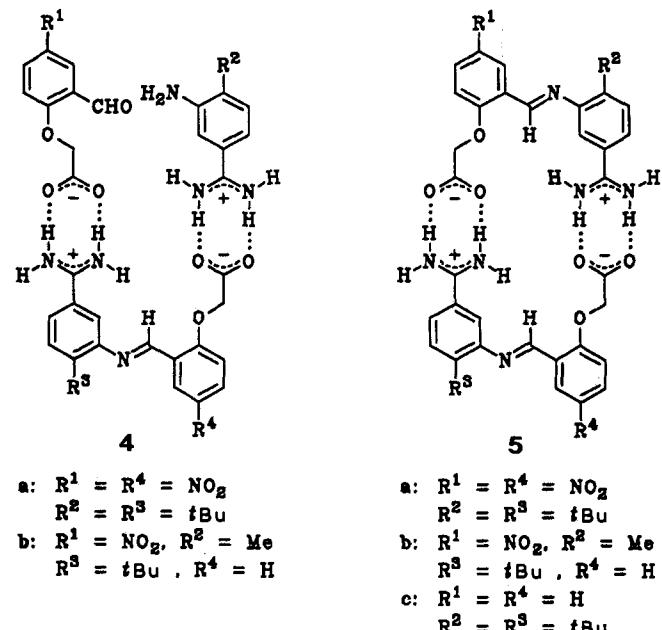
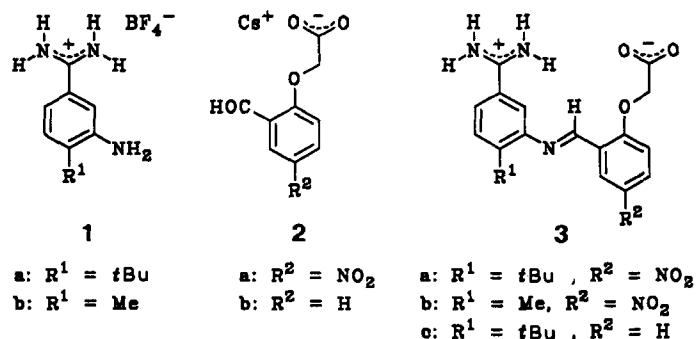


- [10] ^{13}C -NMR (62.89 MHz, Pentan, 195 K [265 K], TMS): $\delta = 43.58$ ($\text{N}(3)\text{Me}_2$, A oder B), 43.80 ($\text{N}(3)\text{Me}_2$, B oder A), 48.73 ($\text{N}(3)\text{Me}_2$, B), 49.57 ($\text{N}(3)\text{Me}_2$, A) [45.96], 44.79 ($\text{N}(1)\text{Me}$, A), 45.42 ($\text{N}(1)\text{Me}$, B) [45.10], 52.48 ($\text{N}(2)\text{Me}$, B), 54.41 ($\text{N}(2)\text{Me}$, A) [53.18], 51.34 (NCH_2 , B), 52.26 (NCH_2 , A), 56.32 (NCH_2 , B), 56.60 (NCH_2 , A), 57.62 (NCH_2 , A + B), 61.36 (NCH_2 , B) 63.24 (NCH_2 , A) [52.78, 56.83, 57.88, 62.18]; (100.61 MHz, 225 K) $\delta = 51.0$ (zwischen 225 und 235 K auch im 62.89 MHz-Spektrum erkennbar) + 52.9 (CH_2Li , $^1J(^{13}\text{C}, ^6\text{Li}) = 13.9$ Hz) [51.74].
- [11] ^1H -NMR (250 MHz, $[\text{D}_{12}]\text{Pentan}$, 195 K [300 K], TMS): $\delta = 2.40 + 2.10$ [2.28] (s + s, ca. 3 H + ca. 3 H; $\text{N}(3)\text{Me}_2$, A + B), 2.33 (s, ca. 1.5 H; $\text{N}(2)\text{Me}$, A), 2.35 (s, ca. 1.5 H; $\text{N}(2)\text{Me}$, B) [2.37], 2.31 [2.35] (s, 3 H; $\text{N}(1)\text{Me}$, A + B), ca. 2 (überlappende Signale; NCH_2), 1.63 + 1.19 (d + d, $^2J(\text{H}, \text{H}) = 10.4$ Hz, 1 H; CH_2Li , B + A, Koaleszenz bei ca. 258 K), 0.67 + 0.30 (d + d, $^2J(\text{H}, \text{H}) = 10.4$ Hz, 1 H; CH_2Li , A + B, Koaleszenz bei ca. 258 K) [1.03].
- [12] Zur Korrektur bekannter Unzulänglichkeiten der MNDO-Methode (Überbewertung von C-Li-Bindungsstärke und nichtbindender Wechselwirkungen) addierte man 60 kJ mol^{-1} zur berechneten Energie von $(\text{I})_2$ [13] und 21 kJ mol^{-1} zu allen berechneten Aktivierungsenergien (N. J. R. van Eikema Hommes, P. von Ragué Schleyer, unveröffentlicht).
- [13] E. Kaufmann, K. Raghavachari, A. E. Reed, P. von Ragué Schleyer, *Organometallics* **1988**, 7, 1597–1607.
- [14] Methode: H. Shanan-Atidi, K. H. Bar-Eli, *J. Phys. Chem.* **1970**, 74, 961–963. Obwohl auch alle anderen bei tiefer Temperatur erkennbaren A/B-Signalpaare bei Temperaturerhöhung koaleszieren, beschränkte teilweise Überlappung mit anderen temperaturabhängigen Signalen die genaue Bestimmung von Koaleszenztemperaturen auf die erwähnten vier Fälle. Die sich aus den geschätzten Koaleszenztemperaturen [241 K (100.61 MHz) und 255 K (62.89 MHz)] der $\text{N}(1)^{13}\text{CH}_3$ - und $\text{N}(2)^{13}\text{CH}_3$ -A/B-Signalpaare ergebenden Geschwindigkeitskonstanten entsprechen denen des A/B-Austauschs, wie sie aus den Aktivierungsparametern für die jeweilige Temperatur berechnet werden. Die Linienbreite der ^{13}C -Signalpaare $[\text{N}(3)\text{Me}]_A + [\text{N}(3)\text{Me}]_B$ und $[\text{N}(3)\text{Me}]_A + [\text{N}(3)\text{Me}]_B$ ist beträchtlich größer als die der übrigen Signale, und Koaleszenz erfolgte zwischen den Meßtemperaturen 215 und 225 K (62.89 MHz) ohne vorangehenden Verlust der Identität der A- und B-Komponente im (besser aufgelösten) Tiefeldpaar. Dies deutet auf die Sequenz: Li-N(3)-Dekoordination, Inversion von N(3), Li-N(3)-Rekoordination, die zu schnellem Me/Me'-Austausch führt, während A/B-Austausch auf der ^{13}C -NMR-Zeitskala noch langsam ist.
- [15] $\Delta\nu_{1/2}$ ca. 70 Hz. Das Tiefeldsignal war durch Signale der Restprotonen des Lösungsmittels, $[\text{D}_{12}]\text{Pentan}$, verdeckt.
- [16] $\Delta G^* = 19.13 T_c \{9.97 + \log(T_c \Delta v^{-1})\}$, Δv ca. 230 Hz.
- [17] ΔG^* (281 K) für die Stereomerisation von C^- in aggregierten Alkyllithiumverbindungen liegt bei 60 kJ mol^{-1} [8]. Berechnungen an Methylolithium haben ergeben, daß die Inversionsbarriere von C^- im Monomer ca. 55 kJ mol^{-1} höher ist als in den Aggregaten [13]. Auf dieser Basis würde man für die Inversion von C^- in **1a, b** Werte von ΔG^* (275 K) um 110 kJ mol^{-1} erwarten.
- [18] G. Fraenkel, W. E. Beckenbaugh, P. P. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* **1976**, 98, 6878–6885.
- [19] B. O. T. Kammermeier, G. W. Klumpp, K. Kolthof, M. Vos, *Tetrahedron Letters* **1991**, 32, 3111–3114.

zieller, zur Evolution befähigter Systeme^[3] einfließen könnten. Wie wir 1986 erstmals gezeigt haben, ist das einfachste Modell einer Selbstreplikation die autokatalytische Synthese eines selbstkomplementären Templatmoleküls^[4]. Bisherige Ansätze, mit denen dieses Prinzip verwirklicht werden konnte, gehen von selbstkomplementären Oligodesoxynucleotiden^[4], Oligonucleotidanalogen^[5–7] oder Hybridekülen mit einem Nucleotidteil^[8] aus^[9]. In all diesen Systemen verläuft die autokatalytische Synthese nach einem Geschwindigkeitsgesetz, in das die Matrizenkonzentration mit der Quadratwurzel eingeht^[1a–c, 4–7], womit im Idealfall ein parabolisches Wachstum der Autokatalysatorkonzentration beobachtet werden kann^[1a–c, 6].

Wir haben nach Wegen gesucht, die Selbstreplikation mit möglichst einfachen organischen Bausteinen zu realisieren und zwar unter Verzicht auf Nucleobasen als Erkennungsprinzip. Unser Konzept sieht die Verwendung einer Amidinium-Carboxylat-Salzbrücke^[10] als Substitut der Basenpaarung vor. Durch eine ^1H -NMR-spektrometrische Titration von Benzamidiniumtetrafluoroborat mit Caesiumacetat in $[\text{D}_6]\text{DMSO}$ ließ sich zunächst zeigen, daß Amidinium-Carboxylat-Salzbrücken im gewählten Lösungsmittel ausreichend stabil sind ($K = 350 \pm 50 \text{ M}^{-1}$ bei $T = 35^\circ\text{C}$). Die Kondensation von 3-Aminobenzamidinen **1** mit 2-Formylphenoxyessigsäuren **2** liefert Anile des Typs **3**^[11], die nach Ergebnissen von Kraftfeldrechnungen (MMX) in Konformationen mit nahezu paralleler Anordnung der Erkennungsgruppen vorliegen können. Diese Moleküle sollten eine autokatalytische Wirkung entfalten, da sie mit den Bausteinen **1** und **2** ternäre Komplexe **4** bilden sollten, in denen die Anilinsynthese durch Präorganisation erleichtert wird.



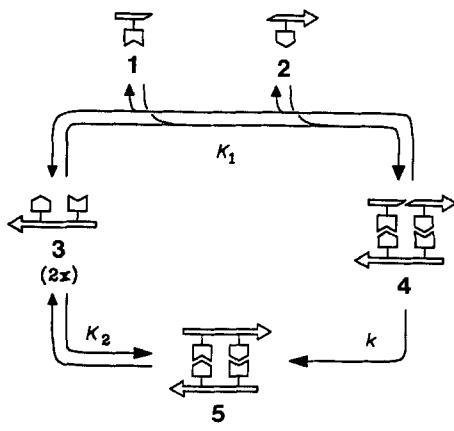
Selbstreplikation bei der Kondensation von 3-Aminobenzamidinen mit 2-Formylphenoxyessigsäuren**

Von Andreas Terfort und Günter von Kiedrowski*

Die Konstruktion künstlicher selbstreplizierender Systeme^[1] ist eine reizvolle und zugleich herausfordernde Aufgabe der bioorganischen und supramolekularen Chemie^[2]. Das Ziel ist, die strukturellen, funktionellen und dynamischen Prinzipien herauszuarbeiten, die bei der Entstehung der frühesten Lebensformen auf unserer Erde eine Rolle gespielt haben^[1] und die in Zukunft in die Entwicklung artifi-

[*] Dr. G. von Kiedrowski, Dipl.-Chem. A. Terfort
Institut für Organische Chemie der Universität
Tammannstraße 2, W-3400 Göttingen

[**] Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie gefördert. Wir danken Herrn Machinek für wertvolle Ratschläge und Unterstützung bei den ^1H -NMR-Messungen.



Tatsächlich lässt sich bei der ^1H -NMR-spektroskopischen kinetischen Verfolgung der Synthese von **3a** aus **1a** und **2a** ein autokatalytischer Reaktionskanal beobachten: **3a** wird umso rascher gebildet, je größer dessen Anfangskonzentration in den Reaktionsmischungen ist^[12]. Die Kurvenverläufe können dabei in guter Näherung mit einem Quadratwurzelmodell beschrieben werden^[13, 14]. Die Synthese von **3a** verläuft im autokatalytischen Reaktionskanal unter den Reaktionsbedingungen ($[\text{D}_6]\text{DMSO}, T = 50^\circ\text{C}$) etwa um den Faktor $\varepsilon = 16.4 \pm 4.4 \text{ M}^{-1/2}$ schneller als im nichtautokatalytischen Kanal; sie ist in bezug auf die autokatalytische Effizienz $\varepsilon^{[15]}$ mit unserem 1986 beschriebenen System ($\varepsilon = 24 \text{ M}^{-1/2}$) sowie mit dem Rebekschen System ($\varepsilon = 22 \text{ M}^{-1/2}$)^[6] vergleichbar. Ein unerwartetes Ergebnis liefert indessen die Reaktion von **1b** mit **2a** in Gegenwart des zu **3b** strukturell vergleichbaren Anils **3c**. Die Bildung von **3b** wurde in $[\text{D}_6]\text{DMSO}$ bei $T = 27^\circ\text{C}$ ^1H -NMR-spektroskopisch bis zu einem Umsatz von 25% verfolgt. In Gegenwart des Anils **3c** wird die Synthese von **3b** etwa um den Faktor 370 M^{-1} beschleunigt. Wie aus Abbildung 1 hervorgeht, korrespondieren die erzielten Geschwindigkeitszuwächse ungefähr mit den vorgelegten Anilkonzentrationen. Dieser Be-

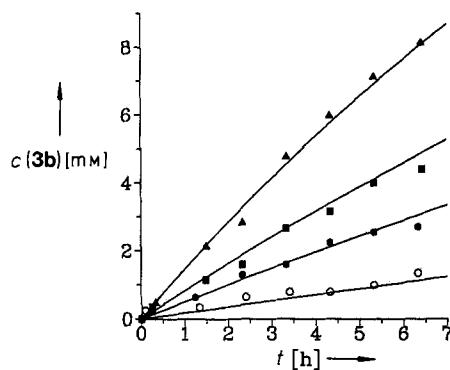


Abb. 1. Synthese des Anils **3b** in Gegenwart von 0, 10, 20, 40 (von unten nach oben) Molprozent der Matrize **3c**. Reaktionsbedingungen: 50 mM **1b**, 50 mM **2a**, $T = 27^\circ\text{C}$. Lösungsmittel: $[\text{D}_6]\text{DMSO}$. Meßfrequenz: 80 MHz. Die Kurvenscharen wurde mit SimFit [13] auf der Grundlage des folgenden Reaktionsmodells berechnet: 1) **1b** + **2a** \rightleftharpoons **3b** + H_2O . 2) **1b** + **2a** + **3c** \rightarrow **3b** + **3c** + H_2O . Ergebnisse: $k_1 = (1.99 \pm 0.15) \times 10^{-5} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$, k_{-1} (nicht exakt bestimmbar) $= (0.1 \pm 7.3) \times 10^{-5} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$, $k_2 = (7.31 \pm 0.26) \times 10^{-3} \text{ M}^{-2}\text{s}^{-1}$.

fund ist bemerkenswert, da die Katalyse durch die strukturell ähnliche selbstkomplementäre Matrize **3c** erstmals nicht mehr einem Quadratwurzelgesetz gehorcht, sondern einer Gesetzmäßigkeit erster Ordnung. Ein Geschwindigkeitsgesetz erster Ordnung bezüglich der Katalysatorkonzentration wird erwartet, wenn der aus **1b**, **2a** und **3c** gebildete ternäre

Komplex **4b** höher als der Katalysatorduplex **5c** populiert ist^[16]. In diesem Fall sollten die Salzbrücken im ternären Komplex eine größere Bindungsstärke als im Katalysatorduplex aufweisen. An experimentellen Belegen zu dieser Hypothese wird gegenwärtig gearbeitet.

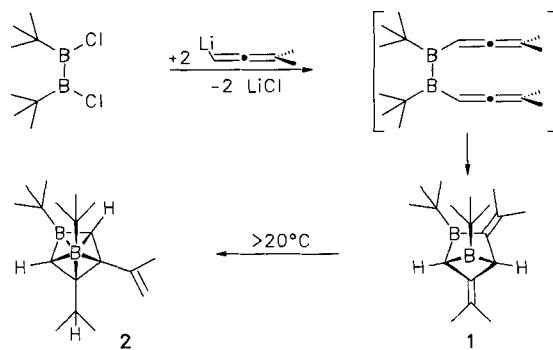
Die gefundene Katalyse erster Ordnung bei einem selbstkomplementären Templatmolekül deutet darauf hin, daß mit geeigneten Modellsystemen auch eine Selbstreplikation unter exponentieller Autokatalyse möglich ist. Das Rezept könnte darin bestehen, nach Verknüpfungsreaktionen zu suchen, die eine Modulation der molekularen Erkennung bewirken. Durch die Verknüpfung muß ein Templatmolekül entstehen, das im Vergleich zu den Edukten weniger stabile Salzbrücken bildet. In gegenwärtigen Untersuchungen wird versucht, die Modulation der molekularen Erkennung mit der Erzeugung chiraler Matrizenmoleküle im Sinne einer asymmetrischen Autokatalyse zu verbinden.

Eingegangen am 18. Oktober 1991 [Z 4976]

- [1] Übersichten: a) G. von Kiedrowski in *40 Jahre Fonds der Chemischen Industrie* (Hrsg.: Verband der Chemischen Industrie), VCI-Selbstverlag, Frankfurt, 1990; b) G. von Kiedrowski, *Origins Life*, im Druck; c) L. E. Orgel, *Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol.* **1987**, 7, 9–16; d) G. F. Joyce, *ibid.* **1987**, 7, 41–51.
- [2] a) G. M. Whitesides, *Angew. Chem.* **1990**, *102*, 1247–1257; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1990**, *29*, 1209–1218; b) J. S. Lindsey, *New J. Chem.* **1991**, *15*, 153–180.
- [3] Vgl. dazu die Aufsätze in *Artificial Life. The Proceedings of an Interdisciplinary Workshop on the Synthesis and Simulation of Living Systems Held September, 1987 in Los Alamos, New Mexico* (Hrsg.: C. G. Langton), Addison-Wesley, Redwood City, USA, 1989.
- [4] G. von Kiedrowski, *Angew. Chem.* **1986**, *98*, 932–934; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1986**, *25*, 932–935.
- [5] G. von Kiedrowski, B. Wlotzka, J. Helbing, *Angew. Chem.* **1989**, *101*, 1259–1261; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1989**, *28*, 1235–1237.
- [6] G. von Kiedrowski, B. Wlotzka, J. Helbing, M. Maitzen, S. Jordan, *Angew. Chem.* **1991**, *103*, 456–459, 1066; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1991**, *30*, 423–426, 892.
- [7] W. S. Zielinski, L. E. Orgel, *Nature* **1987**, *327*, 346–347.
- [8] T. Tjivikua, P. Ballester, J. Rebek, Jr., *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, *112*, 1249–1250; T. S. Nowick, Q. Feng, T. Tjivikua, P. Ballester, J. Rebek, Jr., *ibid.* **1991**, *113*, 8831–8839.
- [9] Auch templatfreie Ansätze sind als Modelle für selbstreplizierende Systeme beschrieben: P. A. Bachmann, P. Walde, P. L. Luisi, J. Lang, *J. Am. Chem. Soc.* **1990**, *112*, 8200–8201; vgl. auch M. Zeleny, G. J. Klir, K. D. Hufford in [3], S. 125–139.
- [10] Andere supramolekulare Nutzanwendungen von Salzbrücken unter Beteiligung von Guanidinium- und Amidiniumsalzen siehe a) G. Müller, J. Riede, F. P. Schmidtchen, *Angew. Chem.* **1988**, *100*, 1574–1577; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1988**, *27*, 1516–1518; b) A. Echaverren, A. Galan, J.-M. Lehn, J. de Mendoza, *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, *111*, 4994–4995; c) M. Göbel, D. Reckenbeil in *Chemodenzentestagung 1991* (Hrsg.: D. Döpp), Universitäts-Selbstverlag, Duisburg, 1991.
- [11] Die Bausteine I wurden mit Alkygruppen substituiert, um die Löslichkeit der korrespondierenden Anile zu erhöhen. 2-Formylphenoxyssäuren **2** wurden anstelle der korrespondierenden 2-Formylbenzoësäuren verwendet, da bei letzteren ein intramolekularer Angriff der Carboxygruppe auf die Anilbindung (Ringschluß) unvermeidbar war.
- [12] Die Edukte **1a** und **2a** (je 50 mM in $[\text{D}_6]\text{DMSO}$) wurden in Gegenwart von 0, 11, 26 und 37 Molprozent **3c** in abgeschmolzenen NMR-Röhrchen umgesetzt. Die Bildung der Phenoxyssäure **3a** ließ sich bei 500-MHz-Meßfrequenz an folgenden Signalen verfolgen: $\delta = 1.32/1.42 (\text{tBu } \mathbf{1a}/\mathbf{3a})$, $7.22/7.56 (3'\text{-H } \mathbf{1a}/\mathbf{3a})$, $10.39/8.86 (\text{CH}=\text{O}/\text{CH}=\text{N})$. Der Gesamtprozeß ist reversibel; bei $T = 50^\circ\text{C}$ wurde die Gleichgewichtskonstante zu $K = 5.73 \pm 1$ bestimmt. Die Konzentration des Primäradduktes liegt unterhalb der NMR-spektroskopischen Erfassungsgrenze.
- [13] Zur Auswertung der Integralverläufe mit dem SimFit-Programm [13] wurde das folgende auf einem Quadratwurzelgesetz basierende Reaktionsmodell verwendet: 1) **1a** + **2a** \rightleftharpoons **3a** + H_2O . 2) **1a** + **2a** + 0.5 **3a** \rightarrow 1.5 **3a** + H_2O . Die mit SimFit bestimmten apparenten Geschwindigkeitskonstanten betragen ($T = 50^\circ\text{C}$): $k_1 = (1.50 \pm 0.24) \times 10^{-4} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$, $k_{-1} = k_1/5.73 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$, $k_2 = (2.46 \pm 0.25) \times 10^{-3} \text{ M}^{-3/2}\text{s}^{-1}$.
- [14] G. von Kiedrowski, **1991**, unveröffentlicht. SimFit (Nonlinear Fitting by Dynamic Simulation) dient zur kinetischen Auswertung experimenteller Konzentrations-Zeit-Verläufe mit beliebigen Reaktionsmodellen. Mehrere (maximal 16) Experimente mit variablen Startkonzentrationen können

gleichzeitig ausgewertet werden. Das Programm übersetzt die zur Laufzeit eingegebenen Reaktionsgleichungen in das zugehörige Differentialgleichungssystem und dessen Ableitung nach den Konzentrationen (Jacobi-matrix). Die Integration kann wahlweise nach einem Runge-Kutta- oder einem modifizierten Gear-Algorithmus erfolgen. Zur nichtlinearen Optimierung (Kurvenanpassung nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate) steht der Simplex- sowie der Newton-Raphson-Algorithmus zur Verfügung. Als Ausgabedaten fallen die berechneten Kurven, die Geschwindigkeitskonstanten sowie deren Fehler und Covarianzen an. Das Programm unterstützt die Formulierung symbolischer Zuordnungen von Konzentrationen mechanistischer Spezies auf observable Konzentrationen (Summen- und Differenzausdrücke). Es eignet sich daher auch für die Untersuchung solcher Kinetiken, bei denen lediglich Gesamtkonzentrationen erfassbar sind (z. B. bei rasch gebildeten und zerfallenden Komplexen). SimFit hat sich in unserem Laboratorium bei einer Vielzahl von reaktionsmechanistischen Untersuchungen bewährt.

- [15] Als autokatalytische Effizienz ε haben wir den Faktor definiert, um den die Matrize im autokatalytischen Reaktionskanal schneller als im nicht-autokatalytischen Reaktionskanal gebildet wird, wenn die Reaktion bei einer Matrizenkonzentration von 1 M verfolgt wird [6].
- [16] Im Normalfall wird ein Quadratwurzelgesetz erwartet, da ein Matrizenkomplex vom Typ 5 aus entropischen Gründen stabiler als ein ternärer Komplex vom Typ 4 sein sollte.



Schema 1. ^{11}B -NMR-Daten für **1**: $\delta = 33, 66$; für **2**: $\delta = -42, 24$.

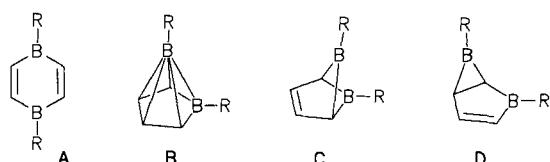
Während aminosubstituierte Diallenylboran- und Diallyldiboran(4)-Derivate stabil sind^[4], entsteht bei der Umsetzung von 1,2-Di-*tert*-butyl-1,2-dichloroboran(4)^[5] mit 3,3-Dimethylallyllithium unerwartet der Bicyclus **1** in 48% Ausbeute. Die Kristallstrukturanalyse von **1** (Abb. 1)^[6] zeigt ein in 2,4-Position überbrücktes 1-Boretan. Die starke

Bildung eines 2,5-Diborabicyclo[2.1.1]hexan-Derivats und dessen Umwandlung in ein Tetracarbahexaboran**

Von Markus Enders, Hans Pritzkow und Walter Siebert*

Professor Wolfgang Beck zum 60. Geburtstag gewidmet

Präparative und theoretische Untersuchungen zur Stabilität der C_4B_2 -Verbindungen **A**^[1], **B**^[2] und **C**^[3] haben gezeigt, daß der Übergang von der Organoboran- zur Carboranstruktur durch die borständigen Substituenten R kontrolliert wird. Bei der Koordination von einem Amino- und einem Methylsubstituenten ist das Carboran noch stabil, bei zwei Aminosubstituenten ($\text{R} = \text{NiPr}_2$) entsteht der Bicyclus **D**. Die temperaturabhängigen ^1H -NMR-Spektren deuten darauf hin, daß **C** und **D** im Gleichgewicht vorliegen^[3].



Wir berichten hier über einen neuen Reaktionsweg zum Tetracarbahexaboran **B** aus dem ungesättigten Organoboran **1**, einem Gerüstisomer von **D** (Schema 1). In **1** wie in **D** sind jeweils zwei B- und C-Atome sp^2 sowie zwei C-Atome im C_4B_2 -Gerüst sp^3 -hybridisiert; eine *nido*-Carboranbildung wird nicht durch den Substituenten am Bor, sondern durch die beiden π -Systeme erschwert. Nach Umlagerung von **1** in ein durch die beiden Isopropylidengruppen in 2,4-Position überbrücktes 1,3-Diboretan und durch H-Wanderung bildet sich das Carboran **2** mit einem Isopropyl- und einem Isopropenylsubstituenten, dessen Konstitution durch Messung von Nuclear-Overhauser Effekten (NOE) im Protonen-NMR ermittelt wurde.

[*] Prof. Dr. W. Siebert, Dipl.-Chem. M. Enders, Dr. H. Pritzkow
Anorganisch-chemisches Institut der Universität
Im Neuenheimer Feld 270, W-6900 Heidelberg

[**] Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (SFB 247), dem Fonds der Chemischen Industrie und der BASF AG gefördert.

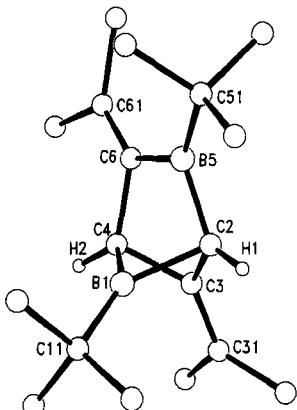


Abb. 1. Molekülstruktur von **1** im Kristall. Ausgewählte Abstände [\AA] und Winkel [$^\circ$]: B1-C3 1.744(9), B1-C2 1.658(8), B1-C4 1.595(9), C2-C3 1.491(7), C3-C4 1.501(7), C3-C31 1.370(6), C2-B5 1.521(7), C4-C6 1.483(7), B5-C6 1.584(8), C6-C61 1.344(6); C2-B1-C4 86.1(5), C2-C3-C4 95.9(5); B1-C2-C3 67.0(4), B1-C4-C3 68.5(4).

Faltung des Vierrings (Winkel zwischen den Ebenen C4-B1-C2 und C2-C3-C4 beträgt 105°) führt zu einem kurzen Abstand von 1.74 Å zwischen B1 und C3. Dies signalisiert eine 1,3-transanulare Wechselwirkung zwischen dem freien p-Orbital an B1 und der exocyclischen Doppelbindung an C3, die auch die bemerkenswerte Hochfeldverschiebung im ^{11}B -NMR-Spektrum ($\delta = 33$) erklärt. Eine vergleichbare Wechselwirkung findet sich im Diels-Alder-Dimer von 2,3,4,5-Tetramethyl-1-phenyl-borol^[7]. In Einklang damit steht auch, daß die exocyclischen Substituenten (C11 an B1, C31 und C3) nicht in einer Ebene mit den anderen Substituenten an B1 und C3 liegen (wie bei sp^2 -hybridisierten Atomen zu erwarten), sondern zur Ringmitte hin (8 bzw. 16°) abgeknickt sind, wodurch eine transanulare Wechselwirkung begünstigt wird.

Im ^1H -NMR-Spektrum von **1** ergeben die Wasserstoffatome des Boretans zwei Doublets ($\delta = 3.62, 3.90$, $^4J(\text{H}, \text{H}) = 5.6$ Hz) und zwei der vier inäquivalenten Methygruppen der Isopropyliden-Substituenten jeweils ein Quartett ($^4J(\text{H}, \text{H}) = 0.6$ Hz). Im ^{13}C -NMR-Spektrum sind bei Raumtemperatur sechs primäre und drei quartäre C-Atome zu finden, die B-CH-Atome ergeben zwei breite Signale bei $\delta = 73.1$ und 56.6. Durch Abkühlen auf 250 K findet man zusätzlich das