

Birgit Dammeier *) und Walter Hoppe

Die Kristall- und Molekülstruktur von β -[*p*-Brom-benzoyloxy]- α -methyl-zimtsäure-diäthylamid

Aus der Abteilung für Röntgenstrukturforschung am Max-Planck-Institut für Eiweiß- und Lederforschung, München, und der Abteilung für Strukturforschung am Physikalisch-Chemischen Institut der Technischen Universität München

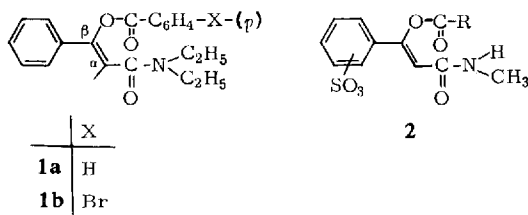
(Eingegangen am 16. Februar 1971)

In der Kristallstrukturanalyse der Titelverbindung steht die sterische Hinderung der konjugiert verbundenen Molekülteile im Vordergrund des Interesses.

The Crystal and Molecular Structure Analysis of β -(*p*-Brombenzoyloxy)- α -methyl-*N,N*-diethylcinnamide

In the crystal-structure analysis of the title compound the main interest is concerned with the steric hinderance of those parts of the molecule which possess conjugated bonds.

Bei der Peptidsynthese entstehen mit einem Überschuß von Inaminen α,β -disubstituierte β -Acyloxy-acrylsäure-dialkylamide vom Typ **1a**, die in ihrer Struktur den bei der Peptidsynthese nach Woodward¹⁾ entstehenden Zwischenprodukten **2** sehr ähnlich sind, doch bei Aminolyseversuchen eine wesentlich geringere Reaktionsfähigkeit zeigen²⁾.



Man vermutet, daß die Reaktionsträgheit von **1a** durch die starke sterische Abschirmung des reaktiven Zentrums >C=O der Enolestergruppierung durch die beiden zusätzlichen Alkylgruppen am Stickstoff verursacht wird. Um diese Frage sicher beantworten zu können, wurde eine Kristallstrukturanalyse des β -[*p*-Brom-benzoyloxy]- α -methyl-zimtsäure-diäthylamids (**1b**) durchgeführt, das sich vom obigen Reaktionsprodukt **1a** nur durch das Br in der *p*-Stellung des Benzoyloxyrestes unterscheidet. Einen gewissen Hinweis auf eine Deformierung des Chromophors hatte

*) Auszug aus der Dissertation, Technische Univ. München, 1970.

1) Woodward, Olofson und Mayer, Tetrahedron [London] Suppl. 8, 321 (1966).

2) G. Höfle, Dissertation, Techn. Univ. München, 1968.

bereits das UV-Spektrum gegeben, das sich von dem des ebenen, ungestörten Zimtsäurechromophors durch eine andere Lage des Absorptionsmaximums unterscheidet.

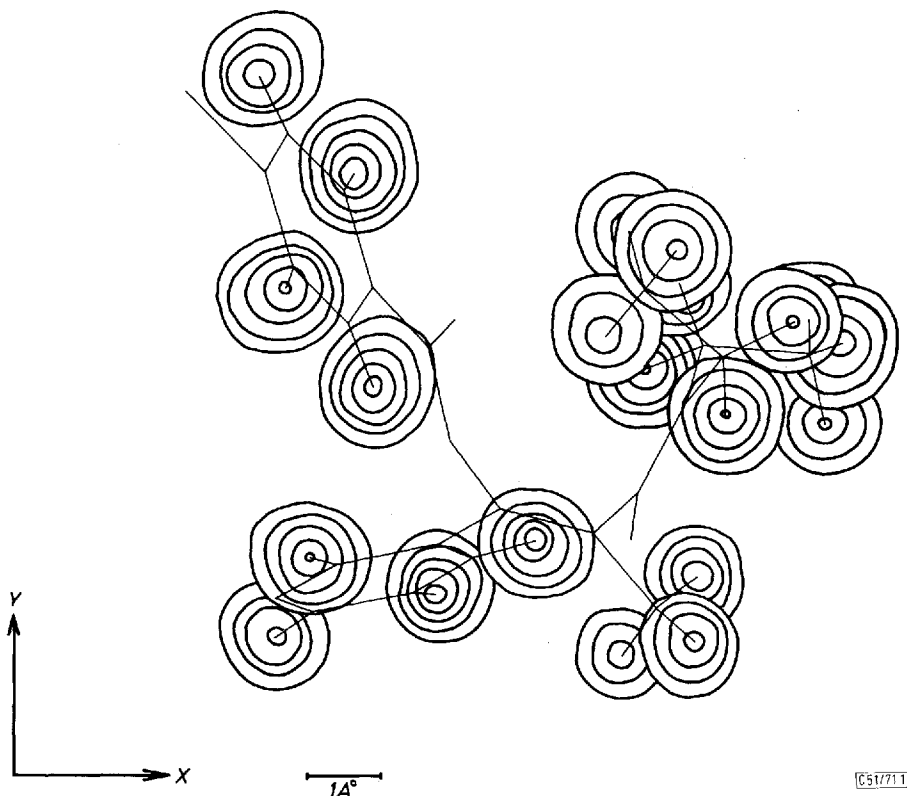
Experimentelles

Der Schmelzpunkt des untersuchten Einkristalls beträgt 112° , die kristallographischen Daten sind:

Raumgruppe $P2_1/a$, $a = 21.448 \pm 0.009 \text{ \AA}$, $b = 13.543 \pm 0.007 \text{ \AA}$, $c = 6.989 \pm 0.006 \text{ \AA}$, $\beta = 94.11 \pm 0.03^\circ$, $V = 2024.87 \text{ \AA}^3$; 4 Moleküle pro Zelle; röntgenographische Dichte 1.368 g/cm^3 ; linearer Absorptionskoeffizient für $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung 32.2 cm^{-1} .

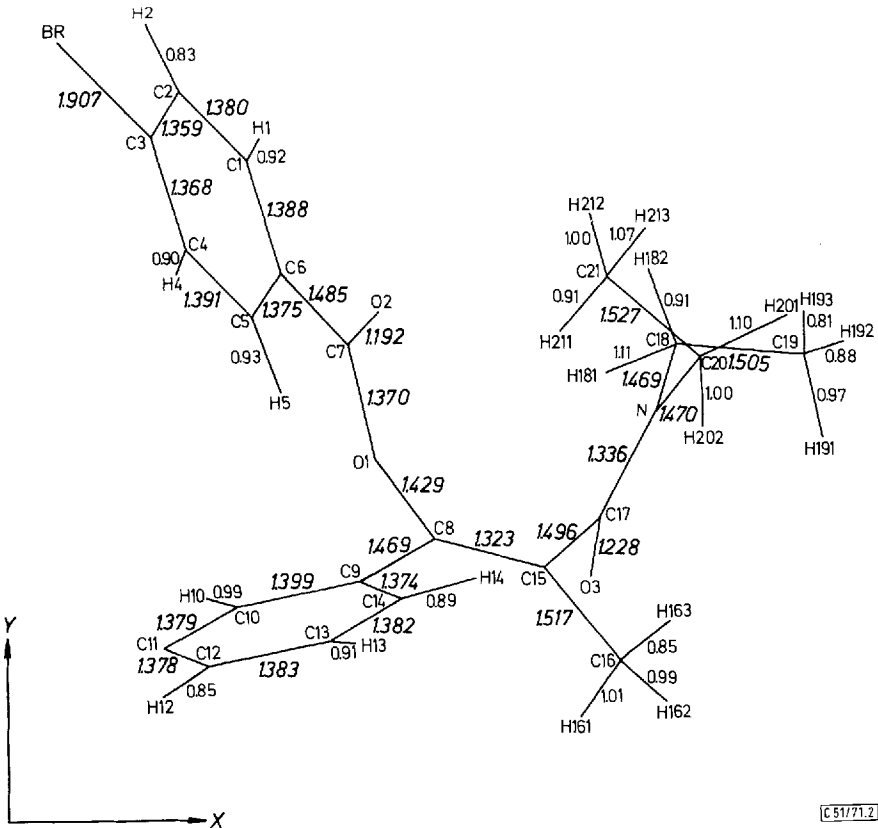
Die Intensitätsmessung von insgesamt 2287 unabhängigen Reflexen ($\theta_{\text{max}} = 60^\circ$) erfolgte mit $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung auf einem Siemens-AED-Einkristalldiffraktometer. Der hierzu verwendete Kristall³⁾ hatte eine Größe von etwa $0.32 \times 0.25 \times 0.27 \text{ mm}^3$.

Da der lineare Absorptionsfaktor μ des zu vermessenden Kristalls relativ hoch ist — er beträgt $\mu = 32.2 \text{ cm}^{-1}$ —, wurden die Reflexintensitäten nach einem Absorptionsmeß-



Abbild. 1. Dreidimensionale Differenz-Fouriersynthese in (001)-Projektion (erste Linie 0.1 e/\AA^3 , jede weitere 0.1 e/\AA^3)

³⁾ Die Kristalle wurden freundlicherweise von G. Höfle, Organ.-Chem. Institut der Techn. Univ. München, zur Verfügung gestellt.



Abbild. 2. Innermolekulare Bindungslängen (in Å)

verfahren von *Kopfmann* und *Huber* korrigiert⁴⁾. Die Absorptionskorrekturen waren trotzdem wegen der Kleinheit und isotrophen Gestalt des Kristalls nur klein.

Strukturanalyse

Die Struktur wurde nach der Schweratommethode gelöst. Mit der daraus erhaltenen Br-Teilstruktur konnte dann über zwei sukzessive Fouriersynthesen die vollständige Molekül- und Kristallstruktur bestimmt werden. Der *R*-Faktor betrug in diesem Stadium 22%.

Nach einem isotropen Verfeinerungszyklus wurde in zwei weiteren Zyklen die anisotrope Schwingung des Br berücksichtigt. Der *R*-Faktor sank dadurch auf 9,3%. Eine weitere anisotrope Verfeinerung für alle Atome ergab $R = 7,0\%$.

Aus der daraus berechneten Differenz-Fouriersynthese konnten die Lagen der H-Atome bestimmt werden. Drei weitere Zyklen der Verfeinerung („mixed mode“: Br, N, O und C anisotrop, H isotrop) brachten einen endgültigen *R*-Faktor von 5,2%.

⁴⁾ *G. Kopfmann* und *R. Huber*, Acta crystallogr. [Copenhagen] A **24**, 348 (1968).

Tab. 1. Lageparameter und ihre mittleren Fehler σ ($\times 10^5$)

Atom	x	σ (x)	y	σ (y)	z	σ (z)
Br	0.48928	3	0.38559	5	0.20469	10
N	0.30999	17	0.57963	28	0.37555	56
O1	0.16135	12	0.54242	19	0.28795	39
O2	0.15896	15	0.66324	23	0.06642	48
O3	0.22152	15	0.94602	26	0.46688	51
C1	0.09624	23	0.78949	35	0.31766	83
H1	0.10056	149	0.80521	246	0.19130	467
C2	0.06442	24	0.84532	39	0.44411	96
H2	0.04655	182	0.89960	304	0.42761	563
C3	0.44615	18	0.30797	35	0.38064	76
C4	0.42657	22	0.21552	39	0.32496	79
H4	0.42955	154	0.19404	251	0.20445	480
C5	0.39528	21	0.15916	36	0.45409	73
H5	0.37920	183	0.09791	303	0.41735	567
C6	0.11562	17	0.69447	29	0.36684	65
C7	0.14705	18	0.63565	31	0.22250	69
C8, β	0.18912	17	0.47761	28	0.15681	61
C9	0.14570	18	0.44230	29	-0.00002	68
C10	0.08358	22	0.42259	40	0.03569	84
H10	0.07024	165	0.42952	271	0.16809	512
C11	0.45856	24	0.88871	46	0.10615	98
C12	0.43852	29	0.87467	44	0.28851	105
H12	0.46521	176	0.84906	291	0.37001	545
C13	0.37744	26	0.89395	36	0.32794	85
H13	0.36655	161	0.89243	266	0.45117	499
C14	0.33622	23	0.92878	32	0.18269	76
H14	0.29785	160	0.94547	258	0.21161	495
C15, α	0.24807	19	0.45343	30	0.20280	65
C16	0.28450	26	0.37698	46	0.09802	102
H161	0.19196	185	0.90831	309	-0.02618	574
H162	0.26021	234	0.33064	340	0.00811	658
H163	0.31055	173	0.34313	284	0.20204	549

Tab. 1. Fortsetzung

Atom	x	$\bar{\sigma}$ (x)	y	$\bar{\sigma}$ (y)	z	$\bar{\sigma}$ (z)
C17	0,28013	19	0,49328	35	0,38366	72
C18	0,31706	26	0,63504	44	0,19770	86
H181	0,27729	194	0,61194	327	0,09805	599
H182	0,30208	209	0,69649	347	0,22012	653
C19	0,38125	35	0,62548	73	0,12552	140
H191	0,37880	217	0,66078	370	0,03080	694
H192	0,40584	197	0,63650	336	0,23027	645
H193	0,39053	244	0,55763	422	0,09193	767
C20	0,16207	29	0,12432	50	0,44672	89
H201	0,11838	223	0,15751	368	0,48959	692
H202	0,15849	183	0,06725	299	0,35622	564
C21	0,20909	41	0,19061	64	0,35458	123
H211	0,22075	234	0,24153	383	0,45462	728
H212	0,18587	204	0,22878	336	0,23531	635
H213	0,23210	278	0,14498	468	0,29400	846

Nach Berücksichtigung der Absorption und zwei zusätzlichen Verfeinerungszyklen (mixed mode) konnte der R -Wert auf $R = 5.0\%$ gesenkt werden. Bemerkenswert ist die sehr gute Definition der Wasserstoffatome trotz des stark streuenden Br-Atoms.

Abbild. 1 zeigt die dreidimensionale Differenz-Fouriersynthese in (001)-Projektion (erste Linie $0.1 \text{ e}/\text{\AA}^3$, jede weitere $0.1 \text{ e}/\text{\AA}^3$).

Diskussion

Die Lageparameter und ihre mittleren Fehler σ sind in Tab. 1 aufgeführt, die Temperaturkoeffizienten der Atome in Tab. 2.

Aus Abbild. 2 lassen sich die innermolekularen Bindungslängen entnehmen, aus Abbild. 3 die innermolekularen Bindungswinkel.

Bemerkenswert sind die kurzen Bindungslängen von 1.359 \AA ($\sigma = 0.008 \text{ \AA}$) für C2–C3 und 1.368 \AA ($\sigma = 0.007 \text{ \AA}$) für C3–C4 gegenüber der normalen mittleren Bindungslänge von 1.383 \AA zwischen den übrigen C-Atomen des Brombenzolringes. In der Literatur⁵⁾ werden ähnliche Verkürzungen der Bindungslängen in Nachbarschaft von Brom angegeben.

Die C6–C7-Einfachbindung mit 1.485 \AA (normal 1.54 \AA im Mittel) ist durch den Mesomerieeffekt der Carbonylgruppe mit dem Br-Benzolring verkürzt. Auch die Ver-

⁵⁾ M. Röhrh, Dissertation, Techn. Univ. München, 1969.

Tab. 2. Temperaturkoeffizienten, definiert nach

$$T = \exp \left[\frac{1}{4} (B_{11} a^{*2} h^2 + B_{22} b^{*2} k^2 + B_{33} c^{*2} l^2 + 2B_{12} a^* b^* h k + 2B_{13} a^* c^* h l + 2B_{23} b^* c^* k l) \right] \text{ für anisotrop,}$$

$$T = \exp \left[B (\sin \vartheta / \lambda)^2 \right] \text{ für isotrop}$$

Atom	B11	B22	B33	B12	B13	B23
Br	7.2752	8.6078	10.8231	-2.3254	1.1099	2.3878
N	5.1066	5.1189	6.1241	-0.0620	-0.4631	-0.1216
O1	4.5999	4.3078	6.1307	0.9898	0.9162	0.7392
O2	8.1324	5.1786	6.6221	0.9134	1.5283	1.1891
O3	6.7695	6.7710	6.8165	-0.7448	0.6335	-1.5359
C1	6.4601	4.8255	7.6561	0.7158	1.4396	1.2855
H1	2.3707					
C2	5.6060	4.3074	10.8814	1.2379	1.2571	0.3950
H2	4.7508					
C3	3.4121	5.5589	7.7757	-0.4353	0.2158	0.8755
C4	5.5804	6.7340	6.1596	-1.4118	0.2546	-0.2865
H4	2.6326					
C5	5.4415	4.9575	6.7929	-1.4777	-0.2084	-0.4426
H5	4.7541					
C6	3.2573	4.3465	6.4645	0.3649	0.1026	0.2711
C7	3.9955	4.4543	6.4579	0.2478	-0.0248	0.5299
C8, β	4.3878	3.7223	6.0910	0.4913	1.1062	0.2719
C9	4.2110	4.0668	6.6962	0.2771	0.6538	0.4689
C10	4.7559	7.5146	7.5783	-0.0979	0.5239	-0.3563
H10	3.4157					
C11	5.8738	8.9929	9.2643	0.2335	-0.3961	0.6829
C12	6.6970	6.4840	9.9362	0.7855	-2.8183	0.1715
H12	4.2894					
C13	7.4604	4.7481	6.7980	-0.3580	-0.2295	-0.1683
H13	3.2006					
C14	5.0594	4.0965	7.6915	0.0425	0.2178	-0.5973
H14	2.8906					
C15, α	4.3078	3.8513	6.2951	0.1431	0.7092	0.1194

Tab. 2. Fortsetzung

Atom	B11	B22	B33	B12	B13	B23
C16	4,7670	5,7421	8,3212	0,8373	1,0073	-0,7849
H161	4,3811					
H162	5,9449					
H163	3,8124					
C17	4,1483	4,7876	6,6052	1,0167	0,8754	0,2165
C18	5,9006	5,7036	7,3743	-0,5178	0,1116	0,4246
H181	5,4733					
H182	6,4393					
C19	6,7959	9,5738	9,3053	-1,4014	1,0754	0,9426
H191	6,6324					
H192	5,4306					
H193	8,4829					
C20	7,5113	7,4099	7,0555	-0,3798	-1,4474	0,6020
H201	7,3526					
H202	4,5250					
C21	9,9366	7,9207	8,2080	-1,5577	-0,5377	1,9730
H211	7,7234					
H212	5,7172					
H213	10,9897					

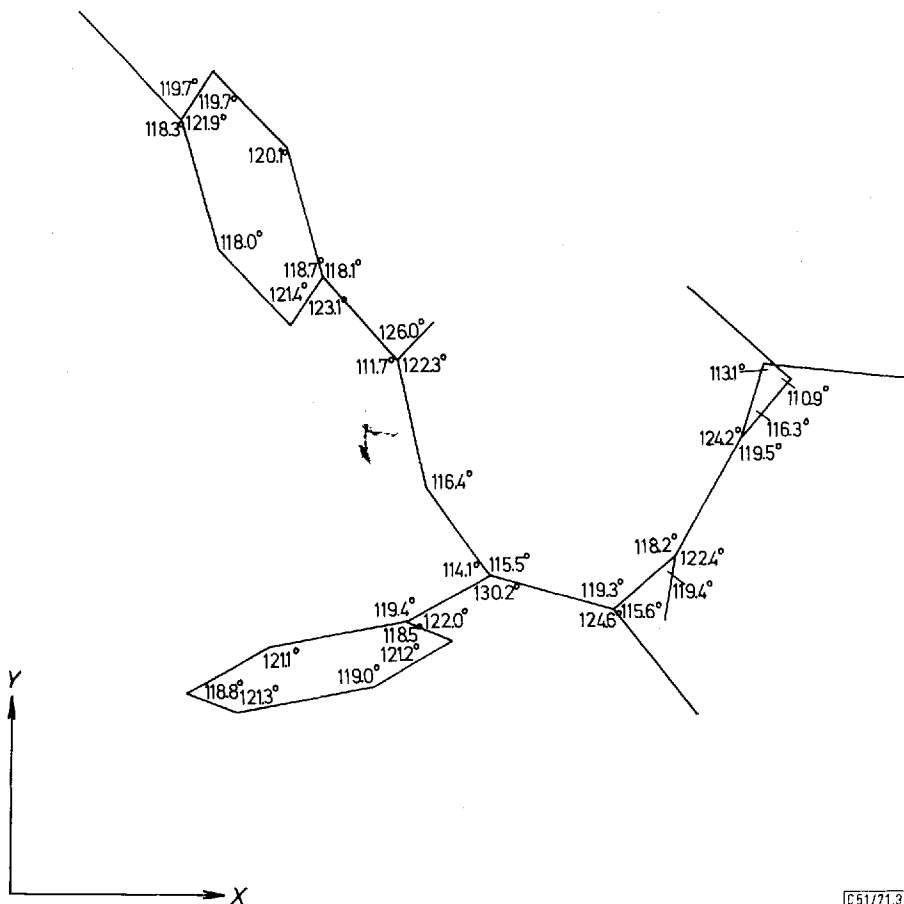
kürzung der C7—O1-Einfachbindung auf 1,370 Å (normal 1,43 Å) beruht auf einem Mesomerieeffekt der CO-Doppelbindung. Die Bindungslänge für O1—C8 ist mit 1,429 Å wieder normal. Die C8—C9-Einfachbindung ist ebenfalls wegen eines Mesomerieeffektes der C8=C15-Doppelbindung mit dem Zimtsäure-Benzolring verkürzt. Die starke Verkürzung der C17—N-Bindung auf 1,336 Å (normal 1,42 Å) beruht auf dem partiellen Doppelbindungscharakter der C—N-Amidbindung.

Bei Betrachtung der Abbild. 3 fallen besonders die großen Bindungswinkel von 130,2° und 124,6° an der C8=C15-Doppelbindung auf. Diese Aufweitung beruht auf der Abstoßung zwischen dem Zimtsäure-Benzolring und der C16-Methylgruppe. Es sei hier erwähnt, daß der entsprechende Winkel an den benzolring-beschwerten Bindungen bei Stilben 128° beträgt⁶⁾.

Die Atome Br, C1, C2, C3, C4, C5, C6 und C7 bilden in guter Näherung eine Ebene I. Der mittlere Fehler für die Atome von dieser Ebene beträgt $\sigma = 0,017$ Å.

⁶⁾ Tables of Interatomic Distance and Configuration in Molecules and Ions, The Chemical Society, Burlington House, London 1958.

Der mittlere Fehler der Abstände entspricht ungefähr dem mittleren Fehler der Bindungslängen (etwa 0.006 Å).



Abbild. 3. Inermolekulare Bindungswinkel ($\sigma = 0.5^\circ$)

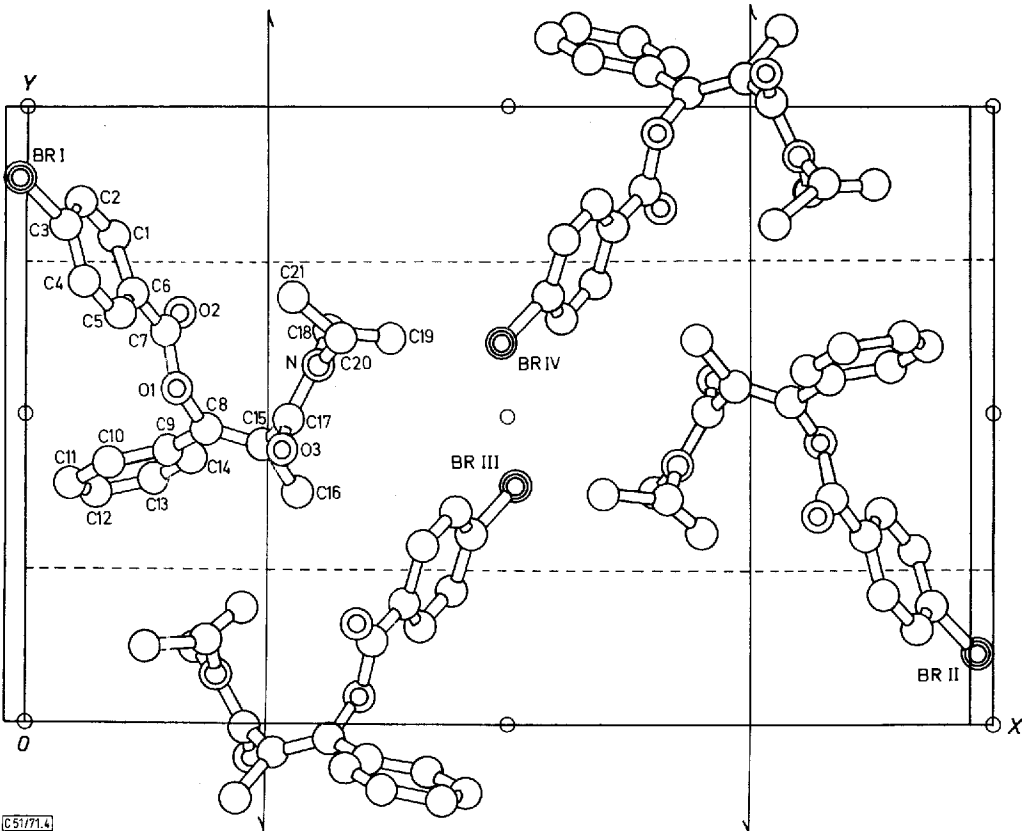
Der Zimtsäure-Benzolring (Ebene II) schließt mit der von den Atomen O1, C8 und C9 gebildeten Ebene III einen Winkel von 36.2° ein. Diese Ebene III schließt mit der durch die Atome C15, C16 und C17 definierten Ebene IV wiederum einen Winkel von 10.6° ein. Eine weitere Ebene V läßt sich durch die Atome O3, C17, N, C18 und C20 legen. Die Ebenen IV und V schließen einen Winkel von 83.06° ein. Durch die starke Verdrehung dieser beiden Ebenen ist der Zimtsäurechromophor vollkommen zerstört, was sich im UV-Spektrum auch bestätigt. Eine Mesomeriebeziehung der C8=C15-Doppelbindung mit der Amidgruppe kann also nicht mehr bestehen, was auch durch die Längen der entsprechenden Bindungen bestätigt wird.

Abbild. 4 gibt in (001)-Projektion die Anordnung der 4 Moleküle in der Elementarzelle wieder.

Tab. 3. Beobachtete und berechnete Strukturfaktoren (x 10)

FO FC		FO FC		FO FC		FO FC		FO FC		FO FC		FO FC	
H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁	H ₁ ,K ₁
22 31 46	22 101 119	17 49 53	-22 30 17	11 302 297	21 73 88								
20 86 76	21 52 32	16 36 32	-21 51 56	-11 190 165	20 85 78								
18 226 255	22 32 15	15 30 20	-20 62 47	10 467 467	-23 80 78								
14 52 95	23 41 14	14 31 20	-19 31 41	-9 324 320	20 67 27								
14 299 3,5	18 32 3	-13 42 47	-19 63 66	8 532 520	19 93 91								
12 417 3,65	17 127 112	12 152 147	18 32 22	-6 955 958	-19 64 50								
10 351 3,65	16 143 146	11 258 260	-18 46 32	7 113 132	18 32 96								
8 208 2,3	15 126 114	10 220 216	17 290 296	-7 263 229	-18 37 38								
-6 988 9,4	14 47 30	9 42 30	-17 134 127	6 190 203	17 107 99								
4 59 47	-12 80 81	8 68 99	-16 39 30	-6 99 223	17 65 71								
2 104 84	12 57 51	7 31 12	-16 247 247	5 190 161	16 58 50								
	11 492 496	6 31 0	15 208 218	-5 442 443	-16 257 264								
	10 33 38	5 141 128	-15 156 149	4 1047 1029	15 103 95								
	9 372 375	4 184 167	14 129 128	-4 1052 1063	-15 323 319								
23 54 57	8 175 172	3 74 74	-14 493 444	3 61 46	14 116 111								
-22 101 105	7 617 631	-1 309 309	-13 193 200	-3 168 152	-14 67 65								
-21 33 32	6 134 86	-1 48 45	-13 566 536	2 903 905	13 177 181								
-20 204 207	5 821 823	0 79 59	12 192 198	-2 619 636	-13 293 281								
-19 36 26	-4 36 31		-12 283 296	1 61 48	12 141 131								
-18 67 71	3 343 356		-11 619 616	0 440 420	-12 247 238								
-17 162 152	2 526 515		-11 85 71	0 49 11	11 74 70								
-16 129 124	1 533 538	16 94 92	-10 278 271		-11 373 361								
-15 205 197		15 114 112	-10 420 413		-10 112 116								
-14 345 325		14 111 121	9 623 632		-10 118 123								
-13 10 80		13 31 21	8 144 124	-23 27 19	9 327 304								
-12 50 47	21 77 73	12 58 52	8 32 6	22 98 97	-9 430 442								
-11 241 243	-20 56 59	11 92 91	-8 937 619	-8 290 62	8 294 285								
-10 253 230	-19 222 224	10 92 97	7 914 927	7 199 188	-8 277 276								
-9 1071 1103	-18 132 134	9 130 138	-7 20 23	-21 35 50	7 127 139								
8 55 76	-17 115 128	8 57 58	6 79 40	20 92 72	-7 946 934								
7 293 245	-16 40 32	7 42 37	5 402 418	19 132 138	-6 183 183								
6 47 33	15 161 163	-6 54 43	5 412 367	19 81 86	-6 372 372								
5 1522 1533	-14 33 21	-5 41 33	-5 328 307	-19 80 85	-5 275 286								
4 904 640	-13 115 112	-4 60 57	-4 2159 2160	18 231 230	-5 673 682								
-3 1085 1078	12 105 104	3 32 35	-4 536 535	-18 137 134	4 128 105								
-2 434 396	11 268 271	2 32 26	3 283 289	17 107 116	-4 57 51								
1 320 328	10 88 86	1 44 16	-3 1051 1052	-17 104 102	-3 618 633								
	9 118 113		2 1054 1044	16 31 1	-3 519 513								
	8 113 123		-2 263 268	-16 197 199	2 633 631								
	7 302 316		1 548 552	15 132 133	-2 549 549								
-23 98 100	6 227 215	-14 50 52	-1 112 110	-15 92 87	1 179 180								
-22 30 15	5 314 316	13 67 63	0 43 64	14 219 217	-1 604 609								
-21 41 84	4 241 252	12 77 82		13 40 22	0 67 170								
-20 32 28	3 355 324	-11 106 108		13 79 82									
-19 151 100	2 243 253	10 33 16		-13 238 235									
-18 73 77	1 282 273	9 38 38	23 27 12	12 428 444									
-17 229 231	0 143 134	-8 117 122	-23 28 6	-12 505 502	-21 71 72								
-16 104 105		7 131 125	-22 29 33	11 416 414	-20 71 60								
-15 335 326		6 174 169	-22 30 17	-10 189 189	-20 71 88								
-14 44 31		5 32 32	-21 39 55	10 371 378	19 29 12								
-13 60 80	-21 73 70	-4 71 79	-21 31 0	-10 138 144	-19 24 5								
-12 443 396	-20 29 48	-3 68 49	-20 83 90	9 82 78	-18 41 36								
-11 255 292	19 41 29	2 86 72	-20 34 9	-9 79 40	-18 133 126								
-10 114 102	18 117 108	-1 39 27	-19 216 210	8 417 404	-17 35 31								
-9 456 450	-17 126 125	0 220 234	-19 168 165	-8 135 135	-17 35 31								
-8 39 99	16 327 331		18 55 59	7 203 202	16 82 88								
-7 325 311	-15 96 105		-18 67 61	-7 814 794	-16 44 54								
6 621 581	14 290 187		17 45 45	6 515 445	-15 133 133								
5 1803 1777	13 236 246	-12 27 3	-17 132 118	-6 233 210	-15 123 121								
4 595 519	12 266 265	-11 75 67	-16 101 106	5 171 156	14 136 135								
3 443 396	11 215 212	-10 40 29	-15 20 24	-5 129 129	-14 242 242								
-2 942 891	10 256 251	-9 72 69	15 29 1	4 482 477	13 30 15								
1 189 195	9 118 113	-8 69 94	-15 247 251	-4 350 338	-13 30 25								
0 627 591	8 108 101	-7 10 81	-14 27 8	3 175 156	-12 226 224								
	7 171 177	-6 31 9	-14 128 122	-3 543 527	-12 264 263								
	6 271 263	-5 92 79	-13 173 169	2 652 641	11 77 85								
	5 196 197	-4 95 10	-12 605 605	-1 945 935	-11 108 111								
	4 304 27	-3 106 105	-12 195 199	1 125 120	-10 119 113								
	3 104 112	-2 32 1	-12 143 134	-1 899 631	-10 371 367								
	2 497 467	1 88 87	-11 170 169	0 516 506	9 108 111								
	1 233 249		-11 247 270		-9 238 240								
			-10 302 306		8 357 353								
			-10 169 166		-8 291 285								
			-9 303 316	-22 90 38	7 25 17								
			-9 285 287	-22 28 8	-7 38 34								
			-8 170 171	21 56 51	6 424 421								
			-8 50 56	-21 81 77	-6 624 627								
			-7 867 841	20 30 19	5 102 94								
			-7 1207 1214	-20 50 51	-5 281 283								
			6 295 273	19 108 99	4 309 333								
			-6 153 165	-19 31 26	-4 238 254								
			5 1029 1033	18 182 190	3 29 34								
			-5 1019 1039	-18 139 134	-3 28 31								
			4 431 410	17 239 240	2 183 198								
			-4 306 286	-17 208 208	-2 761 725								
			3 766 762	16 130 136	1 423 415								
			-3 724 710	-16 35 32	-1 59 40								
			-2 588 582	15 39 38	0 306 313								
			-2 408 387	-15 240 249									
			1 1120 1107	14 101 99									
			-1 1743 1824	-14 389 386									
			0 438 430	13 303 304	-20 84 88								
				-13 288 289	19 71 78								
				12 328 337	-18 28 4								
				-12 28 5	18 149 140								
				11 252 261	-18 29 20								
				10 370 369	-17 28 11								
				-10 208 216	-17 76 72								
				-10 378 361	-16 92 85								
				9 432 431	-16 31 40								
				-9 139 150	15 31 32								
				8 23 48	-15 103 103								
				-8 31 24	-14 85 88								
				-7 110 113	-14 122 128								
				-7 184 171	13 92 85								
				-6 386 386	-13 162 162								
				-6 570 539	12 30 13								
				5 567 554	-12 241 242								
				-5 63 63	-12 11 57								
				4 727 705	-11 39 24								
				-4 174 153	10 355 364								
				-3 140 143	-9 35 35								
				-3 34 12	9 164 160								
				-2 162 128	-9 122 131								
				-1 574 574	8 30 14								
				1 96 120	-8 97 95								
				-1 151 149									
				0 86 89									

FO FC		FO FC		FO FC		FO FC		FO FC		FO FC		FO FC		
H _{2,2,6}		H _{2,4,6}		H _{2,6,6}		H _{2,8,6}		H _{2,2,7}		H _{2,4,7}		H _{2,6,7}		
-9	60	62	-15	25	7	-2	104	97	7	28	13	-1	34	35
-9	176	157	-14	27	19	-1	30	27	-9	26	0	-6	29	12
8	30	14	-12	28	23	0	53	77	-8	26	16	5	46	42
-8	32	17	-12	47	47				7	39	56	-5	73	79
7	77	80	-12	65	74				6	26	6	-4	31	3
-7	123	103	-11	27	3	-13	61	61	-6	27	26	3	30	7
6	64	65	-11	40	32	-12	38	40	5	27	9	-3	31	8
-6	31	21	10	28	7	-11	68	60	-5	42	33	0	60	55
5	98	204	-12	31	17	10	27	26	4	35	25	-2	30	3
-4	31	35	5	36	36	-10	77	89	4	28	6	1	98	91
-4	105	113	-5	43	37	9	27	2	3	26	30	-1	30	2
-4	75	78	8	86	85	-9	55	40	-3	39	40	0	34	24
3	66	61	-8	30	8	8	28	19	2	29	26			
-3	126	119	7	25	10	-8	47	50	-2	65	51			
2	30	26	-7	30	6	7	107	108	1	30	34			
-2	125	129	4	41	39	-7	126	117	-1	28	0			
0	1	54	-6	31	29	6	29	19	0	28	29			
-1	189	181	5	55	57	-6	30	2						
0	30	9	-5	57	45	5	29	18						
			4	42	20	-5	60	52						
			-4	32	3	4	69	81						
			2	57	56	-4	30	31						
			-3	57	88	3	32	30						
			2	30	20	-3	101	91						
			-2	76	83	2	30	7						
			1	109	109	-2	65	66						
			-1	30	6	1	67	65						
			0	30	33	-1	30	14						
			3	31	27	3	31	27						
			-1	27	1	27	1	27						
			1	29	3	29	3	29						
			0	27	1	27	1	27						
			-6	26	6	-6	26	6						
			-5	26	9	-5	26	9						
			4	26	7	4	26	7						
			-4	27	28	-5	27	28						
			3	57	44	-3	57	44						
			4	38	26	5	38	26						
			-4	68	69	-4	68	69						
			29	11	4	29	11	4						
			-4	68	69	-4	68	69						
			29	11	4	29	11	4						
			-3	39	34	-3	39	34						
			2	39	34	2	39	34						
			-2	30	13	-2	30	13						
			7	50	42	8	50	42						
			-7	81	77	-7	81	77						
			6	28	2	6	28	2						
			-6	67	71	-7	67	71						
			-5	58	56	-7	58	56						
			-3	10	-6	3	10	-6						
			5	38	26	5	38	26						
			-5	62	62	-5	62	62						
			9	27	9	9	27	9						
			-4	28	2	-4	28	2						
			-3	66	71	-3	66	71						
			3	27	3	3	27	3						
			2	38	35	2	38	35						
			-2	28	10	-2	28	10						
			1	43	33	1	43	33						
			-1	28	34	-1	28	34						
			0	30	23	0	30	23						
			-10	27	21	-10	27	21						
			-9	55	60	-9	55	60						
			-8	18	18	-8	18	18						
			-6	26	10	-6	26	10						
			-5	26	0	-5	26	0						
			-4	27	26	-4	27	26						
			-3	27	7	-3	27	7						
			2	32	14	2	32	14						
			1	43	33	1	43	33						
			-1	50	47	-1	50	47						
			0	26	5	0	26	5						



Abbild. 4. (001)-Projektion der Elementarzelle