



Fig. 3. Patterson projection on 010.

reciprocal-lattice section the orientation of its transform. Normalization of the observed intensities with respect to

the square of the Fourier transform of such a group might allow its approximate location in the unit cell by means of the modified Patterson function.

It may be pointed out that it is an important advantage of the above method that a knowledge of the absolute scale is not required, although, incidentally the possibility of putting the $F(S)$'s on absolute scale is clearly implied in this method.

It is also possible to use an artificial temperature factor which will reduce both the effects of series termination and of errors in the coefficients without an appreciable loss of detail since the intermolecular vectors are large and their number is small.

We are indebted to Prof. A. L. Patterson for careful reading of the manuscript and helpful criticism.

References

- BOOTH, A. D. (1948). *Fourier Technique in X-ray Organic Structure Analysis*. Cambridge: University Press.
 GIGLIO, E. & RIPAMONTI, A. (To be published).
 LIQUORI, A. M. & RIPAMONTI, A. (1956). *Ric. Scie.* **26**, 1445.
 PATTERSON, A. L. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 339.
 TAYLOR, C. A. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 757.
 TAYLOR, C. A. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 749.

Acta Cryst. (1958). **11**, 824

Atomic scattering factors for wolfram. By EDGAR L. EICHORN, *Applied Mathematics Department, Electro Data Division of Burroughs, Pasadena, California, U.S.A.*

(Received 11 July 1958)

Integration of the selfconsistent wave field of wolfram, computed on the M.I.T. analog computer in 1936

Table 1. *Atomic scattering factors for wolfram*

cm.10 ⁻⁸ sin θ/λ	Selfconsistent field without exchange ($Z = 74$, 14 shells)				
	0.00	0.02	0.04	0.06	0.08
0.0	74.00	73.77	73.04	71.92	70.59
0.1	69.07	67.56	66.04	64.52	63.05
0.2	61.58	60.14	58.72	57.33	55.95
0.3	54.59	53.27	51.97	50.71	49.47
0.4	48.27	47.12	45.99	44.91	43.86
0.5	42.83	41.83	40.89	39.93	39.05
0.6	38.12	37.28	36.43	35.62	34.83
0.7	34.06	33.30	32.56	31.87	31.14
0.8	30.46	29.82	29.19	28.56	27.95
0.9	27.36	26.79	26.24	25.69	25.18
1.0	24.68	24.20	23.73	23.32	22.87
1.1	22.45	22.05	21.70	21.32	20.98
1.2	20.62	20.30	20.00	19.69	19.41
1.3	19.15	18.88	18.63	18.38	18.14
1.4	17.91	17.70	17.49	17.28	17.09
1.5	16.91	16.71	16.57	16.40	16.22
1.6	16.07	15.93	15.78	15.63	15.48
1.7	15.36	15.23	15.09	14.98	14.84
1.8	14.73	—	—	—	—

(Manning & Millman, 1936), has now been carried out by a general wave field integration routine programmed for a fast new ferrite core storage computer, the Burroughs type 220. The algorithms utilized are the same as set out in a previous paper describing the computation of atomic form factors for the monovalent molybdenum ion on the Burroughs type 205 machine (Eichhorn, 1957). The same fine mesh in $\sigma = \sin \theta/\lambda$ was applied. The results are shown in Table 1.

The present curve (*ELLE*) was compared to the scattering curve of wolfram listed in the original edition of the Internationale Tabellen, part II (*TF*) and derived from a Thomas-Fermi model. The comparison was then extended to the scattering values obtained for wolfram by application of the same model taking into account spin energy exchange (*TFD*), which have been listed recently (Thomas & Umeda, 1957).

The *TF* curve is lower than the *ELLE* curve with a maximum discrepancy of almost 6% up to $\sigma = 0.85$; the two curves then intersect and the *TF* curve is then above the *ELLE* curve, with a maximum difference of approximately 4%. That is to say that the *ELLE* curve appears to be a 'sharpened' version of the *TF* curve. The *TFD* curve has the same qualitative deviations from the new scattering curve, but the percentwise discrepancies are much less, and in some points probably not

significant. The intersection point of the *TFD* and *ELE* curves is also at a lower σ value, $\sigma = 0.65$. Maximum discrepancies are of the order of 1%.

The computation of Table 1 took 1 hour and 53 minutes for the 14 shells of the element *W*, comprising 91 integrations of each shell.

Acta Cryst. (1958). **11**, 825

Kristallographische Daten für Hexahelicen, C₂₆H₁₆. Von THEO HAHN, *Mineralogisches Institut der Universität, Frankfurt/Main, Deutschland*

Eingegangen am 22. Juli 1958

Hexahelicen (C₂₆H₁₆ = C_{4n+2}H_{2n+4} für $n = 6$) besteht aus 6 Benzolkernen, die eine Helix bilden mit gerade einer vollen Drehung und einer Ganghöhe von weniger als der Dicke eines aromatischen Moleküls. Es gibt zwei optische Isomere, entsprechend dem Drehungssinn der Schraube. Diese Nicht-Planarität aromatischer Moleküle auf Grund von 'Intramolecular overcrowding' (Newman & Mitarb., 1940, 1947, 1948, 1956; Bell & Waring, 1949; Harnik *et al.*, 1954) (d.h. Annäherung nicht gebundener C Atome auf 3,0 Å und weniger) ist bereits für Verbindungen mit niedrigerer Anzahl der Benzolkerne n strukturell bekannt, nämlich bei 3:4 Benzphenanthren (C₁₈H₁₂, $n = 4$) (Herbstein & Schmidt, 1954a) und 3:4-5:6 Dibenzphenanthren (C₂₂H₁₄, $n = 5$) (McIntosh, Robertson & Vand, 1952) sowie bei Tetrabenznaphthalin (C₂₈H₁₈, $n = 6$) (Herbstein & Schmidt, 1954b), einem Isomeren des Hexahelicens. Trotz der Verbiegung der Moleküle wurde eine starke Ähnlichkeit in Bindungslängen und -winkeln mit ebenen aromatischen Verbindungen gefunden. Dementsprechend wäre beim Hexahelicen eine genaue Kenntnis der Molekülstruktur und ein Vergleich mit dem ebenen Coronen (C₂₄H₁₂) (Robertson & White, 1945) von Interesse, insbesondere wegen der ausgezeichneten Zahl $n = 6$.

Die Substanz wurde von Herrn Dr M. S. Newman (Ohio State University, Columbus, Ohio, U.S.A.) hergestellt (Newman & Lednicer, 1956) und uns durch Herrn Prof. Dr A. Magnus (Physikalisch-chemisches Institut der Universität Frankfurt am Main) zugänglich gemacht. Die Kristalle sind feine Blättchen nach (001) mit einer guten Spaltbarkeit parallel der *a*-Achse. Sie sind oft verbogen und verwachsen und ausserordentlich spröde. Sie zeigen ein sehr geringes Streuvermögen für Röntgenstrahlen. Mittels Dreh-Weissenberg- und Precession-Aufnahmen (Cu *K* α -Strahlung, $\lambda = 1,5418$ Å)

References

- EICHHORN, E. L. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 717.
 MANNING, M. F. & MILLMAN, J. (1936). *Phys. Rev.* **49**, 848.
 THOMAS, L. H. & UMEDA, K. (1957). *J. Chem. Phys.* **26**, 293.

wurden die rhombische Symmetrie und die Auslöschung charakteristisch für die nicht zentrosymmetrische Raumgruppe *P*2₁2₁2₁ festgestellt. Die Achsen sind:

$$a = 7,48 \pm 0,02, \quad b = 12,99 \pm 0,04, \quad c = 17,88 \pm 0,04 \text{ \AA.}$$

Dichte gemessen: 1,268 g.cm.⁻³. Dichte berechnet: 1,256 g.cm.⁻³ mit 4 Molekülen pro Zelle, die also in der allgemeinen Punktlage vorliegen müssen. Das Achsenverhältnis $b:a = 1,74$ ist nahe dem Wert für ein orthorhombisches Gitter, 1,73.

Das optische Drehungsvermögen der Substanz ist ausserordentlich hoch. Newman & Lednicer (1956) fanden für α_D^{25} 3640° und 3707° für die (-) bzw. die (+) Form.

Mein Dank gilt der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Bereitstellung von Apparaten.

Literaturhinweise

- BELL, F. & WARING, D. H. (1949). *J. Chem. Soc.*, p. 2689.
 HARNIK, E., HERBSTEIN, F. H., SCHMIDT, G. M. J. & HIRSHFELD, F. L. (1954). *J. Chem. Soc.* p. 3288.
 HERBSTEIN, F. H. & SCHMIDT, G. M. J. (1954a). *J. Chem. Soc.*, p. 3302.
 HERBSTEIN, F. H. & SCHMIDT, G. M. J. (1954b). *J. Chem. Soc.*, p. 3314.
 MCINTOSH, A. O., ROBERTSON, J. M. & VAND, V. (1952). *Nature, Lond.* **169**, 322.
 NEWMAN, M. S. & LEDNICER, D. (1956). *J. Amer. Chem. Soc.* **78**, 4765.
 NEWMAN, M. S. & Mitarb. (1940, 1947, 1948, 1956). *J. Amer. Chem. Soc.* **62**, 2295; **69**, 3023; **70**, 1913; **78**, 450.
 ROBERTSON, J. M. & WHITE, J. G. (1945). *J. Chem. Soc.*, p. 607.

Acta Cryst. (1958). **11**, 825

Zur Struktur des Kupfernitrates Cu(NO₃)₂ · 1,5H₂O. Von K. DORNBERGER-SCHIFF und JANUSZ LECIEJEWICZ, *Arbeitsstelle für Kristallstrukturanalyse der Deutschen Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Berlin-Adlershof, An der Rudower Chaussee, Deutschland*

(Eingegangen am 16. Juli 1958)

Die Struktur des Kupfernitrates Cu(NO₃)₂ · 1,5H₂O wurde in Zusammenhang mit dem Problem der Wasserstoff-

bindung in organischen Hydraten untersucht. Aus einer Kupfernitratlösung wurden durch langsames Abkühlen