

lose Flüssigkeit vom Sdp.<sub>9</sub> 84°. Die UV-Absorption bei 250 m $\mu$  ( $\log \epsilon = 2.65$ ) zeigt noch 3.2% an Dihydrofuranverbindung XXVIa an, die durch Fraktionieren entfernt werden kann.

$C_8H_{14}O_4$  (174.2) Ber. C 55.18 H 8.04 Gef. C 55.40 H 8.07

*5-Methyl-3-carbomethoxy-4.5-dihydro-furan (XXVIa)*: 76 g XXV werden mit 3 Tropfen konz. Schwefelsäure versetzt und im trockenen N<sub>2</sub>-Strom etwa 2 Stdn. auf 125° erhitzt, bis die Methanolabspaltung beendet ist. In der Ausfrierfalle haben sich 13.0 g *Methanol* kondensiert (ber. 14.0 g). Nach dem Versetzen mit einer Spatelspitze NaHCO<sub>3</sub> wird das zurückbleibende Öl 2mal i. Vak. fraktioniert: 50 g (81% d. Th.) farbl. Öl vom Sdp.<sub>9</sub> 75°. UV-Absorption:  $\lambda_{\max}$  250 m $\mu$  ( $\log \epsilon = 4.15$ ).

$C_7H_{10}O_3$  (142.2) Ber. C 59.14 H 7.09 Gef. C 58.95 H 7.23

*5-Methyl-4.5-dihydro-furan-carbonsäure-(3) (XXVIb)*: 4 g Ester XXVIa werden mit 2 g KOH in 20 ccm Wasser verseift, wie bei XVIIb beschrieben. Die isolierte *Carbonsäure* kristallisiert aus Ligroin in derben Kristallen vom Schmp. 61°. UV-Absorption:  $\lambda_{\max}$  249 m $\mu$  ( $\log \epsilon = 4.02$ ).

$C_6H_8O_3$  (128.2) Ber. C 56.24 H 6.29 Gef. C 56.49 H 6.28

*Bestimmung des Enolgehaltes*: Es wurde nach der Rücktitrationsmethode für Enole nach K. H. MEYER<sup>13)</sup> gearbeitet. Ca. 200 mg Substanz werden in 5–10 ccm 5% Brom enthaltendem absol. Methanol bei –20° gelöst. Danach gibt man *sofort* 5 ccm einer 10-proz. methanol.  $\beta$ -Naphthollösung und 5 ccm einer 10-proz. methanol. KJ-Lösung zu und erwärmt die Mischung 25 Min. auf 40°. Nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur titriert man das ausgeschiedene Jod mit  $n_{10}$  Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

## RANDOLPH RIEMSCHEIDER

Untersuchungen in der Diphenylmethan-Reihe, VIII<sup>1)</sup>

### Über den räumlichen Bau von DDT-Analogen mit behinderter freier Drehbarkeit ihrer Molekülkomponenten

Aus der Freien Universität Berlin, Berlin-Dahlem \*)

(Eingegangen am 15. Dezember 1958)

Ein Vergleich der berechneten und gemessenen Dipolmomente einiger *o,o'*-disubstituierter DDT-Analogen ( $\beta,\beta,\beta$ -Trichlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[X-phenyl]-äthane,  $\beta,\beta$ -Dichlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[X-phenyl]-äthene und  $\beta$ -Chlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[X-phenyl]-äthene) mit behinderter freier Drehbarkeit ihrer Molekülkomponenten zeigt, daß die Lage der Benzolringe und ihrer Substituenten in den meisten Fällen, aber nicht ausnahmslos, symmetrisch ist.

Die aus Betrachtungen an Stuart- bzw. Stuart-Briegleb-Modellen<sup>2,3)</sup> erkennbare Behinderung der freien Drehbarkeit der Molekülkomponenten *o,o'*-disubstituierter

\*) *Anschrift für den Schriftverkehr*: Prof. Dr. R. RIEMSCHEIDER, Berlin-Charlottenburg 9, Bolivarallee 8.

<sup>1)</sup> VII. Mitteil.: R. RIEMSCHEIDER und W. COHNEN, Chem. Ber. 90, 2720 [1957].

<sup>2)</sup> R. RIEMSCHEIDER, Chim. et Ind. (Paris) 72, 261, 435 [1954]; Z. Naturforsch. 9b, 95 [1954]. <sup>3)</sup> R. RIEMSCHEIDER, Z. Naturforsch. 11b, 38 [1956].

DDT-Analogue konnten wir durch dielektrische Messungen am Beispiel einiger  $\beta,\beta,\beta$ -Trichlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[2-methyl-X-halogen-phenyl]-äthane beweisen<sup>4)</sup>. In vorliegender Arbeit wird versucht, genauere Aussagen über den räumlichen Bau der genannten und anderer *o,o'*-disubstituierter DDT-Analogue zu machen. Zu diesem Zweck haben wir weitere *o,o'*-disubstituierte DDT-Analogue synthetisiert und ihre Dipolmomente bestimmt (Tab. 1, lfd. Nr. 6–11, 13–16). Für einige andere DDT-Analogue mit *o*-Substituent(en) wurden auch Meßwerte der Literatur herangezogen (Tab. 1, lfd. Nr. 2, 4, 5, 12).

Tab. 1. Berechnete<sup>5)</sup> und gemessene Dipolmomente einiger *o*-substituierter DDT-Analogue und ihre Konstellationen

Lfd. Nr.	X	Y	Schmp. °C	$\mu_{\text{exp}}$	$\mu_{\text{ber. a)}$	ber. für Konstellation	gemäß Abbild.
<i><math>\beta,\beta,\beta</math>-Trichlor-<math>\alpha</math>-[X-phenyl]-<math>\alpha</math>-[Y-phenyl]-äthane</i>							
1	2-Cl	2-Cl	91	—	3.75	hh'	1
2	2-Cl	4-Cl	75	2.24 <sup>b)</sup>	2.34	h	1
3	2-Cl	3-Cl	—	—	2.68	h	1
4	2.4-CH <sub>3</sub>	2.4-CH <sub>3</sub>	112	2.50 <sup>b)</sup>	2.46	hh'	1
5	2.5-CH <sub>3</sub>	2.5-CH <sub>3</sub>	100	1.94 <sup>b)</sup>	1.77	hh'	1
6	2-CH <sub>3</sub> , 4-Cl	2-CH <sub>3</sub> , 4-Cl	108 <sup>e)</sup>	2.46	2.34	hh'	1
7	2-CH <sub>3</sub> , 4-Br	2-CH <sub>3</sub> , 4-Br	101 <sup>e)</sup>	2.38 <sup>c)</sup>	2.34	hh'	1
8	2-CH <sub>3</sub> , 5-Cl	2-CH <sub>3</sub> , 5-Cl	158 <sup>e)</sup>	3.13	3.36	hh'	1
9	2-CH <sub>3</sub> , 5-Br	2-CH <sub>3</sub> , 5-Br	183 <sup>c)</sup>	3.22 <sup>c)</sup>	3.36	hh'	1
10	3.5-Cl, 2-OCH <sub>3</sub>	3.5-Cl, 2-OCH <sub>3</sub>	156 <sup>f)</sup>	2.50	2.46	h <sub>h</sub> h <sub>a</sub> '	1
11	2.4-Cl, 5-OCH <sub>3</sub>	2.4-Cl, 5-OCH <sub>3</sub>	162 <sup>f)</sup>	3.10	3.10	df'	2
<i><math>\beta,\beta</math>-Dichlor-<math>\alpha</math>-[X-phenyl]-<math>\alpha</math>-[Y-phenyl]-äthene</i>							
12	2-Cl	4-Cl	79	2.25 <sup>d)</sup>	2.92	h	1
13	3.5-Cl, 2-OCH <sub>3</sub>	3.5-Cl, 2-OCH <sub>3</sub>	168 <sup>e,f)</sup>	1.96	2.06	caCa'	1
14	2.4-Cl, 5-OCH <sub>3</sub>	2.4-Cl, 5-OCH <sub>3</sub>	156 <sup>f)</sup>	1.67	1.67	cg'	2
<i><math>\beta</math>-Chlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[X-phenyl]-äthene</i>							
15	3.5-Cl, 2-OCH <sub>3</sub>	—	85	2.08	2.08	caCa'	1
16	2.4-Cl, 5-OCH <sub>3</sub>	—	143 <sup>g)</sup>	2.86	2.86	cg'	2

a) Zur Berechnung vgl. 5). Bei der Berechnung der theoretischen Dipolmomente<sup>5)</sup> der unter laufender Nr. 10–16 genannten Methoxyverbindungen mußten vereinfachende Annahmen gemacht werden. Zur Festlegung der Lage der Methoxygruppe am zugehörigen Benzolkern haben wir auf andere Verbindungen Bezug genommen: Für die  $\beta,\beta,\beta$ -Trichlor- bzw.  $\beta,\beta$ -Dichlor- bzw.  $\beta$ -Chlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[3.5-dichlor-2-methoxy-phenyl]-äthane bzw. -äthene auf das 3.5-Dichlor-2-methoxy-toluol: Die Methoxygruppe steht senkrecht zur Benzolebene; für die  $\beta,\beta,\beta$ -Trichlor- bzw.  $\beta,\beta$ -Dichlor- bzw.  $\beta$ -Chlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[2.4-dichlor-5-methoxy-phenyl]-äthane bzw. -äthene auf *o*-Chlor-anisol und 2.4-Dichlor-anisol. In diesem Falle ist die Methoxygruppe coplanar mit der Benzolebene.

b) H. WILD, Helv. chim. Acta **29**, 497 [1946].

c) R. RIEMSCHEIDER und W. COHNEN, Chem. Ber. **89**, 2702 [1956].

d) I. T. ISHIGURO, M. HAMADA und I. MIYAGAWA, Botyu Kagaku **16**, 220 [1951]; C. A. **1951**, 916.

e) R. RIEMSCHEIDER, l. c. 4) und J. Amer. chem. Soc. **75**, 4853 [1953].

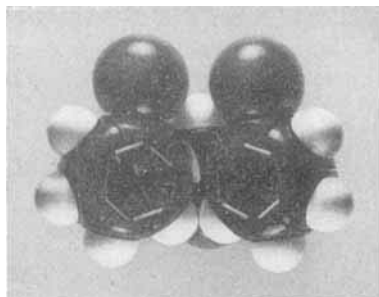
f) VII. Mitteil. 1).

g) IX. Mitteil., Chem. Ber. **91**, 2600 [1958].

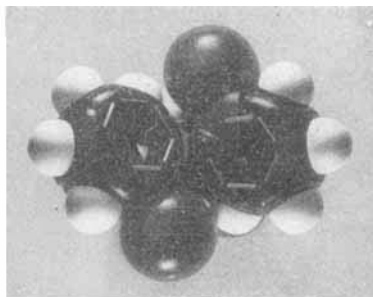
4) R. RIEMSCHEIDER, Advances in Pest Control Research, Vol. II, S. 338 [1958]; Chem. Ber. **89**, 2702 [1956].

5) R. RIEMSCHEIDER und W. COHNEN, Z. Naturforsch. **12b**, 803 [1957].

Nach Modellbetrachtungen ist, wie in der III. Mitteil. dieser Reihe<sup>3)</sup> gezeigt wurde, für *o,o'*-disubstituierte DDT-Analoge im Prinzip mit dem Auftreten der in Abbild. 1 und Abbild. 2 gegebenen Konstellationen bzw. der zugehörigen Konstellations-Serien



[Abbild. 1



Abbild. 2

Bei dem in Abbild. 1 dargestellten *o,o'*-disubstituierten DDT-Analogen nehmen die Ringe nach unserer Bezeichnungsweise<sup>3)</sup> z. B. die Lage *hh'* ein. Wenn der Substituent Chlor ist, lautet die zugehörige Konstellations-Serie: *ah'*, *ag'*, *hh'*, *hf'*, *hg'*, *fg'* (II); vgl. I.c.<sup>3)</sup> Tab. 2. Die in Abbild. 2 dargestellte Konstellation lautet *df'*. Sie gehört zur Serie: *cf'*, *df'*, *dg'*, *dh'* (Ia)<sup>3)</sup>. Beide Konstellationen sind am Modell nicht ineinander überführbar. Nach dem Modell ist für manche *o,o'*-disubstituierten DDT-Analogen noch eine dritte Konstellation möglich, die am Modell ebenfalls nicht in eine der beiden abgebildeten übergeführt werden kann, und zwar *ac'* (IIIa) z. B., wenn der *o*-Substituent Cl ist<sup>3)</sup>. Wir haben hier auf ihre Wiedergabe verzichtet, weil sie am Modell nur gerade noch dargestellt werden kann (zu starke Berührung der *o*-Substituenten mit den Cl-Atomen der  $CCl_3$ -Gruppe).

zu rechnen. Ein Vergleich zwischen berechneten (vgl. V. Mitteil. dieser Reihe<sup>5)</sup>) und gemessenen Momenten der in Tab. 1 genannten Verbindungen zeigt, daß die meisten eine Konstellation(s-Serie) gemäß Abbild. 1 bevorzugen, d. h. *symmetrische* Lage der Benzolringe und ihrer Substituenten: Tab. 1, lfd. Nr. 2–10, 12, 13, 15. Für einige *o,o'*-disubstituierte DDT-Analoge fanden wir jedoch eine Vorzugskonstellation gemäß Abbild. 2, d. h. *antisymmetrische* Lage der Substituenten: Tab. 1, lfd. Nr. 11, 14, 16. Die zuletzt genannten Verbindungen hätten im Falle des Vorliegens einer Konstellation gemäß Abbild. 1 ein sehr hohes Dipolmoment. Zum Beispiel errechnet sich für die Abbild. 1 entsprechende Konstellation *hh'* des  $\beta,\beta,\beta$ -Trichlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[2,4-dichlor-5-methoxy-phenyl]-äthans (Tab. 1, lfd. Nr. 11) das Moment 4,28, für die Abbild. 1 entsprechende Konstellation *cc'* des  $\beta,\beta$ -Dichlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[2,4-dichlor-5-methoxy-phenyl]-äthens (Tab. 1, lfd. Nr. 14) das Moment 5,06. Unter dem Bestreben, die Ladungsunterschiede innerhalb des Moleküls möglichst auszugleichen, ordnen sich wahrscheinlich die Arylkomponenten dieser Verbindungen – soweit es die räumlichen Verhältnisse zulassen – so an, daß das Gesamtmoment möglichst klein wird.

Hinsichtlich der theoretisch berechneten Dipolmomente der Abbild. 2 entsprechenden Konstellationen (*hd'* bzw. *dh'*) der Verbindungen der Tab. 1, die eine symmetrische Lage der Arylkomponenten bevorzugen, sei auf die V. Mitteil. dieser Reihe<sup>5)</sup> verwiesen, besonders Tab. 3.

Ein einheitliches Bauprinzip ist bei *o,o'*-disubstituierten DDT-Analogen wohl darum nicht zu erwarten, weil bei der Ausbildung ihrer Konstellationen mehrere Einflüsse eine Rolle spielen. Gerade diese Untersuchungen lassen das Zusammenwirken der Faktoren „räumlicher Bau“ und anderer, wie z. B. „Ladungsverteilung innerhalb des Moleküls“ bei der Ausbildung von Konstellationen chemischer Verbindungen gut erkennen.

Der DEUTSCHEN FORSCHUNGSGEMEINSCHAFT sei für die Förderung der vorliegenden Arbeit bestens gedankt.

### BESCHREIBUNG DER VERSUCHE

*Dipolmomentmessungen:* Die Messung der Dielektrizitätskonstanten erfolgte mit einem Dekameter nach SLEVOGT bei 25.0°. Lösungsmittel für die Substanzen war Benzol (reinst, thiophenfrei, kristallisierbar,  $d_4^{25}$  0.8740), das durch Kochen und Destillation über Natrium wasserfrei gemacht wurde. Die Meßwerte der *DK* und die Brechungsindices finden sich in Tab. 2.

Zur Berechnung des Dipolmomentes wurde die Formel von K. B. EVERARD<sup>6)</sup> benutzt; dabei gilt für die spezifische Polarisation und das Dipolmoment:

$$\begin{aligned} \rho_{2\infty} = & \frac{3 v_1}{(\epsilon_1 + 2)^2} \alpha + \left( \frac{\epsilon_1 - 1}{\epsilon_1 + 2} - \frac{n_1^2 - 1}{n_1^2 + 2} \right) \beta - \frac{6 n_1 v_1}{(n_1^2 + 2)^2} \gamma + \\ & + \left( \frac{\epsilon_1 - 1}{\epsilon_1 + 2} - \frac{n_1^2 - 1}{n_1^2 + 2} \right) v_1 - A p_2 \quad (1) \end{aligned}$$

$$\mu^2 = \frac{9 k T}{4 \pi N_L} \cdot M_2 \cdot \rho_{2\infty} \quad (2)$$

Die Konstanten  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  erhält man aus den Versuchsergebnissen wie folgt:

- a) Dielektrizitätskonstante:  $\epsilon = \epsilon_1 + \alpha \omega$  oder  $\alpha = \Delta \epsilon / \Delta \omega$  ( $\epsilon_1$ ,  $\alpha = \text{const.}$ )
- b) Dichte:  $1/d = v = v_1 + \beta \omega$  oder  $\beta = \Delta v / \Delta \omega$  ( $v_1$ ,  $\beta = \text{const.}$ )
- c) Brechungsindex:  $n = n_1 + \gamma \omega$  oder  $\gamma = \Delta n / \Delta \omega$  ( $n_1$ ,  $\gamma = \text{const.}$ )

Setzt man in den Formeln (1) und (2) die Standardwerte für  $k$ ,  $N_L$ ,  $\epsilon_1$ ,  $v_1$  und  $n_1$  für Benzol bei 25° ein und nimmt die Atompolarisation  $A p_2 = 0$ , so ergibt sich (in Debye-Einheiten)

$$\mu^2 = M (0.00920 \alpha + 0.00015 \beta - 0.02790 \gamma + 0.00017) \quad (3)$$

Um jede Willkür bei der Berechnung auszuschalten, werden die Steigungen  $\alpha$  und  $\gamma$  mit Hilfe der Ausgleichsrechnung ermittelt.

Hinsichtlich der Berechnung der theoretischen Dipolmomente von DDT-Analogen kann im wesentlichen auf die V. Mitteil. dieser Reihe<sup>5)</sup> verwiesen werden. Hier einige Ergänzungen an 2 Beispielen:

Berechnet man die theoretischen Dipolmomente des  $\beta,\beta,\beta$ -Trichlor- $\alpha,\alpha$ -bis-[3.5-dichlor-2-methoxy-phenyl]-äthans bei einem Valenzwinkel von  $\alpha = \beta = 116^\circ$  für bestimmte Kon-

<sup>6)</sup> K. B. EVERARD, R. A. W. HILL und L. E. SUTTON, Trans. Faraday Soc. 46, 417 [1950].

Tab. 2. Meßwerte zur Bestimmung der Dipolmomente einiger *o,o'*-disubstituierter DDT-Körper

$\omega \cdot 10^3$	$\epsilon$	$n$	
<b><math>\beta,\beta,\beta</math>-Trichlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[2-methyl-4-chlor-phenyl]-äthan</b>			
0.000	2.2830	1.5002	$\alpha = 1.85$
4.418	2.2909	1.5004	$\gamma = 0.0902$
8.093	2.2971	1.5009	
8.170	2.2974	1.5009	
12.831	2.3071	1.5013	$\mu = 2.46 \text{ D}$
<b><math>\beta,\beta,\beta</math>-Trichlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[2-methyl-5-chlor-phenyl]-äthan</b>			
0.000	2.2814	1.5002	$\alpha = 2.81$
3.355	2.2907	1.5007	$\gamma = 0.0838$
6.600	2.2999	1.5010	
12.246	2.3160	1.5013	
14.698	2.3227	1.5015	
25.807	2.3540	1.5025	$\mu = 3.13 \text{ D}$
<b><math>\beta,\beta,\beta</math>-Trichlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[3,5-dichlor-2-methoxy-phenyl]-äthan</b>			
0.000	2.2829	1.5003	$\alpha = 1.71$
3.670	2.2890	1.5004	$\gamma = 0.0875$
7.813	2.2960	1.5008	
13.001	2.3051	1.5012	
16.013	2.3103	1.5014	
18.128	2.3137	1.5020	$\mu = 2.50 \text{ D}$
<b><math>\beta,\beta,\beta</math>-Trichlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[2,4-dichlor-5-methoxy-phenyl]-äthan</b>			
0.000	2.2819	1.5003	$\alpha = 2.48$
3.780	2.2918	1.5008	$\gamma = 0.0790$
8.614	2.3044	1.5010	
13.148	2.3155	1.5016	
16.336	2.3230	1.5019	
23.189	2.3404	1.5021	$\mu = 3.10 \text{ D}$
<b><math>\beta,\beta</math>-Dichlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[3,5-dichlor-2-methoxy-phenyl]-äthen</b>			
0.000	2.2814	1.5002	$\alpha = 1.20$
3.936	2.2859	1.5003	$\gamma = 0.0824$
6.526	2.2892	1.5007	
10.792	2.2944	1.5010	
15.089	2.2991	1.5014	
15.755	2.3004	1.5014	$\mu = 1.96 \text{ D}$
<b><math>\beta,\beta</math>-Dichlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[2,4-dichlor-5-methoxy-phenyl]-äthen</b>			
0.000	2.2834	1.5002	$\alpha = 1.01$
1.654	2.2849	1.5004	$\gamma = 0.1092$
4.047	2.2877	1.5007	
7.710	2.2913	1.5010	
11.409	2.2950	1.5013	
13.456	2.2969	1.5018	$\mu = 1.67 \text{ D}$
<b><math>\beta</math>-Chlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[3,5-dichlor-2-methoxy-phenyl]-äthen</b>			
0.000	2.2804	1.5001	$\alpha = 1.42$
3.836	2.2856	1.5004	$\gamma = 0.0856$
7.004	2.2900	1.5007	
10.861	2.2963	1.5010	
13.321	2.2995	1.5012	
22.149	2.3116	1.5020	$\mu = 2.08 \text{ D}$
<b><math>\beta</math>-Chlor-<math>\alpha,\alpha</math>-bis-[2,4-dichlor-5-methoxy-phenyl]-äthen</b>			
0.000	2.2804	1.5001	$\alpha = 2.52$
4.887	2.2929	1.5008	$\gamma = 0.1032$
6.658	2.2973	1.5010	
9.305	2.3039	1.5013	
12.951	2.3131	1.5014	$\mu = 2.86 \text{ D}$

stellationen ( $\tau' = \tau'' = \tau = 0^\circ$ ;  $\sin \tau / \tau = 1$ ;  $\varphi' = \varphi'' = \varphi = 0$  bis  $360^\circ$ ), so erhält man, wenn  $a = 2.20$  D,  $\Theta = 35^\circ$ ,  $b = 1.77$  D:

$\varphi$		0	30	35	45	90	180°
$\mu$		1.95	2.46	2.76	2.94	3.54	2.77 D

Für Winkel  $\varphi = 30^\circ$  ist die Übereinstimmung zwischen gemessenem und berechnetem Moment gut. Da  $\varphi$  aber die Neigung des Teilmomentes  $a$  angibt, erhält man die Neigung der Arylebene nach  $\varphi - \epsilon = -77^\circ$ . Nach der an anderer Stelle<sup>3)</sup> erläuterten Bezeichnungsweise für Konstellationen von DDT-Analogen und gemäß Tab. 1 der V. Mitteil. dieser Reihe<sup>5)</sup> kommt der diskutierten Verbindung die Konstellation  $h_a h_a'$  zu.

Beim gleichen Vorgehen erhalten wir für das  $\beta, \beta, \beta$ -Trichlor- $\alpha, \alpha$ -bis-[2.4-dichlor-5-methoxyphenyl]-äthan ( $a = 2.86$  D,  $\Theta = 66^\circ$ ,  $b = 1.77$  D):

$\varphi$		0	90	180	270°
$\mu$		4.75	6.20	4.30	4.22 D

Die für die symmetrische Lage der Arylkerne berechneten Momente sind sämtlich zu groß. Um für die antisymmetrische Lage zu berechnen, genügt es jedoch nicht, einfach  $\varphi' = \varphi''$  zu setzen, da dann die 2.2'-ständigen Cl-Atome sich in verschiedenem Abstand von der Trichlormethyl-Gruppe befänden. Ausgangspunkt der Berechnung muß vielmehr die geringste Entfernung der 2.2'-ständigen Cl-Atome von der Trichlormethyl-Gruppe sein. Das ist bei  $\varphi = 39^\circ$  der Fall<sup>5)</sup> ( $ee'$  nach l. c.<sup>3)</sup>). Dann kann in der Rechnung  $\varphi' = 39 + \delta$ ,  $\varphi'' = 39 - \delta$  gesetzt werden, wobei jetzt durch  $\delta$  die Bedingung der gleichen Entfernung der 2.2'-ständigen Cl-Atome von der Trichlormethyl-Gruppe erfüllt ist ( $\tau' = \tau'' = \tau = 0$ ;  $\sin \tau / \tau = 1$ ):

$\delta$		60	70	80°
$\mu$		3.62	3.04	2.49 D

Für  $\delta = 69^\circ$  ist das theoretische Dipolmoment 3.10 D. Die Konstellation der Verbindung ist dann  $df'$ .