

KRISTALLDATEN VON HEXACYANBENZOL

W. Littke und K. Wallenfels

Chemisches Laboratorium der Universität Freiburg/Brsg.

(Received 31 July 1965)

Hexacyanbenzol (1) fällt nach der Kristallisation aus wasserfreiem Acetonitril oder nach rascher Sublimation im Hochvakuum vorwiegend in Form farbloser Oktaeder mit abgeflachten Ecken und starkem Oberflächenglanz an. Die Kristalle verhalten sich im polarisierten Licht optisch isotrop; dies deutet auf eine Ordnung der Molekeln nach kubischer Symmetrie hin.

Zur Ableitung der Kristalldaten wurden mit CuK_α -Strahlung Pulveraufnahmen nach der Guiniermethode sowie Drehkristalldiagramme und Weissenbergaufnahmen bis zur fünften Schichtlinie angefertigt. Sämtliche Reflexe ließen sich lückenlos indizieren und führten zu einer primitiven kubischen Elementarzelle von der Kantenlänge $a=10,82 \pm 0,01 \text{ \AA}$.

Nach der Schwebemethode wurde die Dichte der Kristalle zu $1,20 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ermittelt. Dieser experimentelle Wert steht in bestem Einklang mit der Annahme von 4 Formeleinheiten pro Elementarzelle. Für diese errechnet man aus den Röntgendaten den theoretischen Wert von $1,196 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

Zur Festlegung der Raumgruppe wurde aus den Weissenbergdiagrammen entnommen, daß

- (hkl) ohne gesetzmäßige Auslöschung und
- (0kl) nur mit $k=2n$, (h0l) nur mit $l=2n$ sowie
- (hk0) nur mit $h=2n$

vorhanden ist. Hieraus ergibt sich für Hexacyanbenzol eindeutig die Raumgruppe $\text{Pa}\bar{3}$.

Eine derart hohe Symmetrie wurde bisher nur in sehr wenigen organischen Verbindungen festgestellt. Die Ergebnisse der Feinstrukturaufklärung werden demnächst mitgeteilt.

- (1) K. Wallenfels und K. Friedrich, Tetrahedron Letters
19, 1223 (1963).