

**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  $55^\circ$ ,  $50^\circ$  und  $41^\circ$ , die C-N -Einfachbindungs-längen  $1.40 \text{ \AA}$ ,  $1.46 \text{ \AA}$ , und  $1.43 \text{ \AA}$  und die C=N -Doppelbindungs-längen  $1.24 \text{ \AA}$ ,  $1.27 \text{ \AA}$  und  $1.28 \text{ \AA}$ . 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  $120^\circ$ ,  $121^\circ$  und  $116^\circ$  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  $40^\circ$  bis  $55^\circ$ , scheinen die Folge eines Kompromisses zwischen maximaler  $\pi$ -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.