

Paramagnetische Kernresonanzspektren von Dimethyl- und Diäthyltellur; Elektronegativität von Tellur

VON GOTTHARD KLOSE

Physikalisches Institut der Universität Leipzig
(Z. Naturforsch. 16 a, 528 [1961]; eingegangen am 24. April 1961)

Das hochaufgelöste Protonenresonanzspektrum von Dimethyltellur (Abb. 1) besteht aus einer intensiven Mittellinie mit zwei an den Flanken gelegenen intensitätsschwächeren Linien und zwei weit entfernt und symmetrisch zur Mittellinie gelegenen sehr schwachen Linien. Die beiden inneren Satellitenlinien werden durch die indirekte Spin-Spin-Kopplung zwischen den Protonen der CH_3 -Gruppen, die an die Tellurisotope Te^{123} und Te^{125} mit dem Kernspin $1/2$ (natürliche Häufigkeit 11,59% bzw. 13,45%) gebunden sind, und diesen Isotopen hervorgerufen [$J(\text{Me})$]. Die äußeren Satellitenlinien entstehen durch den gleichen Kopplungsmechanismus zwischen dem Kohlenstoffisotop C^{13} mit

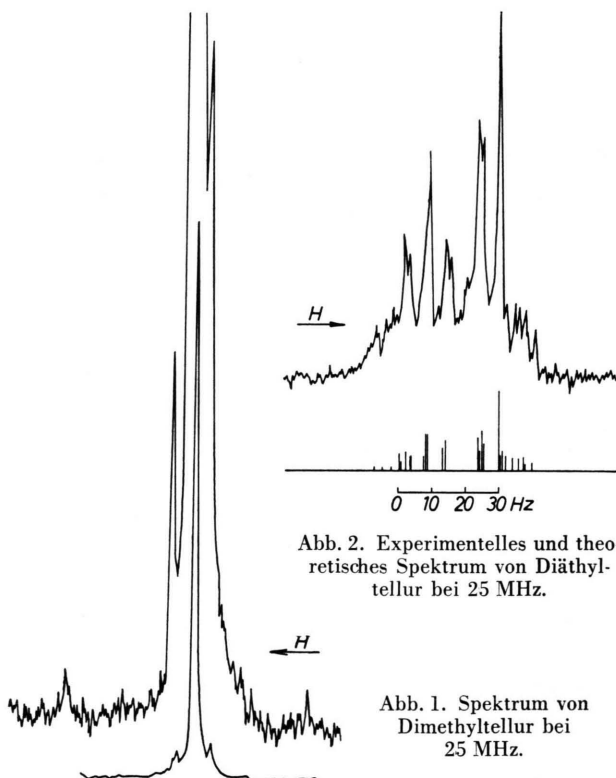


Abb. 2. Experimentelles und theoretisches Spektrum von Diäthyltellur bei 25 MHz.

Abb. 1. Spektrum von Dimethyltellur bei 25 MHz.

¹ G. KLOSE, Hochaufgelöste paramagnetische Protonenresonanzspektren einiger Metallalkyle, Ann. Phys., Lpz. (im Druck).

² J. T. ARNOLD, Phys. Rev. **102**, 136 [1956].

³ N. MÜLLER u. D. E. PRITCHARD, J. Chem. Phys. **31**, 1471 [1959].

⁴ J. RANFT, Vortrag zur Arbeitstagung Hochfrequenzspektroskopie, Leipzig 1960.

dem Kernspin $1/2$ (natürliche Häufigkeit 1,1%) und den Protonen.

Das Spektrum von Diäthyltellur (Abb. 2 oben) zeigt eine gewisse Ähnlichkeit mit dem Kernresonanzspektrum der Äthylgruppe von Äthylalkohol bei der gleichen Resonanzfrequenz. Das Spektrum wurde durch exakte Lösung des HAMILTON-Problems¹ berechnet (Störungsrechnung 1. Ordnung² ist nicht mehr ausreichend, da die Bedingung, daß die innere chemische Verschiebung δ der Protonen der CH_2 - und CH_3 -Gruppe groß ist gegen die indirekte Spin-Spin-Kopplung J zwischen den beiden Protonengruppen, nicht gut erfüllt ist). Das theoretisch berechnete Spektrum (Abb. 2 unten) zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem experimentellen.

Entsprechende Kopplungen zwischen den Tellurisotopen und den Protonen wie bei der Methylverbindung konnten nicht beobachtet werden.

Aus der gemessenen C^{13} -Kopplungskonstante $J_{\text{HC}^{13}}$ von Dimethyltellur und der inneren chemischen Verschiebung δ von Diäthyltellur wurde nach drei verschiedenen empirisch gefundenen Formeln

$$J(\text{HC}^{13}) = 22,6 E_x + 40,1 r(\text{C}-\text{X}) + 5,6 \quad (\text{MÜLLER u. PRITCHARD}^3),$$

$$J(\text{HC}^{13}) = 64,0 + \frac{r(\text{C}-\text{X})}{0,065} E_x' \quad (\text{RANFT}^4),$$

$$e_x = 0,01929 \delta + 1,71 \quad (\text{DAILEY u. SHOOLERY}^5)$$

die Elektronegativität von Tellur bestimmt.

Die gemessenen und berechneten Werte wurden in der folgenden Tabelle zusammengestellt.

J	δ	$J(\text{Me})$	$J(\text{HC}^{13})$	$r(\text{C}-\text{X})$ [l. c. ⁶]
7,0 Hz	25,0 Hz	20,7 Hz	140,5 Hz	2,05 Å
E_x	E_x'	e_x	\bar{e}_x [l. c. ⁷]	
2,3	2,4	2,19	2,1–2,2	

Die verwendeten Substanzen wurden unter Stickstoffatmosphäre in kugelförmige Glasproben mit einem Volumen von 2–4 mm³ eingeschmolzen und ohne Verdünnung untersucht. Ihre Spektren wurden mit einem Trübtäuber-Spektrometer bei 25 MHz aufgenommen. Die Ausmessung der Spektren erfolgte mit Hilfe des Seitenbandverfahrens.

Für die Herstellung der untersuchten Substanzen am Organisch-Chemischen Institut der Universität Leipzig bin ich Herrn Dr. WEISSENFELS zu Dank verpflichtet. Herrn DARGAZANLI möchte ich für die Durchführung der Rechnung beim Diäthylspektrum und Herrn Professor Dr. LÖSCHE für das Interesse an dieser Arbeit danken.

⁵ B. P. DAILEY u. J. N. SHOOLERY, J. Amer. Chem. Soc. **77**, 3977 [1955].

⁶ Die Bindungslänge $r(\text{C}-\text{X})$ wurde dem „Handbook of Chemistry and Physics“, Chemical Rubber Publishing Co., Cleveland 1960–1961, S. 3395, entnommen.

⁷ „Bester Wert“ für die Elektronegativität für Tellur nach PRITCHARD u. SKINNER, Chem. Rev. **55**, 745 [1955].

