

Prom. Nr. 3470

**Röntgenstrukturanalysen des
3-Azabicyclo-(3.3.1)-nonan-hydrobromids
und des Di-Patschuli-chromsäureesters**

Von der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung
der Würde eines Doktors der technischen Wissenschaften
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von
MAX DOBLER
dipl. Ing.-Chem. E. T. H.
von Zürich und Innerthal SZ

Referent: Herr Prof. Dr. J. D. Dunitz
Korreferent: Prof. Dr. E. Heilbronner

Juris-Verlag Zürich
1963

6. ZUSAMMENFASSUNG

1. 3-Azabicyclo-(3.3.1)-nonan-HBr kristallisiert in der tetragonalen Raumgruppe $P\bar{4}2_1c$ ($a = b = 14.006 \text{ \AA}$, $c = 9.425 \text{ \AA}$). Die Struktur wurde aus dreidimensionalen Fouriersynthesen bestimmt und mittels Differenz- und Differentialsynthesen verfeinert. Die Verbindung besitzt Sessel-Sessel - Konformation mit mittleren Bindungswinkeln von 112° . Der Abstand zwischen den beiden Atomen in 3-Stellung beträgt 3.0 \AA . pK-Messungen waren geeignet, zu zeigen, dass die 2-Aza- und die 9-Aza - Verbindung ebenso wie die 3-Aza - Verbindung - auch in Lösung - Sessel-Sessel - Konformation besitzen.
2. Die Strukturanalyse des Di-Patschuli-chromsäureesters (orthorhombisch, $a = 20.65$, $b = 11.45$, $c = 11.92 \text{ \AA}$, Raumgruppe $P2_12_12_1$) ergab eine neue Strukturformel für den Patschulialkohol. Der Cr-O-C - Winkel beträgt etwa $135 - 145^\circ$. Die Cr-O - Bindungslängen von 1.74 \AA deuten einen Doppelbindungscharakter an. Die erhaltenen Resultate würden mit einem linearen Uebergangszustand bei der Chromsäureoxydation im Einklang stehen.