

# Über Konfigurationen von Cyclohexan-Substitutionsprodukten mit einem bis zwölf untereinander gleichen Substituenten

Von Doz. Dr. RANDOLPH RIEMSCHNEIDER und cand. rer. nat. P. GESCHKE<sup>1)</sup>

Aus der Freien Universität Berlin-Dahlem

Zur Diskussion der Konfigurationen von Cyclohexan-Substitutionsprodukten werden nicht nur „Sessel“ und „Wanne“, sondern, unter Vernachlässigung der Tatsache, daß der Kohlenstoff-Ring des Cyclohexans nicht eben sein kann, auch ein vereinfachtes „ebenes Modell“ benutzt. An Hand dieser drei Modelle haben wir die für  $C_6H_{11}X$  bis  $C_6X_{12}$  zu erwartenden Anzahlen von Konfigurationen ermittelt und verglichen. Ihre Verteilung auf die einzelnen Stellungsisomeren wird für die Sessel- und implizit auch für die „ebenen“ Konfigurationen angegeben. Ferner werden Ergebnisse von Betrachtungen über eine gedachte „Conversion“ des Cyclohexan-Sessels mitgeteilt.

Die Zahl der theoretisch möglichen, vom Cyclohexan ableitbaren stellungsisomeren Substitutionsprodukte mit einem bis zwölf untereinander gleichen Substituenten,  $C_6H_{11}X$  bis  $C_6X_{12}$ , beträgt 91. Die Anzahl der zu diesen gehörenden Konfigurationen ist wesentlich größer und hängt von der Anordnung ab, die man den Kohlenstoffatomen des Cyclohexan-Ringes zuschreibt. Den 91 Stellungsisomeren entsprechen:

- 381 Konfigurationen, wenn der „ebene“ Cyclohexan-Ring verwendet wird; von diesen sind 145 Spiegelbilder.
- 719 Konfigurationen, wenn als „nichtebener“ Cyclohexan-Ring der Sessel zugrunde gelegt wird; von diesen sind 290 Spiegelbilder.
- 2079 Konfigurationen, wenn mit der Wanne als denkbare „nichtebene“ Form gearbeitet wird; von diesen sind 960 Spiegelbilder.

Die Verteilung der Konfigurationen auf die Cyclohexan-substitutionsprodukte  $C_6H_{11}X$  bis  $C_6X_{12}$  ist aus Tabelle 1 ersichtlich:

X-substit. Cyclohexane	Anzahl der Stellungs- isomeren	Anzahl der Konfigurationen					
		eben		Sessel		Wanne	
		ohne Sp. <sup>a)</sup>	mit Sp. <sup>b)</sup>	ohne Sp. <sup>a)</sup>	mit Sp. <sup>b)</sup>	ohne Sp. <sup>a)</sup>	mit Sp. <sup>b)</sup>
$C_6H_{11}X$	1	1	1	2	2	4	6
$C_6H_{10}X_2$	4	7	9	10	14	22	36
$C_6H_9X_3$	6	12	19	24	38	60	110
$C_6H_8X_4$	12	32	50	54	90	139	255
$C_6H_7X_5$	13	38	66	76	132	208	396
$C_6H_6X_6$	18	55	90	96	166	252	472
$C_6H_5X_7$	13	38	66	76	132	208	396
$C_6H_4X_8$	12	32	50	54	90	139	255
$C_6H_3X_9$	6	12	19	24	38	60	110
$C_6H_2X_{10}$	4	7	9	10	14	22	36
$C_6HX_{11}$	1	1	1	2	2	4	6
$C_6X_{12}$	1	1	1	1	1	1	1
Insgesamt:	91	236	381	429	719	1119	2079

<sup>a)</sup> ohne Sp. bedeutet: Spiegelbilder werden nicht mitgezählt. <sup>b)</sup> mit Sp. bedeutet: Spiegelbilder werden mitgezählt.

Tabelle 1

Zahlenmäßige Verteilung der Stellungsisomeren und ihrer theoretisch möglichen Konfigurationen auf  $C_6H_{11}X$  bis  $C_6X_{12}$

Es gibt zwei Möglichkeiten, um zu den Zahlen der Tabelle 1 zu gelangen: entweder durch Berechnen mit Hilfe mathematischer Formeln oder durch Aufnotieren und Abzählen aller nicht identischen<sup>2)</sup> Konfigurationen. Bis zu einem gewissen Grade sind wir beiden Möglichkeiten nachgegangen.

<sup>1)</sup> Mitt. XXVIII der Reihe „Zur Chemie von Polyhalocyclohexanen“. – Anschrift der Autoren: Berlin-Charlottenburg 9, Boli-varallee 8.

<sup>2)</sup> Dieses Abzählen der nicht identischen Konfigurationen ist notwendig, da sich beim systematischen Aufzeichnen oft nicht vermeiden läßt, daß manche Konfigurationen mehrmals notiert werden.

Zur Berechnung der in Tabelle 1 genannten Zahlen haben wir, ausgehend von den Arbeiten G. Polyas<sup>3,4)</sup>, sieben Formeln, für jede Spalte eine, abgeleitet, und zwar für:

- 1) Stellungsisomere:

$$\frac{1}{768} (f_1^{12} + 6f_1^{10}f_2 + 15f_1^8f_2^2 + 20f_1^6f_2^3 + 27f_1^4f_2^4 + 24f_1^2f_2^5f_3 + 12f_1^2f_2^4f_3^2 + 30f_1^2f_2^3f_3^3 + 48f_1^2f_2^2f_3^4 + 24f_1^2f_2f_3^5 + 45f_1^2f_3^6 + 120f_1f_2^2f_3^4 + 108f_1f_2f_3^5 + 32f_1^2f_3^6 + 64f_1^2f_3^5 + 32f_1^2f_3^4 + 96f_1^2f_3^3 + 64f_{12})$$

- 2) Ebene Konfigurationen, Spiegelbilder nicht mitgezählt:

$$\frac{1}{24} (f_1^{12} + 12f_1^{10}f_2 + 2f_1^8f_2^2 + 6f_1^6f_2^3 + 3f_1^4f_2^4)$$

- 3) Ebene Konfigurationen, Spiegelbilder mitgezählt:

$$\frac{1}{12} (f_1^{12} + 7f_1^{10}f_2 + 2f_1^8f_2^2 + 2f_1^6f_2^3)$$

- 4) Sessel-Konfigurationen, Spiegelbilder nicht mitgezählt:

$$\frac{1}{12} (f_1^{12} + 4f_1^{10}f_2 + 2f_1^8f_2^2 + 3f_1^6f_2^3 + 2f_1^4f_2^4)$$

- 5) Sessel-Konfigurationen, Spiegelbilder mitgezählt:

$$\frac{1}{6} (f_1^{12} + 3f_1^{10}f_2 + 2f_1^8f_2^2)$$

- 6) Wannen-Konfigurationen, Spiegelbilder nicht mitgezählt:

$$\frac{1}{4} (f_1^{12} + 2f_1^{10}f_2 + f_1^8f_2^2)$$

- 7) Wannen-Konfigurationen, Spiegelbilder mitgezählt:

$$\frac{1}{2} (f_1^{12} + f_2^2)$$

Zur Berechnung wird in die betreffende Formel  $(1+x)$  für  $f_1$ ,  $(1+x^2)$  für  $f_2$ ,  $(1+x^3)$  für  $f_3$  usw. eingesetzt und der entstehende Ausdruck nach Potenzen von  $x$  entwickelt<sup>5)</sup>. Die gesuchten Zahlen sind die Koeffizienten der Potenzen von  $x$ , und zwar gibt der Koeffizient von  $x$  die Anzahl der Stellungsisomeren bzw. Konfigurationen von  $C_6H_{11}X$ , der Koeffizient von  $x^2$  die Anzahl der

Stellungsisomeren bzw. Konfigurationen von  $C_6H_{10}X_2$ , der Koeffizient von  $x^3$  die Anzahl der Stellungsisomeren bzw. der Konfigurationen von  $C_6H_9X_3$  an usw.

Als Beispiel sei hier die Berechnung der in Tabelle 1 unter Spalte „Sessel-Konfigurationen ohne Sp.“ genannten Zahlen durchgeführt: Aus der Formel

$$\frac{1}{12} (f_1^{12} + 4f_1^{10}f_2 + 2f_1^8f_2^2 + 3f_1^6f_2^3 + 2f_1^4f_2^4)$$

erhalten wir durch Einsetzen nach obiger Vorschrift den Ausdruck

$$\frac{1}{12} [(1+x)^{12} + 4(1+x^2)^{10} + 2(1+x^3)^8 + 3(1+x)^6 \cdot (1+x^2)^4 + 2(1+x^4)^2]$$

<sup>3)</sup> Z. Kristallogr., Abt. A, 93, 415 [1936].

<sup>4)</sup> Acta math., 68, 145 [1937]. <sup>5)</sup> S. 4, bes. S. 419–422.

Durch eine einfache Zwischenrechnung wird daraus:

$$1 + 2x + 10x^2 + 24x^3 + 54x^4 + 76x^5 + 96x^6 + 76x^7 + 54x^8 + 24x^9 + 10x^{10} + 2x^{11} + x^{12}$$

wobei sich die 1 am Anfang auf das unsubstituierte Cyclohexan bezieht. Die Zwischenrechnung geschieht am besten tabellarisch:

	1	x	x <sup>2</sup>	x <sup>3</sup>	x <sup>4</sup>	x <sup>5</sup>	x <sup>6</sup>	x <sup>7</sup>	x <sup>8</sup>	x <sup>9</sup>	x <sup>10</sup>	x <sup>11</sup>	x <sup>12</sup>
$f_1^{12}$	1	12	66	220	445	792	924	792	445	220	66	12	1
$4f_2^9$	4		24		60		80		60		24		4
$2f_3^8$	2			8			12			8			2
$3f_4^{14}$	3	12	30	60	93	120	132	120	93	60	30	12	3
$2f_5^6$	2						4						2
	12	24	120	288	648	912	1152	912	648	288	120	24	12
	1	2	10	24	54	76	96	76	54	24	10	2	1

Durch entsprechendes Einsetzen<sup>6)</sup> lassen sich die oben genannten Formeln auch zur Berechnung der Anzahl der Stellungsisomeren bzw. Konfigurationen von Cyclohexan-Substitutionsprodukten mit einem bis zwölf untereinander verschiedenen Substituenten verwenden.

Die in Tabelle 1 angegebene Verteilung von Konfigurationen auf die Summenformeln  $C_6H_{11}X$  bis  $C_6H_{12}$  ist für den Chemiker nicht ausreichend; ihn interessiert vor allem, wieviel Konfigurationen von jedem der 91 Stellungsisomeren möglich und welche davon Spiegelbilder sind. Da sich diese Fragen nach unserer augenblicklichen Kenntnis mathematisch nicht beantworten lassen, haben wir sämtliche theoretisch möglichen ebenen und Sessel-Konfigurationen durch Aufzeichnen und Auszählen ermittelt und diese in Form von Konfigurationskatalogen aufgeschrieben<sup>7)</sup>. Da eine Wannen-Konfiguration bisher experimentell nicht nachgewiesen werden konnte, wurde auf einen vollständigen Wannen-Katalog verzichtet. Das aus den Katalogen für ebene und Sessel-Konfigurationen von  $C_6H_{11}X$  bis  $C_6H_{12}$  gewonnene Zahlenmaterial ist in Tabelle 2 zusammengestellt. Um zu verstehen, daß in der Spalte „Körper+Gegenkörper“ dieser Tabelle die Zahlen für die ebenen Konfigurationen mit enthalten sind, muß man mit dem Begriff der „Conversion“ vertraut sein. Bei der „Conversion“ des Kohlenstoff-Ringes von Sessel-Konfigurationen im Sinne von O. Hassel<sup>8)</sup> „gehen je zwei Konfigurationen ineinander über“ (Abb. 1). Die Partner eines solchen Konfigurationspaares haben wir als Körper und Gegenkörper<sup>9)</sup> bezeichnet. Beim eingehenden Durchdenken der Übergangsmöglichkeiten fanden wir, daß eine solche angenom-

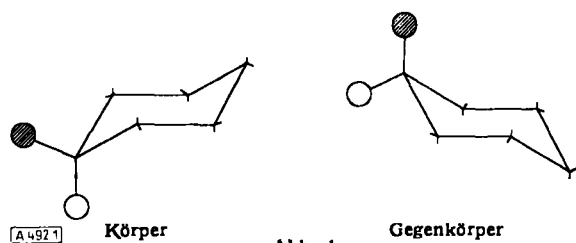


Abb. 1

„Conversion“ eines  $C_6H_{10}X_2$  mit den Substituenten in 1,1-Stellung. Um die Änderung der Lage jedes einzelnen Substituenten besser verfolgen zu können, wurde einer der Substituenten schraffiert.

<sup>6)</sup> Sind die Substituenten X, Y, Z, ... vorhanden, die voneinander unabhängig sein sollen, so wird  $(1 + x + y + z + \dots)$  für  $f_1$ ,  $(1 + x^2 + y^2 + z^2 + \dots)$  für  $f_2$ ,  $(1 + x^3 + y^3 + z^3 + \dots)$  für  $f_3$  usw. eingesetzt, nach Potenzen entwickelt und mit den Koeffizienten die Anzahl der entsprechenden Konfigurationen erhalten (z. B. gibt der Koeffizient von  $x^2 y^2 z^2$  die Anzahl der Konfigurationen von  $C_6H_9X_2Y_2Z_2$  an).

<sup>7)</sup> Vgl. Mitt. XXI dieser Reihe.

<sup>8)</sup> Tidsskr. Kjem. Bergv. Met. 6, 96 [1946]; Research 3, 504 [1950]. Vgl. auch „Version“ bei H. Sachse, Ber. dtsch. chem. Ges. 23, 1367 [1890].

<sup>9)</sup> In früheren Arbeiten<sup>10)</sup> erste und zweite Sesselform genannt. Wir ziehen diese Bezeichnung jetzt vor, da es nur einen Cyclohexan-Sessel gibt.

<sup>10)</sup> Mitt. XVI u. XVIII, Mh. Chem. 83, 1281–1288 [1952].

mene „Conversion“ theoretisch zu sechs verschiedenen Ergebnissen führen kann. In der folgenden Übersicht wurden die symmetrischen Konfigurationen und die Antipodenpaare der asymmetrischen Konfigurationen mit römischen Zahlen, die Partner eines Antipodenpaares zusätzlich mit a und b bezeichnet, und zwar die Bilder mit a und die Spiegelbilder mit b:

Überführung einer symmetrischen Konfiguration	Anzahl der Konf.-Paare
1) in sich selbst:	
Körper (I) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (I) .....	17
2) in eine andere symmetrische Konfiguration:	
Körper (II) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (III) .....	61
Überführung einer asymmetrischen Konfiguration	
3) in sich selbst:	
Körper (IVa) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (IVa) bzw. Körper (IVb) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (IVb) .....	26
4) in eine andere asymmetrische Konfiguration:	
a) Körper und Gegenkörper sind Bild und Spiegelbild verschiedener Antipodenpaare:	
Körper (Va) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (Vib) bzw. Körper (Vb) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (Vla) .....	264
b) Körper und Gegenkörper sind Bild und Spiegelbild des gleichen Antipodenpaares:	
Körper (VIIa) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (VIIb) .....	13
c) Körper und Gegenkörper sind beide Bilder oder beide Spiegelbilder verschiedener Antipodenpaare:	
Körper (VIIIa) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (IXa) bzw. Körper (VIIIb) $\rightleftharpoons$ Gegenkörper (IXb) .....	0
	381

Lfd. Nr.	Substituenten		Körper B. (+ Sp.) <sup>a)</sup>	+ Gegenkörper B. (+ Sp.) <sup>b)</sup>	Konfigurationen	
	Zahl	Stellung			B. (+ Sp.) <sup>c)</sup>	Gesamtzahl
1	1	1	1	+ 1	2	2
2	2	1,1	1		1	1
3		1,2	2 (+1)	+ 1 (+2)	3 (+3)	6
4		1,3	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
5		1,4	2	+ 1	3	3
6	3	1,1,2	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
7		1,1,3	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
8		1,1,4	1	+ 1	2	2
9		1,2,3	3 (+1)	+ 3 (+1)	6 (+2)	8
10		1,2,4	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
11		1,3,5	2	+ 2	4	4
12	4	1,1,2,2	1	+ (+1)	1 (+1)	2
13		1,1,2,3	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
14		1,1,2,4	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
15		1,1,2,5	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
16		1,1,2,6	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
17		1,1,3,3	1		1	1
18		1,1,3,4	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
19		1,1,3,5	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
20		1,1,4,4	1		1	1
21		1,2,3,4	6 (+4)	+ 4 (+6)	10 (+10)	20
22		1,2,3,5	6 (+2)	+ 6 (+2)	12 (+4)	16
23		1,2,4,5	5 (+2)	+ 2 (+1)	7 (+3)	10
24	5	1,1,2,2,3	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
25		1,1,2,2,4	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
26		1,1,2,3,3	1	+ 1	2	2
27		1,1,2,3,4	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
28		1,1,2,3,5	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
29		1,1,2,3,6	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
30		1,1,2,4,4	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
31		1,1,2,4,5	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
32		1,1,2,4,6	3 (+1)	+ 3 (+1)	6 (+2)	8
33		1,1,3,3,4	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
34		1,1,3,3,5	1	+ 1	2	2
35		1,1,3,4,5	3 (+1)	+ 3 (+1)	6 (+2)	8
36		1,2,3,4,5	10 (+6)	+ 10 (+6)	20 (+12)	32

<sup>a)</sup> Unter B. zählen wir die Bilder der asymmetrischen Konfigurationen und dazu die symmetrischen Konfigurationen, bei denen wir ja keine Bilder und Spiegelbilder unterscheiden können.

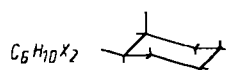
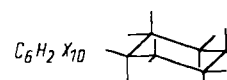
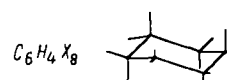
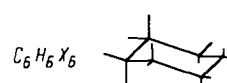
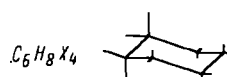
<sup>b)</sup> Die Spalte „Körper B. (+ Sp.)“ gibt gleichzeitig die Zahlen der theoretisch möglichen ebenen Konfigurationen an.

<sup>c)</sup> Unter (+ Sp.) sind die Spiegelbilder gesondert aufgeführt, womit also gleichzeitig die Anzahl der Antipodenpaare angegeben ist. Vgl. auch <sup>a)</sup>.

Tabelle 2. Zahlenmäßige Verteilung der 719 Sessel-Konfigurationen von  $C_6H_{11}X$  bis  $C_6H_{12}$  auf die 91 Stellungsisomeren und auf Körper und Gegenkörper, unter getrennter Berücksichtigung der Bilder (B.) und Spiegelbilder (Sp.).

Fortsetzung von Tabelle 2

Lfd. Nr.	Substituenten		Körper B. (+ Sp.) <sup>b, c)</sup>	+ Gegenkörper B. (+ Sp.) <sup>b)</sup>	Konfigurationen	
	Zahl	Stellung			B. (+ Sp.) <sup>c)</sup>	Gesamtzahl
37	6	1.1.2.2.3.3	1		1	1
38		1.1.2.2.3.4	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
39		1.1.2.2.3.5	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
40		1.1.2.2.3.6	2 (+1)	+ 1 (+2)	3 (+3)	6
41		1.1.2.2.4.4	1	+ (+1)	1 (+1)	2
42		1.1.2.2.4.5	2 (+1)	+ 1 (+2)	3 (+3)	6
43		1.1.2.3.3.4	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
44		1.1.2.3.3.5	2	+ 2	4	4
45		1.1.2.3.4.4	2 (+1)	+ 1 (+2)	3 (+3)	6
46		1.1.2.3.4.5	8 (+8)	+ 8 (+8)	16 (+16)	32
47		1.1.2.3.5.5	8 (+8)	+ 8 (+8)	16 (+16)	32
48		1.1.3.3.4.5	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
49		1.1.2.3.5.6	6 (+4)	+ 4 (+2)	10 (+6)	16
50		1.1.2.4.4.5	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
51		1.1.2.4.4.6	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
52		1.1.2.4.5.5	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
53		1.1.3.3.5.5	1		1	1
54		1.2.3.4.5.6	8 (+1)	+ 5 (+2)	13 (+3)	16
55	7	1.1.2.2.3.3.4	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
56		1.1.2.2.3.3.5	1	+ 1	2	2
57		1.1.2.2.3.4.4	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
58		1.1.2.2.3.4.5	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
59		1.1.2.2.3.4.6	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
60		1.1.2.2.3.5.5	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
61		1.1.2.2.4.4.5	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
62		1.1.2.3.3.4.5	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
63		1.1.2.3.3.4.6	3 (+1)	+ 3 (+1)	6 (+2)	8
64		1.1.2.3.3.5.5	1	+ 1	2	2
65		1.1.2.3.4.4.5	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
66		1.1.2.3.4.5.5	3 (+1)	+ 3 (+1)	6 (+2)	8
67		1.1.2.3.4.5.6	10 (+6)	+ 10 (+6)	20 (+12)	32
68	8	1.1.2.2.3.3.4.4	1	+ (+1)	1 (+1)	2
69		1.1.2.2.3.3.4.5	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
70		1.1.2.2.3.3.4.6	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
71		1.1.2.2.3.3.5.5	1		1	1
72		1.1.2.2.3.4.4.5	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
73		1.1.2.2.3.4.4.6	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
74		1.1.2.2.3.4.5.5	2 (+2)	+ 2 (+2)	4 (+4)	8
75		1.1.2.2.3.4.5.6	6 (+4)	+ 4 (+6)	10 (+10)	20
76		1.1.2.2.4.4.5.5	1		1	1
77		1.1.2.3.3.4.5.5	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
78		1.1.2.3.3.4.5.6	6 (+2)	+ 6 (+2)	12 (+4)	16
79		1.1.2.3.4.4.5.6	5 (+2)	+ 2 (+1)	7 (+3)	10
80	9	1.1.2.2.3.3.4.4.5	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
81		1.1.2.2.3.3.4.5.5	1 (+1)	+ 1 (+1)	2 (+2)	4
82		1.1.2.2.3.3.4.5.6	3 (+1)	+ 3 (+1)	6 (+2)	8
83		1.1.2.2.3.4.4.5.5	1	+ 1	2	2
84		1.1.2.2.3.4.4.5.6	4 (+4)	+ 4 (+4)	8 (+8)	16
85		1.1.2.3.3.4.5.5.6	2	+ 2	4	4
86	10	1.1.2.2.3.3.4.4.5.5	1		1	1
87		1.1.2.2.3.3.4.4.5.6	2 (+1)	+ 1 (+2)	3 (+3)	6
88		1.1.2.2.3.3.4.5.5.6	2 (+1)	+ 1	3 (+1)	4
89		1.1.2.2.3.4.4.5.5.6	2	+ 1	3	3
90	11	1.1.2.2.3.3.4.4.5.5.6	1	+ 1	2	2
91	12	1.1.2.2.3.3.4.4.5.5.6.6	1		1	1

Tabelle 3  
Die Bilder der 13 Konfigurationspaare, die gleichzeitig Antipodenpaare sind<sup>a)</sup>.

[A 492 3]

Zu welchen 11 Stellungsisomeren diese 13 Konfigurationspaare gehören, ist auch aus Tabelle 2 zu entnehmen: für die betreffenden Stellungsisomeren ist die Zahl der in Klammern angegebenen Spiegelbilder unter „Gegenkörper“ größer als unter „Körper“.

<sup>a)</sup> Nach ebener Darstellung sind keine optischen Antipoden zu erwarten.

Wie oft die genannten Übergangsmöglichkeiten für die Konfigurationen der Cyclohexan-Substitutionsprodukte mit einem bis zwölf untereinander gleichen Substituenten theoretisch zu erwarten sind, wurde unter „Anzahl der Konfigurationspaare (Konf.-Paare)“ angegeben. Daß von diesen Übergangsmöglichkeiten die letztgenannte nicht zu erwarten ist, wird durch unsere Festlegung der Bilder und Spiegelbilder bedingt<sup>7)</sup>. Die 13 Konfigurationspaare, für die Körper und Gegenkörper Bild und Spiegelbild des gleichen Antipodenpaares sind, beanspruchen besonderes Interesse (vgl. Tab. 3). Die Summe aller oben genannten Sessel-Konfigurationspaare beträgt 381 und ist gleichzeitig die Anzahl der theoretisch möglichen ebenen Konfigurationen (vgl. Tab. 1, „ebene Konfigurationen mit Sp.“). Ebenso entspricht jedem einzelnen Sessel-Konfigurationspaar eine ebene Konfiguration<sup>7)</sup>.

Wie bereits erwähnt, können wir der Tabelle 2 nicht nur entnehmen, wieviel Sessel-Konfigurationen, sondern auch wieviel ebene Konfigurationen zu jedem einzelnen Stellungsisomeren gehören: die Zahlen für die zuletzt genannten Konfigurationen sind in Tabelle 2 unter „Körper“ zu finden, und zwar deshalb, weil die Zahl der Körper mit derjenigen der Sessel-Konfigurationspaare identisch ist, da wir in den Fällen, in denen eine Sessel-Konfiguration bei „Conversion“ in sich selbst übergeht<sup>11)</sup>, diese als Körper gezählt haben.

Zu welchen Ergebnissen die in Analogie zu dieser Arbeit für Substitutionsprodukte von Dioxanen, Cyclohexen und verwandten Verbindungen angestellten Betrachtungen geführt haben, wird an anderer Stelle erörtert werden.

Eingeg. am 10. März 1953 [A 492]

<sup>11)</sup> Vgl. Übersicht S. 391.