

den nicht den häufig zu beobachtenden Fehler begehen, die modernsten und instrumentell aufwändigsten Methoden als die besten einzustufen. Die nächsten drei Kapitel befassen sich mit den verschiedenen Darreichungsformen. Hier kommt der analytische Aspekt vor allem bei den modernen therapeutischen Systemen zu kurz. Es folgen Kapitel über regulatorische Fragen wie Spezifikationsfestsetzung, Validierung, Methodentransfer und Dokumentation. Außerdem wird auf die Methodenentwicklung (Kapitel 10) und auf Stabilitätsstudien (Kapitel 13) näher eingegangen. Mit dem letzten Kapitel über die elektrophoretische Mikrochip-Technologie wird entgegen dem bisherigen Konzept des Buches eine analytische Methode zum Thema gemacht.

Das Konzept des vorliegenden Buches – Strukturierung nach Aufgabenfeldern – bedingt relativ häufige Wiederholungen in den einzelnen Kapiteln. Insofern kann jedes Kapitel für sich gelesen werden (Handbuch), aber das Lesen mehrerer hintereinander ermüdet. Für den pharmazeutischen Analytiker ist es sinnvoll, ja sogar unbedingt notwendig, seine Arbeit im Kontext mit Synthesechemikern und Galenikern zu sehen. Deshalb halte ich das Konzept für durchaus gut und lohnenswert. Einige Kapitel enthalten meines Erachtens allerdings zu viele fachfremde Informationen. So findet sich im gesamten Kapitel 8 kein Hinweis auf die speziellen Probleme der Analytik etwa von Dosieraerosolen oder Suppositorien. Die Galenik (pharmazeutische Technologie) ist absolut beherrschend. Das Inhaltsverzeichnis ist schlüssig; hierüber findet man zuverlässig die interessierenden Abschnitte. Dagegen lässt das Stichwortregister, das gerade in einem Handbuch möglichst umfangreich sein sollte, zu wünschen übrig: Viele Begriffe tauchen in mehreren Kapiteln auf, der Registerhinweis führt jedoch meist nur in eines. Als gravierender Mangel des Buches ist das Fehlen eines Abkürzungsverzeichnisses zu vermerken. Weitere kleine Mängel wie das Fehlen des Begriffs „Traceability“ im Zusammenhang mit Richtigkeit sind vorhanden, auf ihre kleinliche Aufzählung soll aber verzichtet werden. Das Buch ist sicherlich sehr nützlich für Einsteiger in die pharmazeutische Industrie und für jede dort angesiedelte

Bibliothek. Auch „alten Hasen“ kann es durchaus Anregungen und neue Erkenntnisse vermitteln.

Peter Surmann

Institut für Pharmazie
der Humboldt Universität, Berlin

Object-Oriented Magnetic Resonance. Classes and Objects, Calculations and Computations. Von Michael Mehring und Volker A. Weber-russ. Academic Press, San Diego 2001. 555 S., geb. (mit CD-ROM) 79.95 \$.—ISBN 0-127-40620-4

In *Object-Oriented Magnetic Resonance* werden die quantenmechanischen Prinzipien der Kernspin- und Elektronenspinresonanz erläutert, die die Grundlage für das Verständnis und die Entwicklung neuer Kernspinresonanz(NMR)-Experimente und Algorithmen darstellen. Die Themenbreite des Buchs ist sehr groß, das Spektrum reicht von der Beschreibung grundlegender Quantenmechanik des Spins bis zu Berichten über spezielle Themen wie die Liouville-Raumentwicklungen. Anwendungen von Multipuls, Mehrquanten und mehrdimensionaler Spektroskopie, sowie Quantenrechnungen bauen auf diesen Konzepten auf. Einführungen in die Festkörper-NMR-Spektroskopie, elektronenparamagnetische Resonanz-(EPR)-Spektroskopie und die Elektron-Kern-Doppelresonanz(ENDOR)-Spektroskopie werden gegeben.

Seit vielen Jahren schon besteht Bedarf an einem Buch, das einen Überblick über das sich dynamisch entwickelnde Gebiet der Festkörper-NMR-Spektroskopie bietet. Besonders in den letzten Jahren haben sich die Methoden und die Gerätetechnik rasant verbessert. Bücher, die sowohl eine grundlegende Einführung in das Gebiet geben als auch praktisches Expertenwissen vermitteln, sind schwer zu finden. Das vorliegende Buch richtet sich nach Angabe der Autoren an Wissenschaftler und graduierende Studierende, die sich in den Bereichen Biologie, Chemie, Materialwissenschaften, Physik und Medizin mit NMR- und EPR-Spektroskopie beschäftigen. Aufgrund der physikalischen Präsentation des Themas ist das Buch jedoch beson-

ders interessant für Physikochemiker und Wissenschaftler mit Vorkenntnissen in der Quantenmechanik.

Die Autoren wählten für ihr Werk einen ansprechenden Titel mit Bezug auf die Objekt-orientierte Programmierung in der Informatik. Tatsächlich können die meisten Pulssequenzelemente als modulare Bestandteile in vielen Anwendungen eingesetzt werden. Im Fall von NMR sind Objekte (nach den Autoren) Operatoren der Spinphysik wie sphärische Tensoroperatoren, Dichteoperatoren usw. Die Gesamtheit der Spinoperatoren, Propagatoren usw. werden als Klassen definiert. Bei der Computerprogrammierung werden die Objekte als Blackboxes behandelt, die einen Code (die NMR-Pulssequenz) und Daten (das zu untersuchende quantenmechanische Spinsystem) enthalten sowie Signale (die strukturellen Fragen an das Spinsystem) empfangen und aussenden können. Eine wichtige Regel bei der Objekt-orientierten Programmierung ist, dass der Anwender eines Objekts niemals einen Blick in die Blackbox werfen soll. Aber gerade das fordern die Autoren von ihren Lesern: Sie beschreiben ausführlich alle Objekte und Klassen, die in der Kernspinresonanz Verwendung finden. Zusätzlich zu den mathematischen, theoretischen und numerischen Themenebenen ist in jedem Unterabschnitt eine Liste mit graphischen Symbolen aufgeführt, die auf wichtige Aussagen, Übungen, Programme im Text oder auf der CD-ROM hinweisen: eine didaktische Maßnahme, die den Lehrbuchcharakter des Buchs unterstreichen soll. Doch nun zum Inhalt der Kapitel im Einzelnen.

In den Kapiteln 1–6 werden die physikalischen Grundkenntnisse für die quantitative Beschreibung der magnetischen Kern- und Elektronenresonanz vermittelt. Hier werden auch die Klassen und Objekte im Hilbert- und Liouville-Raum definiert. Spin-Spin-Wechselwirkungen von Kernen und Elektronen, Quadrupolwechselwirkungen, chemische Verschiebungen, entsprechende Hamilton-Funktionen und ein-dimensionale Spektren werden in Kapitel 7 beschrieben. Außerdem werden MAS(Magic Angle Spinning)-Techniken erläutert. Eine kurze Darstellung der Relaxation am Ende des Kapitels leitet über zu Kapitel 8, in dem Relaxa-

tionsvorgänge im Detail erörtert werden. In Kapitel 9 werden Spinecho-Experimente wie das bekannte Hahn-Echo behandelt. Unter anderem werden Echo-Sequenzen behandelt, die unter dem Namen „Rotary, Driven, Stimulaten, Quadrupolar, Solid Magic Echo“ Eingang in die Literatur gefunden haben und als Bausteine in vielen Pulsprogrammen verwendet werden. Kenntnis dieser elementaren Konzepte ist die Voraussetzung für das Design neuer Pulssequenzen. Die Autoren behandeln dieses Thema auf beinahe 60 Seiten sehr umfassend. Doppelresonanz-Techniken wie ENDOR, DNP, SEDOR und CP werden in Kapitel 10 abgehandelt. Diese Experimente werden am Beispiel eines Dreiniveausystems und eines Vielniveausystems erläutert. Schwerpunktmaßig werden Doppelresonanzexperimente behandelt unter Berücksichtigung elektronischer Übergänge. Das 11. Kapitel beschäftigt sich mit Multipulssequenzen und den Problemen der homonuklearen Entkopplung. Sequenzen wie CPMG, WAHUHA, LG und die Varianten MREV-8 und BR-24 werden vorgestellt. Eine Einführung in die Mehrquanten-Spektroskopie wird in Kapitel 12 gegeben. Leider werden hier wichtige Methoden wie MQ-MAS- und „double quantum local field separated“-Spektroskopie nicht besprochen. In Kapitel 13 werden die Grundlagen der zweidimensionalen Spektroskopie kurz erläutert.

Die Möglichkeit, das Prinzip der magnetischen Kernresonanz in einem Quantencomputer zu nutzen, hat in letzter Zeit großes Aufsehen erregt. Ein solcher Computer verwendet Quantenzustände als Speicher, die als Überlagerungen mehrerer verschiedener Zahlen angesehen werden können. Nach Rechnungen mit diesen Quantenzuständen muss eine Dekonvolution durchgeführt werden, um ein eindeutiges Ergebnis zu erhalten; ein Quantencomputer hat das Potential, um vieles leistungsfähiger zu sein als ein herkömmlicher Computer gleicher Größe. Das Kapitel 14 beschäftigt sich intensiv mit diesem Thema. Somit ist die Brücke zwischen Objekt-orientierter Computerprogrammierung und der Programmierung von NMR-Impulssequenzen geschlagen. Im letzten Kapitel werden analytische Rechenverfahren behandelt, die für eine quantitative

Beschreibung jedes MR-Experiments unentbehrlich sind. Das Kapitel bietet Einblick in das Floquet-Verfahren, Störungstheorie und die Prinzipien der Sekulärglättung.

Darüber hinaus enthält das Buch eine knappe Einführung in Simulationsprogramme zur Berechnung von MR-Phänomenen. Die entsprechende Software GAMMA und NMRMAT wird zusammen mit einigen Anwendungsbeispielen auf der CD-ROM mitgeliefert. Dies ist meines Erachtens eine sehr schöne Idee, denn bei vielen Festkörper-NMR-Experimenten sind mehr oder weniger intensive Berechnungen notwendig, um die Spektren in einer Multispinumgebung richtig zu analysieren.

Michael Mehring veröffentlichte 1983 die 2. Auflage seines Buchs *High Resolution NMR in Solids* (Springer), die mittlerweile leider vergriffen ist. Im Vergleich zu diesem Buch hat das vorliegende wesentliche Erweiterungen erfahren: So sind die Ausführungen über die quantenchemische Natur des Spins, die Relaxation, Spinechos und Quantencomputer auf der Basis von NMR weit aus umfassender. Durch diese Aktualisierung ging allerdings der klare Aufbau des Inhalts, der das ältere Buch auszeichnet, teilweise verloren. Außerdem wurde das Kapitel über magnetische Abschirmungstensoren, in dem Probleme und Beispiele aus der Praxis zur Anisotropie chemischer Verschiebungen erörtert wurden, nicht in das neue Buch übernommen. Weiterhin ist bedauerlich, dass Entwicklungen, die aus der Zeit nach 1983 stammen, mit Ausnahme des NMR-Quantencomputers nicht thematisiert wurden. Allgemein wird die Theorie zu sehr überbetont, was die Erwartungen eines Lesers, der mehr an praktischen Anwendungen interessiert ist, enttäuschen könnte. Ein Kapitel oder Abschnitt über „Recoupling“-Phänomene im Festkörper findet sich beispielsweise nicht. Da die Ent- und Rückkopplung eng miteinander verbunden sind, hätte man dieses Thema im Kapitel 11, wo über die homonukleare Entkopplung berichtet wird, aufnehmen können. Auch ein Kapitel über NMR-Anwendungen bei Polymeren und Biomolekülen fehlt leider. Wahrscheinlich ist es nicht möglich, alle interessanten Themen dieses Forschungsgebiets in nur einem Buch umfassend zu behandeln.

Das Buch kann dennoch jedem empfohlen werden, der sich für die physikalischen Grundlagen der magnetischen Kernresonanz und Elektronenspinresonanz interessiert. Es sollte in der Bibliothek eines jeden Wissenschaftlers, der sich mit NMR-Spektroskopie beschäftigt, zu finden sein.

Bernd Reif

Institut für Organische Chemie und
Bochemie II
der Technischen Universität München

Structure and Bonding in Crystalline Materials. Von *Gregory S. Rohrer*. Cambridge University Press, Cambridge 2000. 539 S., Broschur 29.95 €.—ISBN 0-521-66379-2

Das vorliegende Lehrbuch nähert sich auf etwa 550 Seiten den Zusammenhängen von Struktur und Bindung in kristallinen Festkörpern an. Bewusst ist hier der Begriff „Annäherung“ verwendet, denn angesichts des Themas und spätestens beim Lesen des Buches wird einem klar, dass der Umfang dieses Stoffgebiets nahezu grenzenlos ist. Eine Gesamtdarstellung käme somit eher der Quadratur des Kreises gleich. Dennoch wurde von Gregory Rohrer eine gute Arbeit geleistet, selbst in Anbetracht einiger Schwachstellen, die eine erste Auflage so mit sich bringt.

Thema und Stoff des Buches entstammen einem Vorlesungszyklus für graduierende Studenten (Niveau von Diplomanden und Doktoranden) im Bereich Materials Science and Engineering an der Carnegie Mellon University. Der Autor lehrt den Inhalt des Buches im Rahmen einer ein-semestriegen Veranstaltung mit etwa 52 Vorlesungsstunden. In seinem Vorwort stellt er explizit fest, dass es seine Absicht sei, die vorhandenen Bücher der Spezialliteratur über Kristallographie, Festkörperphysik und anorganische Strukturchemie in einer ansprechenden und für Studierende nützlichen Weise zusammenzufügen. Dabei will er die vorhandene Literatur keineswegs ersetzen, sondern verwendet sie sogar durch entsprechende Verweise für weiterführendes Lesen und vertiefendes Arbeiten.

Das Buch besteht aus 10 Kapiteln. In einer Einführung werden die elementar-