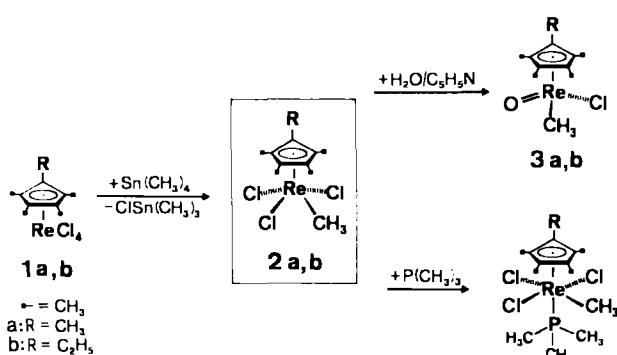


# Zur Bedeutung von Organozinn-Verbindungen in der Olefin-Metathese: Synthese, Struktur und Lewis-Acidität von $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{CH}_3\text{ReCl}_3]^{**}$

Von Wolfgang A. Herrmann\*, Josef K. Felixberger, Eberhardt Herdtweck, Adolf Schäfer und Jun Okuda  
Professor Heinz Harnisch zum 60. Geburtstag gewidmet

Tetraorganozinn-Verbindungen sind die wirkungsvollsten Cokatalysatoren bei der Olefin-Metathese. Nach Molybdän und Wolfram ist Rhenium das aktivste Katalysatormetall dieser Reaktion<sup>[1]</sup>. Ein lösliches, nicht näher charakterisiertes Reaktionsprodukt aus  $\text{ReCl}_5$  und  $\text{Sn}(n\text{-C}_4\text{H}_9)_4$  (Molverhältnis 2:3) war 1971 als erstes rheniumhaltiges System für die homogenkatalysierte Olefin-Metathese erkannt worden<sup>[2]</sup>. Das verwandte heterogene System  $\text{Re}_2\text{O}_7/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$  bewirkt sogar die Metathese funktionalisierter Olefine<sup>[3,4]</sup>. Zwar darf der eigentliche Metathese-Mechanismus<sup>[1]</sup> – zumindest bei den löslichen Systemen – als geklärt gelten (Olefin-Cycloaddition an Metallcarben-Spezies), doch gilt dies nicht für die Rolle der Tetraorganozinn-Verbindungen bei der Aktivierung der Katalysatoren (Alkylierung oder Reduktion?)<sup>[5]</sup>. Wir haben deshalb versucht, am Beispiel der gut zugänglichen, einfachen Organorhenium(v)-Komplexe **1a, b** die Elementarschritte der Einwirkung zinnhaltiger Cokatalysatoren auf höherwertige, lösliche Rheniumverbindungen aufzuklären und beschreiben hier Synthese, Charakterisierung und Reaktivität ungewöhnlicher Alkylrhenium(v)-Komplexe.



Schema 1.

Läßt man auf eine  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ -Lösung von **1a** bei Raumtemperatur 1.1 Äquivalente Tetramethylstannan einwirken, so erhält man nach Schema 1 in einer glatten Transmethylierung neben Trimethylzinnchlorid ( $^1\text{H-NMR}$ -Nachweis) den neuen Re<sup>v</sup>-Komplex **2a** als braune, etwas luft- und stark hydrolyseempfindliche Kristalle. Nach Elementaranalyse und FD-Massenspektrum hat diese in polaren organischen Solventien unzersetzt lösliche Substanz die Formel  $[(\text{C}_5\text{Me}_5)\text{CH}_3\text{ReCl}_3]$ . Das IR-Spektrum zeigt neben dem Bandenmuster für das  $(\text{C}_5\text{Me}_5)\text{Re}$ -Fragment charakteristische Banden für die  $\text{ReCl}$ - und  $\text{CH}_3\text{Re}$ -Gruppen<sup>[6]</sup>.

Der aus **1a** und  $\text{Sn}(\text{CD}_3)_4$  analog zugängliche Komplex  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{CD}_3\text{ReCl}_3]$  ( $[\text{CD}_3]\text{-2a}$ ; 99.5%-Markierung) erlaubt die Zuordnung aller CH- bzw. CD-Schwingungen<sup>[6]</sup>. Eine Einkristall-Röntgen-Strukturanalyse des besser kristallisierenden Derivats **2b** (Abb. 1) bestätigt trotz Fehlordnung eines Cl-Atoms mit der  $\text{CH}_3$ -Gruppe die erwartete Struktur eines Halbsandwich-Komplexes mit quadratisch-pyramidaler Koordination<sup>[7]</sup>; das analog synthetisierte Derivat  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4\text{Et})\text{CH}_3\text{ReBr}_3]$  hat im Kristall die gleiche Geometrie, zeigt aber keine Fehlordinngerscheinungen.

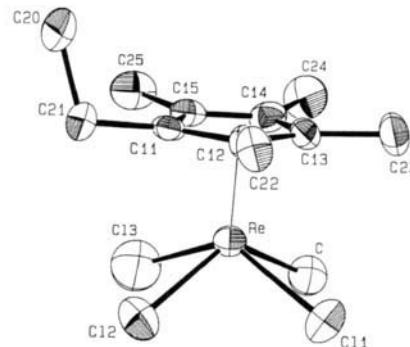


Abb. 1. Molekülstruktur von **2b** im Kristall. Der Komplex kristallisiert aus Dichlormethan/n-Pentan bei  $-30^\circ\text{C}$  orthorhombisch in der Raumgruppe  $\text{Pbca}$  (I.T. Nr. 61) [7]. Die Atome C13 und C sind fehlgeordnet (75:25). – Ausgewählte Abstände [pm] und Winkel [ $^\circ$ ]: Re-C11 235.4(1), Re-C12 236.6(1), Re-C13 233.0(2), Re-C 229.7(3); C11-Re-C12 80.8(1). – Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturuntersuchung können beim Fachinformationszentrum Energie, Physik, Mathematik GmbH, D-7514 Eggenstein-Leopoldshafen 2, unter Angabe der Hinterlegungsnummer CSD-52335, der Autoren und des Zeitschriftenzitats angefordert werden.

Anders als bei den oxidischen  $d^2\text{-Re}^v$ -Komplexen des Typs  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{ReOX}_2]$  (X = Alkyl, Halogen)<sup>[8]</sup> ist der aromatische  $\pi$ -Ligand bei **2b** praktisch symmetrisch an das Metall fixiert. Wie eine MO-Betrachtung für  $d^2$ -Komplexe  $[(\pi\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{ReX}_4]$  (X: anionischer Ligand) zeigt, können diese als Singulett oder als Triplet (Gleichgewicht) vorliegen<sup>[9]</sup>. Als Folge hiervon erfährt in den  $^1\text{H-NMR}$ -Spektren von **2a** die metallständige  $\text{CH}_3$ -Gruppe eine stark temperaturabhängige paramagnetische Verschiebung: Während sie bei  $+50^\circ\text{C}$  bei  $\delta = 36.5$  (!) in Resonanz tritt, verschiebt sich das Signal bei sinkender Temperatur zu höherem Feld und erscheint bei  $-50^\circ\text{C}$  bei  $\delta = 13.5$ .

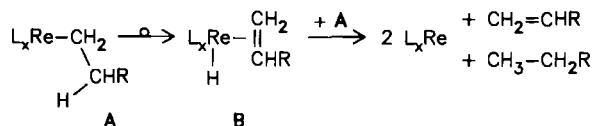
Wegen der starken Abflachung der  $\text{ReCl}_3\text{C}$ -Pyramide in **2** ( $\text{ReCl}_3\text{C}$ -Winkelsumme in **2b**  $325^\circ$ ; Abb. 1) sollten Komplexe vom Typ **2** die Anlagerung eines weiteren Liganden in *trans*-Stellung zum  $\pi$ -gebundenen Ringsystem zulassen, wenn die Rhenium(v)-Zentren als Lewis-Säuren wirken. Dies trifft zu (siehe Schema 1): So läßt sich z. B. **2a** mit Wasser in Gegenwart von zwei Äquivalenten Pyridin zum oxidischen Derivat **3a** (vier verschiedenenartige Liganden!) umsetzen<sup>[10]</sup>, und mit Trimethylphosphan entstehen die stabilen Addukte **4a, b**<sup>[11]</sup>, die in Analogie zum röntgenographisch charakterisierten Komplex  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{ReCl}_4(\text{PMMe}_3)]^{[12]}$  oktaedrische Struktur haben dürften.

Wirken höhere Alkylzinn-Verbindungen auf das Tetrachlorid **1a** unter sonst gleichen Bedingungen ein, so erhält man im Falle von  $\text{Sn}(\text{C}_2\text{H}_5)_4$  und  $\text{Sn}(n\text{-C}_4\text{H}_9)_4$  neben den entsprechenden Trialkylzinnchloriden einheitlich einen Rhenium(IV)-Komplex, welcher die nach Schema 1 sinngemäß zu erwartende Ethyl- bzw. *n*-Butylgruppe *nicht* enthält. Vielmehr hat das in  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  lösliche Produkt die Formel **5a**<sup>[13]</sup>; seine zweikernige Konstitution folgt aus dem Diamagnetismus, der eine direkte Metall-Metall-Wechsel-

[\*] Prof. Dr. W. A. Herrmann, J. K. Felixberger, Dr. E. Herdtweck, Dr. A. Schäfer, Dr. J. Okuda  
Anorganisch-chemisches Institut der Technischen Universität München Lichtenbergstraße 4, D-8046 Garching

[\*\*] Mehrfachbindungen zwischen Hauptgruppenelementen und Übergangsmetallen, 42. Mitteilung. Diese Arbeit wurde von der Hoechst AG sowie dem Bundesministerium für Forschung und Technologie gefördert. – 41. Mitteilung: W. A. Herrmann, K. Jung, A. Schäfer, H.-J. Kneuper, *Angew. Chem.* 99 (1987) 464; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 26 (1987) Nr. 5.

wirkung voraussetzt, sowie aus der Folgereaktion mit Trimethylphosphan unter Bildung des paramagnetischen  $\text{Re}^{IV}$ -Komplexes **6a**<sup>[14]</sup>. Berücksichtigt man die gaschromatographisch nachgewiesene Freisetzung von Ethylen/Ethan bzw. 1-Buten/*n*-Butan, so ist die unter Reduktion ( $\text{Re}^V \rightarrow \text{Re}^{IV}$ ) verlaufende Bildung von **5a** mit einer  $\beta$ -Hydrid-Verschiebung und deren Konsequenzen erklärbar (Schema 2): Die Alkyl-Zwischenstufe **A** lagert sich zum Hydrido(olefin)-Isomer **B** um, das dann unter Olefin-Abspaltung und intermolekularer Alkan-Bildung reduktiv zerfällt; elementarer Wasserstoff tritt bei der Bildung von **5a** nicht auf. Damit ist gezeigt, daß Alkylzinn-Verbindungen höherwertige Metallhalogenid-Systeme zwar zunächst redoxneutral alkylieren, danach aber auch zur Reduktion der Übergangsmetalle führen können, wenn die Metalle sterisch und elektronisch (Lewis-Säuren) Alkyl-Umlagerungsprozesse wie die  $\beta$ -Hydrid-Verschiebung zulassen<sup>[15]</sup>.



Schema 2.

### Arbeitsvorschriften

**2a:** Eine Suspension von 463 mg (1.00 mmol) **1** in 20 mL  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  wird bei Raumtemperatur mit 0.15 mL (1.08 mmol)  $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$  versetzt und 2 h gerüttelt ( $\text{N}_2$ -Atmosphäre). Die violette Suspension wandelt sich in eine rotbraune Lösung um. Nach Abziehen des Lösungsmittels wird das Rohprodukt dreimal mit je 10 mL *n*-Pentan gewaschen und schließlich bei  $-30^\circ\text{C}$  aus  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ /*n*-Pentan umkristallisiert. Ausbeute 375 mg (85%) rotbraune, analysenreine Kristalle; kein  $\text{Fp}$  bis  $250^\circ\text{C}$ . - **2b** wird entsprechend dargestellt; braunrote Kristalle;  $\text{Fp} = 135^\circ\text{C}$  (Zers.).

**3a:** Eine Suspension von 160 mg (0.36 mmol) **2a** in 10 mL Toluol wird bei  $25^\circ\text{C}$  mit einer Lösung von 6.5  $\mu\text{L}$  (0.36 mmol)  $\text{H}_2\text{O}$  und 58  $\mu\text{L}$  Pyridin (0.72 mmol) in 1 mL Tetrahydrofuran (THF) versetzt. Nach 2 h Rühren unter  $\text{N}_2$  wird die braune Reaktionslösung vom ausgefallenen Pyridiniumhydrochlorid abfiltriert und eingeeignet. Nach Überschichten mit *n*-Pentan fallen bei  $-30^\circ\text{C}$  84 mg (60%) schwarze Kristalle aus;  $\text{Fp} = 174^\circ\text{C}$ .

Eingegangen am 23. Dezember 1986 [Z 2029]

[1] Zusammenfassungen: R. H. Grubbs, *Prog. Inorg. Chem.* 24 (1978) 1; T. J. Katz, *Adv. Organomet. Chem.* 16 (1977) 283.

[2] J. A. Moulijn, C. Boelhouwer, *Chem. Commun.* 1971, 1170.

[3] E. Verkijnen, F. Kapsteijn, J. C. Mol, C. Boelhouwer, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1977, 198; J. C. Mol, E. F. G. Woerlee, *ibid.* 1979, 330.

[4] J. C. Mol, *J. Mol. Catal.* 15 (1982) 35.

[5] E. L. Muetterties, *Inorg. Chem.* 14 (1975) 951.

[6] **2a:** IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ; \*: Bänder für  $\text{CD}_3$ -Derivat): 1198 m ( $\delta\text{ReCH}_3$ ), 745 m ( $\gamma\text{ReCH}_3$ ); 3000 w- $\text{m}^{-1}$ \*2256, 2958 w- $\text{m}^{-1}$ \*2203, 2912 w- $\text{m}^{-1}$ \*2098 ( $\nu\text{CH}$ ); 1482 s ( $\delta\text{CH}$ ); 1378 vs, 1018 s ( $\nu\text{CC}$ ); 330 vs ( $\nu\text{ReCl}$ ). FD-MS ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ;  $^{187}\text{Re}/^{35}\text{Cl}$ ):  $m/z$  442 ( $M^+$ , 100%; korrektes Isotopenmuster).  $^1\text{H-NMR}$  (270 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $20^\circ\text{C}$ ):  $\delta(\text{ReCH}_3) = 27.98$  (s, 3 H),  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 2.41$  (s, 15 H); chemische Verschiebung der rhenumständigen  $\text{CH}_3$ -Gruppe stark temperaturabhängig (vgl. Text).  $^{13}\text{C}[^1\text{H}]\text{-NMR}$  (67.8 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ,  $20^\circ\text{C}$ ):  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 143.8$ ,  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 16.0$ ,  $\delta(\text{ReCH}_3)$  nicht zuzuordnen. Korrekte C,H,Cl-Analysenwerte.

[7] Rotbraune Oktaeder; Raumgruppe  $Pbca$ ;  $a = 1247.0(3)$ ,  $b = 836.6(1)$ ,  $c = 2854.0(8)$  pm,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ;  $V = 2977 \cdot 10^6$  pm $^3$ ,  $Z = 8$ ;  $M = 456.9$ ;  $T = 25^\circ\text{C}$ ;  $\rho_{\text{rel.}} = 2.038$  g  $\text{cm}^{-3}$ ;  $F_{000} = 1744$ ; CAD4 (Enraf-Nonius), Graphit-Monochromator,  $\lambda = 0.7107$  Å ( $\text{MoK}_\alpha$ ), Meßbereich:  $1^\circ \leq \theta \leq 25^\circ$ ,  $t(\text{max}) = 60$  s,  $h(0/14)$ ,  $k(0/9)$ ,  $l(-33/33)$ ; 5844 gemessene Reflexe, davon 728 ausgelöscht, 2591 unabhängige Reflexe, 1816 unabhängige Reflexe mit  $I > 3.0\sigma(I)$  zur Verfeinerung benutzt; Strukturlösung nach Patterson-Methode; alle Nichtwasserstoffatome anisotrop verfeinert, H-Atome auf ideale Positionen berechnet und in die Strukturfaktorenberechnung einbezogen; empirische Absorptionskorrektur,  $\mu = 87.93$   $\text{cm}^{-1}$ ;  $R = \Sigma(|F_0| - |F_c|)/\Sigma|F_0| = 0.029$ ;  $R_w = [\Sigma w(|F_0| - |F_c|)^2/\Sigma w F_0^2]^{1/2}$

$= 0.028$ ;  $\text{GOF} = [\Sigma w(|F_0| - |F_c|)^2/(NO - NV)]^{1/2} = 3.316$  ( $w = 1/\sigma^2(F_0)$ );  $\Delta e_0/\text{Å}^3 = 1.32$ .

[8] W. A. Herrmann, E. Herdtweck, M. Flöel, J. Kulpe, U. Küsthhardt, J. Okuda, *Polyhedron*, im Druck.

[9] P. Kubáček, R. Hoffmann, Z. Havlas, *Organometallics* 1 (1982) 180.

[10] **3a:** IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ): 1203 m ( $\delta\text{ReCH}_3$ ), 2978 m, 2955 m, 2915 m, 2893 m ( $\nu\text{CH}$ ); 1460 m (sh) ( $\delta\text{C}_5\text{Me}_5$ ); 1389 m, 1378 s, 1040 s (sh) ( $\nu\text{CC}$ ); 963 vs, 951 vs ( $\nu\text{ReO}$ ); 365 w, 343 s ( $\nu\text{ReCl}$ ).  $^1\text{H-NMR}$  (400 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ ,  $30^\circ\text{C}$ ):  $\delta(\text{ReCH}_3) = 2.75$  (s, 3 H),  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 1.54$  (s, 15 H).  $^{13}\text{C}[^1\text{H}]\text{-NMR}$  (100.4 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ ,  $30^\circ\text{C}$ ):  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 103.65$ ,  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 10.79$ ,  $\delta(\text{ReCH}_3) = -11.04$ . EI-MS (70 eV;  $^{187}\text{Re}/^{35}\text{Cl}$ ):  $m/z$  388 ( $M^+$ , 50%), 373 ( $[M - \text{CH}_3]^+$ , 100%), 337 ( $[M - \text{CH}_3 - \text{HCl}]^+$ , 90%). Korrekte C,H,Cl-Analysenwerte.

[11] **4a:** Dunkelbraune Kristalle,  $\text{Fp} = 138^\circ\text{C}$  (Zers.). IR (KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ): 3000 m, 2980 m, 2915 s ( $\nu\text{CH}$ ); 1490 m, 1455 m, 1420 m ( $\delta\text{CH}$ ); 1372 s, 1022 m ( $\nu\text{CC}$ ); 1288 s, 970 vs (sh) ( $\nu\text{PMe}_3$ ); 305 m (sh) ( $\nu\text{ReCl}$ ); 1005 m, 870 w, 730 m, 680 m, 370 w (ohne Zuordnung).  $^1\text{H-NMR}$  (270 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ ,  $20^\circ\text{C}$ ):  $\delta(\text{PCH}_3) = 1.562$  (d, 9 H);  $^2\text{J}(\text{H},\text{P}) = 11.7$  Hz;  $\delta(\text{ReCH}_3) = 1.536$  (d, 3 H);  $^3\text{J}(\text{H},\text{P}) = 14.7$  Hz;  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 1.491$  (s, 15 H).  $^{31}\text{P}[^1\text{H}]\text{-NMR}$  (36.43 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ ,  $20^\circ\text{C}$ ; ext.  $\text{H}_3\text{PO}_4$ ):  $\delta = 6.70$  (s).  $^{13}\text{C}[^1\text{H}]\text{-NMR}$  (67.8 MHz,  $\text{C}_6\text{D}_6$ ,  $30^\circ\text{C}$ ):  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 108.03$ ,  $\delta(\text{ReCH}_3) = 15.37$ ,  $\delta(\text{P}(\text{CH}_3)_3) = 15.12$  (d;  $^1\text{J}(\text{P},\text{C}) = 39.9$  Hz),  $\delta(\text{C}_5\text{Me}_5) = 10.63$ . - EI-MS (70 eV;  $^{187}\text{Re}/^{35}\text{Cl}$ ):  $m/z$  517 ( $M^+ - \text{H}$ ; isotopenkorrekt). Korrekte C,H,Cl,P-Analysenwerte.

[12] W. A. Herrmann, E. Voss, U. Küsthhardt, E. Herdtweck, *J. Organomet. Chem.* 294 (1985) C37.

[13] **5a:** Dunkelbraune Kristalle; kein Schmelzpunkt bis  $250^\circ\text{C}$ . IR (Auszug; KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ): 335 vs/305 s ( $\nu\text{ReCl}$ ); 1485 s/1450 s ( $\delta\text{CH}$ ); 1375 vs/1025 vs (sh) ( $\nu\text{CC}$ ); 1078 m.  $^1\text{H-NMR}$  (270 MHz,  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ ,  $-50^\circ\text{C}$ ):  $\delta(\text{CH}_3) = 1.85$  (s). EI-MS (70 eV,  $^{187}\text{Re}/^{35}\text{Cl}$ ):  $m/z$  427 ( $[\text{C}_5\text{Me}_5\text{ReCl}_3]^+$ , 30%), 392 ( $[\text{C}_5\text{Me}_5\text{ReCl}_2]^+$ , 5%), 355 ( $[\text{C}_5\text{Me}_5\text{ReCl}_3 - 2\text{HCl}]^+$ , 100%), 36 ( $[\text{HCl}]^+$ , 38%). Korrekte C,H,Cl-Analysenwerte. - Die Formel **5a** folgt ferner aus der Reduzierbarkeit dieser Substanz zum strukturell gesicherten  $\text{Re}^{III}$ -Komplex  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Re}(\mu\text{-Cl})\text{Cl}]_2$ ; W. A. Herrmann, R. A. Fischer, E. Herdtweck, unveröffentlicht.

[14] **6a:** Braune Kristalle,  $\text{Fp} = 163^\circ\text{C}$  (Zers.). IR (Auszug, KBr,  $\text{cm}^{-1}$ ): 275 s, 305 s, 320 vs ( $\nu\text{ReCl}$ ); 950 vs, 965 vs, 1282 s, 1290 s, 1310 m ( $\nu\text{PMe}_3$ ). EI-MS (70 eV,  $^{187}\text{Re}/^{35}\text{Cl}$ ):  $m/z$  503 (Molekülion, 5%), 468 ( $[M^+ - \text{Cl}]$ , 30%), 433 ( $[M^+ - 2\text{Cl}]$ , 15%), 356 ( $[\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{ReCl}]^+$ , 100%). Korrekte C,H,Cl,P-Analysenwerte.

[15] Anmerkung bei der Korrektur (2. April 1987): Bemerkenswert ist das Ausbleiben einer Mehrfachalkylierung von **1a,b** selbst bei Anwendung von  $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ , in großem Überschuss; der Komplex  $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)\text{Re}(\text{CH}_3)]_2$  ist allerdings durch eine Grignard-Reaktion zugänglich: M. Flöel, E. Herdtweck, W. Wagner, J. Kulpe, P. Härtler, W. A. Herrmann, *Angew. Chem.*, im Druck.

### Stereoelektronische Effekte und chirale Erkennung: Ein natürliches Verwandtschaftssystem chiraler Verbindungen basierend auf Selektivitäten bei der Acetalbildung

Von Christian R. Noe\*, Max Knollmüller, Georg Göstl,  
Berndt Oberhauser und Horst Völlenkle

Stereoelektronische Effekte vom Typ des anomeren Effekts wurden seit dessen Formulierung durch R. U. Lemieux et al.<sup>[1]</sup> ausführlich untersucht, und ihre grundlegende Bedeutung für die Kohlenhydratchemie ist unbestritten<sup>[2]</sup>. Bei unseren Arbeiten mit terpenoiden Kohlenhydrat-Modellen vom Typ **1** haben wir uns vor allem mit dem Phänomen der Enantiomer-Selektivität<sup>[3,4]</sup> befaßt und unter anderem eine Regel entwickelt, die – basierend auf dieser Selektivität – eine einfache Bestimmung der absoluten Konfiguration über charakteristische Signallagen in den Kernresonanzspektren ermöglicht. Die Regel wurde vor allem für sekundäre Alkohole vom Typ **2** (Schema 1)

[\*] Univ.-Doz. Dr. C. R. Noe, Prof. Dr. M. Knollmüller, Dipl.-Ing. G. Göstl, Dr. B. Oberhauser  
Institut für Organische Chemie der Technischen Universität  
Getreidemarkt 9, A-1060 Wien (Österreich)  
Univ.-Doz. Dr. H. Völlenkle  
Institut für Kristallographie und Mineralogie  
der Technischen Universität  
Getreidemarkt 9, A-1060 Wien (Österreich)