

Raman- und Ultrarotspektren und Molekülsymmetrie der 1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexane.

Von

F. Wollrab und A. Maschka.

Aus dem Institut für Physikalische Chemie der Technischen Hochschule Wien.

Mit 2 Abbildungen.

(Eingelangt am 11. Dezember 1953.)

Zur Überprüfung der von verschiedenen Autoren für die 1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexane vorgeschlagenen Konfigurationen werden aus den bekannten Ultrarotspektren der genannten Isomeren durch kritische Auswertung Frequenzmittelwerte bestimmt, die den entsprechenden Ramanspektren gegenübergestellt werden. Der Vergleich der bei den einzelnen Isomeren beobachteten Linienzahlen mit den theoretisch zu erwartenden und die Anwendung des theoretisch für die Punktgruppen D_{3d} und C_{2h} geforderten Alternativverbotes ergibt, daß die spektralen Befunde mit den von *Bastiansen* und Mitarbeitern¹⁸ vorgeschlagenen Konfigurationen in Einklang stehen.

I. Bisherige Strukturvorschläge für die Isomeren.

Bisher sind fünf 1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexane bekannt*, nämlich das α -, β -, γ -, δ - und ε -Isomere. Das erstmalig von *Bastiansen* und *Hassel*¹ isolierte und von diesen Autoren zunächst „ ζ -1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan“ benannte Isomere gehört nicht hierher; denn es erwies sich auf Grund der Untersuchungen von *Ellefsen* und Mitarbeitern² sowie von *Riemschneider*^{2a} als ein 1,1',2,4,4',5-Hexachlorcyclohexan.

* Inzwischen ist auch ein sechstes Isomeres aufgefunden worden, wie sich aus folgenden Arbeiten ergibt: *R. Riemschneider, M. Spät, W. Rausch* und *E. Böttger*, Mh. Chem. 84, 1068 (1953); *H. D. Orloff, A. J. Kolka, G. Calingaert, M. E. Griffing* und *E. R. Kerr*, J. Amer. Chem. Soc. 75, 4243 (1953); *O. Bastiansen* und *O. Hassel*, Mh. Chem. 85, 303 (1954).

¹ *O. Bastiansen* und *O. Hassel*, Acta Chem. Scand. 1, 683 (1947).

² *O. Ellefsen, O. Hassel* und *E. W. Lund*, Acta Chem. Scand. 4, 1145 (1950).

^{2a} *R. Riemschneider*, Z. Naturforsch. 6b, 48, 339 (1951).

Die Beschreibung der Isomerieverhältnisse bei den Cyclohexanderivaten gründet sich auf die Vorstellungen über die Struktur der Cyclohexanmolekel. Bereits *Sachse*³ erkannte, daß bei Zugrundelegung tetraedrischer Valenzwinkel am Kohlenstoffatom eine ebene Form der Cyclohexanmolekel ausgeschlossen werden muß und nur eine Sesselform oder eine Wannenform möglich ist. Durch eine Analyse des Schwingungsspektrums konnten *Kohlrausch* und *Stockmair*⁴ eindeutig nachweisen, daß Cyclohexan in der Sesselform vorliegt. Zum gleichen Ergebnis kamen *Ramsay* und *Sutherland*⁵ auf Grund einer Normalkoordinatenrechnung und *Wierl*⁶ bzw. *Pauling* und *Brockway*⁷ mit Hilfe der Elektronenbeugung.

Im sesselförmigen Cyclohexan gibt es zwei geometrisch verschiedene Arten von Bindungen zwischen Kohlenstoffatomen und Liganden (Abb. 1), auf die schon *Kohlrausch*, *Reitz* und *Stockmair*⁸ hinwiesen und die nach *Hassel* und *Viervoll*⁹ wie folgt bezeichnet werden:

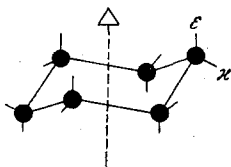


Abb. 1. Sesselform des Cyclohexans.
Δ...dreizählige Drehachse.

a) Bindungen parallel zur dreizähligen Drehachse, „aufrechte Bindungen“, ϵ -Bindungen.

b) Bindungen annähernd senkrecht zur dreizähligen Drehachse (der Winkel ist $109^{\circ} 28'$ statt 90°), „gestreckte Bindungen“, α -Bindungen.

Trotz der oben skizzierten Vorstellungen wird die Stereoisomerie der Cyclohexanderivate noch vielfach als cis-trans-Isomerie am ebenen Sechsering beschrieben; für das an jedem C-Atom einfach substituierte Cyclohexan wären in diesem (ebenen) Fall 9 Isomere möglich (vgl.^{10, 11}).

*Slade*¹² wandte als erster die neuere Auffassung von der Struktur des Cyclohexans auf die Isomerie der 1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexane an und kam zu dem Schlusse, daß 16 Isomere möglich sind (vgl.¹³).

³ *H. Sachse*, Ber. dtsch. chem. Ges. **23**, 1363 (1890).

⁴ *K. W. F. Kohlrausch* und *W. Stockmair*, Z. physik. Chem., Abt. B **31**, 382 (1936).

⁵ *D. A. Ramsay* und *G. B. B. M. Sutherland*, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A **190**, 245 (1947).

⁶ *R. Wierl*, Ann. Physik **8**, 521 (1931).

⁷ *L. Pauling* und *L. O. Brockway*, J. Amer. Chem. Soc. **59**, 1223 (1937).

⁸ *K. W. F. Kohlrausch*, *A. W. Reitz* und *W. Stockmair*, Z. physik. Chem., Abt. B **32**, 229 (1936).

⁹ *O. Hassel* und *H. Viervoll*, Acta Chem. Scand. **1**, 149 (1947).

¹⁰ *H. Luther*, *H. Koelbel*, *E. Ruschenburg* und *F. Lampe*, Z. Naturforsch. **4 b**, 133 (1949).

¹¹ *Landolt-Börnstein*, 6. Aufl., Bd. I, Teil 2, S. 524.

¹² *R. E. Slade*, Chem. and Ind. **40**, 314 (1945); Endeavour **4**, 148 (1945).

¹³ *R. Riemschneider* und *P. Geschke*, Angew. Chem. **65**, 390 (1953).

Da Strukturuntersuchungen mittels Röntgenstrahlen für β -Hexachloreyclohexan ein Symmetriezentrum ergaben (*Dickinson* und *Bilicke*¹⁴), schrieb *Slade*¹² diesem Isomeren die Struktur $\kappa\kappa\kappa\kappa\kappa\kappa$ zu¹⁵. Mit Hilfe von *Stuart*-Modellen gelangte er auch zu Vorstellungen über die Strukturverhältnisse bei den übrigen Isomeren, und zwar nahm er für das α -Isomere die Konfiguration $\varepsilon\varepsilon\kappa\kappa\kappa\kappa$, für das δ -Isomere die Konfiguration $\varepsilon\kappa\kappa\varepsilon\kappa\kappa$ und für das γ -Isomere die Konfiguration $\varepsilon\kappa\kappa\kappa\kappa\kappa$ in Anspruch.

Kauer und Mitarbeiter¹⁶ bzw. *Daasch*¹⁷ kamen zu Ergebnissen, die von denen *Slades* teilweise abweichen; so schlugen sie z. B. für das ε -Isomere eine Wannenstruktur vor.

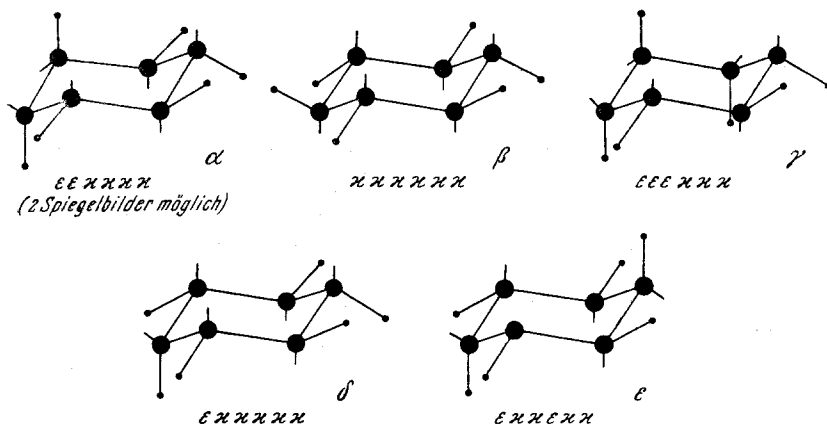


Abb. 2. Struktur der 1,2,3,4,5,6-Hexachloreyclohexanisomeren nach *Bastiansen* und Mitarbeitern¹⁸.

Am besten fundiert erscheinen die von *Bastiansen* und Mitarbeitern¹⁸ angegebenen Strukturen des α -, β -, γ -, δ - und ε -Isomeren. Diese Autoren zogen ihre Schlüsse nicht auf Grund von Modellbetrachtungen, sondern von Elektronenbeugungsversuchen. Ihre Resultate sind in Abb. 2 wiedergegeben; wie man sieht, ist nach *Bastiansen* und Mitarbeitern die Wannenform bei keinem Isomeren realisiert.

In Tabelle 1 sind die von den verschiedenen Autoren für die 1,2,3,4,5,6-Hexachloreyclohexane vorgeschlagenen Strukturen zusammengefaßt.

¹⁴ *R. G. Dickinson* und *C. Bilicke*, *J. Amer. Chem. Soc.* **50**, 764 (1928).

¹⁵ Der Einfachheit halber wird im folgenden die *Hasselsche* Bezeichnungswiese durchgehend angewandt.

¹⁶ *K. C. Kauer*, *R. B. DuVall* und *F. N. Alquist*, *Ind. Eng. Chem.* **39**, 1135 (1947).

¹⁷ *L. W. Daasch*, *Analyt. Chemistry* **19**, 779 (1947).

¹⁸ *O. Bastiansen*, *O. Ellefsen* und *O. Hassel*, *Acta Chem. Scand.* **3**, 918 (1949).

Tabelle 1. Die für die 1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan-Isomeren vorgeschlagenen Konfigurationen.

Isomeres	Slade ¹²	Kauer und Mitarbeiter ¹⁵	Dausch ¹⁷	Bastiansen und Mitarbeiter ¹⁸
α	$\varepsilon \varepsilon \kappa \kappa \kappa \kappa$	—	—	$\varepsilon \varepsilon \kappa \kappa \kappa \kappa$
β	$\kappa \kappa \kappa \kappa \kappa \kappa$	$\kappa \kappa \kappa \kappa \kappa \kappa$	$\kappa \kappa \kappa \kappa \kappa \kappa$	$\kappa \kappa \kappa \kappa \kappa \kappa$
γ	$\varepsilon \kappa \kappa \kappa \kappa \kappa$	—	—	$\varepsilon \varepsilon \varepsilon \kappa \kappa \kappa$
δ	$\varepsilon \kappa \kappa \varepsilon \kappa \kappa$	—	—	$\varepsilon \kappa \kappa \kappa \kappa \kappa$
ε	—	Wanne (unbestimmte Konfiguration)	Wanne (mehrere Konfigurationen)	$\varepsilon \kappa \kappa \varepsilon \kappa \kappa$

Tabelle 2. Raman- und Ultra-rottspektrum von α -Hexachlorcyclohexan.

Raman ¹⁹	UR
160 (0) ?	—
286 ($1/2$)	—
305 ($1/2$)	—
393 (1)	—
—	509 st
522 ($1/2$)	524 m
—	628 st
649 ($1/2$) ?	—
667 ($1/2$) ?	670 m
—	696 sst
706 (5)	708 m
—	740 schw
759 (2)	769 st
786 (0)	786 sst
—	795 sst
815 (0)	—
854 (1)	858 m
—	924 st
943 (0)	951 sst
1045 (0)	1046 schw
1098 ($1/2$)	1106 m
1174 (0) ?	—
—	1205 schw
1228 (0)	1225 st
1265 ($1/2$)	1263 m
1307 ($1/2$)	1313 m
1338 (0)	1349 m
1367 ($1/2$) ?	—
2951 ($1/2$)	—
—	2978 m
2989 ($1/2$)	—

Tabelle 3. Raman- und Ultra-rottspektrum von β -Hexachlorcyclohexan.

Raman ¹⁹	UR
194 (0)	—
268 ($1/2$)	—
307 (3)	—
—	511 sst
749 (5)	745 sst
—	777 m
791 (0)	787 m
818 (0)	814 m
854 (5)	—
—	905 m
—	922 m
—	932 m
—	1011 m
1020 (0)	1028 m
—	1047 st
1083 (2)	—
1170 (2)	—
—	1192 m
1204 ($1/2$)	—
—	1227 st
1295 ($1/2$)	—
—	1319 st
1334 ($1/2$)	—
1361 ($1/2$)	—
2900 (0) ?	—
2944 (2)	—
—	2956 m

Tabelle 4. Raman- und Ultra-
rotspektrum von γ -Hexa-
chlorcyclohexan.

Raman ¹⁰	UR
206 ($1/2$)	—
261 ($1/2$)	—
288 (0) ?	—
309 ($1/2$)	—
326 ($1/2$)	—
350 (4)	—
388 ($1/2$)	—
400 ($1/2$)	—
482 (3)	477 schw
—	486 st
565 ($1/2$)	—
672 (1)	666 sst
689 (2)	687 m
782 (6)	776 st
—	785 m
855 (1)	845 st
911 (1)	910 m
934 (2)	—
—	952 st
—	968 m
1033 ($1/2$)	1034 m
1112 ($1/2$)	1107 st
1202 ($1/2$)	1189 m
—	1204 m
1226 ($1/2$)	1223 st
—	1245 st
1267 ($1/2$)	1278 st
1326 ($1/2$) ?	—
1340 ($1/2$)	1345 st
1359 (0) ?	—
—	2919 st
2935 ($1/2$)	—
—	2968 st
2994 ($1/2$)	—
—	3021 st

Tabelle 5. Raman- und Ultra-
rotspektrum von δ -Hexa-
chlorcyclohexan.

Raman ¹⁰	UR
272 ($1/2$)	—
310 (2)	—
353 ($1/2$)	—
418 (0)	—
458 (0)	452 m
565 ($1/2$)	569 st
691 (1)	692 schw
759 (2)	758 st
—	774 st
798 ($1/2$) ?	—
824 ($1/2$) ?	—
856 (2)	862 m
920 (0)	926 st
—	953 st
—	989 m
—	1032 m
—	1079 schw
1100 (0)	1104 m
—	1215 st
1237 (0)	1240 st
1285 ($1/2$)	1282 m
1306 (0) ?	1310 m
1333 (0) ?	1329 sst
—	1346 st
1363 (0)	—
2937 ($1/2$)	2939 st
—	2968 m
2987 ($1/2$)	—
—	3041 st

In den Tabellen 2 bis 5 sind die Frequenzen in cm^{-1} , die Intensitäten der Ramanlinien als Schätzwerte in einer zehnstufigen Skala angegeben.

? = Linie ist fraglich, st = starke Bande,
schw = schwache Bande, sst = sehr starke Bande.
m = mittelstarke Bande,

II. Schwingungsspektren.

Die Tabellen 2 bis 6 zeigen eine Gegenüberstellung der Raman- und Ultrarotspektren der einzelnen Isomeren. Die in den Tabellen 2

bis 5 aufscheinenden Raman-Feststoff-Spektren von α -, β -, γ - und δ -1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan haben wir an Präparaten der Firma E. Merck, Darmstadt, ermittelt. Die Ergebnisse wurden bereits in einer früheren Arbeit mitgeteilt¹⁹; das in Tabelle 6 angegebene Ramanspektrum von ϵ -1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan stammt von *Luther* und Mitarbeitern²⁰. Die Frequenzwerte der aufgeführten Ultrarotspektren stellen Mittelwerte dar, die durch eine vergleichende kritische Auswertung der von *Kauer* und Mitarbeitern¹⁶, *Daasch*¹⁷, *Luther* und Mitarbeitern²⁰, *Whiffen* und *Thompson*²¹ und *Siebert*²² angegebenen Spektren erhalten wurden.

Tabelle 6. Raman- und Ultrarotspektrum von ϵ -Hexachlorcyclohexan.

Raman ²⁰	UR	Raman ²⁰	UR
228 (1)	—	—	919 m
247 (1)	—	—	938 sst
356 (1)	—	951 (0)	—
431 (0)	—	—	1001 m
—	514 schw	—	1027 st
521 (1)	522 schw	1084 (0)	—
—	548 st	—	1200 m
556 (3)	562 st	—	1243 m
645 (0)	—	—	1295 m
714 (0)	716 st	—	1343 m
755 (1)	—	—	1459 schw
796 (2)	791 st	—	2940 m
907 (0)	—	—	2968 m

Frequenzen in cm^{-1} .

schw = schwache Bande, st = starke Bande,
m = mittelstarke Bande, sst = sehr starke Bande.

III. Diskussion.

Im folgenden werden die Punktgruppen, denen die von den verschiedenen Autoren für die einzelnen Isomeren vorgeschlagenen Strukturen angehören, und die Abzählung der Normalschwingungen angegeben²³.

¹⁹ *M. v. Stein, A. Maschka, F. Wollrab und W. Gnülse*, Z. physik. Chem. **201**, 261 (1952).

²⁰ *H. Luther, F. Lampe, J. Goubeau und B. W. Rodewald*, Z. Naturforsch. **5 a**, 34 (1950).

²¹ *D. H. Whiffen und H. W. Thompson*, J. Chem. Soc. London **1948**, 1420.

²² *W. Siebert*, Z. Elektrochem. **54**, 517 (1950).

²³ Vgl. etwa *K. W. F. Kohlrausch*, Der Smekal-Raman-Effekt, Erg.-Bd. **1931 bis 1937**, S. 43ff. Berlin: Springer-Verlag, 1938.

α-1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan.

Slade¹³, Bastiansen und Mitarbeiter¹⁸: Punktgruppe C_2 .

Luther und Mitarbeiter¹⁰: Punktgruppe C_2 .

Rasse	Auswahl		Gesamtzahl der Normal-schwingungen	CH-Valenz-schwingungen
	UR	Raman		
<i>A</i>	<i>a</i>	<i>p</i>	25	3
<i>B</i>	<i>a</i>	<i>d p</i>	23	3
Summe			48	6

β-1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan.

Slade¹², Kauer und Mitarbeiter¹⁶, Daasch¹⁷, Bastiansen und Mitarbeiter¹⁸: Punktgruppe D_{3d} .

Luther und Mitarbeiter¹⁰: Punktgruppe D_{3d} .

Rasse	Auswahl		Gesamtzahl der Normal-schwingungen	CH-Valenz-schwingungen
	UR	Raman		
<i>A_{1g}</i>	<i>i a</i>	<i>p</i>	6	1
<i>A_{1u}</i>	<i>i a</i>	<i>v</i>	3	0
<i>A_{2g}</i>	<i>i a</i>	<i>v</i>	2	0
<i>A_{2u}</i>	<i>a</i>	<i>v</i>	5	1
<i>E_g</i>	<i>i a</i>	<i>d p</i>	8	1
<i>E_u</i>	<i>a</i>	<i>v</i>	8	1
Summe			48	6

γ-1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan.

Slade¹²: Punktgruppe C_s .

Bastiansen und Mitarbeiter¹⁸: Punktgruppe C_s .

Luther und Mitarbeiter¹⁰: Punktgruppe C_s .

Rasse	Auswahl		Gesamtzahl der Normal-schwingungen	CH-Valenz-schwingungen
	UR	Raman		
<i>A'</i>	<i>a</i>	<i>p</i>	27	4
<i>A''</i>	<i>a</i>	<i>d p</i>	21	2
Summe			48	6

*δ-1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan.*Slade¹²: Punktgruppe C_{2h} .Bastiansen und Mitarbeiter¹³: Punktgruppe C_s .Luther und Mitarbeiter¹⁰: Punktgruppe C_{2h} . C_{2h}

Rasse	Auswahl		Gesamtzahl der Normal-schwingungen	CH-Valenz-schwingungen
	UR	Raman		
A_g	ia	p	14	2
A_u	a	v	11	1
B_g	ia	dp	10	1
B_u	a	v	13	2
	Summe		48	6

 C_s

Rasse	Auswahl		Gesamtzahl der Normal-schwingungen	CH-Valenz-schwingungen
	UR	Raman		
A'	a	p	27	4
A''	a	dp	21	2
	Summe		48	6

*ε-1,2,3,4,5,6-Hexachlorcyclohexan.*Bastiansen und Mitarbeiter¹³: Punktgruppe C_{2h} .Luther und Mitarbeiter¹⁰: Punktgruppe C_{2v} . C_{2h}

Rasse	Auswahl		Gesamtzahl der Normal-schwingungen	CH-Valenz-schwingungen
	UR	Raman		
A_g	ia	p	14	2
A_u	a	v	11	1
B_g	ia	dp	10	1
B_u	a	v	13	2
	Summe		48	6

C_{2v}

Rasse	Auswahl		Gesamtzahl der Normal-schwingungen	CH-Valenz-schwingungen
	UR	Raman		
A_1	a	p	14	2
A_2	$i a$	$d p$	11	1
B_1	a	$d p$	10	1
B_2	a	$d p$	13	2
	Summe		48	6

Die in den obigen Abzählungstabellen angeführten CH-Valenzschwingungen besitzen Frequenzwerte, die zwischen 2850 und 3000 cm^{-1} liegen. Alle anderen Normalschwingungen der Hexachloreyclohexane liegen im Bereich unter 1500 cm^{-1} ²⁴.

In Tabelle 7 wird für jedes Isomere die Zahl der auf Grund der Abzählung zu erwartenden Ramanlinien und Ultrarotbanden mit Frequenzen unter 1500 cm^{-1} der Zahl der beobachteten Schwingungen gegenübergestellt. Ferner wird die Anzahl der Koinzidenzen von Ramanlinien mit Ultrarotbanden im gleichen Frequenzbereich aufgeführt.

Die Punktgruppen D_{3d} und C_{2h} haben ein Symmetriezentrum; ist ein solches vorhanden, so gilt das sogenannte Alternativverbot, das heißt, alle im Ramaneffekt erlaubten Frequenzen sind im Ultrarot inaktiv und alle im Ultrarot aktiven Frequenzen im Ramaneffekt verboten. Demnach dürften bei diesen Punktgruppen keine Koinzidenzen von Raman- und UR-Frequenzen auftreten.

Prüft man die in Tabelle 7 angegebenen Anzahlen der Koinzidenzen von Ramanfrequenzen mit Ultrarotbanden, so erkennt man an der geringen Zahl der Koinzidenzen, daß ein Symmetriezentrum nur den Molekülen des β - und des ϵ -Isomeren zugeschrieben werden kann. Dies steht in Übereinstimmung mit den von *Bastiansen* und Mitarbeitern¹⁸ vorgeschlagenen Strukturen. Die vier Koinzidenzen, die in den Spektren der beiden genannten Moleküle dennoch auftreten, können als zufällige Entartung einer Raman-aktiven und einer Ultrarot-aktiven Schwingung oder als Durchbrechung der Auswahlregeln erklärt werden. Eine solche Durchbrechung ist besonders bei den Ramanspektren von Feststoffen möglich, da bei diesen durch die relativ starken intermolekularen Kräfte ein Zustand geschaffen wird, der vom idealen Gaszustand stark abweicht, für den allein die Auswahlregeln strenge Gültigkeit besitzen.

²⁴ Vgl. etwa *K. W. F. Kohlrausch*, Ramanspektren, S. 334ff. Leipzig: Akad. Verlagsges. 1943.

Tabelle 7. Anzahlen der Ramanlinien und Ultrarotbanden mit Frequenzen unter 1500 cm^{-1} und Anzahl der Koinzidenzen von Ramanlinien mit Ultrarotbanden.

Isomeres	Symmetrie	Zu erwartende		Beobachtete		Anzahl der Koinzidenzen
		Ramanlinien	UR-Banden	Ramanlinien	UR-Banden	
α	C_2	42	42	21	20	13
β	D_{3d}	12	11	14	14	4
γ	C_s	42	42	24	17	12
δ	C_{2h}	21	21	18	18	11
	C_s	42	42			
ε	C_{2h}	21	21	13	15	4
	C_{2v}	42	42			

Beim Vergleich der beobachteten Linienanzahlen mit der Erwartung muß man im Auge behalten, daß bei den linienreichen Spektren einerseits häufig zufällige Entartungen auftreten und andererseits eine Anzahl Frequenzen wegen ihrer geringen Intensität nicht beobachtet wird. Obwohl durch diesen Sachverhalt eine Schlußfolgerung aus dem Vergleich von erwarteter und beobachteter Linienzahl auf die Struktur erschwert wird, kann man erkennen, daß die höher symmetrischen Strukturen (geringe Linienzahl zu erwarten) dem β - und ε -Isomeren zuzuordnen sind. — Die beim β -Isomeren auftretenden überzähligen Linien sind als Ober- oder Kombinationstöne bzw. Durchbrechung der Auswahlregeln zu erklären.

Zusammenfassend kommt man zu folgendem Ergebnis:

Bei α -, β - und γ -Hexachloreyclohexan bestehen hinsichtlich der Molekülsymmetrie keine Unterschiede zwischen den Vorschlägen der einzelnen Autoren. Auch die Schwingungsspektren stehen mit den vorgeschlagenen Strukturen in Übereinstimmung.

Bei δ - und ε -Hexachloreyclohexan besitzen die von den verschiedenen Autoren vorgeschlagenen Strukturen verschiedene Symmetrie. Die Schwingungsspektren begünstigen hier eindeutig die von Bastiansen und Mitarbeitern¹⁸ angegebenen Konfigurationen der Punktgruppen C_s und C_{2h} .

Eine eingehendere Analyse der Hexachloreyclohexan-Spektren erscheint nicht möglich, solange keine Polarisationsmessungen vorliegen.