

## 167. RÖNTGEN-Daten des 38-Hydrates des Natriumsalzes der Phytinsäure<sup>1)</sup>

von J. P. Fennessey und W. Nowacki

Abteilung für Kristallographie und Strukturlehre der Universität von Bern, Sahlstrasse 6

(19. VII. 68)

Die Phytinsäure (Hexaphosphorsäureester von Meso-inosit) ist im Pflanzenreich ausserordentlich verbreitet und kommt auch in den Erythrocyten von Hühnern und anderen Vögeln vor [1]. Die genaue Gestalt der Molekel zu kennen, wäre daher von grosser strukturchemischer Wichtigkeit. Wir haben deshalb das 38-Hydrat des Na-Salzes der Phytinsäure,  $C_6H_6Na_{12}O_{24}P_6 \cdot 38H_2O$  (1608,4) [2] untersucht.

Die Kristalle zersetzen sich beim Erwärmen (Smp. 58–59°), vermutlich als Resultat des Verlustes von Kristallwasser, ebenfalls unter Einwirkung der RÖNTGEN-Strahlen (Aufbrechen in kleine Fragmente; Lebensdauer weniger als ein Tag).

Das Salz bildet monokline, klare, farblose, (100)-lattenförmige, nach der *c*-Achse gestreckte Kristalle (Morphologie vgl. [3]) mit den Gitterkonstanten  $a_0 = 23,065 \pm 0,002$ ,  $b_0 = 12,120 \pm 0,004$ ,  $c_0 = 22,871 \pm 0,002$ ,  $\beta = 108^\circ 21,1 \pm 0,2'$  [in Übereinstimmung mit den morphologischen Daten in [3]  $a:b:c = 0,630066:1:0,639015$ ,  $\beta = 108^\circ 13'$  verglichen mit  $c_0:b_0:a_0 = 3 \times 0,629015:1:3 \times 0,63435$ ,  $\beta_0 = 108^\circ 21,2'$ ] und einem Zellvolumen von  $V = 6068,19 \text{ \AA}^3$ , erhalten nach der Methode der kleinsten Quadrate, angewandt auf 91  $0_{hkl}$ -Werte aus (*h0l*)-(Fe $K_{\alpha}$  = 1,93597 Å) und (*hk0*)-(Cu $K_{\alpha 1}$  = 1,54051 Å) WEISSENBERG-Aufnahmen (kalibriert mit Si-Pulver mit  $a_0 = 5,4196 \text{ \AA}$ ). Mit  $Z = 4$  ergibt sich  $d_x = 1,760 \text{ gcm}^{-3}$ , während  $d_{exp.} = 1,75 \pm 0,01 \text{ gcm}^{-3}$  (Flotation in einer Toluol-Tetrabromäthanlösung) ist.

Die Raumgruppe ist entweder *Cc* oder *C2/c* [(*hkl*) nur mit  $h + k = 2n$ , (*h0l*) nur mit  $l = 2n$  vorhanden]. Da die Molekulareigensymmetrie höchstens *m* ist, muss die Raumgruppe bei  $Z = 4$  die azentrische *Cc* sein, was durch einen positiven piezoelektrischen Test bestätigt wird.

Wir danken Herrn Prof. Dr. TH. POSTERNAK (Genf) für die Anregung zu dieser Arbeit und die Kristalle, Herrn Dr. P. ENGEL für seine Hilfe bei der Beobachtung des piezoelektrischen Effektes und dem SCHWEIZERISCHEN NATIONALFONDS (Projekt Nr. 4708.2) für Unterstützung bestens.

### LITERATURVERZEICHNIS

- [1] P. KARRER, «Lehrbuch der organischen Chemie», 13. Auflage, S. 702, Thieme, Stuttgart 1959.  
 [2] S. POSTERNAK, *Helv.* 4, 150 (1921).  
 [3] *Loc. cit.* [2], S. 162.

<sup>1)</sup> Mitteilung Nr. 191 der Abteilung für Kristallographie und Strukturlehre, Universität Bern.