ETH zürich

ETH Library

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

Doctoral Thesis

Author(s):
Dobler, Max

Publication date:
1963

Permanent link:
https://doi.org/https://doi.org/10.3929/ethz-a-000089170

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. 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 Å, c = 9.425 Å). 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 Å. 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 Å, Raumgruppe $P2_12_12_1$) ergab eine neue Strukturformel für den Patschulialkohol. Der Cr-O-C - Winkel beträgt etwa 135 - 145°. Die Cr-O - Bindungslängen von 1.74 Å deuten einen Doppelbindungscharakter an. Die erhaltenen Resultate würden mit einem linearen Uebergangszustand bei der Chromsäureoxydation im Einklang stehen.