

## Brèves communications - Kurze Mitteilungen

## Brevi comunicazioni - Brief Reports

Les auteurs sont seuls responsables des opinions exprimées dans ces communications. — Für die kurzen Mitteilungen ist ausschließlich der Autor verantwortlich. — Per le brevi comunicazioni è responsabile solo l'autore. — The editors do not hold themselves responsible for the opinions expressed by their correspondents.

### Die Kristallstruktur des monoklinen basischen Kupfernitrates<sup>1</sup>

Es wurde die vollständige Struktur des monoklinen basischen Kupfernitrates  $\text{Cu}_4(\text{NO}_3)_2(\text{OH})_6$  mittels Patterson-, Trial-and-error- und Fourier-Methoden bestimmt. Die Gitterkonstanten sind  $a = 5,57 \pm 0,00$ ,  $b = 6,05 \pm 0,00$ ,  $c = 6,89 \pm 0,00 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 94^\circ 30' \pm 6'$ ,  $V = 231,9 \text{ \AA}^3$ ; die Raumgruppe ist  $C_{2h}^2 - P2_1/m$ . Die Dichte beträgt  $d_{\text{phys.}} = 3,32$ ,  $d_{\text{räntg.}} = 3,33 \text{ gcm}^{-3}$ ; es ist  $Z = 1$  Formeleinheit in der Zelle vorhanden. Die Punktlagen und Parameter ergeben sich zu

	$x$	$y$	$z$
$\text{Cu}_1$ = (2a)	mit 0	0	0
$\text{Cu}_{11}$ = (2e)	0,500	0,250	0
$\text{OH}_1$ = (2e)	0,867	0,250	0,833
$\text{OH}_{11}$ = (4f)	0,333	0	0,842
$\text{O}_1$ = (2e)	0,200	0,250	0,217
$\text{N}$ = (2e)	0,200	0,250	0,391
$\text{O}_{11}$ = (4f)	0,200	0,076	0,479

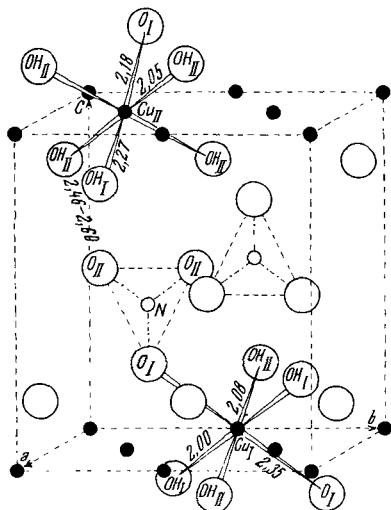


Abb. 1.

Die Struktur ist eine typische Schichtstruktur (Abb. 1). Die Cu-Atome bilden ein pseudohexagonales Netz (001) mit  $\text{Cu}-\text{Cu} = 3,03$  bzw.  $3,17 \text{ \AA}$ . Jedes  $\text{Cu}_1$  ist deformiert oktaedrisch von 2  $\text{OH}_1$ , 2  $\text{OH}_{11}$  und 2  $\text{O}_1$  (von  $\text{NO}_3$ -Gruppen) in den Abständen 2,00, 2,08 und  $2,35 \text{ \AA}$ , jedes  $\text{Cu}_{11}$  analog von 4  $\text{OH}_{11}$ , 1  $\text{O}_1$  und 1  $\text{OH}_1$  in den Abständen 2,05, 2,18 und  $2,27 \text{ \AA}$  umgeben. Es sind Oktaederschichten (vom C6-Typ)  $\text{Cu}_X_{6/3} = \text{Cu}_X_2$  ( $X = \text{OH}_1, \text{OH}_{11}, \text{O}_1$ ) vorhanden. Der Abstand  $\text{OH}_{11}-\text{O}_{11}$  beträgt 2,46–2,60  $\text{ \AA}$  und wird als Wasserstoffbindung  $\text{O}-\text{H}_{11} \dots \text{O}_{11}$  interpretiert. Die Oktaederschichten

hängen durch diese Wasserstoffbindungen über die  $\text{NO}_3$ -Gruppen, welche nahezu normal zu den Schichtebenen stehen, miteinander zusammen. Im Gegensatz zu vielen Schichtstrukturen ist diese Verbindung wohl infolge der Stellung der Nitratgruppen optisch positiv. — Die Struktur ist mit dem basischen Kupferbromid<sup>1</sup> isotyp.

Die ausführliche Arbeit wird a. a. O. erscheinen.

W. NOWACKI und R. SCHEIDEDEGGER

Mineralogisches Institut, Abteilung für Kristallographie und Strukturlehre, Universität Bern, den 11. September 1951.

### Summary

The structure of monoclinic basic copper nitrate (I) was determined by Patterson, trial and error, and Fourier methods. (I) is a typical layer structure, the Cu-atoms forming a pseudo-hexagonal net (001), being surrounded octahedrally by (4 + 2) OH or O with distances 2,00 to 2,35  $\text{ \AA}$ . The nitrate groups are almost perpendicular to the layers, one O lying in the OH-planes above and below the planes of the Cu-atoms. The structure is isotypic with basic copper bromide.

<sup>1</sup> F. AEBI, Helv. chim. acta 31, 369 (1948).

### Kristallstrukturelle Untersuchung von Xanthazol-Monohydrat<sup>1</sup>

Es wurde mit einer vollständigen Kristallstrukturbestimmung des Monohydrats der purinanalogen Verbindung 5,7-Dihydroxy-1v-triazolo(d)pyrimidin (Formelbild Abb. 1) begonnen. Die Substanz, deren Herstellung wir der Freundlichkeit von Prof. H. ERLENMEYER (Basel) verdanken, wurde in Parallel zum Guanazol als Xanthazol bezeichnet. BITTERLI und ERLENMEYER<sup>2</sup> haben außerdem  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{CH}_3^-$  und  $\text{NH}_2$ -substituierte Triazolopyrimidine erstmalig synthetisiert.

Drehkristall- und Weißbergaufnahmen ergaben eine trikline Elementarzelle mit  $a = 9,67 \text{ \AA}$ ,  $b = 10,71 \text{ \AA}$ ,  $c = 5,24 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 100^\circ 52'$ ,  $\beta = 141^\circ 54'$ , und  $\gamma = 87^\circ 00'$ . Gemäß der mit der Schwebemethode bestimmten Dichte von etwa 1,74 sind  $Z = 2$  Moleküle in der Elementarzelle vorhanden. Die Intensitäten von etwa 1300 Reflexen wurden nach dem Multipelfilmverfahren ermittelt. Es wurde versucht, mittels der Methode von ROGERS<sup>3</sup>, welche auf einer statistischen Auswertung der Intensitäten basiert, zwischen der zentrischen ( $C_1^1 - P\bar{1}$ ) und der azentrischen Symmetrie ( $C_1^1 - P1$ ) zu unterscheiden, was aber nicht eindeutig gelang. Immerhin zeigte die Statistik eine größere Annäherung an den

<sup>1</sup> Mitteilung Nr. 64 von W. NOWACKI und Mitarbeitern.

<sup>2</sup> P. BITTERLI und H. ERLENMEYER, Helv. chim. acta 34, 835 (1951).

<sup>3</sup> D. ROGERS, Research 2, 342 (1949); Acta cryst. 3, 210 (1950).

<sup>1</sup> Mitteilung Nr. 64 von W. NOWACKI und Mitarbeitern.

<sup>2</sup> Mitteilung Nr. 1 von W. NOWACKI und R. SCHEIDEDEGGER, Acta cryst. 3, 472 (1950).