

account. The atomic parameters are given in Table 2. The difference Fourier maps of b and a axis projections indicated that a small proportion of the $C\gamma$ atom was still distributed in the *gauche* I (*trans* to $H\alpha$) and *gauche* II (*trans* to the carboxyl group) positions. Persistence of the disordered structure even at -90°C was also indicated by the presence of very diffuse $h+k=2n+1$ reflexions which should be extinguished on changing to the structure of space group $I2/a$.

Table 2. Atomic parameters for the C form

	x	y	z	B
O(1)	0.49	0.45	0.080	1.93
O(2)	0.30	0.20	0.048	1.26
N	0.11	0.60	0.067	0.10
C(1)	0.36	0.41	0.069	2.25
C(2)	0.25	0.57	0.102	0.12
C(3)	0.24	0.51	0.155	1.20
C(4)	0.37	0.55	0.198	4.20

$C(2) = C\alpha$, $C(3) = C\beta$, $C(4) = C\gamma$

A stereoscopic view of the structure of the C form is shown in Fig. 1, along with one of the A form. The figures were drawn by the *ORTEP* program by Johnson (1965). It may be seen that while the structure of the hydrogen-bonded double layer remains almost the same in both forms, the stackings of the double layers are different. In the A form, the distance between the nearest $C\gamma$ atoms facing each other across the gap between the double layers would be as close as about 2.8 \AA , if all the $C\gamma$ atoms were fixed at the *trans* position. In the C form, on the other hand, they are separated by more than 3.4 \AA even if all of them adopt the *trans* conformation. Hence, the C form structure is quite favourable for the *trans* conformation of the $C\gamma$ atoms.

References

- ICHIKAWA, T. & IITAKA, Y. (1968). *Acta Cryst.* B24, 1488.
 JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, U.S.A.
 MATHIESON, A. McL. (1952). *Acta Cryst.* 5, 332.
 MATHIESON, A. McL. (1953). *Acta Cryst.* 6, 399.

Acta Cryst. (1972). B28, 3107

Vierlingsbildung und Symmetrie des Lithiumchlorid-Monohydrats $\text{LiCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$. VON HANS JACOBI, *Mineralogisch-Kristallographisches Institut der T.U. Clausthal, Deutschland*

(Eingegangen am 17. Januar 1972 und wiedereingereicht am 19. Juni 1972)

Contrary to existing data, $\text{LiCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ is orthorhombic with $a=c=2 \times 3,84$, $b=3,87 \text{ \AA}$, with space group $Cmcm$ or one of the corresponding sub-groups.

Die unterschiedlichen Angaben in der Literatur über die Symmetrie und die Abmessungen der Elementarzelle des $\text{LiCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ beruhen vorwiegend auf Röntgenpulverdiagrammen (Ott, 1926; Rotter, 1951; Kessis, 1965; Weiss, Hensel & Kühr, 1969). Einkristalluntersuchungen lagen bisher nur vor von Hendricks (1928), auf dessen Ergebnisse sich auch Datt, Rannev, Ozerov & Kuznets (1971) bei der Auswertung ihrer Neutronenbeugungsdiagramme an einem 'Einkristall in Form einer viereckigen Bipyramide' stützen. Nach den genannten Autoren kristallisiert das $\text{LiCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ im tetragonalen System mit nahezu kubischen Gitterkonstanten. Nun macht aber bereits Hendricks folgenden Hinweis: 'as a rule the crystals were twinned in a complicated manner. The few single crystals obtained were apparently tetragonal showing development of (001), (111), (11T)'. Nach eigenen Untersuchungen an sehr zahlreichen Kristallen aus verschiedenen Ansätzen, auf die die Beschreibungen von Ott und Datt und vor allem auch die Beschreibung der vermeintlichen Einzelindividuen von Hendricks zutreffen, handelt es sich hier keineswegs um Einzelindividuen sondern ausnahmslos um Vierlinge, die eine tetragonale Bipyramide mit oder ohne Basisflächen vortäuschen. Bei frisch aus wässriger Lösung gezüchteten Kristallen sind die Vierlingsgrenzen unter einem schwach vergrößernden Stereomikroskop bei gekreuzten Polarisatoren mühelos erkennbar.

Aus dem Vierlingsverband abgetrennte Einzelindividuen wurden mit Präzessionsaufnahmen untersucht. Hierbei konnte die eindeutige Orientierung der Kristalle zum Primärstrahl nur polarisationsoptisch im konoskopischen Strahlengang erfolgen. Im Einzelnen wurden folgende

Ergebnisse erhalten: $\text{LiCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ist optisch zweiachsig positiv [$2 V_\gamma$, ca. 60° , $AE \parallel (001)$], rhombisch-pseudotetragonal mit $a_0=c_0=2 \times 3,84 \text{ \AA}$ und $b_0=2 \times 3,87 \text{ \AA}$ (jeweils $\pm 0,02 \text{ \AA}$), $Z=8$. Diese Zellabmessungen stimmen numerisch mit den von Weiss und Mitarbeitern verfeinerten Werten von Kessis überein. Die gefundenen Auslöschungen sind für $Cmcm$ (oder deren Untergruppen) charakteristisch. Zwillingflächen sind (101) und (10T).

Einzelindividuen wurden trotz zahlreicher Versuche unter Variation der Züchtungsbedingungen nie erhalten. Bei der mechanischen Trennung der Vierlinge erweist sich die gute Spaltbarkeit nach (100) als störend: während Vierlinge scharfe Röntgenreflexe liefern, ergeben abgetrennte Einzelindividuen vor allem bei der Intensitätsmessung am Zählrohrgoniometer so stark verbreiterte Linienprofile, dass die bei dieser Verbindung – im Zusammenhang mit der Strukturaufklärung des $[\text{Li}(\text{OH}_2)_3]\text{ZnCl}_3$ (Jacobi, 1969) – besonders interessierende Bestimmung der Protonenlagen aussichtslos erschien. Bemerkenswert ist, dass Versuche zur 'Ausheilung' häufig zu erneuter Vierlingsbildung führten.

Literatur

- DATT, I. D., RANNEV, N. V., OZEROV, R. P. & KUZNETS, V. M. (1971). *Sov. Phys. Crystallogr.* 16, 538.
 HENDRICKS, S. B. (1928). *Z. Kristallogr.* 66, 297.
 JACOBI, H. (1969). *Naturwiss.* 56, 368.
 KESSIS, J. J. (1965). *Bull. Soc. Chim. Fr.* 32, 48.
 OTT, H. (1926). *Z. Kristallogr.* 63, 231.
 ROTTER, R. (1951). *Vestn. Geol. Úst. Čsl.* 26, 213.
 WEISS, E., HENSEL, H. & KÜHR, H. (1969). *Chem. Ber.* 102, 632.