



Doctoral Thesis

## Röntgenographische und infrarotspektroskopische Untersuchungen an Bicyclo-(2.2.2)-octan, Triethylendiamin und Chinuclidin

**Author(s):**

Brüesch, Peter

**Publication Date:**

1965

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000089819> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Prom. Nr. 3664

**Röntgenographische und  
infrarotspektroskopische Untersuchungen  
an Bicyclo-(2.2.2)-octan, Triethylendiamin  
und Chinucidin**

Von der  
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN  
HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung  
der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften  
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von  
**PETER BRÜESCH**  
dipl. Physiker ETH  
von Tschierschen (Kt. Graubünden)

Referent: Herr Prof. Dr. Hs. H. Günthard  
Korreferent: Herr Prof. Dr. J. D. Dunitz

Juris-Verlag Zürich  
1965

### Zusammenfassung

Von Bicyclo(2.2.2)octan (BCO) und 1-Aza-bicyclo(2.2.2)octan (ABCO) wurden zwischen  $20^{\circ}\text{C}$  und  $-170^{\circ}\text{C}$  Debye- Scherrer Diagramme aufgenommen. Die Infrarotspektren der Lösungen von BCO, ABCO und 1,4- Diaza-bicyclo(2.2.2)octan (DABCO) wurden in  $\text{CCl}_4$  und  $\text{CS}_2$  aufgenommen, während die Festkörper in KBr zwischen  $-190^{\circ}\text{C}$  und  $+110^{\circ}\text{C}$  spektroskopiert wurden.

Sowohl die Pulverdiagramme als auch die Infrarotspektren zeigen die Existenz von Phasenumwandlungen der Festkörper. Die Umwandlungstemperaturen liegen für BCO bei ca.  $-120^{\circ}\text{C}$ , für ABCO bei ca.  $-70^{\circ}\text{C}$  und für DABCO bei  $+80^{\circ}\text{C}$ . Die Hochtemperaturphasen der drei untersuchten Verbindungen kristallisieren kubisch flächenzentriert mit vier Molekülen in der Elementarzelle. Die Debye- Scherrer Diagramme der Tieftemperaturphasen lassen sich hexagonal indizieren, wobei die Elementarzelle von BCO drei, diejenige von ABCO zwei Moleküle enthält.

Die Infrarotspektren der Hochtemperaturphasen von BCO, ABCO und DABCO sind im wesentlichen identisch mit den entsprechenden Spektren der Lösungen. Dagegen zeigen die Tieftemperaturspektren Durchbrechungen der Auswahlregeln und Aufspaltungen entarteter Frequenzen. Die Zuordnung der Infrarotspektren stützt sich auf den Vergleich der Infrarot- und Ramanspektren, den Vergleich der Hoch- und Tieftemperaturspektren sowie auf die Normalkoordinatenanalysen. Das Tieftemperaturspektrum von BCO lässt nicht mit Sicherheit auf eine bestimmte site- Symmetrie schliessen (ev. site- Symmetrie  $C_3$ ). Die Zuordnung des Tieftemperaturspektrums von ABCO ist nur aufgrund der site- Symmetrien  $C_3$  oder  $C_1$  möglich. Für die Tieftemperaturphase von DABCO fällt nur die site- Symmetrie  $C_{3h}$  in Betracht, in Übereinstimmung mit der röntgenographisch bestimmten hexagonalen Struktur.

Zürich, den 1. Februar 1965

Der Verfasser

P. Brüesch