

Zeitschrift: Verhandlungen der Schweizerischen Naturforschenden Gesellschaft.
Wissenschaftlicher und administrativer Teil = Actes de la Société
Helvétique des Sciences Naturelles. Partie scientifique et administrative
= Atti della Società Elvetica di Scienze Naturali

Herausgeber: Schweizerische Naturforschende Gesellschaft

Band: 151 (1971)

Vereinsnachrichten: Sektion für Kristallographie

Autor: [s.n.]

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 15.03.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

11. Sektion für Kristallographie

Schweizerische Gesellschaft für Kristallographie
Société Suisse de Cristallographie

Präsident: Prof. Dr. W. NOWACKI, Mineralogisch-Petrographisches
Institut, Sahlistrasse 6, 3000 Bern

Sekretär: Dr. P. ENGEL, Sahlistrasse 6, 3000 Bern

Samstag, 9. Oktober

1. W. NOWACKI (Bern): *Über die Unmöglichkeit der Ableitung aller Raumgruppen mittels Paralleloeder und deren Unterteilung in Stereoeder*

Wie schon FEDOROW in seiner Arbeit «Reguläre Plan- und Raumteilung» (Abh. k. Bayer. Akad. Wiss. II. Cl. XX. Bd. II. Abth., 1900) gezeigt hat, sind in allen Raumgruppen ausser in $O^{6,7}$ - $P4_{3,1}$ 32 sogenannte Hauptcentra (in unserer Dissertation «Homogene Raumteilung und Kristallstruktur», ETH Zürich, 1935, als Hauptpunkte im Sinne FEDOROWS [HP*] bezeichnet) vorhanden. Die HP* bilden wahre oder scheinbare Translationsgitter (TG). Bei den letzteren sind die «Gitterpunkte» nicht alle parallel orientiert, nur ihre Zentren bilden ein TG. Konstruiert man um die HP* herum ihre Wirkungsbereiche, so sind dies Paralleloeder. Unterteilt man die Paralleloeder entsprechend ihrer Eigensymmetrie, so erhält man Stereoeder. Da es in allen Raumgruppen – ausser $O^{6,7}$ – HP* gibt, ist eine Ableitung *aller* Raumgruppen mit Hilfe von Raumteilungen in Paralleloeder offensichtlich nicht möglich; man erhält alle Raumgruppen – ausser $O^{6,7}$.

Die Frage nach der maximalen Flächenanzahl F_{\max} eines Stereoeders und die Frage, ob *jedes* Stereoeder durch «erlaubte Abänderung» in einen Wirkungsbereich transformiert werden kann, sind noch offen. W. FISCHER (Marburg) hat einen Wirkungsbereich mit 24 Flächen gefunden; also ist $F_{\max} \geq 24$.

LITERATUR

NOWACKI, W.: Space groups not always derivable by parallelohedra and subdivision into stereohedra. *Science* 173: 52–53 (1971).

2. A. NIGGLI (Zürich): *Beschreibungsmöglichkeiten magnetischer Strukturen*

3. H. DACHS (Tübingen): *Neue Methoden, Fragestellungen und Ergebnisse in der Neutronenbeugung*

4. E. PARTHÉ und J. GARIN (Genf und Philadelphia): *Zinkblende- und Wurtzitüberstrukturen bei ternären Chalcogeniden der Zusammensetzung 1_246_3*

5. G. CHAPUIS (Zürich): *Kristallstruktur von $In_{6,6}Ca_{3,1}S_{13}$*

6. CHR. GNEHM (Zürich): *Strukturtypen im System Zn–In–S*
7. B. RIBÁR, B. MATKOVIĆ, M. ČLJUKIĆ und F. GABELA (Novi Sad): *Die Kristallstruktur von Hg/OH/NO₃*
8. D.J. MULLEN and W. NOWACKI (Bern): *Refinement of the Crystal Structures of Realgar, AsS, and Orpiment, As₂S₃*

The crystal structures of realgar and orpiment were refined in order to obtain more accurate As–S bond distances. Three-dimensional data were collected with a Weissenberg counter diffractometer. The cell dimensions of realgar are: $a = 9.325 \text{ \AA}$, $b = 13.571 \text{ \AA}$, $c = 6.587 \text{ \AA}$, $\beta = 106^\circ 23'$, and those of orpiment are: $a = 11.475 \text{ \AA}$, $b = 9.577 \text{ \AA}$, $c = 4.256 \text{ \AA}$, $\beta = 90^\circ 41'$. In both cases the space group is $P2_1/n(C_{2h}^5)$. The final R factors after several rounds of least squares refinement were 0.045 for realgar and 0.065 for orpiment.

The structures are essentially the same as the original determinations. Realgar has four separate As_4S_4 molecules per unit cell, with cradle-like molecular configurations, van der Waals' forces being operative between the molecules. The structure of orpiment consists of layers of covalently bonded sulphur and arsenic atoms, lying normal to the (010) direction. These layers can be considered as being composed of $-As_2S_2-$ chains, parallel with the c direction, with sulphur bridges between arsenic atoms in neighbouring chains. Van der Waals' forces are responsible for inter-layer cohesion.

The mean As–S bond distance is 2.237 Å in realgar and 2.282 Å in orpiment.

9. F. SCARBROUGH (Bern): *The crystal structures of two polyhedral boron cage compounds—Examples of direct methods solutions*
10. D. SCHWARZENBACH (Zürich): *Kristallstrukturen von Titanperoxykomplexen*
11. I. UEDA and W. NOWACKI (Bern): *The crystal structure of di-*p*-bromobenzoic ester of capsanthin*

The crystal structure of di-*p*-bromobenzoic ester of capsanthine ($C_{54}H_{62}O_5Br_2$) was determined from three-dimensional X-ray diffraction data. The unit cell dimensions are $a = 19.385$, $b = 33.02$, $c = 7.88 \text{ \AA}$ and $\beta = 92.5^\circ$. The space group is $P2_1$ and $Z = 4$. The intensity data were collected photographically and the structure was solved by a minimum function method based on a modified Patterson function. In spite of the radiation damage by X-rays and the high temperature factors, all atoms could be found except the hydrogen atoms. The molecules are in contact with each other by van der Waals' interactions. The structure of the molecule agrees with one of the chemical constitutional formulae proposed by KARRER, except that the hydroxyl group and the carboxyl group around the cyclopentene ring of capsanthine itself is in the *trans* configuration. The carotenoid chain is in the all-*trans* configuration.

12. T. ITO (Bern), Y. IIMURA and H. HAGIHARA: *The crystal structure of cadmium ethylxanthate*

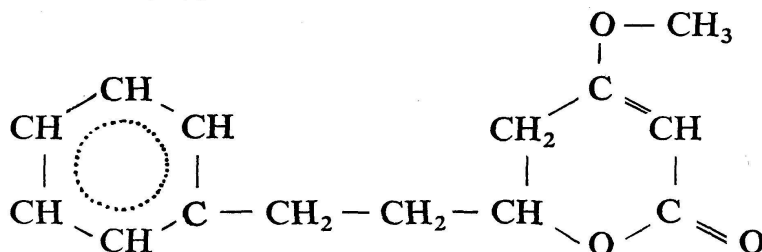
13. P. ENGEL und W. NOWACKI (Bern): *Die Kristall- und Molekülstruktur von Dihydrokavain und Methysticin*

Dihydrokavain $C_{14}H_{16}O_3$ und Methysticin $C_{15}H_{14}O_5$ sind zwei Derivate aus der Wurzel des Kawapfeffers (*Piper methysticum*). Die Molekülstruktur wurde mittels direkter Phasenbestimmungsmethoden ermittelt.

Dihydrokavain kristallisiert in der monoklinen Raumgruppe $P2_1/c$ mit $a = 10,921$, $b = 7,605$, $c = 17,014$ Å, $\beta = 119,49^\circ$. Die Phasenwinkel (0° bzw. 180°) wurden mit der für zentrosymmetrische Raumgruppen anwendbaren Formel

$$E_h \approx \sum_k E_k E_{h-k}$$

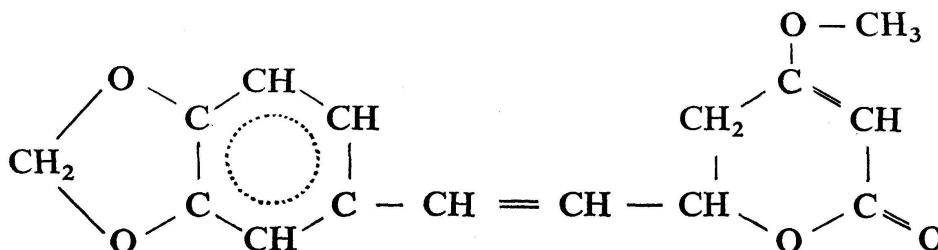
bestimmt. Die *E*-Fouriersynthese zeigte die vollständige Struktur. Die Verfeinerung erfolgte mit der Methode der kleinsten Quadrate bis zu einem *R*-Wert von 8,5%.



Methysticin kristallisiert in der orthorhombischen Raumgruppe $P2_12_12_1$ mit $a = 28,916$, $b = 8,504$, $c = 5,348$ Å. Die Phasenwinkel ($0^\circ \leq \varphi < 360^\circ$) für azentrische Raumgruppen können mit der Tangensformel

$$\operatorname{tg} \varphi_h \approx \frac{\sum_k |E_k E_{h-k}| \sin(\varphi_k + \varphi_{h-k})}{\sum_k |E_k E_{h-k}| \cos(\varphi_k + \varphi_{h-k})}$$

berechnet werden. Die *E*-Fouriersynthese liess Teile der Struktur erkennen. Aus der Fourieranalyse der Teilstruktur resultierten angenäherte Phasenwinkel, die erneut mit der Tangensformel verfeinert wurden. Die neue *E*-Fouriersynthese zeigte die ganze Struktur. Die Verfeinerung mit der Methode der kleinsten Quadrate ergab einen *R*-Wert von 7%.



14. RITA GRIEB (Zürich): *Kristallstruktur von 2-[5-isopropylfuryl-(2)]-3-acetyl-*p*-Benzochinon*