

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, $C_{26}H_{16}$. Von THEO HAHN, *Mineralogisches Institut der Universität, Frankfurt/Main, Deutschland*

Eingegangen am 22. Juli 1958

Hexahelicen ($C_{26}H_{16} = C_{4n+2}H_{2n+4}$ 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 ($C_{18}H_{12}$, $n = 4$) (Herbstein & Schmidt, 1954a) und 3:4-5:6 Dibenzphenanthren ($C_{22}H_{14}$, $n = 5$) (McIntosh, Robertson & Vand, 1952) sowie bei Tetrabenznaphthalin ($C_{28}H_{18}$, $n = 6$) (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 ($C_{24}H_{12}$) (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 $K\alpha$ -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 $P2_12_12_1$ 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 $Cu(NO_3)_2 \cdot 1,5H_2O$. 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 $Cu(NO_3)_2 \cdot 1,5H_2O$ wurde in Zusammenhang mit dem Problem der Wasserstoff-

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

von 40 °C. auf 25 °C. grosse tafelige Kristalle erhalten. Aus diesen hygroskopischen Kristallen wurden Zylinder von ungefähr 1 mm. Durchmesser mit der Zylinderachse parallel zur monoklinen Achse ausgeschnitten. Die Zylinder wurden solange der Atmosphäre ausgesetzt, bis ihr Durchmesser auf 0,1 bis 0,2 mm. abgenommen hatte und dann schnell in Lindemannglas-Kapillaren eingeschmolzen. Aus Schwenk- und Weissenbergaufnahmen (Cu $K\alpha$ und Mo $K\alpha$ Strahlung) um zwei verschiedene Achsen wurden die Gitterkonstanten zu

$$a = 16,7, \quad b = 4,90, \quad c = 15,4 \text{ \AA}, \quad \beta = 88,0^\circ$$

bestimmt und die in der Literatur (siehe z. B. Mellor, 1952) angegebene monokline Symmetrie bestätigt.

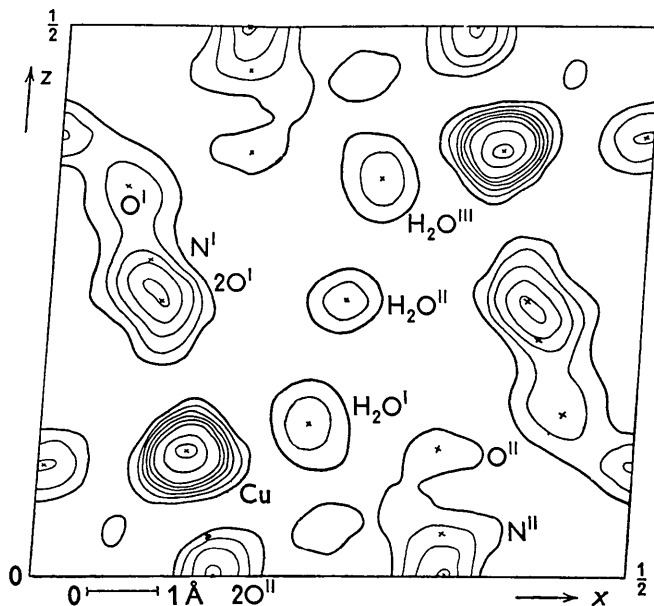


Fig. 1. Projektion der Elektronendichte längs b .

Es ergeben sich die folgenden Auslöschungsregeln:

$$\begin{aligned} (hkl) & \text{ nur mit } h+k+l = 2n \text{ vorhanden,} \\ (h0l) & \text{ nur mit } l = 2n \text{ vorhanden } (h = 2n). \end{aligned}$$

Damit verträglich sind die Raumgruppen Ic und $I2/c$, die den Raumgruppen Cc und $C2/c$ bei anderer Achsenwahl entsprechen. Die Gitterkonstanten der flächenzentrierten Zelle sind:

$$a = 22,2, \quad b = 4,90, \quad c = 15,4 \text{ \AA}, \quad \beta = 48,0^\circ.$$

Es ergab sich $Z = 8$ und $d_{\text{röntgen.}} = 2,58 \text{ g.cm.}^{-3}$ im Vergleich zu $d_{\text{pykn.}} = 2,63 \text{ g.cm.}^{-3}$.

Die Prüfung der Struktur auf Symmetriezentrum nach dem Verfahren von Howells, Philips & Rogers (1950) ergab für die $h0l$ -Reflexe eine hyperzentrische Intensitätsverteilung. Dies, ebenso wie das negative Ergebnis der für verschiedene Richtungen durchgeführten Prüfungen auf pyroelektrischen Effekt lässt auf die Raumgruppe $C2/c$ schließen. Aus der Patterson-Projektion $P_0(u, w)$ und der verallgemeinerten Projektion $P_1(u, w)$ ergibt sich die Lage des Kupferatoms. Fig. 1 zeigt die nach zwei Schritten erhaltene Elektronendichteprojektion.

Die Koordinaten des Cu ergeben sich zu:

$$x = 0,12, \quad y = 0, \quad z = 0,11.$$

Die Koordinaten der anderen Atome sind noch sehr ungenau, wie sich schon aus dem R -Faktor $R = 0,35$ ersehen lässt. Die Arbeit wird an anderer Stelle fortgesetzt.

Literatur

- MELLOR, J. W. (1952). *A Comprehensive Treatise on Inorganic and Theoretical Chemistry*, vol. 3, p. 281. London.
- HOWELLS, E. R., PHILIPS, D. C. & ROGERS, D. (1950). *Acta Cryst.* **3**, 210.

Notes and News

Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. Copy should be sent direct to the Editor (P. P. Ewald, Polytechnic Institute of Brooklyn, 333 Jay Street, Brooklyn 1, N. Y., U. S. A.) or to the Technical Editor (R. W. Asmussen, Chemical Laboratory B of the Technical University of Denmark, Sølvgade 83, Copenhagen K, Denmark)

International Union of Crystallography

Commission on Crystallographic Apparatus

This Commission of the International Union of Crystallography announces two conferences to be held at Karolinska Institutet, Stockholm, Sweden.

June 11, 1959—Precision Lattice Parameter Determination.

June 12, 1959—Counter Methods for Crystal Structure Analysis. Attendance will be limited to 50 people actively engaged in either of these fields. Those wishing to attend should notify the Chairman, Dr William Parrish, Philips Laboratories, Irvington-on-Hudson, New York, U.S.A., no later than March 1, 1959. Those wishing to present

a paper should send title and preliminary abstract to the Chairman by December 1, 1958.

The second international symposium on *X-ray Microscopy and X-ray Microanalysis* will be held at the same place, June 15–17, 1959. Papers on X-ray absorption, emission, and diffraction as microanalytical tools in biological and other fields will be welcome (date line for titles 1 December, 1958, for abstracts 15 February, 1959, for full publishable text 17 June, 1959). For registration forms and further information: Dr G. Höglund, Institutionen för Medicinsk Fysik, Karolinska Institutet, Stockholm 60, Sweden.

Hotel reservations for the meetings may be arranged through: Reso Travel Bureau, Barnhusgatan 16, Stockholm 1, Sweden, before March 1, 1959.