

5. Experimenteller Teil

5.1. Analysenmethoden

5.1.1. Schmelzpunkte

Die Schmelzpunkte wurden auf einem Kofler Heizmikroskop, Modell Reichert Thermovar, gemessen und sind nicht korrigiert.

5.1.2. Infrarot-Spektren

Die IR-Spektren wurden mit dem Perkin-Elmer Spektrometer, Modell 983, an KBr-Presslingen aufgenommen. Flüssige Proben wurden als Film zwischen NaCl-Fenstern gemessen. Der Meßbereich betrug $4000\text{-}400\text{ cm}^{-1}$. Bei der Angabe der IR-Daten sind die intensiven Banden unterstrichen.

5.1.3 Kernresonanzspektren

Zur Aufnahme der ^1H -NMR-Spektren dienten die NMR-Spektrometer DRX 500 (500 MHz) und WM 300 (300 MHz) der Firma Bruker, sowie JNM-PM X60si (60 MHz) der Firma JEOL. Die chemischen Verschiebungen werden in ppm angegeben und beziehen sich auf Tetramethylsilan (0 ppm) als inneren Standard [24]. ^{13}C -NMR-Spektren wurden mit Hilfe der NMR-Spektrometer DRX 500 (125 MHz) und WM 300 (75 MHz) der Firma Bruker angefertigt. Als inneren Standard verwendete man ebenfalls Tetramethylsilan. Die chemischen Verschiebungen sind den breitbandenkoppelten NMR-Spektren entnommen. Als Zuordnungshilfe bezüglich der Signalmultiplizität dienten die entsprechenden DEPT-135/90-Spektren. Die chemischen Verschiebungen der Signale werden mit folgender Spezifikation der Multiplizität angegeben: s Singulett, d Dublett, t Triplett, m Multipliett .

5.1.4. Massenspektren

EI-Massenspektren wurden mit dem AMD 604 (EI-Ionenquelle 70eV) gewonnen. Angegeben sind die Ionisierungsenergie und die Temperatur des Einlaßsystems. Die Intensitäten der angegebenen Daten beziehen sich auf den Basispeak (100%).

5.1.5. Elementaranalysen

Die Elementaranalysen wurden mit einem Elementaranalysator der Firma Carlo Erba, Modell 1106, und mit dem Elementaranalysator der Firma Hekatech GmbH, Modell 300, durchgeführt.

5.1.6. Chromatographie

a) Analytische Chromatographie

Für analytische Trennungen (DC) wurden DC-Alufolien (Merck 60 F₂₅₄) verwendet.

b.) Präparative Schichtchromatographie

Für die präparative Schichtchromatographie (PSC) verwendete man luftgetrocknete Kieselgelschichten (Merck PF₂₅₄) mit einer Schichtdicke von 1mm auf Glasplatten der Größe 48 x 20 cm. Die sowohl unter UV-Licht als auch visuell erkannten Zonen wurden ausgeschabt und mit Aceton oder Ethylacetat eluiert.

c) Säulenchromatographie

Präparative Trennungen wurden auch mittels der Flash-Säulenchromatographie durchgeführt. Dazu verwendete man eine Säule mit einem

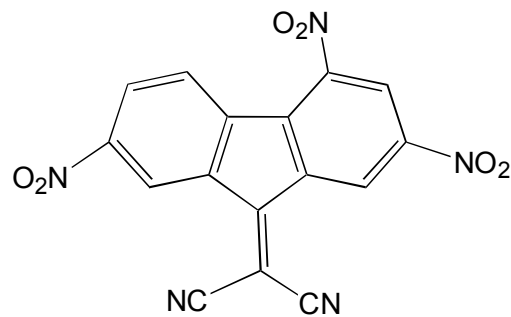
Durchmesser von 30 mm und einer Länge von 250 mm, einem Teflonküken (NS 14.5/12.5) und einen aufgesetzten 250 ml-Rundkolben mit Schliff NS 29. Für die Trennung wurde jeweils 60 g Kieselgel 60 mit einer Korngröße zwischen 40µm und 63 µm (230-400 mesh) der Firma Merck verwendet.

5.2. Lösungsmittel

Die verwendeten Lösungsmittel wurden nach Standardmethoden gereinigt und, falls erforderlich, getrocknet [114].

5.3. Eingesetzte Propandinitrile

5.3.1 (2,4,7-Trinitro-9*H*-fluoren-9-yliden)propandinitril (DTF, 5)



5

wurde von der Firma Acros Organics N.V., Geel, Belgien, bezogen.

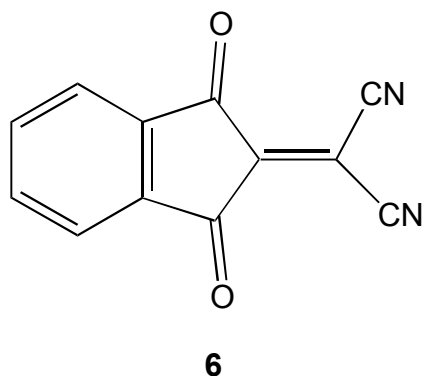
Summenformel: C₁₆H₅N₅O₆, **Formelgewicht:** 363.15 **Schmelzpunkt:** 175-176°C,

Lit. [27]: 176 °C

IR: ν [cm⁻¹] = 3493, 3095, 2230, 1611, 1599, 1584, 1522, (1463), (1412), 1344, 1311, (1214), 1199, (1104), 1015, 955, (928), 911, (900), 851, 829, 782, 768, 730, 698, (444)

5.3.2. Darstellung von (1,3-Dioxo-2,3-dihydro-1*H*-inden-2-yliden)propandinitril (DCID, **6**) nach *Chatterjee* [29]

In einem 50 ml Erlenmeyerkolben werden 0.38 g (2.1 mmol) Ninhydrin und 1.6 g (24.2 mmol) Malonsäuredinitril vermischt. Diese Mischung wird erhitzt, bis eine homogene Schmelze entsteht. Nach kurzem Abkühlen wird die Schmelze mit wenig Methanol versetzt. Nach kurzer Zeit scheiden sich gelbe Kristalle ab, die abgesaugt werden. Die 0.4 g Rohprodukt werden aus Ethylacetat umkristallisiert. Es ergeben sich so 0.25 g (57%) 2-(1,3-dioxo-2,3-dihydro-1*H*-inden-2-yliden)-propandinitril (DCID, **6**) mit einem Schmelzpunkt von 278-280 °C (Lit [29] Schmp.: 280-283°C).



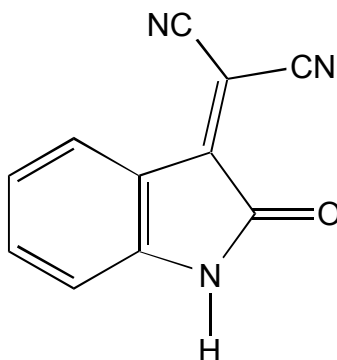
Summenformel: C₁₂H₄N₂O₂, **Formelgewicht:** 208.18 g/mol, **Schmelzpunkt:** 278-280 °C (Lit. [29]: 280-283 °C)

MS (EI, 70 eV, 150 °C) : m/z (%) = 210 (M+2)⁺(10), 209 (M+1)⁺(15), 208 (M)⁺ (100), 207(6), 181 (4), 180 (26), 154 (3), 153 (10), 152 (86), 130 (6) , 129 (4), 127 (5), 126 (8), 125 (9), 105 (6), 104 (44), 101(3), 100 (5), 99 (8), 78 (3), 77 (5), 76 (49), 75 (12), 74 (13), 66 (6), 52 (3), 51 (3), 50 (24)

IR: ν [cm⁻¹] = 3094, 2954, 2229, 1862, 1749, 1703, 1677, 1611, 1580, 1467, 1358, 1327, 1292, 1252, 1236, 1223, 1180, 1069, 1005, 892, 870, 813, 791, 776, 746, 665, 628, 593, 555, 533, 429

5.3.3. Darstellung von (2-Oxo-2,3-dihydro-1H-indol-3-yliden)propandinitril

(DMIO, 7) nach A. Fatiadi [45]



7

In einem 100 ml-Rundkolben werden 1.5 g (0.01 mol) Isatin und 0.7 g (0.01 mol) Malonsäuredinitril in 60 ml absolutem Ethanol zwei Stunden unter Rückfluß erhitzt. Nach zwei Stunden wird der Ansatz auf Raumtemperatur abgekühlt, und das Lösungsmittel am Rotationsverdampfer abgezogen. Nach Umkristallisieren aus Ethanol und Trocknen des Rückstandes erhält man 1.6 g (80%) 2-(2-oxo-2,3-dihydro-1H-indol-3-yliden)propandinitril (7).

Summenformel: C₁₁H₅N₃O, **Formelgewicht:** 195.19 g/mol, **Schmelzpunkt** (Ethylacetat): 236 -238 °C, Lit. [45]: 237-239 °C

MS (EI, 70 eV, 155°C) : m/z (%) = 196 (M+1)⁺ (13), 195 (M)⁺ (100), 170 (5), 169 (34), 168 (53), 167 (27), 141 (7), 140 (33), 139 (6), 115 (9), 114 (7), 113 (18), 112 (4), 88 (6), 87 (9), 86 (5), 83 (6), 76 (5), 75 (4), 68 (17), 64 (4), 63 (5), 62 (7), 61 (3), 50 (4), 44(3), 41(7), 40 (4), 39 (4), 38 (4)

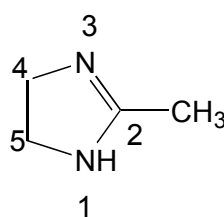
300 MHz ¹H-NMR (DMSO-d₆): δ[ppm] = 6.91-6.93 (d, 1H), 7.09-7.14 (t, 1 H), 7.53-7.58 (t, 1H), 7.83-7.85 (d, 1H), 11.21 (s, 1H, NH)

75 MHz ^{13}C -NMR (DMSO- d_6): δ [ppm] = 80.71, 111.64, 111.81 (CH) , 113.14, 118.73, 123.08 (CH), 125.95 (CH), 137.99 (CH), 146.65, 150.68, 163.83 (C=O)

IR: ν [cm^{-1}] = 3258, (3109), (2871), (2779), 2232, (1943), (1832), 1716, 1619, 1585, 1465, (1390), 1342, 1289, 1265, 1213, (1187), 1107, 1026, 966, 924, 879, 793, 756, 684, 642, 626, 498, (471), (443), (407)

5.4. Eingesetzte Imidazolderivate und Acetamidine

5.4.1. 4,5-Dihydro-2-methylimidazol (16)

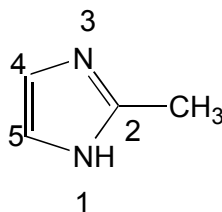


16

wurde von der Firma Aldrich, Steinheim, bezogen.

Summenformel: $\text{C}_4\text{H}_8\text{N}_2$, **Formelgewicht:** 84.13 g/mol, **Schmelzpunkt:** 105-106°C,
Lit. [59]: 107 °C

IR: ν [cm^{-1}] = 3293, 1623, 1472, (1384), 1293, 1033, 945, (670), 591

5.4.2. 2-Methylimidazol (17)**17**

wurde von der Firma Fluka bezogen

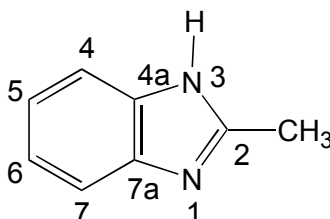
Summenformel: $C_4H_6N_2$, **Formelgewicht:** 82.11 g/mol, **Schmelzpunkt:** 143-144°C,
Lit. [117]: 145°C

300 MHz 1H -NMR (DMSO- d_6): δ [ppm] = 2.28 (s, 3H, CH_3), 6.87 (s, 2H),
11.5 (s, 1H, NH)

75 MHz ^{13}C -NMR (DMSO- d_6): δ [ppm] = 13.91 (CH_3), 121.47 (C-4, C-5),
143.75 (C-2)

IR: ν [cm^{-1}] = 3177, 3027, 2657, 1844, 1675, 1595, 1436, 1367, 1302, (1208), 1154,
1129, 1114, (1046), 994, 944, 915, 743, 680, (628)

5.4.3. 2-Methylbenzimidazol (18)



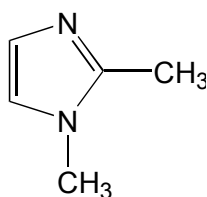
wurde von der Firma Fluka bezogen.

Summenformel: $C_8H_8N_2$, **Formelgewicht:** 132.17 g/mol, **Schmelzpunkt:** 176 °C,
Lit. [59]: 176-177 °C

300 MHz 1H -NMR (DMSO- d_6): δ [ppm] = 2.49 (s, 3H, CH_3), 7.08-7.13 (q, 2H),
7.43-7.49 (q, 2H)

75 MHz ^{13}C -NMR (DMSO- d_6): δ [ppm] = 14.79 (CH_3), 114.36 (C-5 und C-6),
121.17 (C-4 und C-7), 139.12 (C-4a und C-7a), 151.44 (C-2)

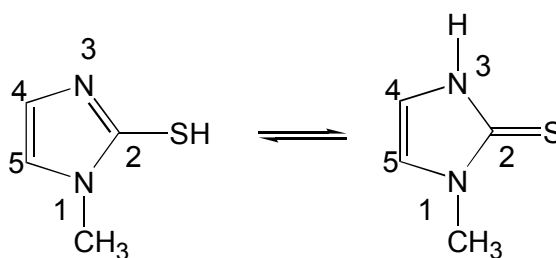
IR: ν [cm^{-1}] = 3432, 3098, 3063, 2995, 2917, 2876, 2849, (2789), (2724), (2680),
(2538), 1621, 1592, 1554, 1486, 1450, 1416, 1386, 1361, 1272, 1219, 1044, 1028,
1021, 1004, (925), (897), (835), (766), 737, (675), (618), (492), (481), (435)

5.4.4. 1,2-Dimethylimidazol (19)**19**

wurde von der Firma Aldrich bezogen und vor Gebrauch umkristallisiert.

300 MHz $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6): δ [ppm] = 2.24 (s, 3H, CH₃), 3.51 (s, 3H, CH₃) 6.69 (s, 1H, 5-H), 6.97 (s, 1H, 4-H)

75 MHz $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6): δ [ppm] = 12.56 (CH₃ an C-2), 32.36 (CH₃ an N-1), 120.83 (C-5), 126.1 (C-4), 144.28 (C-2)

5.4.5. 1-Methyl-2-sulfanylimidazol (20)**20**

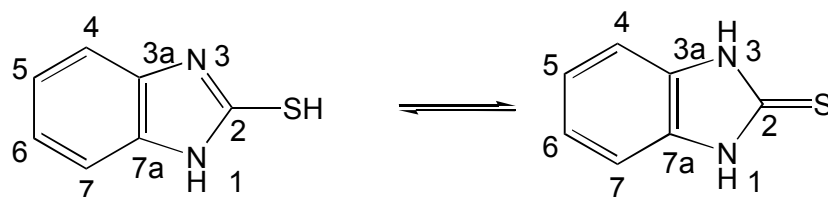
wurde von der Firma Aldrich bezogen.

300 MHz $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6): δ [ppm] = 3.43 (s, CH₃) 6.88 (d, 1H), 7.05 (d, 1H), 12.05 (s, 1H, SH)

75 MHz $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6): δ [ppm] = 33.65 (CH₃), 114.17 (C-5), 119.58 (C-4), 161.33 (C-2)

IR: ν [cm^{-1}] = 3109, (1624), 1569, 1511, 1467, 1398, 1356, 1336, (1274), 1259, 1245, 1215, 1179, 1150, 1086, 1014, 978, 920, 850, 743, 676, 661, 601, 530, 481, 430, 415

5.4.6. 2-Sulfanylbenzimidazol (21)



wurde von der Firma Aldrich, Steinheim, bezogen.

300 MHz $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- d_6): δ [ppm] = 7.13 - 7.23 (m, 4H), 12.58 (s, 2H, 2x NH)

75 MHz $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- d_6): δ [ppm] = 109.67 (C-5 und C-6), 122.51 (C-4 und C-7), 132.45 (C-3a und C-7a), 168.36 (C=S)

IR: ν [cm^{-1}] = 3161, (2878), (2569), (1920), (1874), 1645, 1511, 1467, 1380, 1356, 1338, (1273), 1259, 1231, 1215, 1179, 1016, 978, 920, (900), 744, 711, 661, (617), 600, 481, 430, 416

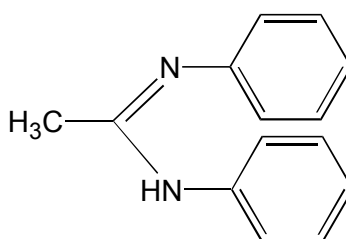
5.4.7. Darstellung der *N,N'*-Bisarylacetamide (22a-g) nach Taylor und Erhardt

[42]

Allgemeine Arbeitsvorschrift:

In einem 250 ml Zweihalskolben werden 16.22 g (0.1 mol) Triethylorthoacetat, 0.2 mol des entsprechenden Anilinderivats und 0.5 ml Essigsäure vereinigt und bei 140°C für zwei Stunden am Rückfluß erhitzt. Im Anschluss wird im Wasserstrahlvakuum fraktioniert destilliert. Der Destillationsrückstand wird aus Petrolether und Toluol im Verhältnis 1:1 mehrmals umkristallisiert.

5.4.7.1. *N,N'*-Diphenylacetamidin (22a)



22a

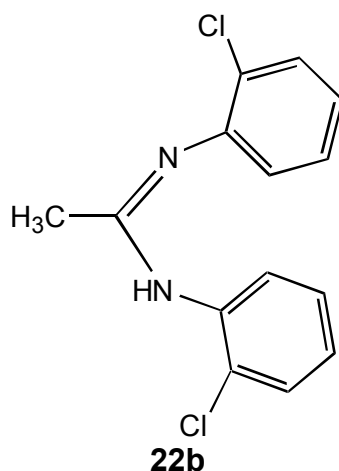
Summenformel: C₁₄H₁₄N₂, **Formelgewicht:** 210 g/mol, **Schmelzpunkt**

(Toluol/Petrolether): 133-135 °C Lit. [42]: 134-136 °C

Ausbeute: 12 g (57%)

MS (EI, 70 eV, 90°C) : m/z (%) = 211 (M+1)⁺ (4), 210 (M)⁺ (22), 209 (M⁺ - H⁺, 21), 167(2), 119 (9), 118 (100), 117 (3), 105 (2), 104 (1), 93 (8), 91 (1), 78 (3), 77 (45), 76 (1), 66 (1), 65 (2), 59 (1), 51(11), 50 (2), 44 (3), 42 (1), 40 (2), 39 (2)

IR: ν [cm⁻¹] = 3456, 3211, 3055, 1628, 1585, 1534, 1490, 1443, 1374, 1333, 1286, 1245, 1220, (1169), (1153), 1072, 1031, (899), 797, 764, 748, 700, 692, 603, (561), 516, (444)

5.4.7.2 *N,N'*-Bis(2-chlorphenyl)acetamidin (22b)

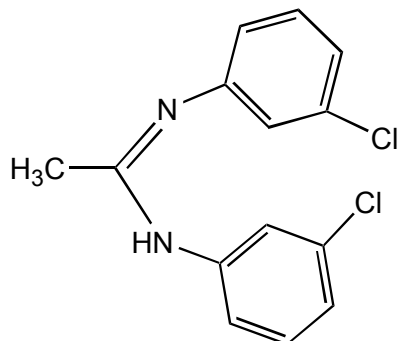
Summenformel: $C_{14}H_{11}N_2Cl_2$, **Formelgewicht:** 279 g/mol, **Schmelzpunkt**

(Toluol/Petrolether): 94-95 °C Lit. [42]: 94.5-95.5 °C

Ausbeute: 9.6 g (34%)

MS (EI, 70 eV, 85°C) : m/z (%) = 282 (M+3)⁺(1), 281 (M+2)⁺ (1), 280 (M+1)⁺(6), 279 (3), 278 (10), 277 (2), 246 (2), 245 (9), 244 (5), 243 (26), 207 (2), 167 (2), 155 (3), 154 (31), 153 (10), 152 (100), 151 (3), 132 (1), 127 (3), 121 (2), 118 (4), 117 (2), 113 (8), 112 (2), 110 (23), 104 (2), 103 (6), 103 (7), 102 (1), 99 (1), 91 (1), 90 (2), 89 (1), 85 (1), 77 (4), 76 (3, $C_6H_4^+$), 75 (15), 74 (1), 63 (2), 51 (3), 50 (2), 44 (1), 42 (2), 40 (2), 39 (2)

IR: ν [cm^{-1}] = 3510, (3180), (3010), (1998), (1910), (1845), 1710, 1633, 1578, 1511, 1488, (1441), 1373, 1300, 1268, 1208, 1172, 1105, 1080, (1011), (998), 982, 905, 897, 844, 805, 788, 755, 732, 708, 598, 580, 487

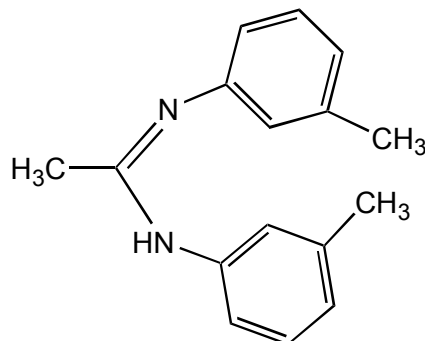
5.4.7.3 *N,N'*-Bis(3-chlorphenyl)acetamidin (22c)**22c**

Summenformel: $C_{14}H_{11}N_2Cl_2$, **Formelgewicht:** 279 g/mol, **Schmelzpunkt** (Toluol/Petrolether): 85-86°C Lit. [118]: 85-86°C

Ausbeute: 10.2 g (37%)

MS (EI, 70 eV, 110°C) : m/z (%) = 280 ($M+2$)⁺ (3), 280 ($M+1$)⁺ (11), 278 (7), 277 (16), 277 (6), 155 (3), 154 (33), 153 (9), 152 (100), 132 (3), 127 (6), 113 (10), 112 (2), 111 (30), 103 (6), 103 (5), 76 (6, $C_6H_4^+$), 75 (15), 51 (2), 50 (3), 44 (3), 42 (2), 40 (3)

IR: ν [cm^{-1}] = 3300, 2987, 1634, 1580, 1534, 1472, 1423, 1374, 1327, 1217, 1088, 1074, 871, 827, 777, 721, 683

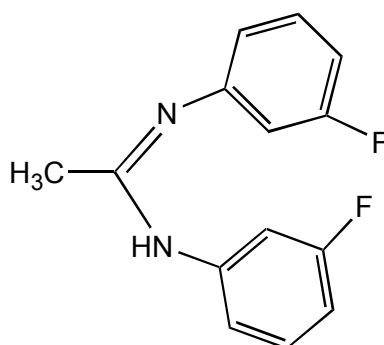
5.4.7.4 *N,N'*-Bis(3-methylphenyl)acetamidin (22d)**22d**

Summenformel: $C_{16}H_{18}N_2$, **Formelgewicht:** 238 g/mol, **Schmelzpunkt** (Toluol/
Petrolether): 102-104 °C Lit.[119]: 104-105°C

Ausbeute: 11.3 g (47%)

MS (EI, 70 eV, 95°C) : m/z (%) = 239 ($M+2$)⁺ (5), 238 ($M+1$)⁺ (25), 237 (18), 133.1 (10), 132 (100), 131 (3), 118 (8), 107 (9), 91 (37), 65 (14), 57 (6), 56 (4), 55 (6), 43 (8), 42 (3), 39 (4)

IR: ν [cm^{-1}] = 3303, 1644, 1609, 1555, 1491, 1377, 1338, 1299, 1246, 1175, 1155, 1085, 923, 896, 869, 801, 775, 703, 695, 444

5.4.7.5 *N,N'*-Bis(3-fluorphenyl)acetamidin (22e)

22e

Summenformel: $C_{14}H_{12}N_2F_2$, **Formelgewicht:** 246.25 g/mol,

Schmelzpunkt (Sublimation): 85-86°C, **Ausbeute:** 8.2 g (33%)

MS (EI, 70 eV, 85 °C) : m/z (%) = 247 ($M+1$)⁺ (3), 246 (M)⁺ (21), 245 ($M-H$)⁺ (8) 137 (9), 136 (100), 111(5), 96 (3), 95 (37), 75 (11)

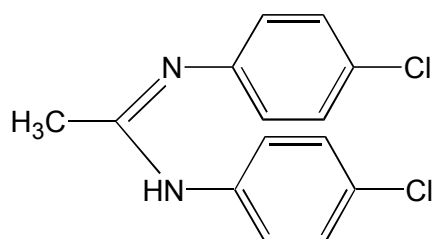
500 MHz ¹H-NMR (DMSO-*d*₆): δ [ppm] = 1.94 (s, 3H, CH₃), 6.61, 6.63, 6.77, 6.8, 7.3, 7.38, 7.91 (8 Aryl-Protonen), 9.25 (s, 1H, NH)

125 MHz ¹³C-NMR (DMSO-*d*₆): δ [ppm] = 17.9 (CH₃), 30.67 (C-2), 105.78, 107.92, 108.22, 114.64, 117.72, 129.88, 130.13, 130.2 (8-Aromaten-C), 142.7, 152.82, 161.7(C-F), 163.63 (C-F)

IR: ν [cm^{-1}] = 3261, 3125, 3067, 2438, 2334, 1922, 1836, 1728, 1636, 1597, 1540, 1477, 1449, 1376, 1328, 1296, 1278, 1260, 1248, 1172, 1161, 1137, 1081, 1070, 1025, 1004, 990, 968, 960, 893, 880, 866, 782, 766, 698, 682, 626, 600, 520, 490, 460, 451, 427

 $C_{14}H_{12}N_2F_2$ (246.25)

Berechnet:	C	68.28	H	4.91	N	11.38
Gefunden:	C	68.03	H	4.88	N	11.39

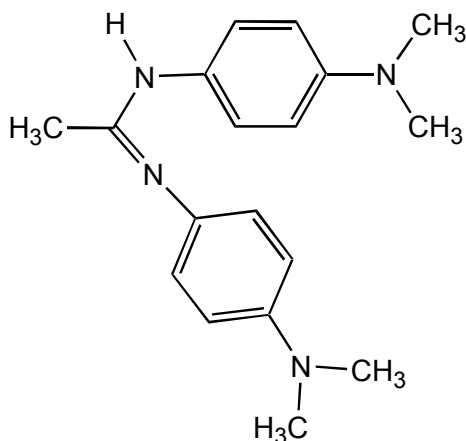
5.4.7.6. *N,N'*-Bis-(*p*-chlorphenyl)acetamidin (22f)**22f**

Summenformel: $C_{14}H_{12}N_2Cl_2$, **Formelgewicht:** 279.17 g/mol, **Schmelzpunkt:** 114-115 °C Lit. [42]: 114 °C **Ausbeute:** 7.6 g (27%)

300 MHz 1H -NMR (Aceton- d_6): δ [ppm] = 1.92 (s, 3 H), 5.07 (s, 1 H), 7.12 (s, 2 H), 7.22-7.25 (m, 4H)

75 MHz ^{13}C -NMR (Aceton- d_6): δ [ppm] = 18.52, 76.61, 77.04, 77.47, 122.19 (4 CH), 127.82, 128.89 (4 CH), 153.12

IR: ν [cm^{-1}] = 3441, 3177, 3089, 3064, 2971, 1909, 1880, 1622, 1583, 1533, 1485, 1430, 1397, 1379, 1331, 1296, 1270, 1248, 1228, 1172, 1090, 1036, 1010, 953, 842, 818, 782, 728, 709, 693, 665, 634, 580, 518, 495, 476, 438

5.4.7.7. *N,N'*-Bis-[(4-(*N,N*-dimethylphenyl)]acetamidin (22g)**22g**

Summenformel: $C_{18}H_{24}N_4$, **Formelgewicht:** 296.43 g/mol, **Schmelzpunkt** (Essigsäure): 158-160°C, **Ausbeute:** 13.2 g (45%)

MS (EI, 70 eV, 155 °C): m/z (%) = 297 (M+1)⁺(12), 296 (M)⁺(62), 162 (11), 161 (97), 137 (10), 136 (100), 135 (11), 121 (5), 120 (13), 105 (8), 104 (6), 79 (6), 77 (10), 42 (16)

300 MHz ¹H-NMR (Chloroform): δ [ppm] = 1.96 (s, 3 H), 2.91 (s, 12 H), 6.71-6.68 (d, 4 H), 7.02- 6.99 (d, 4H)

75 MHz ¹³C-NMR (Chloroform): δ [ppm] = 24.37, 40.87, 113.27, 124.87, 148.29, 180.68

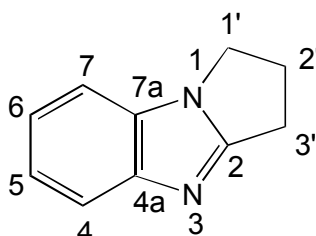
IR: ν [cm^{-1}] = 2898, 1668, 1521, 1405, 1351, 1225, 1128, 1060, 947, 806, 651, 565, 517

$C_{18}H_{18}N_4$ (296.43) * Essigsäure

Berechnet:	C	68.59	H	7.97	N	16.41
Gefunden:	C	68.64	H	8.05	N	16.38

5.4.8. Darstellung von 2,3-Dihydro-1H-cyclopenta[a]benzimidazol (**23**) nach Reppe [43]

In ein Bombenrohr werden 4.3 g (0.04 mol) o-Phenylendiamin (**35**) und 3.4 g (0.04 mol) γ -Butyrolacton (**37**) eingetragen. Nach Verschließen des Rohres wird die Reaktionsmischung sieben Stunden auf 270°C erhitzt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wird das Gemisch mit Chloroform extrahiert, und anschließend das Lösungsmittel wieder abgezogen. Der schwarze teerartige Rückstand wird bei einem Druck von $7 \cdot 10^{-2}$ mbar sublimiert. Dann werden die farblosen Kristalle aus Petrolether/ Cyclohexan umkristallisiert.

**23**

Summenformel: C₁₀H₁₀N₂, **Formelgewicht:** 158 g/mol, **Schmelzpunkt:** 114-115°C
Lit. [43]: 113-115°C **Ausbeute:** 3.4 g (54%)

MS (EI, 70 eV, 70°C): m/z (%) = 159 (M+1)⁺ (12), 158 (M)⁺ (100), 157 (M⁺ - H⁺, 83), 116 (M⁺-C₃H₆, 1), 76(C₆H₄⁺)

300 MHz ¹H-NMR (Aceton-d₆): δ [ppm] = 2.6 (q, 2 H an C-2), 2.91-2.89 (t, 2 H an C-1), 4.07 (t, 2 H an C-3), 7.12 (m, 2 H an C-6 und C-7), 7.32 (d, 1 H an C-5), 7.54-7.53 (d, 1H an C-8)

75 MHz ¹³C-NMR (Aceton-d₆): δ [ppm] = 23.88, 26.81, 43.33 (sek. C-Atome), 110.64, 111.76, 119.98, 122.1 (tertiäre C-Atome)

IR: ν [cm⁻¹] = 3386, 1624, 1592, 1499, 1451, 1415, 1377, 1332, 1299, 1276, 1219, 1156, 1057, 1032, 928, 745, 541, 459, 439