

fassungen für weite Passagen der behandelten Gebiete nicht existieren, wird sich dieses Buch sicher als unentbehrlich für jene erweisen, die mit Cyclopropanen und den davon abgeleiteten Intermediaten zu tun haben.

Manfred Christl
Institut für Organische Chemie
der Universität Würzburg

Massenspektrometrie: Begriffe und Definitionen. (Reihe: Heidelberger Taschenbücher, Band 260). Von E. Schröder. Springer, Berlin, 1991. 95 S., Broschur DM 24.80. – ISBN 3-540-53329-X

Die Massenspektrometrie ist – viel mehr als andere spektroskopische Methoden – vom Zusammenspiel physikalischer und chemischer Vorgänge geprägt. Dies hat vor allem in den letzten zwei Jahrzehnten zu vielfältigen methodischen Weiterentwicklungen und zu einer erheblichen Erweiterung der massenspektrometrischen Analytik geführt. Gleichzeitig haben aber auch die Erkenntnisse über die intrinsischen Eigenschaften und die Reaktionen von Ionen sowie neutraler chemischer Spezies durch die massenspektrometrische Grundlagenforschung stark zugenommen. Das vorliegende Taschenbuch soll Studenten im Haupt- und Nebenfach sowie analytisch tätigen Chemikern in lexikalischer Form die Begriffsvielfalt der heutigen Massenspektrometrie erläutern und ihnen so das Lesen der neueren Literatur erleichtern. Um es vorweg zu sagen: Das Buch wird diesem Anspruch leider nur mit großen Einschränkungen gerecht. Es enthält erhebliche Mängel und ist mit wenig Sorgfalt geschrieben, so daß es trotz des geringen Preises auch Studenten nicht empfohlen werden kann.

Auf 68 Seiten werden in 77 alphabetisch geordneten Abschnitten massenspektrometrische Grundbegriffe erläutert. Hinzu kommen Eintragungen von Nebenbegriffen mit Querweisen. Die restlichen 27 Seiten enthalten zwei den Rahmen des Büchleins wohl sprengende Tabellen: Atom- und Nuclidmassen – zu 15% von Isotopen mit der natürlichen Häufigkeit null (!) – und Korrelationen zwischen Massenzahlen und Strukturelementen.

Natürlich sind einige Abschnitte schon lesenswert: Die Ionisierungsmethoden einschließlich moderner Verfahren wie *Elektrospray*, *Fast-Atom-Bombardment (FAB)* und *Inductively Coupled Plasma (ICP)* werden vergleichsweise eingehend erklärt, ebenso neuere Chromatographie-Massenspektrometrie-Kopplungen (z.B. *Moving Belt*- und *Thermospray*). Auch den gängigen Analysatortypen (*Sektorfeld*-, *Quadrupol*-, *Flugzeit*- und *Ionencyclotronresonanz- (ICR)*-Massenspektrometer) sowie der vielbesagten *MS/MS*-(*Tandem*-) Massenspektrometrie und den *Metastabilen Ionen* werden größere Abschnitte gewidmet. Dem Ordnungsprinzip entsprechend ist hier und da etwas Ionen-Chemisches eingeschoben: von *Allylsplaltung* bis *Retro-Diels-Alder-Zerfall*. Gerade diese Abschnitte sind aber zu knapp gefaßt und – auch bei den Literaturverweisen – nicht up-to-date: So sollten beim Begriff *Lokalisierte Ladung* auch andere Fragmentierungsprinzipien (z.B. *Distonische Ionen*, *Remote Fragmentation*) erwähnt werden.

Leider sind viele andere wichtige Begriffe (z.B. *Feldfreie Räume* im Abschnitt über Metastabile Ionen, das beim modernen Flugzeitmassenspektrometer entscheidend wichtige *Reflectron*, die *Isotopenmassenspektrometrie* und der in den letzten Jahren so erfolgreiche *Ion-Trap-Detektor*) überhaupt nicht erwähnt. Bei der ICR-Massenspektrometrie fehlt ein Hinweis auf die *Externen Ionenquellen* und das gegenüber anderen Methoden enorm große *Zeitfenster* (> 1 s)! Didaktisch

wichtig wäre auch ein Abschnitt über die *Anregungsenergie von Ionen* gewesen und darüber, wie stark diese ein Massenspektrum (z.B. Peakintensitäten der Ionen m/z 91 und m/z 92 beim *n*-Butylbenzol, S. 39) beeinflussen kann.

Und nun zu wirklich Ärgerlichem. Man trifft vielfach auf sprachlich, aber auch sachlich unpräzise Formulierungen und Definitionen, von denen die meisten hier besser nicht wiedergegeben werden. Nicht von ungefähr haben Peaks „Intensitäten“, aber Ionen und Isotope „Häufigkeiten“, und die Verwechslung von Abszisse und Ordinate ist ebenfalls irritierend. Die Größe z im massenspektrometrischen m/z ist die Ladungszahl, nicht die Elementarladung (letztere, e , kommt aber nicht vor!). Die Definition der *McLafferty-Reaktion* ist schlecht; sie würde in der gegebenen Form z.B. auch Wasser-Eliminierungen einschließen. Trivial dagegen ist der Hinweis, daß in der Beziehung $m_0 = m_1 - m_2$ für die Masse des Neutralfragments $m_2 < m_1$ ist.

Ganz schlimm wird es beim Herzstück der konventionellen Massentrennung, dem *Magnetischen Massenanalysator*: Seit wann werden schwerere Ionen im Magnetfeld (dies wird mal B , mal H genannt) stärker abgelenkt als leichtere? Just daneben staunt der Leser über die Gleichsetzung der Lorentz-Kraft (Bev) mit der kinetischen Energie der Ionen ($mv^2/2$), wo doch sicher mv^2/r , die Zentrifugalkraft, gemeint ist! Auch die Energiedispersion (S. 22) ist fehlerhaft formuliert. Alles nur Druckfehler? Wohl kaum; denn auch das *Isotopenmuster*-Beispiel (CuCl_2) gibt beim Nachrechnen andere Werte – und das nicht etwa deshalb, weil der Autor nicht einmal die Nuclid-Häufigkeiten aus der Anhang-Tabelle des Buches benutzt. Rechnet man – ohne Zuhilfenahme des Computers! – nach, so erhält man z.B. 91.2% (statt 95.1%) für den $^{63}\text{Cu}^{35}\text{Cl}_2$ -Anteil. Und warum nur gleicht die *Feldionenquelle* (S. 27) so schematisch der IE-Quelle, wo doch die Gegenelektrode ganz nahe (1.5–2 mm) beim Emitterfaden sitzen muß?

Trauriges Fazit: Dies Buch läßt allzuviel zu wünschen übrig. Da hätte es auch nichts genützt, wenn unseren Altvordeuren mehr Ehre erwiesen worden wäre: Dem Mattauach-Herzog-Analysator fehlt meist das zweite t (das reizt zu MS-Insider-Kalauern!), und die besagte Kraft auf bewegte elektrisch geladene Teilchen im Magnetfeld wurde nicht etwa von dem Verhaltensforscher (ohne t), sondern von dem berühmten Physiker (mit t) gefunden.

Dietmar Kuck
Fakultät für Chemie
der Universität Bielefeld

Modern NMR Techniques and Their Application in Chemistry.

(Reihe: Practical Spectroscopy Series, Vol. 11). Herausgegeben von A. I. Popov und K. Hallenga. Marcel Dekker, New York, 1991. X, 665 S., geb. \$ 135.00 (USA und Kanada), \$ 162.00 (alle übrigen Länder). – ISBN 0-8247-8332-8

Nun ist das Arbeitsgebiet NMR-Spektroskopie ganz sicher kein Zweig der Wissenschaft, der über einen Mangel an Literatur oder Büchern zum Thema zu klagen hätte: Vom einfachen Lehrbuch bis hin zur spezialisierten Monographie findet sich viel Lesenswertes. Trotzdem gibt es auch auf diesem wohlsortierten Markt schmerzliche Lücken, beispielsweise genau die Richtung, die der Titel des hier zu besprechenden Buches anspricht: „Modern NMR Techniques and Their Application in Chemistry“. Dies ist sicherlich ein ambitionierter Titel, und auch der Preis des Buches ist beträchtlich. Diese beiden Randbedingungen wecken entsprechend hohe Erwartungen (auch bei der Rezensentin), und an diesen Erwartungen muß sich letztlich das Produkt messen lassen.

Um es gleich vorweg zu schicken: Ich bin ein bißchen enttäuscht und sehe mich gezwungen, diesem Produkt ein wenig „Themaverfehlung“, zumindest aber einen gewissen Mangel an Aktualität anzukreiden. Diesen Vorwurf möchte ich begründen. Was hat dieses Buch auf seinen immerhin 665 Seiten zu bieten? In zehn Kapiteln behandeln Autoren diverse Aspekte zum Thema NMR in der Chemie. Viel-Autoren-Bücher sind weit verbreitet und in Zeiten zunehmender Spezialisierung auch vollkommen akzeptabel.

Schon Kapitel 1, „NMR Properties of Nuclei“ (52 Seiten), scheint mir nicht unbedingt angebracht in diesem Buch: Der Inhalt dieses Kapitels ist ausgesprochen Grundlagen-orientiert; Ähnliches findet sich auch in zahlreichen Varianten in ebenso zahlreichen, Chemikern vertrauten NMR-Lehrbüchern. Im übrigen sollte man wohl davon ausgehen können, daß die potentielle Leserschaft dieses Buches über dieses Basiswissen verfügt.

Kapitel 2, „Fourier Transform NMR: Theoretical and Practical Aspects“ (72 Seiten), erscheint mir bedeutend nützlicher – es ist für Chemiker gut lesbar geschrieben und hat durchaus seine Berechtigung in diesem Buch, auch wenn der Inhalt von Kapitel 2 in vielfacher Form schon in anderen NMR-Büchern zu finden ist.

Die folgenden acht Kapitel behandeln nun die Anwendung der Methode in der Chemie. Es ist begrüßenswert, daß dem Thema Festkörper-NMR-Spektroskopie zwei Kapitel (208 Seiten) gewidmet werden. Allerdings ist der Inhalt dieser beiden Kapitel eher dazu angetan, bestehende Vorurteile zu zementieren, als Appetit auf Anwendung zu erzeugen. Das Kapitel „Solid State NMR of Spin-1/2 Nuclei“ zeigt als Anwendungsbeispiele in Abbildungen (S. 137, 160) zwei Beispiele aus Arbeiten von Pines et al. sowie Herzfeld und Berger, die inzwischen schon Legende sind. Diese beiden Abbildungen sind in mehreren Übersichtsartikeln und Büchern der letzten zehn Jahre verwendet worden. Weitere appetitanregende Anwendungen, geschweige denn einen Überblick darüber, was in den letzten Jahren in der Chemie auf diesem Gebiet erarbeitet worden ist, fehlen völlig. Auch der Abschnitt, der sich CP-MAS-NMR-Untersuchungen an Festkörpern widmet, ist in dieser Hinsicht irreführend. Alle Beispiele hier betreffen ausschließlich ^{13}C -Messungen an Kohle und organischen Polymeren. Das sind zwar sicherlich wichtige Anwendungen, aber sie allein repräsentieren eben nicht „Modern NMR Techniques and Their Application in Chemistry“.

Kapitel 4, „Solid-State NMR of Quadrupolar Nuclei“ (106 Seiten), enthält eine nützliche Zusammenfassung zum Thema Quadrupol-Wechselwirkungen und Asymmetrieparameter, hier sind auch die Anwendungsbeispiele etwas breiter gestreut. Kapitel 5, „Quantitative Analysis by NMR“ (46 Seiten), bietet wiederum vorwiegend Basiswissen, hier hätte man sich gewünscht, daß auch auf Quantifizierungsprobleme in der Festkörper-NMR-Spektroskopie eingegangen wird, die sich bekanntlich von denen der Lösungs-NMR-Spektroskopie in manchen Aspekten unterscheiden.

Vielleicht wäre es besser gewesen, Kapitel 6, „Structural Determination of Organic Compounds“, und Kapitel 10, „Two-Dimensional NMR Studies of Biomacromolecules“ in einem Kapitel zu vereinen, denn es liegt in der Natur der Sache, daß die jeweils zu besprechende Methodik viele Gemeinsamkeiten aufweist, der eigentliche Unterschied vorwiegend im Molekulargewicht der „Objekte“ besteht.

Zwar gibt Kapitel 7, „Structural Determination of Inorganic Compounds“, einen Anwendungsbereichsüberblick anhand einer Reihe anorganischer und metallorganischer Verbindungen, einschließlich der Anwendung von 2D-NMR-Techniken, aber die Festkörper-NMR-Spektroskopie in diesem Bereich kommt hier zu kurz: Es werden gerade einmal sehr knapp Zement und Zeolithe erwähnt. Das ist besonders schade, denn

auch Kapitel 3 und 4 bieten in dieser Hinsicht wenig. Eine eingehendere Diskussion, etwa zur kombinierten Anwendung von Lösungs- und Festkörper-NMR-Spektroskopie (oder Festkörper-NMR-Spektroskopie und Beugungsverfahren) wäre hier sehr hilfreich gewesen. Kapitel 8, „Equilibria Studies in Solutions“, und Kapitel 9, „Reaction Kinetics and Exchange“, haben ihre Berechtigung in der Tatsache, daß diese Themen in vielen anderen Büchern recht stiefmütterlich behandelt werden.

Daß es durchaus möglich ist, in einem von Preis und Umfang vergleichbaren Rahmen dem ehrgeizigen Ziel des hier besprochenen Buches deutlich näher zu kommen, beweist meines Erachtens ein anderes Viel-Autoren-Buch, das 1990 von P. Granger und R. K. Harris herausgegeben wurde („Multinuclear Magnetic Resonance in Liquids and Solids – Chemical Applications“, NATO ASI Series C, Vol. 322, Kluwer Academic Publishers, 1990, ISBN 0-7923-0986-3).

Angelika Sebald
Bayerisches Geoinstitut
Universität Bayreuth

Quasicrystals, Networks and Molecules of Fivefold Symmetry.

Von I. Hargittai. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1990. XIII, 314 S., geb. DM 148.00.–ISBN 3-527-27927-X/0-89573-723-X

Durch die Entdeckung eines Materials, das die Beugungseigenschaften eines normalen Kristalls aufweist (Bragg Peaks) und dennoch eine perfekte fünfzählige Drehachse zu besitzen scheint, haben Shechtman et al. 1984 eine Welle von Aktivitäten auf dem Gebiet der Festkörperchemie und der Physik ausgelöst. Die Zahl der Publikationen zu diesem Thema war in der Tat überwältigend, so daß der Bedarf an Monographien – sowohl als Einführung als auch als Überblick – auf der Hand liegt. Das zu besprechende Buch erscheint also im rechten Augenblick (obwohl es nicht das einzige ist, eine größere Zahl von Monographien zu diesem Thema ist bereits erschienen).

Die Themen des Buchs reichen von reiner Mathematik bis hin zur Organischen Chemie, so daß sowohl Anfänger als auch Experten einen guten Überblick erhalten. Wie allen Monographien, die aus Beiträgen mehrerer Autoren zusammengesetzt sind, fehlt auch diesem Buch etwas die klare Linie, ein Mangel, der durch den größeren Blickwinkel jedoch hinreichend ausgeglichen wird.

Im ersten Kapitel schreibt Mackay über die geschichtliche Entwicklung der fünfzähligen Symmetrie in der Kristallographie und erörtert ihre philosophische Bedeutung. Dieser Beitrag ist eine gute Einführung in das allgemeine Problem der Begriffe Ordnung und Unordnung in flachen und gewölbten Räumen verschiedener Dimension. Senechal schreibt im zweiten Kapitel über den Einfluß des eindimensionalen Quasikristalls und stellt heraus, daß selbst dieses einfachste Fallbeispiel bisher nur unvollständig aufgeklärt ist und daß unsere Kenntnisse über nicht-kristallographische Symmetrie noch in den Anfängen stecken. In diesem ausgezeichneten Beitrag ist das derzeitige Wissen über den eindimensionalen Fall klar und sorgfältig zusammengefaßt. Kapitel 3 beschreibt die Zusammenhänge zwischen stochastischen Netzkarten und quasikristalliner Symmetrie. Die Autoren Sagdeev und Zaslavsky nutzen die Beziehungen zwischen dem chaotischen Verhalten selbstähnlicher Fraktale und der Selbstähnlichkeit quasikristalliner Systeme.

Kapitel 4 bis 6 befassen sich ausführlicher mit der experimentellen Chemie. Viele Autoren haben hochaufgelöste elektronenmikroskopische (HREM = high resolution electron microscopy) Aufnahmen von Quasikristallen veröffentlicht,