

## **Produkte der verlängerten Autoxidation einfacher zweiwertiger Phenole in Gegenwart von Kupfer(II)-Ionen – eine Elektronenspinresonanzstudie**

**Milica G. Nikolić<sup>1\*</sup>, Nenad S. Krstić<sup>1</sup>, Dragan M. Đorđević<sup>1</sup>**

*1- Universität Niš, Fakultät für Naturwissenschaften und Mathematik, Institut für Chemie, Višegradska 33, 18000 Niš, Serbien*

### **ABSTRACT**

Die Elektronenspinresonanz (ESR)-Spektroskopie wurde zur Charakterisierung der Produkte verwendet, die durch längere Autoxidation von einfachen zweiwertigen Phenolen (Hydrochinon, Brenzcatechin und 4-Methylbrenzcatechin) in Gegenwart von Kupfer(II)-Ionen erhalten wurden. Die ESR-Spektren bei Raumtemperatur zeigten, dass sowohl paramagnetische Kupfer(II)-Ionen als auch organische Radikale in den erhaltenen Autoxidationsprodukten vorhanden sind, ähnlich wie die mit Huminsäure komplexierten Kupfer(II)-Ionen. Das Verhältnis der Signalintensität organischer Radikale zur Signalintensität der Kupfer(II)-Ionen legt nahe, dass die kleinste Menge an Kupfer(II)-Ionen in das Autoxidationsprodukt von Hydrochinon eingebaut wird, während die höchste Menge an Kupfer(II)-Ionen in das Autoxidationsprodukt von Catechol eingebaut wird. Zufriedenstellende Computersimulationen von experimentellen ESR-Spektren wurden erhalten, indem nur eine Art von Kupfer(II)-Ionen-Bindungsstelle für das Hydrochinon-Autoxidationsprodukt und zwei unterschiedliche Arten von Kupfer(II)-Ionen-Bindungsstellen für Catechol- und 4-Methylcatechin-Autoxidationsprodukte betrachtet wurden. Die Parameter, die durch die Computersimulation von ESR-Spektren erhalten wurden, zeigten eine vorherrschende ionische Bindung von Kupfer(II)-Ionen in Polymermatrices mit tetraedrischer Verzerrung an Kupfer(II)-Ionen-Bindungsstellen und vernachlässigbaren Austauschwechselwirkungen zwischen ihnen. Produkte, die durch Hydrochinon- und Brenzcatechin-Autooxidation erhalten werden, haben ähnlichere Eigenschaften im Vergleich zu dem Produkt, das durch die 4-Methylbrenzcatechin-Autoxidation erhalten wird, wo stärker ausgeprägte ionische Bindungen von Kupfer(II)-Ionen und eine geringere tetraedrische Verzerrung vorhanden sind. Aufgrund der dipolaren Wechselwirkungen sauerstoffzentrierter

organischer Radikale in Autoxidationsprodukten mit paramagnetischen Kupfer(II)-Ionen sind ihre ESR-Linienbreiten größer und ihre g-Werte kleiner im Vergleich zu den Werten, die in Huminsäuren aus verschiedenen Bodentypen gefunden werden.

Schlüsselwörter: *Hydrochinon, Brenzcatechin, 4-Methylbrenzcatechin, Autoxidation, Kupfer(II)-Ion, ESR*