

etwa gleich ( $\approx 0,2 \text{ \AA}^{-3}$ ), aber in der vierten Bindung werden deutlich höhere Werte gefunden. Dichtemaxima, die auf ungebundene Elektronenpaare zurückzuführen sind, treten an den Stickstoffatomen auf.

Im  $\text{S}_4\text{N}_4\text{F}_4$  liegen je zwei verschieden lange Bindungen (1,652 und 1,544 Å) vor. Die Elektronendichte der längeren Bindung entspricht den drei Bindungen in  $\text{S}_4\text{N}_4\text{H}_4$ , die geringere Dichte zeigen. Die Dichte in den beiden kurzen Bindungen ist erheblich höher.

In der S–F-Bindung wird nur eine geringe Dichte beobachtet, was Angaben über andere Bindungen, die Fluor enthalten, entspricht [2]. Theoretische MO-Rechnungen an diesen Systemen liegen vor [3] und zeigen qualitative Übereinstimmung mit unseren Experimenten.

Die Elektronendichten zeigen eine befriedigende Korrelation zu den Abständen, allerdings ist eine quantitative Interpretation nicht möglich.

### Literatur

1. Hansen, N. K., Coppens, P.: Acta Crystallogr. A34, 909 (1978)
2. Seiler, P., Schweizer, W. B., Dunitz, J. D.: Acta Crystallogr. B40, 319 (1984)
3. Foti, A., Smith, V. H., Kishner, S., Gopinathan, M. S., Whitehead, M. A.: Mol. Phys. 35, 111 (1978)

H. Fuess, M. Körfer und E. Stuckenschmidt (Institut für Kristallographie der Universität Frankfurt). **Inelastische Neutronenstreuung – eine spektroskopische Methode in der Kristallographie.**

Aus Neutronenflugzeitmessungen lassen sich Aussagen über Molekülbewegungen in Kristallen ableiten. Besonders vorteilhaft ist dabei die Untersuchung wasserstoffreicher Substanzen, da hierbei der hohe inkohärente Streuquerschnitt des Wasserstoffs ausgenutzt werden kann. Der Austausch von Wasserstoff gegen Deuterium bietet zusätzliche Möglichkeiten der Zuordnung von inelastischen Linien. Neben der Information aus dem inelastischen Energie- oder -verlustspektrum läßt die Analyse der quasi-elastischen Linie Aussagen über Diffusionsvorgänge zu (Translations- und Rotationsdiffusion).

Mit inelastischer Neutronenstreuung untersuchen wir die Beweglichkeit von Wassermolekülen in natürlichen Zeolithen und die Dynamik der  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$ -Gruppe in dem Ferroelektrikum  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{HgCl}_3$  oberhalb und unterhalb des Phasenübergangs.

Es sollen die Prinzipien inelastisch inkohärenter Neutronenflugzeitmessungen und erste Ergebnisse der Anwendung auf die beiden genannten Gebiete vorgestellt werden.

J. Gauß und D. Cremer (Institut für Organische Chemie der Universität Köln). **Zur Frage der Referenzebene in nichtplanaren Ringmolekülen.**

Der Konformationsraum eines N-gliedrigen Ringmoleküls wird durch  $(N-3)$  Ringwellungsparameter aufgespannt. Jedem Punkt des Konformationsraums entspricht eine bestimmte Ringkonformation, deren Geometrie durch N Bindungslängen und  $(N-3)$  Bindungswinkel bestimmt ist.

Die Beschreibung nichtplanarer Ringmoleküle durch Berechnung der „least-squares“ (LS)-Ebene hat den Nachteil, daß sie, statt zu  $(N-3)$ , zu N die Ringkonformation beschreibenden Koordinaten führt. Eine eindeutige Festlegung der Konformation im  $(N-3)$ -dimensionalen Konformationsraum mit Hilfe der LS-Koordinaten ist nicht möglich [1, 2].

Es empfiehlt sich deshalb, anstelle der LS-Ebene die „Mean plane“ (MP) zu berechnen, welche durch die Gleichungen (1)–(3) bestimmt ist [2]:

$$\sum_i^N z_i = 0 \quad (1)$$

$$\sum_i^N z_i \cos \alpha_i = 0 \quad (2)$$

$$\sum_i^N z_i \sin \alpha_i = 0 \quad (3)$$

mit  $\alpha_i = 2\pi(i-1)/N$ . Die MP hat den Vorteil, daß sie zu  $(N-3)$  Ringwellungsparametern führt und damit eine eindeutige Festlegung der Ringkonformation im Konformationsraum ermöglicht. Es läßt sich beweisen, daß die MP invariant ist gegenüber konformativen Prozessen wie z. B. der Ringpseudorotation. Demgegenüber präzediert die Normale der LS-Ebene um die Normale der MP bei der Pseudorotation, d. h. die Richtung der LS-Ebene hängt von der jeweiligen Konformation des Ringes ab. Aus diesem Grunde sollte die MP als Referenzebene zur Beschreibung nichtplanarer Ringmoleküle gewählt werden. Bei Bedarf kann die Richtung der LS-Ebene auf einfache Weise aus derjenigen der MP abgeleitet werden.

### Literatur

1. Cremer, D.: Acta Crystallogr. **B40**, 498 (1984)
2. Essen, H., Cremer, D.: Acta Crystallogr. **B40**, 418 (1984)
3. Cremer, D., Pople, J. A.: J. Am. Chem. Soc. **97**, 1354 (1975)