

Spectrometric Identification of Organic Compounds. Von R. M. Silverstein und G. C. Bassler. Verlag John Wiley & Sons, Inc., New York-London 1963. 1. Aufl., 177 S., geb. £ 3.4.0.

Massenspektrometrie, Protonenresonanzspektroskopie, IR- und UV-Spektroskopie sind heute unentbehrliche Hilfsmittel der organischen Chemie. Die Grundlagen dieser Methoden lernt jeder Chemiestudent im Laufe seines Studiums kennen. Damit allein ist es aber nicht getan. Mehr als es bisher bei uns der Fall war, sollten Übungen in der praktischen Anwendung dieser Methoden auf chemische Probleme in den Studiengang aufgenommen werden. Einen Weg, auf dem ein wichtiger Schritt in dieser Richtung mit nur geringem Aufwand gegangen werden könnte, zeigt das Buch von Silverstein und Bassler, das eine didaktisch hervorragende Anleitung zur Auswertung von Spektren organischer Verbindungen gibt.

In diesem Buch findet man zwar über die theoretischen Grundlagen und die instrumentelle Technik der Massenspektrometrie, der IR-Spektroskopie, der Protonenresonanz und der UV-Spektroskopie gerade nur das Allerwichtigste. Für jede dieser Methoden wird aber ein recht reichhaltiges Material über die Zusammenhänge zwischen Spektren und Molekülstruktur geboten, wobei die empirischen Fakten als das für die praktische Anwendung Nützliche ganz im Vordergrund stehen.

Im zweiten Teil des Buches wird zunächst an 20 Beispielen in ausführlicher Diskussion gezeigt, wie sich aus Massen-, Protonenresonanz-, IR- und UV-Spektren für verschiedenartige organische Substanzen (mit den Elementen C, H, O, N, S und den Halogenen; Molgewichte bis 250) ohne Elementaranalyse und ohne den geringsten chemischen Befund die Strukturformeln ableiten lassen. Selbstverständlich sind solche eindeutigen Ergebnisse nicht in allen Fällen zu erwarten, aber es wird an diesen Beispielen doch sehr eindrucksvoll die Fülle an Informationen demonstriert, die sich allein aus den Spektren – besonders aus den Massenspektren – bei erschöpfender Auswertung erhalten lassen. Bei den nächsten 10 Substanzen werden nur die Spektren selbst mitgeteilt; die Auswertung bleibt dem Leser überlassen, der sein Ergebnis jedoch an Hand der angegebenen Beilstein-Zitate kontrollieren kann. Bei den letzten 10 Beispielen wird auch noch auf diese „Eiselsbrücke“ verzichtet. Wer alle 40 Übungsbeispiele sorgfältig durchgearbeitet hat, wird – auch wenn er vielleicht nicht alle Lösungen finden konnte – etwas Wichtiges hinzugelernt haben: Die Routine im Umgang mit Spektren, die ihm nun – zusammen mit dem im ersten Teil des Buches gegebenen Material – auch bei der Lösung anderer Probleme sehr nützlich sein wird.

Für jede einzelne der hier behandelten Methoden – Massenspektrometrie, Protonenresonanzspektroskopie, IR- und UV-Spektroskopie – gibt es zweifellos vollständigere, systematischere und im Detail wohl auch kompetentere Bücher, auch für die praktische Anwendung in der organischen Chemie. Das vorliegende Buch ist aber vor allen anderen dadurch ausgezeichnet, daß es ein Lern- und Übungsbuch ist, was auf knappstem Raum konsequent die ständige Kombination aller vier Methoden lehrt. Dies scheint dem Rezensenten in einer Zeit, in der durch zwangsläufige Spezialisierung etwa der Experte für Massenspektrometrie schon kein Experte für Protonenresonanz mehr sein kann, äußerst wichtig; denn erst die gegenseitige Ergänzung der einzelnen Methoden potenziert ihre Effektivität so, daß sich für den an Strukturproblemen interessierten Organiker der maximale Nutzen ergibt.

Der „Silverstein-Bassler“ kann dem interessierten Studenten – vor allem aber dem Dozenten und Assistenten für die Benutzung in Übungen und Seminaren – sehr empfohlen werden.

H. A. Staab [NB 408]

Practical Optical Crystallography. Von N. H. Hartshorne und A. Stuart. Edward Arnold Publishers Ltd., London 1964. 1. Aufl., VI, 326 S., zahlr. Abb., geb. £ 2.0.0.

Das vorliegende Werk bietet eine sehr vollständige Einführung in die Anwendung der Kristalloptik auf die Untersuchungen von Kristallen. Es werden aber nicht nur die experimentellen Methoden diskutiert, sondern auch die Grundlagen der geometrischen Optik und der Kristallographie behandelt. Dies wird in manchen Teilen allerdings in einem Umfang getan, wie er für den Zweck des Buches nicht notwendig ist. So ist z. B. die Kristallmorphologie mit etwa 30 Seiten hier überbewertet. Ähnliches gilt auch für die Strukturlehre, die außerdem etwas eigenwillig dargestellt wurde. Vermißt wird allerdings ein Abschnitt, der näher auf die Zusammenhänge zwischen Kristalloptik und Kristallstruktur eingeht. Das Buch stellt keine hohen Anforderungen an den Ausbildungsstand des Lesers, so daß Studenten es gut als Einführung benutzen können. Es werden alle wichtigen Methoden für die Untersuchung von Kristallen mit dem Polarisationsmikroskop aufgeführt, jedoch sind U-Tischmethoden nicht behandelt worden.

Das Buch enthält einige elementare Fehler. So wird auf Seite 37 und auf Seite 98 z. B. behauptet, daß Kristalle mit Spiegelebenen nicht optisch aktiv sein können. Alle Lehrbücher der Kristallphysik geben aber m, mm2, $\bar{4}2m$ als mögliche Klassen für die optische Aktivität an. Bei der Behandlung der Beckeschen Lichtlinie werden neuere Arbeiten übersehen, wonach diese Erscheinung nicht ein Effekt der geometrischen Optik, sondern eher ein Effekt der Beugungsoptik ist.

Von diesen Unstimmigkeiten abgesehen bietet das Buch aber eine recht brauchbare Möglichkeit, sich die Grundbegriffe der geometrischen Kristalloptik anzueignen. Die theoretischen Grundlagen sollten bei einer Neuauflage besser dargestellt werden.

H. Jagodzinski [NB 347]

Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy. Von N. B. Colthup, L. H. Daly und S. E. Wiberley. Academic Press, New York-London 1964. 1. Aufl., XII, 511 S., zahlr. Abb. u. Tab., geb. \$ 12.—.

Bisher war es immer schwierig, ein einziges Buch zur Einarbeitung in die Schwingungsspektroskopie zu empfehlen, da in den bekannten Monographien zu diesem Thema entweder eine Theorie der Schwingungsspektren entwickelt wird oder das Schwergewicht auf experimentellen und anwendungstechnischen Gesichtspunkten liegt oder aber nur die Infrarotgruppenfrequenzen aufgeführt und diskutiert werden. In der vorliegenden Einführung wird versucht, die Probleme in einer Abhandlung darzustellen, und zwar, um es gleich vorweg zu nehmen, mit sehr gutem Erfolg. Im einführenden Kapitel wird die Theorie der Rotations- und Schwingungsspektren elementar behandelt, wobei trotz der Kürze alle wichtigen Begriffe erläutert werden. Im zweiten Kapitel werden die Bauelemente von Infrarot- und Raman-Spektrographen sowie experimentelle Fragen besprochen. In einem Kapitel über Klassifizierung der Moleküle werden die Symmetrieeigenschaften der Moleküle erklärt, und die Gruppentheorie wird so weit entwickelt wie sie zum Verständnis der Klassifizierung der Normalschwingungen notwendig ist. Neben den Charakterentabellen der Punktgruppen sind jeweils viele Beispiele von untersuchten Molekülen angegeben. In den folgenden neun Kapiteln werden die Gruppenfrequenzen zusammengestellt und ausführlich diskutiert. Nach einer sehr anschaulichen Darstellung der Veränderung der Gruppenfrequenzen durch Wechselwirkungen mit anderen Schwingungen werden die charakteristischen Frequenzen geordnet nach Gruppen mitgeteilt. Dabei ist die Literatur bis etwa 1961, teilweise auch bis 1963, berücksichtigt. In einem weiteren Kapitel werden die Gruppenfrequenzen noch einmal geordnet nach Spektralbereichen aufgeführt und in Korrelationskarten dargestellt. Weiterhin findet man die Absorptionsspektren von 624 Molekülen,