



Doctoral Thesis

Zur Konformation von Benzylidenanilinen Röntgenstrukturanalysen von Benzylidenanilin und von zwei Benzylidenanilin-Derivaten

Author(s):

Bürgi, Hans Beat

Publication Date:

1969

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000093487> →

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](#).

Diss. Nr. 4334

Zur Konformation von Benzylidenanilinen

Röntgenstrukturanalysen von Benzylidenanilin
und von zwei Benzylidenanilin-Derivaten

ABHANDLUNG

zur Erlangung
der Würde eines Doktors der technischen Wissenschaften
der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE
ZÜRICH

vorgelegt von

HANS-BEAT BÜRGI

dipl. Chem. ETH

geboren am 20. Januar 1942
von Olten (Kt. Solothurn)

Angenommen auf Antrag von
Prof. Dr. J. D. Dunitz, Referent
Prof. Dr. E. Heilbronner, Korreferent

Juris Druck + Verlag Zürich
1969

V. ZUSAMMENFASSUNG

Die Strukturen von Benzylidenanilin, p-Methylbenzyliden-p-nitroanilin und Benzyliden-p-carbonsäureanilin wurden mit Hilfe direkter Methoden gelöst und nach der Least Squares Methode verfeinert. Die Torsionswinkel um die C-N -Einfachbindung betragen 55° , 50° und 41° , die C-N -Einfachbindungs-längen 1.40 \AA , 1.46 \AA , und 1.43 \AA und die C=N -Doppelbindungs-längen 1.24 \AA , 1.27 \AA und 1.28 \AA . Es scheint, dass die Bindungs-längen sowohl von der Art des Substituenten als auch vom Torsionswinkel um die C-N -Einfachbindung abhängig sind. Die Winkel am Stickstoffzentrum betragen 120° , 121° und 116° und werden grösser mit wachsendem Torsionswinkel um die C-N -Einfachbindung.

"HUECKEL-molecular-orbitals"-Rechnungen bevorzugen die planare Konformation des Benzylidenanilins. Die beobachteten Konformationen, mit Torsionswinkeln von 40° bis 55° , scheinen die Folge eines Kompromisses zwischen maximaler π -Elektronenenergie und minimalen Wechselwirkungsenergien nicht gebundener Atome zu sein, der einem Minimum an Spannungsenergie entspricht.

Ausblick:

Die Untersuchung polymorpher Formen (p-Methylbenzyliden-p-nitroanilin), und anderer Derivate werden weitere Hinweise auf die Stabilität der hier beschriebenen Konformationen der Benzylidenaniline und auf die Deformierbarkeit der Winkel am Stickstoffzentrum geben können.

Eine Strukturanalyse des als planar angenommenen 2-Phenyl-3,3-dimethylindolenins würde erlauben den tatsächlichen Torsionswinkel um die C-N -Einfachbindung zu bestimmen.

Strukturanalysen von Nitro- und Carboxyderivaten dieser Verbindung würden ermöglichen, den Einfluss para-ständiger Substituenten im Anilinring auf die C-N-Bindungs-längen eindeutiger zu beschreiben.