

H. BÄRNIGHAUSEN, H. BECK, H. W. GRUENINGER, E. TH. RIETSCHEL und N. SCHULTZ (Karlsruhe), **Neue AB₂-Strukturtypen mit siebenfach koordiniertem Kation.**

Unter Verwendung dreidimensionaler Einkristall-Röntgeninterferenzdaten (MoK α -Strahlung) wurden die Kristallstrukturen von Sr(OH)₂, SrJ₂ und EuJ₂ (zwei Modifikationen) durch Interpretation der Patterson-Synthesen bestimmt und nach der Methode der kleinsten Quadrate verfeinert. In allen Verbindungen ist das zweiwertige Kation von sieben ungefähr gleichweit entfernten Anionen umgeben. Die Koordinationspolyeder sind zwar ähnlich, jedoch unterscheidet sich dasjenige von Sr(OH)₂ bezüglich der idealisierten Symmetrie deutlich von den übrigen (*mm2* gegen *m*). Zwischen der monoklinen und der mit SrJ₂ isotypen rhombischen Modifikation von EuJ₂ bestehen enge strukturelle Beziehungen. Interessant ist in diesem Zusammenhang, daß die bei der monoklinen Form beobachtete Zwillingsbildung eine Mittelstellung einnimmt. Bemerkenswert sind ferner strukturelle Parallelen zwischen Sr(OH)₂ und YOOH. Diese werden unter einem gruppentheoretischen Aspekt diskutiert.

Sr(OH)₂: *Pnam*; $a = 9,889$, $b = 6,1202$, $c = 3,9184$ Å; $Z = 4$. Ortsparameter der Atome Sr: 0,1613, 0,0959, 0,25; O(1): 0,395, 0,344, 0,25; O(2): 0,369, -0,135, 0,25.

EuJ₂: *P2₁/c*; $a = 7,64$, $b = 8,26$, $c = 7,88$ Å, $\beta = 98^\circ$; $Z = 4$. Ortsparameter der Atome Eu: 0,2138, 0,4473, 0,3052; J(1): 0,4009, 0,1093, 0,2158; J(2): -0,0765, 0,2700, -0,0049.

SrJ₂: *Pbca*; $a = 15,22$, $b = 8,22$, $c = 7,90$ Å, $Z = 8$. Ortsparameter der Atome Sr: 0,1105, 0,4505, 0,2764; J(1): 0,2020, 0,1077, 0,1630; J(2): -0,0341, 0,2682, 0,0054.

V. BENGIAT (Department of Chemistry, Weizmann Institute of Science, Rehovoth, Israel), H. IRNGARTINGER (Organisch-chemisches Institut der Universität Heidelberg) und L. LEISEROWITZ (Department of Chemistry, Weizmann Institute of Science, Rehovoth, Israel), **Die Elektronendichteverteilung in der C \equiv C-Bindung.**

Wir befassen uns in unseren beiden Laboratorien mit der systematischen röntgenographischen Untersuchung von Acetylenverbindungen mit dem Ziel, die Elektronendichteverteilung in C \equiv C-Bindungen zu bestimmen. Von den beiden Verbindungen (I)¹ und (II) wurden dreidimensionale Zählerdaten vermessen, (I) auf einem automatischen Siemens-Diffraktometer nach HOPPE mit MoK-Strahlung nach der Differenz-Filter-Methode bis zu $(\sin \theta)/\lambda = 0,81$, (II) auf einem General-Electric-Goniostat mit CuK α -Strahlung nach der Methode mit stationärem Kristall und stationärem Zähler. Die Strukturen wurden mit einem Fortran-Programm SEARCH² (I) und durch Patterson-Projektionen (II) gelöst. Die Verbesserung der Koordinaten und anisotropen Temperaturparameter der schweren Atome ergaben niedrige *R*-Werte. In (II) bilden die Ebenen der beiden Carboxyl-