

Infrarotspektroskopische Untersuchungen an einigen heterocyclischen Analogen des Chalkons: Zuordnung verschiedener Banden (Teil XVII)

Kurze Mitteilung

Von

S. S. Misra

Aus dem Chemistry Department, Harcourt Butler Technological Institute,
Kanpur, Indien

(Eingegangen am 29. März 1972)

Die Infrarotabsorptionsspektren von Analogen des Chalkons wurden in letzter Zeit von mehreren Autoren untersucht¹⁻⁵. Im Rahmen meiner Arbeiten über die Infrarotabsorption von Chalkonen befaßt sich die vorliegende Arbeit mit der Zuordnung verschiedener Infrarotabsorptionsbanden von heterocyclischen und mehrkernigen Analogen des Chalkons (Tab. 1). Die Ergebnisse sind in Tab. 2 zusammengefaßt.

Experimenteller Teil

Die in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Analogen des Chalkons wurden durch Kondensation von 1-Acetylnaphthalin, 2-Acetylthiophen, 5-Acetyl-8-hydroxychinolin und 4-Acetylbiphenyl mit den entsprechenden Arylaldehyden dargestellt. Die Synthesemethode wurde an anderer Stelle beschrieben⁶⁻⁷. Die Reinigung erfolgte durch mehrmalige Umkristallisation. Die Homogenität der gereinigten Präparate wurde durch Dünnschichtchromatographie (Silicagel, Petroläther/Essigester 5 : 1) überprüft.

Die Infrarotabsorptionsspektren wurden in CHCl_3 aufgenommen. Die Schichtdicke betrug 0,1 mm. Es wurde von $4000-650\text{ cm}^{-1}$ gemessen. Die Aufnahme erfolgte auf einem Beckman-Spektrophotometer Model IR-7 mit einem Präzisionsprisma.

Tabelle 1. $\text{Ar}-\text{CO}-\text{CH}=\text{CH}-\text{Ar}'$

Verb.-Nr.	Ar	Ar'
1	1-Naphthyl	5-Brom-3,4-dimethoxyphenyl
2	1-Naphthyl	2-Bromphenyl
3	1-Naphthyl	3,4-Methyendioxyphenyl
4	2-Thienyl	2-Bromphenyl
5	2-Thienyl	2-Hydroxyphenyl
6	2-Thienyl	5-Nitro-4-hydroxy-3-methoxyphenyl
7	2-Thienyl	6-Brom-3,4-dimethoxyphenyl
8	8-Hydroxy-5-chinolinyl	2-Bromphenyl
9	8-Hydroxy-5-chinolinyl	2,3-Dimethoxyphenyl
10	Biphenyl	2-Nitrophenyl

Tabelle 2. Infrarotabsorptionsbanden

Schwingung	Beobachtete			
	1*	2*	3*	4*
3100—3000 ν CH (aromatisch)	3012	3049	3012	2994
3000 ν CH (olefinisch)	2941	3003	2941	2941
1685—1665 ν C=O	1678	1678	1661	1647
1647—1621 ν C=C	1642, 1631	1631	1647, 1634	1637
1600—1500 ν Phenylalkan	1592, 1565 1550	1587, 1572 1548	1581, 1550 1531	1600, 1587 1558
1650—1600 Gerüstschwingungen	1642, 1613	1631, 1529	1647, 1634	
1630—1575 des kondensierten	1592, 1527	1511, 1502	1613, 1581	—
1525—1450 Systems	1484, 1462	1484, 1451	1506, 1475	
1548—1508 ν_{as} NO ₂	—	—	—	—
1356—1340 ν_s NO ₂	—	—	—	—
2850 ν_s CH ₃ (<i>Ar</i> -OCH ₃)	2825	—	—	—
1460 ν_{as} (=C—O—C)	1462	—	—	—
1250 δ CH Äther	1261	—	—	—
1616—1598 ν Benzolring-		1587, 1572		1600, 1587
1581—1573 schwingung	—	1511, 1502	—	1506, 1484
1510—1460 (<i>o</i> -disubst.)		1464, 1466		1414
1457—1427				
1286—1252 δ Benzolring-		1274, 1134		1260, 1250
1164—1156 schwingung	—	1124	—	1152, 1141
1139—1111 (<i>o</i> -disubst.)		1045, 1010		1060, 1031
1044—1022				
1410—1350 δ OH (phenol.)	—	—	—	—
1260—1180 ν CO (phenol.)	—	—	—	—
1292—1272 ν C—C—C	1276, 1272	1274	1285	1295
1175—1125 δ CH, substit.	1144, 1093	1134, 1095	1176, 1134	1105, 1082
1110—1070 phenyl	1048, 1005	1073, 1010	1124, 1104	1073, 1060
1070—1000			1042	1044, 1010
1042—1028 <i>Ar</i> -Br (<i>o</i> -)	—	1045	—	1044
980—965 \approx CH	998	978	979, 950	977
unter 900 \oint CH	847	864, 857	858	843

* Die Nummern der Verbindungen entsprechen denen der Tab. 1.

Anmerkung: Der Bereich 820—720 cm⁻¹ wurde durch die Absorption des Chloroforms verdeckt.

von Analogen des Chalkons

Banden, cm^{-1}

5*	6*	7*	8*	9*	10*
2998	2994	3003	3003	3003	2994
2985	2941	2841	2989	2941	2899
1667	1689	1647	1661	1656	1678
1639	1650	1642	1639, 1626	1626	1639
1597, 1506	1595, 1543	1587, 1553	1572, 1563	1595, 1577	1595, 1522
1647, 1639			1639, 1626	1621, 1595	1639, 1522
1597, 1506	—	—	1597, 1560	1577, 1502	1449
1475, 1464			1511, 1504	1477, 1464	
—	1543	—	—	—	1522
—	1353	—	—	—	1339
—	2833	2841	—	2833	—
—	1475, 1443	1464	—	1464	—
—	1266, 1255	1264, 1232	—	1271, 1230	—
—	—	—	1597, 1572	—	1595, 1578
—	—	—	1511, 1504	—	1522, 1449
—	—	—	1480, 1433	—	—
—	—	—	1264, 1161	—	1290, 1152
—	—	—	1155, 1041	—	1143, 1066
—	—	—	1032	—	1022
1389, 1368	1362, 1353	—	1391, 1359	1399	—
1233	1255	—	1264, 1235	1183	—
1282	1295	1290	1264	1271	1290
1144, 1180	1143, 1134	1167, 1083	1188, 1172	1172, 1153	1198, 1066
1096, 1068	1081, 1063	1064, 1045	1155, 1098	1120, 1101	1020
1001	1044	1029	1031	1091, 1038	—
—	—	1045	1031	—	—
977	990, 982	989	978, 955	959	968
857	862, 834	862, 843	835	835	885, 833

ν = Streckschwingung; δ = Knickschwingung (in der Ebene);
 ϑ = Knickschwingung (aus der Ebene).

Literatur

- ¹ *N. L. Silver* und *D. W. Boykin, Jr.*, *J. Org. Chem.* **35**, 759 (1970).
- ² *D. N. Dhar* und *V. P. Gupta*, *Indian J. Chem.* **9**, 818 (1971).
- ³ *D. N. Dhar* und *S. S. Misra*, *J. Indian Chem. Soc.* **49**, 629 (1972).
- ⁴ *A. Nayak*, *P. L. Nayak*, *B. K. Sabata* und *M. K. Rout*, *J. Indian Chem. Soc.* **41**, 507 (1964).
- ⁵ *S. S. Misra*, *J. Indian Chem. Soc.* (ingesandt).
- ⁶ *S. C. Kushwaha*, *S. S. Misra* und *J. B. Lal*, *Proc. Nat. Acad. Sci. (India)* **40**, 301 (1970).
- ⁷ *S. S. Misra*, Ph. D. Thesis Kanpur University, 1970.