

Acta Cryst. (1971). B27, 1684

Lattice parameters and space groups of two diethyldithiocarbamates. A correction. By A. CONDE, F. BERNIER, A. LÓPEZ-CASTRO and R. MÁRQUEZ, *Departamento de Óptica, Sección de Física del C.S.I.C., Universidad de Sevilla, Spain*

(Received 19 April 1971)

A correction of earlier data [*Acta Cryst.* (1970). B26, 2135] for Te diethyldithiocarbamate.

Since the publication of an earlier paper by Conde, Bernier, López-Castro & Márquez (1970) two different compounds have been found in the recrystallization of Te diethyldithiocarbamate: Te(II) diethyldithiocarbamate and Te(IV) diethyldithiocarbamate.

The crystallographic data of our publication correspond to the Te(IV) compound. The experimental value of the

density is 1.52 g.cm^{-3} and the number of molecules per unit cell is 8.

Ours thanks are due to Professor S. Husebye for his communication.

References

CONDE, A., BERNIER, F., LÓPEZ-CASTRO, A. & MÁRQUEZ, R. (1970) *Acta Cryst.* B26, 2135.

Acta Cryst. (1971). B27, 1684

Die Kristallstruktur von Brenzcatechin: eine Neubestimmung.* Von HARTMUT WUNDERLICH† und DIETRICH MOOTZ,‡ *Abteilung für Röntgenstrukturanalyse, Gesellschaft für Molekularbiologische Forschung mbH, 3301 Stöckheim über Braunschweig, Deutschland*

(Eingegangen am 3. Dezember 1970)

The crystal structure of catechol, 1,2-dihydroxybenzene, which had been described earlier, was redetermined. The main improvements of this more accurate study are: (1) hydrogen atoms showed up as highest peaks in a difference map and were refined anisotropically; (2) the suggested proton order in the hydrogen bonding system is strongly confirmed; (3) a third hydrogen bond as an intramolecular component of a bifurcated interaction is established; (4) bond lengths and bond angles in the benzene ring are more uniform.

Die Kristallstruktur von Brenzcatechin, 1,2-Dihydroxybenzol, wurde von Brown (1966) bestimmt. Die auf Weissenbergaufnahmen mit Cu $K\alpha$ -Strahlung (wahrscheinlich; Strahlung in der Arbeit nicht angegeben) gesammelten Intensitäten wurden visuell geschätzt und ergaben 912 beobachtete unabhängige Strukturamplituden, mit denen bei anisotroper Verfeinerung der unabhängigen sechs Kohlenstoff- und zwei Sauerstoffatome und isotroper Berücksichtigung der sechs Wasserstoffatome in modellmässiger konstruierter Positionen eine befriedigende Struktur und ein *R*-Faktor von 0,058 erreicht wurden.

Eine Neubestimmung dieser Struktur erscheint hiernach nicht notwendig. Wir hätten uns auch nicht dazu entschlossen, wenn wir nicht bei dem Vorhaben, die Struktur eines mit Brenzcatechin substituierten Phosphorans zu bestimmen, unbeabsichtigt einen neuen Datensatz von Brenzcatechin selbst gemessen hätten, das offensichtlich in grosser Menge als Zersetzungsprodukt entstanden war. Dieser Irrtum wurde erst beim Studium der Pattersonfunktion bemerkt. Aus ihm erwuchs unsere Neubestimmung,

die im folgenden wegen ihrer generell etwas höheren Genauigkeit und eines besonderen, neuen, Aspektes der Struktur beschrieben wird.

Experimentelles und kristallographische Daten

Weissenberg- und Präzessionsaufnahmen der in dünnwandige Glaskapillaren eigenschmolzenen Kriställchen zeigten monokline Symmetrie und die für die Raumgruppe $P2_1/c$ charakteristischen Auslöschungen. Die Gitterkonstanten wurden durch eine Ausgleichsrechnung mit den gemessenen Diffraktometerwinkeln von 35 Reflexen gewonnen:

Diese Arbeit:	Brown (1966):
$a = 10,082$ (1) Å	10,069 Å
$b = 5,518$ (2)	5,509
$c = 10,943$ (1)	10,941
$\beta = 118,53$ (1)°	119,0°

Die Zahlen in Klammern sind geschätzte Standardabweichungen und beziehen sich auf den letzten angegebenen Stellenwert. Die von Brown (1966) angegebenen Werte (ohne Standardabweichungen) sind hier von $P2_1/a$ nach $P2_1/c$ transformiert worden. Die Dichte wurde von Brown (1966) zu $d_m = 1,371 \text{ g.cm}^{-3}$ gemessen. Mit vier Molekülen $C_6H_4(OH)_2$ in der Elementarzelle beträgt der mit den neuen Gitterkonstanten berechnete Wert $d_x = 1,367 \text{ g.cm}^{-3}$.

Die Intensitäten aller unabhängigen Reflexe mit $\theta \leq 70^\circ$ wurden auf einem automatischen Diffraktometer (AED)

* Gekürzt vorgetragen auf der Wintertagung 1971 der American Crystallographic Association in Columbia, South Carolina, U.S.A. (Wunderlich & Mootz, 1971).

† Gegenwärtige Adresse: Department of Crystallography, University of Pittsburgh, Pittsburgh, Pa. 15213, U.S.A.

‡ Gegenwärtige Adresse: Max-Planck-Institut für Festkörperforschung, 7 Stuttgart 1, Heilbronner Strasse 69, Deutschland.