



Guide to Fluorine NMR for Organic Chemists

Fluor ist ein außergewöhnliches und faszinierendes Element mit Interesse für akademische Forschung, Medizin und Industrie. Die breit gefächerten Anwendungsmöglichkeiten fluorierter Verbindungen haben die Suche nach neuen Fluorierungsreagentien und -verfahren beflügelt. Außerdem regen sie die Untersuchung der Effekte an, die der Einbau von Fluor auf die physikalischen und chemischen Eigenschaften von Substanzen ausübt. Viele Organiker, die sich auf dieses Gebiet einlassen, erkennen schnell die Bedeutung der Fluor-NMR-Spektroskopie, mit der aber vor allem Anfänger weniger vertraut sind als mit der Protonen- oder Kohlenstoff-NMR-Spektroskopie. Hier kann die Monographie Abhilfe schaffen, die Professor W. R. Dolbier, ein führender Experte des Studiums fluorierter Moleküle, kürzlich vorgestellt hat: Das Buch baut auf Grundkenntnissen zur NMR-Spektroskopie auf, ist klar geschrieben und führt den Anwender in sieben Kapiteln mit steigendem Anspruch durch alle Aspekte der Fluor-NMR-Spektroskopie. Es ist ein unentbehrliches Handbuch für alle Institutionen, in denen ^{19}F -NMR-Spektroskopie betrieben wird.

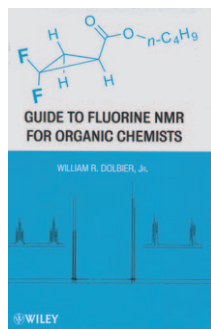
In den ersten beiden Kapiteln werden die einzigartigen Effekte von Fluoratomen als Substituenten zusammengefasst. Ein besonderes Augenmerk liegt dabei auf Größe, Polaritätseffekten, Auswirkungen auf pK_s , pK_b und Lipophilie. Hinzu kommen einige Grundlagen der Fluor-NMR-Spektroskopie, etwa chemische Verschiebungen und Spin-Spin-Kopplungskonstanten, ^1H - und ^{13}C -NMR-Spektroskopie fluororganischer Verbindungen, Auswirkungen von Isotopen auf chemische Verschiebungen und mehrdimensionale ^{19}F -NMR-Spektroskopie. Die folgenden fünf Kapitel sind nach einer zunehmenden Zahl an Fluorsubstituenten geordnet. Im dritten und längsten Kapitel werden monofluorierte Verbindungen ausführlich abgehandelt: Dabei helfen ungefähr 100 Schemata, Tabellen und Abbildungen, vollgepackt mit Werten für chemische Verschiebungen und Kopplungs-

konstanten, sowie klar präsentierte und im Detail interpretierte ^1H -, ^{13}C - und ^{19}F -NMR-Spektren. Gesättigte und ungesättigte, aromatische und heteroaromatische Fluorverbindungen werden nacheinander diskutiert, allgemeine Merkmale und Muster, die die Erkennung von Signaturen erleichtern, werden beschrieben, und interessante Details werden herausgestellt. In ähnlicher Manier befassen sich die Kapitel 4 und 5 mit der NMR-spektroskopischen Charakterisierung von CF_2 - bzw. CF_3 -Gruppen. Im Hinblick auf chemische Verfahren in fluorigen Phasen ist das Kapitel 6 über stärker fluorierte Gruppen höchst nützlich. Im letzten Kapitel geht es schließlich um Verbindungen, in denen eines oder mehrere Fluoratome direkt an ein Heteroatom (B, Si, N, P, O oder S) gebunden sind. Dieser Abschnitt richtet sich vor allem an Chemiker, die sich für chemische Verschiebungen in der Fluor-NMR-Spektroskopie interessieren oder mechanistische Studien an neuen Reaktionen planen. Während für Trifluormethyl-Organometallverbindungen einige nützliche Daten angegeben werden, bleiben Spezies mit Metall-Fluor-Bindungen z.B. zu Pd oder Ni außen vor. Leser, die mehr über diese eher anorganischen Aspekte der NMR-Methode wissen wollen, werden aber auf entsprechende Originalbeiträge verwiesen.

Die straffe Organisation des Stoffs sorgt für einen schnellen Zugriff auf die gewünschten Informationen, sodass das Buch eigentlich auch ohne das Register auskommen könnte. Die verständlich abgefassten Kapitel geben einen sehr guten Überblick über viele Aspekte der Fluor-NMR-Spektroskopie. Mit kommentierten Daten für insgesamt über 1000 Verbindungen steht das Buch Forschern und fortgeschrittenen Studenten als ein wichtiges Hilfsmittel bei der Charakterisierung fluorierter organischer Verbindungen zur Seite. Ich bin überzeugt, dass dieses Buch das Zeug zum bevorzugten Nachschlagewerk für Fluorchemiker hat.

Véronique Gouverneur
Chemistry Research Laboratory
University of Oxford (Großbritannien)

DOI: 10.1002/ange.201002423



Guide to Fluorine NMR for Organic Chemists
Von William R. Dolbier, John Wiley & Sons, Hoboken
2009. 272 S., geb.,
69.90 €, ISBN 978-0470193419