

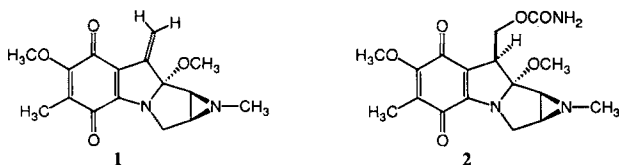
- [7] Einige I-I-Abstände [Å]: I<sub>2</sub> 2.67 [8], Ph<sub>3</sub>P-I-I 3.2 [9], tBu<sub>3</sub>P-I-I 3.32 [10], Ph<sub>3</sub>As-I-I 3.0 [11], [(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>]I<sub>3</sub> 2.82–3.50\* [12], (PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> 2.85–3.74\* [12], van-der-Waals-Radius 4.3 [7]. Die mit \* markierten Verbindungen enthalten Iod-Iod-Bindungen unterschiedlicher Länge.
- [8] F. A. Cotton, G. Wilkinson, *Advanced Inorganic Chemistry*, 5. Aufl., Wiley-Interscience, New York, 1988; *Anorganische Chemie*, 4. Aufl., Verlag Chemie, Weinheim, 1985.
- [9] S. M. Godfrey, D. G. Kelly, A. G. Mackie, C. A. McAuliffe, R. G. Pritchard, S. M. Watson, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* 1991, 1163.
- [10] W. W. du Mont, M. Batcher, S. Pohl, W. Saak, *Angew. Chem.* 1987, 99, 945; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 1987, 26, 912.
- [11] C. A. McAuliffe, B. Beagley, G. A. Gott, A. G. Mackie, P. P. MacRory, R. G. Pritchard, *Angew. Chem.* 1987, 99, 237; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 1987, 26, 264.
- [12] F. A. Cotton, P. Kibala, *J. Am. Chem. Soc.* 1987, 109, 3309.
- [13] Wir danken einem der Gutachter, der dieses zusätzliche Experiment anregte.

## Die Totalsynthese von (±)-Mitomycin K\*\*

Von John W. Benbow, Gayle K. Schulte  
und Samuel J. Danishefsky\*

Die Faszination, die von Mitomycinen und verwandten Alkaloiden mit ebenfalls einer Aziridin-Einheit nun schon seit geraumer Zeit ausgeht, hält unvermindert an<sup>[1, 2]</sup>. Dies liegt an der medizinischen Bedeutung zumindest einer dieser Verbindungen, Mitomycin C, das ein Cytostaticum ist<sup>[3]</sup>, und an ihren neuartigen Molekülstrukturen, die auf engem Raum eine Fülle funktioneller Gruppen vereinen<sup>[2]</sup>. Eine große Zahl von Arbeitsgruppen hat sich mit der Isolierung<sup>[1, 4]</sup>, der Strukturaufklärung<sup>[5]</sup>, der Reaktivität<sup>[6]</sup>, den Festkörperstrukturen<sup>[7]</sup>, der Synthese<sup>[8]</sup> und der bioorganischen Chemie<sup>[9]</sup> verschiedener Mitomycine beschäftigt.

Eine der interessanteren Arten von Mitomycinen sind zweifelsohne die, in denen wie in Mitomycin K 1 in 9-Stellung eine Methylengruppe vorhanden ist, ein weiteres potentiell reaktives Zentrum. Diese Methylengruppe fehlt in bereits länger bekannten Mitomycinen wie *N*-Methylmitomycin A 2, die mit Mitomycin K verwandt sind.



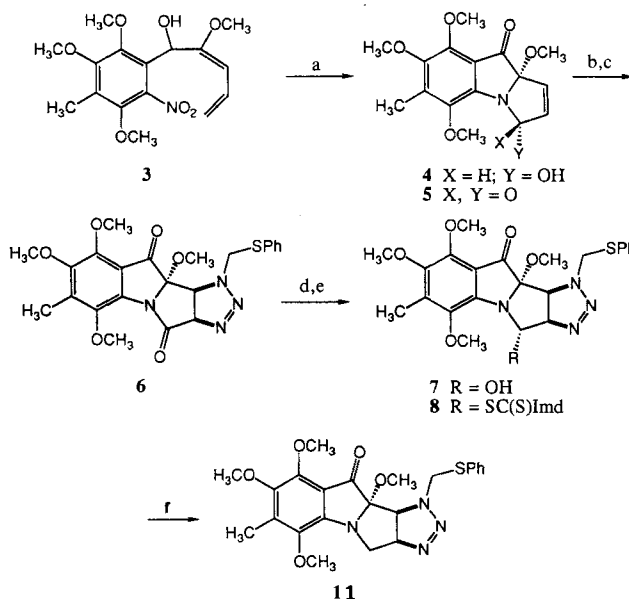
Totalsynthesen der eher weit verbreiteten Mitomycine vom Typ 2 gelangen Fukuyama und Kishi et al.<sup>[8e–h]</sup>, eine Totalsynthese eines Mitomycins vom Typ 1 wurde jedoch noch nicht durchgeführt. Diese Verbindungen sind für uns aufgrund des Mechanismus ihrer Bioaktivierung von Interesse. Prinzipiell scheint es möglich, daß die Anwesenheit einer Vinylchinon-Einheit diese Systeme elektrophil macht,

[\*] Prof. Dr. S. J. Danishefsky, J. W. Benbow  
Department of Chemistry  
Yale University  
225 Prospect Street, New Haven, CT 06511 (USA)  
G. K. Schulte  
Center for Chemical Instrumentation, Yale University

[\*\*] Diese Arbeit wurde vom PHS (Grant CA 28824) gefördert. Die NMR-Spektren wurden an der Northeast Regional NSF/NMR Facility, unterstützt durch die National Science Foundation Chemistry Division (Grant CHE 7916210), der Yale University aufgenommen. J. W. B. dankt den National Institutes of Health für ein Postdoktoranden-Stipendium (Grant CA 08907-02).

selbst dann, wenn eine reduktive Aktivierung nicht stattfindet<sup>[10]</sup>. Ein photochemischer Zugang zum Mitomycin-Grundgerüst wurde jüngst gefunden<sup>[11]</sup>. Wir beschreiben nun die Totalsynthese von (±)-Mitomycin K 1. Obwohl Verbindung 4 bereits einen beträchtlichen Teil der Mitomycin-K-Struktur enthält, blieben die weiteren Syntheseschritte zu 1 eine Herausforderung, der nur mit neuartigen Reaktionen begegnet werden konnte.

Die erste Hürde war die konstruktive Funktionalisierung der C1-C2-Doppelbindung von 4<sup>[12]</sup>. Wir gingen davon aus, daß sich diese ungesättigte Einheit im korrespondierenden konjugierten Lacton präparativ vielseitiger nutzen lassen sollte<sup>[13]</sup>. Wir oxidierten daher Verbindung 4 mit PDC<sup>[14]</sup> und erhielten das Imid 5 in 65% Ausbeute (Schema 1)<sup>[15]</sup>.



Schema 1. a)  $h\nu$ ,  $\lambda = 350$  nm, THF (45%). b) Pyridiniumchlorochromat (PDC), Celite, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (65%). c) PhSCH<sub>2</sub>N<sub>3</sub>, PhH, 80 °C (90%). d) L-Selectride (1.25 Äquiv.), THF, –78 °C (77%). e) 1,1'-Thiocarbonyldiimidazol (5 Äquiv.), 4-Dimethylaminopyridin (DMAP) (1 Äquiv.), CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 35 °C (65%). f) Bu<sub>3</sub>SnH (1.70 M), Azodiisobutyronitril (AIBN), PhH, 80 °C (63%). Imd = Imidazol.

Mit Phenylthiomethylazid<sup>[16]</sup> bei 80 °C ließ sich 5 in 90% Ausbeute zum Dihydrotriazol 6 umwandeln. Die Reduktion von 6 mit L-Selectride ergab in 77% Ausbeute die Hydroxy-Verbindung 7<sup>[15]</sup>. Letztere wurde mit 1,1'-Thiocarbonyldiimidazol in Gegenwart von DMAP in 65% Ausbeute zur Thiothioxo-Verbindung 8<sup>[15]</sup> umgesetzt<sup>[17]</sup>. Die seltsam an-

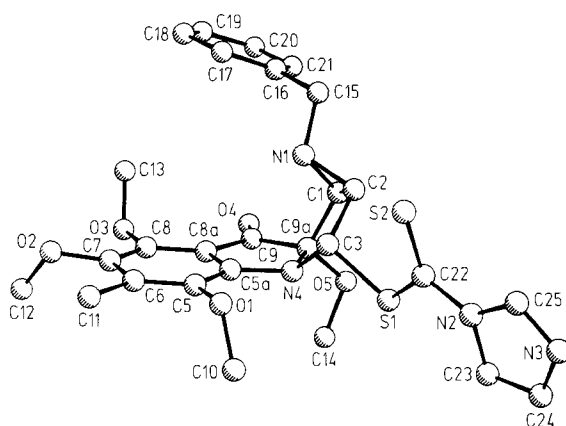
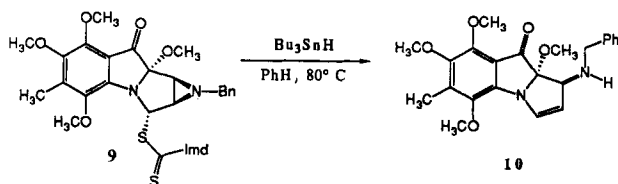


Abb. 1. Struktur von 9 im Kristall (PLUTO).

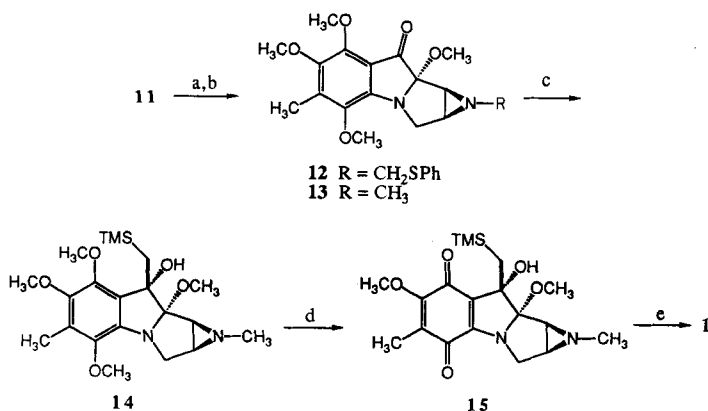
mutende Umwandlung von **7** in **8** läuft vermutlich über eine Umlagerung der zunächst gebildeten Thioxo-Verbindung in den korrespondierenden Thioester, der offensichtlich unter Austausch der Acyl-Einheit zu **8** reagiert. Die Struktur von **8** kann aufgrund der Ergebnisse der Röntgenstrukturanalyse von Verbindung **9**<sup>[18]</sup> (Abb. 1) als gesichert gelten. **9** ist eine Zwischenstufe einer Reaktionssequenz, mit der wir überprüfen, ob es möglich ist, die Aziridin-Einheit vor der Reduktion an C3 aufzubauen<sup>[19]</sup>. Die Barton-Reduktion von **9** ergab jedoch in einer Fragmentierungsreaktion das Allylamin **10** (Schema 2)<sup>[20]</sup>.



Schema 2. Bn = CH<sub>2</sub>Ph.

Da  $\beta$ -Aziridino-Radikale zur Fragmentierung neigen, untersuchten wir, ob sich ein Dihydrotriazol-Derivat desoxygenieren läßt. Wir hatten Glück und konnten die Imidazolidi-thiocarboxyl-Einheit von **8** mit Tri-*n*-butylzinnhydrid reduktiv spalten, wobei das reduzierte Produkt **11** entstand, das in 63 % Ausbeute isoliert wurde.

Die N<sub>2</sub>-Abspaltung aus dem Dihydrotriazol **11** gelang in 48 % Ausbeute durch Bestrahlung mit Licht der Wellenlänge 254 nm (Vycor-Filter)<sup>[13]</sup>. Das entstandene Phenylthiomethylaziridin **12** wurde mit Raney-Nickel in Aceton in 70 % Ausbeute zum *N*-Methylaziridin **13** umgesetzt (Schema 3). Dies ist nach unserem Wissen das erste Mal, daß Phenylthiomethylazid zur Synthese von *N*-Methylaziridinen eingesetzt wurde.



Schema 3. a) 254 nm-Hg-Lampe/Vycor-Filter, PhH in Quarzrohr (48 %). b) Raney-Nickel, Aceton, 60 °C (70 %). c) Trimethylsilylmethylolithium (15 Äquiv.), THF, -10 °C (90 %). d) Silber(II)-picolinat (6 Äquiv.), NaOAc (10 Äquiv.), CH<sub>3</sub>CN/H<sub>2</sub>O (8–16 %). e) Pyridinium-*p*-toluolsulfonat (PPTS), CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (81 %).

Die Reaktionssequenz zur Einführung von C10 wurde mit der Umsetzung von **13** mit Trimethylsilylmethylolithium gestartet<sup>[21]</sup>. Diese Umsetzung verlief ohne die Bildung von Nebenprodukten und ergab in 90 % Ausbeute das Addukt **14**<sup>[15]</sup> offenbar als einziges Stereoisomer. Die Umsetzung von **14** mit Silber(II)-picolinat<sup>[22]</sup> führte in geringer Ausbeute zur bemerkenswerten Verbindung **15**, die man formal als das Produkt der Addition von Trimethylsilanol an Mitomycin K

ansehen kann. Im letzten Reaktionsschritt wurde **15** mit PPTS in Dichlormethan umgesetzt und Mitomycin K **1** als Racemat erhalten. Die IR-, <sup>1</sup>H-NMR- und <sup>13</sup>C-NMR-Spektren dieses synthetisch hergestellten ( $\pm$ )-Mitomycin K (Fp = 123–125 °C) sind identisch mit denen einer Probe, die durch Partialsynthese über das natürlich vorkommende *N*-Methylmitomycin A<sup>[23]</sup> erhalten wurde.

Damit ist der Weg offen für die Erforschung der chemischen Stabilität von Mitomycin K. Auch der Frage, in welcher Weise dieses Molekül für eine kovalente Bindung an seinen Rezeptor aktiviert wird, wollen wir nachgehen.

Eingegangen am 11. Januar 1992 [Z 5113]

- [1] a) R. Sugawara, T. Hata, *J. Antibiot. Ser. A* **1956**, 9, 147; b) S. Wakaki, H. Marumo, K. Tomioka, Y. Mimura, E. Kato, H. Konada, S. Kudo, Y. Fujimoto, *Antibiot. Chemother. (Basel 1954–70)* **1958**, 8, 288.
- [2] a) W. A. Remers, *The Chemistry of Antitumor Antibiotics*, Wiley, New York, **1979**, zit. Lit.; b) W. A. Remers, B. S. Iyengar in *Recent Progress in the Chemical Synthesis of Antibiotics* (Hrsg.: G. Lukacs, M. Chao), Springer, Berlin, **1990**, S. 415–445.
- [3] a) B. A. Chabner, J. M. Collins, *Cancer Chemotherapy Principles and Practice*, Lippencott, Philadelphia, **1990**; b) S. K. Carter, S. T. Crooke, *Mitomycin C Current Status and New Developments*, Academic Press, New York, **1979**.
- [4] Porfiromycin: C. DeBoer, A. Dietz, N. E. Lummus, G. M. Savage, *Antimicrobial Agents Annual 1960*, Plenum, New York, **1961**, S. 17–22. Mityromycin: D. V. Lefemine, M. Dann, F. Barbatschi, W. K. Hansmann, V. Zbinovsky, P. Monnikendan, J. Adam, N. Bohonos, *J. Am. Chem. Soc.* **1962**, 84, 3184; M. Kono, M. Kasai, K. Shirahata, N. Hirayama, *J. Antibiot.* **1991**, 44, 309. Isomitomycin A und Albomitomycin A: M. Kono, Y. Saitoh, K. Shirahata, Y. Arai, S. Ishii, *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, 109, 7224. Decarbamoyldehydromitomycine (einschließlich Mitomycin K): C. Urakawa, H. Tsuchiya, K.-I. Nakano, *J. Antibiot.* **1981**, 34, 243. C. Urakawa, H. Tsuchiya, K.-I. Nakano, N. Nakamura, *ibid.* **1981**, 34, 1152.
- [5] Mitomycin A: J. S. Webb, D. B. Cosulich, J. H. Mowat, J. B. Patrick, R. B. Broschard, W. E. Meyer, R. P. Williams, C. F. Wolf, W. Fulmor, C. Pidacks, *J. Am. Chem. Soc.* **1962**, 84, 3184, 3187. Gesamtstruktur von Mitomycin B: S. Kinoshita, K. Vzu, K. Nakano, M. Shimizu, T. Takahashi, *J. Med. Chem.* **1971**, 14, 103.
- [6] a) C. L. Stevens, K. G. Taylor, M. E. Munk, W. S. Marshall, K. Noll, G. F. Shah, L. G. Shah, K. Uzu, *J. Med. Chem.* **1964**, 8, 1; b) W. A. Low, G. Weir, *Can. J. Chem.* **1978**, 56, 296; c) M. Tomasz, *Chem.-Biol. Interact.* **1976**, 13, 89; d) J. B. Patrick, R. P. Williams, W. E. Meyer, W. Fulmor, D. B. Cosulich, R. W. Broschard, J. S. Webb, *J. Am. Chem. Soc.* **1964**, 86, 1889; e) W. G. Taylor, W. A. Remers, *Tetrahedron Lett.* **1974**, 2483; f) W. G. Taylor, W. A. Remers, *J. Med. Chem.* **1975**, 18, 307; g) S. Kinoshita, K. Uzu, K.-I. Nakano, M. Shimizu, T. Takahashi, *ibid.* **1971**, 14, 104.
- [7] a) A. Tulinsky, *J. Am. Chem. Soc.* **1962**, 84, 3188; b) A. Tulinsky, J. H. van de Hende, *ibid.* **1967**, 89, 2907; c) R. Yahashi, I. Matsubara, *J. Antibiot.* **1976**, 29, 104; d) R. Yahashi, I. Matsubara, *ibid.* **1978**, 31, 6 (Korrektur); e) N. Hirayama, K. Shirahata, *Acta Crystallogr. Sect. B* **1987**, 43, 555.
- [8] Ausgewählte Synthesen: a) S. Danishefsky, E. M. Berman, M. Ciufolini, S. J. Etheredge, B. F. Segmüller, *J. Am. Chem. Soc.* **1985**, 107, 3891; b) K. J. Shaw, J. R. Luly, H. Rapoport, *J. Org. Chem.* **1985**, 50, 4515; c) J. Rebek, Jr., S. H. Shaber, Y.-K. Shue, J.-C. Gehret, S. Zimmerman, *ibid.* **1984**, 49, 5164; d) R. W. Franck, *Fortschr. Chem. Org. Naturst.* **1979**, 38, 1. Einzige Totalsynthesen: e) F. Nakatsubo, T. Fukuyama, A. J. Cocuzza, Y. Kishi, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, 99, 8115; f) T. Fukuyama, F. Nakatsubo, A. J. Cocuzza, Y. Kishi, *Tetrahedron Lett.* **1977**, 4295; g) L. Yang, T. Fukuyama, *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, 109, 7881; h) L. Yang, T. Fukuyama, *ibid.* **1989**, 111, 8303.
- [9] a) W. Szybalski, V. N. Iyer, *Fed. Proc.* **1964**, 23, 946; b) R. W. Franck, M. Tomasz in: *Chemistry of Antitumor Agents* (Hrsg.: D. E. V. Wilman), Blackie & Sons, Glasgow, **1990**, S. 379–393; c) S. J. Danishefsky, M. Ciufolini, *J. Am. Chem. Soc.* **1984**, 106, 6424; d) M. Egbertson, S. J. Danishefsky, *ibid.* **1987**, 109, 2204; e) H. Kohn, N. Zein, *ibid.* **1983**, 105, 4105; f) K. Bean, H. Kohn, *J. Org. Chem.* **1985**, 50, 293; g) M. Tomasz, R. Lipman, B. F. McGuinness, K. Nakanishi, *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, 110, 5892; h) M. Tomasz, R. Lipman, D. Chowdary, J. Pawlek, G. L. Verdine, K. Nakanishi, *Science* **1987**, 235, 1204; i) B. F. McGuinness, R. Lipman, K. Nakanishi, M. Tomasz, *J. Org. Chem.* **1991**, 56, 4826; j) Y. P. Hong, H. Kohn, *ibid.* **1991**, 56, 6479.
- [10] Es ist vorstellbar, daß ein geeignetes biologisches Nucleophil sich in einer 1,6-Michael-Addition über die exocyclische Olefin-Einheit an das Chinon anlagern könnte. Die nachfolgende Verdrängung der Methoxygruppe an C9a könnte das entsprechende C10-substituierte Mitosen liefern und somit insgesamt zu einer Aktivierung von Mitomycin K ohne anfängliche Aktivierung führen.

- [11] K. F. McClure, J. W. Benbow, S. J. Danishefsky, G. K. Schulte, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 8185.
- [12] **4** konnte unter den Standardbedingungen für eine reduktive Aminierung ( $\text{NaCNBH}_3$ ) nicht umgesetzt werden, und Versuche, die Alkoholgruppe in ein geeignetes Edukt zur Desoxygenierung umzuwandeln (beispielsweise in einen SPh- oder OC(S)R-Rest), gingen mit dem Verlust der C9a-Methoxygruppe und Pyrrolbildung einher. Die Osmylierung der Olefin-Einheit verlief erfolgreich und war stereospezifisch. Das gebildete Diol mit der  $1\beta,2\beta$ -Konfiguration (wie anhand des optischen Antipoden gezeigt werden konnte) war für eine Umwandlung in die erwünschte  $1\beta,2\beta$ -Aziridin-Einheit nicht geeignet.
- [13] Die photolytische Umwandlung von Dihydrotriazolen in Aziridine ist bekannt: a) G. J. Sinta, R. W. Franck, R. J. Kempton, *J. Org. Chem.* **1974**, *39*, 3739; b) P. Scheiner, *Tetrahedron* **1968**, *24*, 2757.
- [14] E. J. Corey, J. W. Suggs, *Tetrahedron Lett.* **1975**, 2647; E. J. Corey, G. Schmidt, *ibid.* **1979**, 399.
- [15] Alle neuen Verbindungen ergaben passende  $^1\text{H}$ -NMR-,  $^{13}\text{C}$ -NMR- und IR-Spektren sowie zufriedenstellende hochaufgelöste Massenspektren und/oder Elementaranalysen.
- [16] B. M. Trost, W. H. Pearson, *J. Am. Chem. Soc.* **1981**, *103*, 2483; B. M. Trost, R. A. Kunz, *J. Org. Chem.* **1974**, *39*, 2648.
- [17] Ähnliche Umlagerungen von Thioxocarbonaten sind bekannt: a) H. R. Al-Kazimi, D. S. Tarbell, D. Plant, *J. Am. Chem. Soc.* **1955**, *77*, 2479; b) A. Schönberg, L. Vargha, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **1930**, *63*, 178.
- [18] Röntgenstrukturanalyse von **9**: Triklin, Raumgruppe  $P\bar{1}$  (Nr. 2),  $a = 11.754(2)$ ,  $b = 24.35(1)$ ,  $c = 9.982(3)$  Å,  $\alpha = 101.00(3)$ ,  $\beta = 100.76(2)$ ,  $\gamma = 86.66(3)^\circ$ ,  $V = 2755(2)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ;  $\rho_{\text{ber.}} = 1.332$  g cm<sup>-3</sup>;  $\mu(\text{CuK}\alpha) = 20.72$  cm<sup>-1</sup>. Datensammlung auf einem Rigaku-AFC5S-Diffraktometer (Graphitmonochromator,  $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung,  $\lambda = 1.54178$  Å). Ein Kristall mit den Kantenlängen  $0.25 \times 0.25 \times 0.15$  mm wurde vermessen. Die Struktur wurde mit Direkten Methoden (SHELXS 86) gelöst und mit einer vollständigen Matrix nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate verfeinert.  $R = 0.070$ ,  $R_w = 0.088$  und  $S = 2.81$  für 5013 unabhängige Reflexe ( $2\theta \leq 114^\circ$ ,  $I > 3\sigma(I)$ ). Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturuntersuchung können beim Direktor des Cambridge Crystallographic Data Centre, University Chemical Laboratory, Lensfield Road, GB-Cambridge CB2 1EW, unter Angabe des vollständigen Literaturzitats angefordert werden.
- [19] Das *N*-Benzyl-Analogon des Dihydrotriazols **6** wurde durch Umsetzung von **5** mit Benzylazid hergestellt. Die Reduktion der Carbonylgruppe und die anschließende Derivatisierung mit 1,1'-Thiocarbonyldiimidazol ergaben **9**. Einzelheiten zu dieser Reaktionssequenz werden an anderer Stelle veröffentlicht.
- [20] H. R. Barton, S. W. McCombie, *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* **1975**, *1*, 1574.
- [21] a) D. J. Ager, *Synthesis* **1984**, 384; b) D. J. Peterson, *J. Org. Chem.* **1968**, *33*, 780.
- [22] K. Kloc, J. Mlochowski, L. Syper, *Chem. Lett.* **1980**, 725.
- [23] M. Egbertson, *Part I: Studies Concerning the Reductive Activation of Mitomycins*, Dissertation, Yale University **1989**.

## Verallgemeinerte Edshamar-Polyeder zur Beschreibung einer Familie von Festkörperstrukturen

Von Sven Lidin\*, Thomas Popp, Mehmet Somer und Hans Georg von Schnering

In Verbindungen der allgemeinen Zusammensetzung  $\text{M}_n\text{X}_p$  mit  $n \gg p$  muß der Bestandteil X, der ein einzelnes Atom, ein Ion oder ein Molekül sein kann, diskrete Einheiten bilden, die gewissermaßen in ein kontinuierliches Medium M eingebettet sind. Die Koordinationszahl (CN) von X ist stets das  $n/p$ -fache derjenigen von M:  $\text{CN}(\text{X}) = n/p(\text{CN}(\text{M}))$ . Bei großen CN(M) wird also CN(X) sehr groß, und entsprechend groß werden auch die dazugehörigen Koordinationspolyeder. Wir möchten nun eine neue Klasse raumfüllender Polyeder vorstellen, die zur Beschreibung von Strukturen verwendet werden kann, in denen eine kleine An-

zahl linearer Moleküle, großer Atome oder großer Ionen durch viele monoatomare Einheiten koordiniert wird. Diese Polyeder lassen sich durch sukzessive Durchdringung von Würfeln entlang einer dreizähligen Achse erzeugen.

Zunächst wollen wir die Kondensation zweier Würfel zu einer Struktureinheit unter Ausbildung gemeinsamer Eckpunkte betrachten. Dies kann auf fünf Arten erfolgen, wie in Abbildung 1 a–e gezeigt. Die ersten vier Fälle ergeben nichts signifikant Neues. Sie lassen sich durch Verschmelzen von jeweils ein, zwei, vier oder acht Eckpunkten erzeugen, was zu gemeinsamen Eckpunkten, Kanten, Flächen bzw. einer vollständigen Überlagerung führt. Die fünfte Möglichkeit (Abb. 1e) ist dagegen von größerem Interesse. In diesem Fall durchdringen sich die Würfel so, daß jeweils drei Eckpunkte verschmolzen werden.

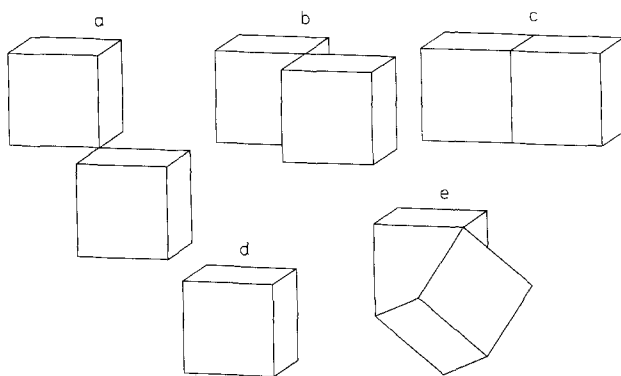


Abb. 1. Zwei Würfel mit a) einer, b) zwei, c) vier, d) acht, e) drei gemeinsamen Ecken.

Jeweils ein Eckpunkt beider Würfel liegt jetzt im Innern des anderen Würfels, wobei eine Struktur entsteht, die an einen kubisch-innenzentrierten Würfel erinnert (body centered cubic, bcc). Die Zentrierung ist bei weitem nicht perfekt; der eingeschlossene Punkt befindet sich eher in der Position  $(1/3, 1/3, 1/3)$  als in der Position  $(1/2, 1/2, 1/2)$  des umhüllenden Würfels. Die beiden ursprünglichen Würfel enthielten je acht Eckpunkte, zusammen also sechzehn. Nach der Kondensation sind nur noch dreizehn Eckpunkte vorhanden. Von diesen verbleibenden dreizehn Eckpunkten werden zwei von elf anderen eingeschlossen, welche ein neues raumfüllendes Polyeder bilden, das Edshamar-Polyeder<sup>[1]</sup>, im weiteren durch das Symbol  $^{11}\text{E}$  und die Konfiguration  $4^63^6$  gekennzeichnet (Abb. 2a).

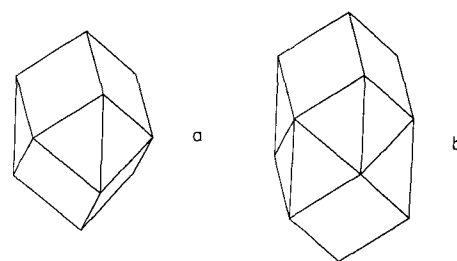


Abb. 2. a) Das Edshamar( $^{11}\text{E}$ )-Polyeder. b) Das  $^{14}\text{E}$ -Polyeder.

Die letztere Schreibweise gibt an, daß das Polyeder aus sechs Quadraten und sechs Dreiecken aufgebaut ist<sup>[2]</sup>. Es liegt auf der Hand, daß sich dieser Prozeß noch weiterführen läßt. Die Kondensation dreier Würfel entlang einer gemeinsamen dreizähligen Achse führt zu einem Polyeder mit vierzehn Eckpunkten,  $^{14}\text{E}$ , das die Konfiguration  $4^63^{12}$  hat

[\*] Dr. S. Lidin

Dept. Inorganic Chemistry 2  
Chemical Centre, P.O. Box 124  
S-22100 Lund (Schweden)

Dr. T. Popp, Dr. M. Somer, Prof. Dr. H. G. von Schnering  
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, Stuttgart