualitativen und quantitativen chemischen Analyse sowie der Stöchiometrie verweist – denn nur dies, so die Autoren, gestattet eine vollwertige Überprüfung, Interpretation und Einordnung der Ergebnisse. Jedes Kapitel behandelt Messmethoden sowohl für die Analyse gasförmiger, flüssiger, als auch fester Stoffe, und der Einfluss des physikalischen Zustandes auf die erhaltenen Messergebnisse wird anschaulich herausgearbeitet (NMR-Spektroskopie, Festkörper-NMR-Spektroskopie usw.). Im Kapitel der Schwingungsspektroskopie werden zudem nicht nur die IR- und ATR-IR-Spektroskopie sowie verschiedene Raman-Experimente erörtert, sondern auch entsprechende Untersuchungen mit Neutronen- oder Elektronenstrahlen sind enthalten. Ergänzt wird dieses Kapitel schließlich mit einer praxisbezogenen Einführung in die Gruppentheorie, der Bandenzuordnung sowie der qualitativen und quantitativen Spektrenanalyse.

Als Beispiel eines weiteren Kapitels seien die Beugungsmethoden herausgegriffen. Nach einer kurzen und gelungenen Einführung über die Unterschiede der Elektronen-, Neutronen- und der Beugung von Röntgenstrahlung wird detailliert die Beugung an Gasen, kurz an Flüssigkeiten und wieder ausführlich an Kristallen (Einkristalle und Pulver) besprochen. Dem in der Strukturanalyse durch Beugung an Einkristallen bewanderten Leser fallen hier kleinere Ungereimtheiten auf, welche aus der für den Anfänger notwendigen Vereinfachung resultieren mögen. Beispielsweise werden nur sieben statt der elf Laue-Klassen erwähnt. Leider finden sich dann in einer Tabelle Angaben, bei denen im triklinen Kristallsystem die Achsen und -winkel, im monoklinen System die Achsen „ungleich“ sind – besser wäre „beliebig“ statt „ $\neq$ “ gewesen. In den Übungsaufgaben, welche sich an jedes Themenkapitel anschließen, findet sich leider die Schreibweise  $Pa\bar{3}$  statt richtig  $Pa\bar{3}$  für den Raumgruppentyp 205, obwohl dann richtigerweise das Symbol  $\bar{3}$  für die Symmetrie der Lage verwendet wird. Besonders gut hat mir die Diskussion im Kapitel „Wie gut ist die Struktur?“ gefallen, denn hier wird deutlich gesagt, wie trügerisch die üblichen Gütekriterien sein können, und wie leicht man ein kristallographisches Problem übersehen kann. Auch modernere Entwicklungen, wie die Elektronendichtebestimmung anhand von Einkristallstrukturdaten oder die



Structural Methods in  
Molecular Inorganic  
Chemistry

Von D. W. H. Rankin, Norbert Mitzel und Carole Morrison. John Wiley & Sons, Hoboken, 2013. 498 S., geb., 137,00 €. — ISBN 978-0470972793

Rietveld-Verfeinerung an Pulvern, werden besprochen, sodass ein guter Eindruck der methodischen Vielfalt vermittelt wird.

Besonders schön ist die Zusammenstellung der Fallbeispiele im letzten Kapitel („Case Histories“). Die Beispiele (Verbindungen, Spektren, Strukturen) sind instruktiv ausgewählt, und sowohl „Klassiker“ (Struktur von  $\text{XeF}_6$ ) als auch neuere Ergebnisse (bis einschließlich 2012) sind enthalten. Es wird gezeigt wie wichtig das Sammeln komplementärer Informationen durch verschiedene Messmethoden für ein „ganzheitliches“ Bild einer chemischen Verbindung ist, und, dass manchmal immer noch nicht alle Fragen geklärt werden können.

Zusammenfassend ist den Autoren eine wirklich gute grundlegende Einführung in die verschiedenen Methoden zur strukturellen Charakte-

risierung von Verbindungen der anorganischen Molekülchemie gelungen. Meiner Meinung nach eignet sich das Buch sowohl für Studierende, als auch für Anwender, die ihr Wissen in einer schon länger nicht mehr gebrauchten Methode auffrischen wollen, ohne zu tief in theoretische Grundlagen einsteigen zu müssen. Man wird in einer jeden strukturellen Charakterisierungsmethode umfassend informiert – ein für den Anwender solcher Methoden gut geeignetes Buch eben. In diesem Sinne kann ich das Buch voll und ganz empfehlen.

Florian Kraus  
Department Chemie  
Technische Universität München

DOI: 10.1002/ange.201304990