



Doctoral Thesis

## Röntgenstrukturanalysen einiger organischer Verbindungen

**Author(s):**

Weber, Hans Peter

**Publication Date:**

1964

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000090307> →

**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. 3494**

# **Röntgenstrukturanalysen einiger organischer Verbindungen**

Von der  
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN  
HOCHSCHULE IN ZÜRICH  
zur Erlangung  
der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften  
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von  
**HANS PETER WEBER**  
dipl. Naturwissenschaftler ETH  
von Meilen (Kt. Zürich)

Referent: Herr Prof. Dr. J. D. Dunitz  
Korreferent: Herr Prof. Dr. A. Eschenmoser

Juris-Verlag Zürich  
1964

### Zusammenfassung

Azacyclododecan-hydrochlorid kristallisiert aus wässrigen Lösungen in triklinen Nadeln ( $a = 13,77$ ,  $b = 5,07$ ,  $c = 9,67$  Å,  $\alpha = 109^{\circ}26'$ ,  $\beta = 90^{\circ}22'$ ,  $\gamma = 101^{\circ}10'$ , Raumgruppe  $P\bar{1}$ ,  $Z = 2$ ). Die Struktur wurde in zwei Projektionen bestimmt und anschliessend dreidimensional mit Differenzsynthesen verfeinert. Die Konformation des protonierten Zwölfringes weist ausschliesslich gestaffelte partielle Konformationen auf und hat annähernd 422-Symmetrie. Alle Bindungslängen im Ring haben normale Werte um  $1,54$  Å. Die Valenzwinkeldeformation beträgt im Mittel  $+3^{\circ}$  und die Torsionswinkel liegen in acht Fällen nahe bei  $150^{\circ}$  (antiperiplanar) und in vier Fällen nahe bei  $60^{\circ}$  (synklinal). Die transannularen H..H-abstände betragen ca.  $2,1$  Å. Das Stickstoffatom hat die Stellung eines Atoms der Art II und bildet zwei Wasserstoffbrücken zu den Chlorionen.

1,6-trans-Dibromcyclodecan kristallisiert monoklin ( $a = 7,94$ ,  $b = 5,65$ ,  $c = 12,78$  Å,  $\beta = 106^{\circ}47'$ , Raumgruppe  $P2_1/c$ ,  $Z = 2$ ). Die Molekel hat ein Symmetriezentrum. Die Zehnringskonformation entspricht der bekannten Anordnung aus acht synklinalen und zwei antiperiplanaren partiellen Konformationen und hat annähernd  $2/m$ -Symmetrie. Die beiden Bromatome sind an C-atomen der Art II in äquatorialer Stellung gebunden.

Di-Patschuli-chromsäureester kristallisiert orthorhombisch ( $a = 20,65$ ,  $b = 11,45$ ,  $c = 11,92$  Å, Raumgruppe  $P2_12_12_1$ ,  $Z = 4$ ). Es wurde die richtige Struktur für Patschulialkohol gefunden. Der Cr-O-C-winkel in der Estergruppierung beträgt ca.  $140^{\circ}$ . Diese Spreizung der Sauerstoffvalenz gab Anlass zur Vermutung, dass der Uebergangszustand bei der Oxydation von Alkoholen mit Chromsäure über eine lineare Anordnung Cr-O-C abläuft.