

# Vorwort zur 9. Auflage

Die Strukturaufklärung organischer Verbindungen mit spektroskopischen Methoden hat in den vergangenen Jahrzehnten eine rasante Entwicklung genommen. Die rasche Folge von überarbeiteten und erweiterten Neuauflagen dieses Buches trägt dieser Entwicklung Rechnung. Moderne Methoden der Strukturanalytik werden anhand von Beispielen beschrieben, ohne etwas ältere, häufig verwendete Verfahren ganz beiseite zu lassen. Darüber hinaus wird der unterschiedliche Ausrüstungsstandard der spektroskopischen Abteilungen berücksichtigt. In der Kernresonanz z.B. existiert ein weiterer Bereich zwischen 60- und 1000-MHz-Geräten, die ganz unterschiedliche Möglichkeiten bieten.

Zielsetzung des Buches ist zunächst die begleitende Lektüre zu Vorlesungen und Seminaren über (organische) Strukturanalytik. Danach soll das Buch bei Diplom-, Master- und Doktorarbeiten und generell bei Forschungsprojekten die wissenschaftliche Basis bieten, um Strukturprobleme organischer Verbindungen zuverlässig zu lösen. Fehlerhafte Strukturen oder Strukturdaten treten immer noch erstaunlich häufig in Publikationen auf, obwohl sie mit modernen spektroskopischen Methoden vermieden werden könnten. Die Lösung komplexer Strukturprobleme bietet einen fesselnden Anreiz, eine herausfordernde „Knobelei“, auf streng wissenschaftlicher Basis.

Die Neuerungen und Erweiterungen der 9. Auflage sind überwiegend, aber nicht ausschließlich in den Kapiteln 3 und 5 zu finden.

Die Ergänzungen im Kapitel 3 'Kernresonanz-Spektren' betreffen im methodischen Bereich vor allem 2D-Techniken: E-COSY, DOSY, HSQC-TOCSY, HSQC-NOESY und INADEQUATE. Da organische Moleküle im Wesentlichen auf Kohlenstoffgerüsten

aufgebaut sind, spielen  $^{13}\text{C}$ -NMR-Signale eine besondere Rolle. Leider gibt es gerade bei ihnen viele Fehlzuordnungen. Häufig findet man daher in Fachzeitschriften bloße Auflistungen der  $^{13}\text{C}$ -chemischen Verschiebungen ohne jede Zuordnung. Damit geht ein wichtiges Kriterium für den Strukturnachweis neuer Verbindungen verloren. Die Diskussion der  $^{13}\text{C}$ -NMR-Verschiebungen nimmt in der 9. Auflage einen breiten Raum ein. Die maßgeblichen Effekte, vor allem die Verteilung der Elektroendichte, werden an vielen Beispielen erörtert. Zusätzlich wurde die nach Substanzklassen geordnete Tabelle der  $^1\text{H}$ - und  $^{13}\text{C}$ -chemischen Verschiebungen (Abschnitt 3.5.3) auf über 30 Druckseiten erweitert.

Das vollständig neu erstellte Kapitel 5 'Umgang mit Spektren und analytischen Daten an Beispielen' zeigt anhand von zehn Fällen, wie man analytische Daten beschreibt und mit welchen Strategien man daraus zu Strukturvorschlägen kommt. Die dabei behandelten Verbindungen wurden ausnahmslos mit modernen Geräten gemessen und beziehen aktuelle Anwendungen von 2D-NMR und HR-MS ein.

Als Zusatz wird ein frei zugänglicher elektronischer Übungsteil neu zur Verfügung gestellt, der stetig erweitert werden soll. Bei der Erstellung der 9. Auflage sind wir zu besonderem Dank verpflichtet: Herrn Heinz Kolshorn, Herrn Dr. Johannes Liermann und Frau Ingrid Schermann (alle Universität Mainz) sowie Frau Jrene Lehmann, Herrn Urs Stalder, Yvonne Forster und den Studierenden des Organisch-chemischen Praktikums II (alle Universität Zürich).

*Herbert Meier  
im Namen der Autoren*

# Vorwort zur 1. Auflage

Es ist kein einfaches Unterfangen, die in den letzten Jahren angesammelten Untersuchungsergebnisse in der UV-, IR-, NMR- und Massenspektrometrie in einem Taschenbuch zu komprimieren. Um dies zu erreichen, muss man Kompromisse schließen und Schwerpunkte setzen. Demgemäß wurde versucht, die zum Verständnis der einzelnen Methoden notwendigen Grundlagen und das für Anwendung in der täglichen Praxis des Organikers Wesentliche in leicht verständlicher Form zusammenzufassen. Soweit es möglich war, wurden spezielle Techniken der einzelnen Methoden erwähnt und anhand von Beispielen erläutert. In anderen Fällen sind ergänzende Hinweise auf die einschlägige Fachliteratur gegeben. Am Schluss des Buches sind einige ausgearbeitete, integrierende Beispiele angeführt. Diese Beispiele sollen einerseits das methodische Vorgehen bei der Lösung von Problemen aus der Struktur-Analytik aufzeigen und andererseits anschaulich belegen, dass die kombinierte Anwendung verschiedener spektroskopischer Methoden erfolgversprechender und zuverlässiger ist als die Anwendung nur einer Methode. Die weitaus größte Zahl aller Strukturaufklärungen werden heute in Hochschule und Industrie auf diese Weise schnell und einfach bewältigt. Es

wäre jedoch übertrieben zu behaupten, dass alle Strukturprobleme allein mit spektroskopischen Methoden lösbar sind, es sei denn, eine Röntgen-Strukturanalyse wird durchgeführt. Chemische Umwandlungen oder Abbau-Reaktionen müssen auch heute teilweise noch zur exakten Strukturaufklärung herangezogen werden.

Wir hoffen, dass der angehende Chemiker durch dieses Buch das notwendige Rüstzeug für die Anwendung der spektroskopischen Methoden in der organischen Chemie erhält und die Erfolgsaussichten jeder einzelnen Methode bei der Lösung von Strukturproblemen richtig einzuschätzen lernt.

Für die Anfertigung von Spektren und die Durchsicht des Textes im NMR-Kapitel sei den Herren H. Kolshorn, H. Petersen und U. Plücken, Tübingen, besonders gedankt und für die Durchsicht des Textes des Massenspektrometrie-Kapitels sowie für wertvolle Anregungen den Herren N. Bild, A. Guggisberg, H. Kühne und H. Suess, Zürich.

Zürich, im Mai 1979

*Manfred Hesse  
Herbert Meier  
Bernd Zeeh*