

significant. The intersection point of the *TFD* and *ELE* curves is also at a lower  $\sigma$  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<sub>26</sub>H<sub>16</sub>.** Von THEO HAHN, *Mineralogisches Institut der Universität, Frankfurt/Main, Deutschland*

*Eingegangen am 22. Juli 1958*

Hexahelicen (C<sub>26</sub>H<sub>16</sub> = C<sub>4n+2</sub>H<sub>2n+4</sub> 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<sub>18</sub>H<sub>12</sub>,  $n = 4$ ) (Herbstein & Schmidt, 1954a) und 3:4-5:6 Dibenzphenanthren (C<sub>22</sub>H<sub>14</sub>,  $n = 5$ ) (McIntosh, Robertson & Vand, 1952) sowie bei Tetrabenznaphthalin (C<sub>28</sub>H<sub>18</sub>,  $n = 6$ ) (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<sub>24</sub>H<sub>12</sub>) (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 *P*2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub> 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.<sup>-3</sup>. Dichte berechnet: 1,256 g.cm.<sup>-3</sup> 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  $\alpha_D^{25}$  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<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · 1,5H<sub>2</sub>O.** 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<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · 1,5H<sub>2</sub>O wurde in Zusammenhang mit dem Problem der Wasserstoff-

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