

diesen Fall würden wir ein Modell mit Koordinaten gemäss Kolonne E der Tabelle vorschlagen; der Unterschied zum Prolinmodell ist am besten beim Vergleich der entsprechenden Seitenrisse erkennbar (Fig. 1b und 1c).

*Charakter des Rechenprogrammes.* In einem durch den «Fortran-Processor» in Maschinensprache übersetzten kombinierten und durch Eingabe von Leitziffern steuerbaren Programm wurden auf einer «IBM 1620» folgende Operationen automatisiert<sup>11)</sup>:

1. Einlesen eines Satzes von Koordinaten, gegeben a) als schiefwinklige Koordinaten in Kantentlängen-Einheiten einer monoklinen Elementarzelle, b) als Zylinderkoordinaten, c) als Cartesische Koordinaten;

2. Transformation der nach 1. eingelesenen Koordinaten in ein beliebig verdrehtes und verschobenes Cartesisches System;

3. die Berechnung a) des Abstandes zweier Atome, b) des Winkels, den drei Atome einschliessen, c) des Winkels, den zwei durch je drei Atome definierte Ebenen miteinander bilden, d) der Polarkoordinaten<sup>12)</sup> eines beliebigen Atoms, wobei Ursprung, Polrichtung und Nullazimut durch drei wählbare Atome definiert werden.

Diese Arbeit wurde auf Anregung von Herrn Prof. M. BRENNER (Basel) durchgeführt. Dem SCHWEIZERISCHEN NATIONALFONDS und der KOMMISSION ZUR FÖRDERUNG DER WISSENSCHAFTLICHEN FORSCHUNG durch Arbeitsbeschäftigungskredite des Bundes danken wir für die Bereitstellung der Mittel. Weiter danken wir dem Rechenzentrum Basel (Dr. A. LEEPIN) für die Möglichkeit, am Kernspeicher-Rechenautomaten IBM 1620 zu arbeiten.

#### ZUSAMMENFASSUNG

Unter dem Gesichtspunkt der Konstruktion von Molekelmodellen erheischen die der Literatur zu entnehmenden Atomkoordinaten in vielen Fällen eine Umformung. Die Angaben über peptidisch gebundenes Prolin bieten ein Beispiel. Es ist ein Rechenprogramm zur automatischen Datentransformation ausgearbeitet und zur Berechnung der Abmessungen eines Modells für Prolin bzw. Hydroxyprolin im Peptidverband verwendet worden.

Institut für organische Chemie der Universität Basel

<sup>11)</sup> Auf Anfrage erhältlich.

<sup>12)</sup> Polarkoordinaten ermöglichen es unmittelbar, Valenzrichtungen in ein kugelförmiges Modellatom zu bohren.

## 230. Eine neue Mikrokapillarpipette für chromatographische Arbeiten

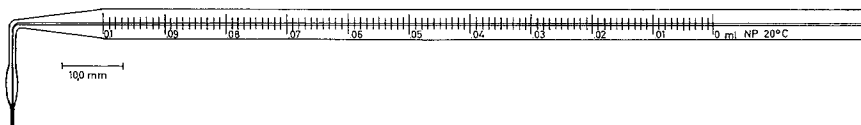
von H. R. Stocker

(18. VII. 63)

Zum Aufbringen der papier- oder dünn-schicht-chromatographisch zu untersuchenden Substanzlösungen bedient man sich meistens sogenannter Blutzuckerpipetten; oft kommen jedoch auch speziell für elektrophoretische Zwecke gedachte «ELPHOR»-Präzisionspipetten zum Einsatz, und in einigen Fällen verwendet man auch die etwas kostspieligen «AGLA»-Mikrometer- oder «HAMILTON»-Spritzen, wobei erstere das Maximum an Genauigkeit herauszuholen gestatten. Beim chromatographischen Arbeiten sieht man sich oft in die Lage versetzt, eine grössere Menge Analysenlösung aufzutragen, und zwar unter Wahrung eines möglichst kleinen

Startpunktes (3 mm  $\varnothing$ ). In andern Fällen erscheint es vorteilhaft, die Substanzlösung in Form eines schmalen Striches auf das Papier oder die Trägerschicht zu bringen. Das Auftragen solch «relativ» grosser Mengen an Substanzlösung – 20 bis 100 und mehr Mikroliter – bietet mit den oben genannten Pipetten erhebliche Schwierigkeiten, weil die Flüssigkeit zu schnell ausfliesst, woraus sich zu grosse Startflecke oder zu breite Startlinien ergeben. Mit den angeführten Spritzen kommt ein Überdimensionieren der Startflecke weniger in Betracht, doch ist es sehr umständlich und langwierig, schöne und gleichmässige Startstriche zu erhalten.

Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, verwenden wir eine in unserem Laboratorium entwickelte Mikrokapillarpipette (vgl. Fig.), die sehr einfach zu handhaben ist. Sie besteht aus einer dem Füllvolumen (100  $\mu$ l) entsprechenden geeichten



Kapillare (Normalpräzision), deren Ende auf der einen Seite in eine feinste haar-kapillare Verengung übergeht. Damit ein bequemes Auftragen gestattet ist, ist die Spitze der Pipette um 90° abgelenkt, so dass sie zum Arbeiten wie ein Schreibstift gehalten werden kann. Zum Aufbringen der Substanzlösung in Strichform lässt sie sich gut an einer Leitschiene entlang über den Trägerstoff führen. Die Spitze der Pipette ist plangeschliffen, damit die Flüssigkeit immer gleichmässig ausfliesst und keine Beschädigung des Trägers zu befürchten ist.

Laboratorium der Brauerei A. HÜRLIMANN AG., Zürich

## 231. Die Kristallstruktur des Kaliummethylats

von E. Weiss

(23. VII. 63)

Von den einfachen Alkalimetall-alkoholaten wurde bisher lediglich die Struktur des Lithiummethylats eingehender untersucht<sup>1)</sup>. DEBYE-SCHERRER-Diagramme des Kaliummethylats wurden bereits früher mitgeteilt<sup>1a) 2)</sup>, doch konnte seine Struktur bisher noch nicht abgeleitet werden. Nach vorhergehenden Strukturuntersuchungen an Alkalimetall-acetylendiolaten,  $M_2O_2C_2^3$  ( $M = K, Rb, Cs$ ), war auch für die Methanolate dieser Metalle eine ähnliche Struktur zu vermuten. Dabei sollten in einem tetragonalen Gitter lineare, parallele  $CH_3OK$ -Einheiten mit ähnlichen Nachbarschaftsverhältnissen wie im Falle der Acetylendiolate vorliegen. Diese Annahme konnte nun bei einer erneuten Untersuchung des Kaliummethylats bestätigt werden.

1) a) P. J. WHEATLEY, J. chem. Soc. 1967, 4270; b) H. DUNKEN & J. KRAUSSE, Z. f. Chem. 1, 27 (1961).

2) O. SCHMITZ-DUMONT, D. MERTEN & D. EIDING, Z. anorg. allg. Chem. 319, 366 (1963).

3) a) E. WEISS & W. BÜCHNER, Helv. 46, 1121 (1963); b) *idem*, Z. anorg. allg. Chem., im Druck.