

acceptors in the bonds were phosphate oxygens (Veidis, Palenik, Schaffrin & Trotter, 1969; Blessing & McGandy, 1972).

This work resulted from a suggestion by Dr H.W. Wyckoff. It was supported by grant GM-10867 from the United States Public Health Service, and grant 65/15552 from the Australian Research Grants Committee.

References

- BLESSING, H. R. & MCGANDY, E. L. (1972). *J. Amer. Chem. Soc.* **94**, 4034–4035.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS*. Oak Ridge National Laboratory Report ORNL-TM-305.
- CROMER, D. T. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 17–23.
- CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 104–109.
- FREEMAN, H. C. & GUSS, J. M. (1972). *Acta Cryst.* **B28**, 2090–2096.
- FREEMAN, H. C., GUSS, J. M., NOCKOLDS, C. E., PAGE, R. & WEBSTER, A. (1970). *Acta Cryst.* **A26**, 149–152.
- HAMILTON, W. C. & IBERS, J. A. (1968). *Hydrogen Bonding in Solids*, pp. 259–265. New York: Benjamin.
- MADDEN, J. J., MCGANDY, E. L. & SEEMAN, N. C. (1972). *Acta Cryst.* **B28**, 2377–2382.
- MARTÍNEZ-CARRERA, S. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 783–789.
- RAE, A. D. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 683–684.
- RAE, A. D. & BLAKE, A. B. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 586.
- STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175–3187.
- SUNDBERG, R. J. & MARTIN, R. B. (1974). *Chem. Rev.* **74**, 471–517.
- VEIDIS, M. J., PALENIK, G. J., SCHAFFRIN, R. & TROTTER, J. (1969). *J. Chem. Soc. (A)*, pp. 2659–2666.
- YAMANE, T., ASHIDA, T. & KAKUDO, M. (1973). *Acta Cryst.* **B29**, 2884–2891.

Acta Cryst. (1975). **B31**, 2837

Die Kristallstruktur von α -Tetrasilbertelluridnitrat

VON E. SCHULTZE-RHONHOF*

Chemisches Institut der Universität Bonn, Bonn, Deutschland (BRD)

(Eingegangen am 28. Juli 1974; angenommen am 3. September 1974)

The crystal structure of α - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ has been determined from powder data (final R value 10.5%). The compound is cubic, space group $P\bar{a}3$ (T_h^6 , No. 205) with 4 formula units per unit cell; $a = 8.173(4) \text{ \AA}$. The structure can be compared with that of α - Ag_2Te . The tellurium atoms form a body-centred cell. The silver atoms and the nitrate groups are statistically distributed.

Einleitung

Tempert man gepulverte und in ein Markröhrchen eingeschmolzene Kristalle von γ - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ sechs Monate bei 100°C , dann wandeln sie sich über die β -Modifikation in α - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ um (Schultze-Rhonhof & Bergerhoff, 1966). Die Verbindung wurde seinerzeit anhand einer Debije-Scherrer-Aufnahme, auf der zehn Linien erkennbar waren, charakterisiert und mit einer Gitterkonstanten $a = 4,07(2) \text{ \AA}$ indiziert (der in der Arbeit von 1966 angegebene Wert beruht auf einem Rechenfehler). Diese Indizierung führt aber zu Widersprüchen zwischen Dichte und Zellinhalt; die Elementarzelle enthält nur eine halbe Formeleinheit. Daher wurde auf länger belichteten Aufnahmen nach Hinweisen auf eine grössere Zelle gesucht. In der Tat fanden sich weitere 18 schwächere Linien, die auf eine Zelle mit doppelter Gitterkonstante führen.

Als Ausgangsmaterial für die Darstellung von α - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ standen nur *ca* 2 mg γ - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ zur

Verfügung. Leider gelang es nicht, Einkristalle zu gewinnen. Daher mussten die Gitterparameter der Substanz und die Intensitäten ihrer Reflexe aus Pulveraufnahmen bestimmt werden (Cu $K\alpha$ -Strahlung, $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$; Kameradurchmesser = 57,3 mm, Filmanordnung nach Straumanis & Ievičš (1936), d -Werte beobachtet: $5,67 \geq d \geq 0,7864 \text{ \AA}$). Auch der Versuch einer Strukturaufklärung musste mit Pulverdaten unternommen werden.

Die 28 auf den Aufnahmen beobachteten Linien liessen sich kubisch indizieren. Die Extrapolation nach $\frac{1}{2}(\cos^2 \theta / \sin \theta + \cos^2 \theta / \theta)$ (Azároff & Buerger, 1958) ergab $a = 8,173(4) \text{ \AA}$. Daraus errechnet sich mit $n = 4$ und $M = 683,10$ die Röntgendichte $D_x = 8,31(1) \text{ g cm}^{-3}$. (Wegen der geringen Substanzmenge konnte die Dichte D_o von α - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ nicht gemessen werden; als Vergleichswert diente die Dichte der γ -Modifikation: $D_x(\gamma) = 7,2 \text{ g cm}^{-3}$.) Die Intensitäten wurden mit einem Mikrodensitometer gemessen. Gerechnet wurde auf einer IBM 7090 mit der Programmkette BN-X-64 (Schultze-Rhonhof, 1966), die mit Ausnahme eines für Pulveraufnahmen verwendbaren Absorptionsprogrammes alle notwendigen Programme enthält. Wegen des

* Neue Adresse: D53 Bonn, Amsterdamer Str. 15, Deutschland.

hohen Silber- und Tellurgehaltes der Verbindung musste für Absorption korrigiert werden [$\mu=193,1 \text{ cm}^{-1}$ (*International Tables for X-ray Crystallography*, 1962)]. Dazu wurde die Methode von Bradley (1935) benutzt ($\mu R=2,3$; Transmissionsfaktoren $0,034 < T < 0,133$). Die Atomformfaktoren zur Strukturformfaktorenberechnung wurden aus den von Forsyth & Wells (1959) angegebenen Konstanten berechnet. Verfeinert wurde nach der Methode der kleinsten Quadrate (Gewichtssetzung: $w=1$). Die Nitratgruppen wurden als starre Gruppen behandelt (Scheringer, 1963). Bei zusammenfallenden Reflexen wurde nach jedem Verfeinerungszyklus die gemessene Intensität einer Linie aufgrund der berechneten Strukturamplituden aufgeteilt und daraus die einzelnen F_o -Werte neu berechnet.

Systematische Auslöschungen allgemeiner Art [im Sinne der *International Tables for X-ray Crystallography* (1969)] sind nicht zu beobachten. Anhand der wenigen in den vorliegenden Pulveraufnahmen beobachtbaren Linien ist das Vorhandensein von Auslöschungen spezieller Art nicht sicher zu beurteilen. Zur Auswahl der Raumgruppe müssen daher noch weitere Überlegungen herangezogen werden. Es fällt auf, dass von den beobachteten 28 Linien allein 24 nur gerade Indices haben. Von diesen Linien sind dazu noch diejenigen zehn deutlich stärker als die übrigen 14, für die $h+k=4n$; $k+l=4n$; $l+h=4n$ gilt und die in einer früheren Arbeit (Schultze-Rhonhof & Bergerhoff, 1966) auf eine kleinere, flächenzentrierte Zelle mit der halben Gitterkonstanten geführt hatten. Weitere drei Linien haben einen geraden und zwei ungerade Indices, bei einer Linie sind alle Indices ungerade. Linien mit zwei geraden und einem ungeraden Index werden nicht beobachtet.

Sowohl die Verteilung der Reflexintensitäten als auch die Pattersonsynthese deuten darauf hin, dass eine scheinbar flächenzentrierte Teilzelle mit der halben Gitterkonstanten, die eine halbe Formeleinheit enthält, eine Rolle als Baustein in der Struktur des α - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ spielt. Alle Versuche, ein Strukturmodell zu finden, in dem, wie in jeder konventionellen Struktur, jedem Atom ein definierter Gitterplatz zukommt, und das mit den gemessenen Intensitäten sowie mit der Pattersonsynthese vereinbar ist, führten zu Widersprüchen. Daher wurde die von anderen Silber-Chalkogen- und Silber-Halogen-Verbindungen her (z.B. Strock, 1934; Rahlfs, 1936) bekannte Möglichkeit diskutiert, dass einige Atome der Verbindung statistisch über mehrere Gitterplätze verteilt sind. Im α - Ag_2Te (Rahlfs, 1936) besetzen die Telluratome ein flächenzentriertes Teilgitter; die Silberatome sind statistisch auf Lücken zwischen den Telluratomen verteilt. Auch in der Struktur von β - $[\text{Ag}_4\text{Te}][\text{NO}_3]_2$ (Schultze-Rhonhof & Bergerhoff, 1969) lassen sich die Telluratome als allerdings sehr verzerrt flächenzentriert angeordnet beschreiben.

Ein Modell, das vier Telluratome in flächenzentrierter Anordnung entsprechend der Punktlage 4(a) der Tabelle 1, vier Silberatome in ebenfalls flächenzentrierter Anordnung in Punktlage 4(b) und 12 Silber-

atome statistisch verteilt auf die 24 Gitterplätze der Punktlage 24(d) enthält, zeigt befriedigende Übereinstimmung der beobachteten mit den berechneten Intensitäten. Auch die Pattersonsynthese lässt sich mit diesem Modell widerspruchsfrei deuten.

Tabelle 1. Atomkoordinaten im α - $\text{Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$

Punkt- lage	Punkt- sym- metrie	x	y	z	B(Å ²)
4Te in 4(a)	$\bar{3}$	0	0	0	0,92 (4)
4Ag(1) in 4(b)	$\bar{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1,2 (1)
12Ag(2) in 24(d)	1	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	0	1,9 (1)
4N(1) in 8(c)	3	0,19 (1)	0,19	0,19	2,2 (3)
12O(1) in 24(d)	1	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$	0,31	
4N(2) in 8(c)	3	0,31	0,31	0,31	
12O(2) in 24(d)	1	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	0,19	

Die Parameter der Nitratgruppen sind aus der Pattersonsynthese nicht zu entnehmen, da die zugehörigen Maxima neben denen der Schweratome im Untergrund verschwinden. Aufgrund der dreizähligen Symmetrie des Nitrations kann angenommen werden, dass diese Gruppe mit ihrem Stickstoffatom auf einer dreizähligen Achse sitzt. Geometrische Überlegungen führen weiter zu der Annahme, dass die Nitratgruppen in Abhängigkeit von der statistischen Besetzung der Punktlage 24(d) mit 12 Silberatomen auf der dreizähligen Achse beweglich ist, da bei allen möglichen unbeweglichen Lagen der Nitratgruppe mindestens ein Sauerstoffatom einer der Positionen der 24-zähligen Silberlage so nahe kommt, dass sich ein unzulässig kleiner Ag-O-Abstand ergibt. Für die Strukturformfaktorenberechnung wurde diese Beweglichkeit durch ein Modell dargestellt, das eine achtzählige Position 8(c) für den Stickstoff (und entsprechend eine 24-zählige Position 24(d) für den Sauerstoff) durch zwei halbbesetzte achtzählige (bzw. 24-zählige), durch ein Zentrum in $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ verknüpfte Positionen ersetzt (vgl. Tabelle 1).

Das vorgeschlagene Strukturmodell, ohne die Nitratgruppen an sich höher symmetrisch, lässt sich in der Raumgruppe $Pa\bar{3}$ (T_h^h , Nr. 205) beschreiben. Mit Rücksicht auf die Herkunft der Messwerte (Pulverdaten) wurde auf die an sich mögliche Verfeinerung der drei Parameter der Punktlage 24(d): x, y, z für das Ag(2) verzichtet. Das Nitrat wurde wegen seines geringen Anteiles an der Gesamtstreuung und entsprechend den Möglichkeiten des verwendeten Programmes (Scheringer, 1963; Schultze-Rhonhof, 1966) als 'starre Atomgruppe' behandelt, von der nur ein Lageparameter x der Punktlage 8(c) verfeinert werden musste. [Der N-O-Abstand wurde der Struktur des NaNO_3 (Tavhonen, 1947) ($d=1,22 \text{ \AA}$) entnommen.]

Mit den Parametern der Tabelle 1 ergibt sich $R=10,5\%$ für die beobachteten Reflexe allein, $R'=19,9\%$ für alle einschliesslich der nicht beobachteten Reflexe bis zu einem d -Wert von $d=0,7865 \text{ \AA}$ ($R=\frac{\sum |F_o| - |F_c|}{\sum |F_o|}$). Die gemessenen und berechneten Strukturamplituden der beobachteten Reflexe sind in Tabelle 3 wiedergegeben, von den nicht beobachteten Reflexen

in einer gesonderten Tabelle 4 nur die berechneten Strukturamplituden. Da es sich um Pulverdaten handelt, sind in der Tabelle 3 auch die gemessenen und berechneten Intensitäten gegenübergestellt. R_I für die Pulverintensitäten (Kennard, Hanawalt, Wilson, de Wolf & Frank-Kamenetsky, 1971) ($R_I = \sum |I_o - I_c| / \sum I_c$) beträgt $R_I = 15,0\%$; dieser Wert ändert sich auch nicht, wenn man die nicht beobachteten Linien aus Tabelle 4 in die Rechnung einbezieht, da für alle diese Linien I_c verschwindet. Tabelle 3 enthält ferner die gemessenen (d_{obs}) und die aus $a = 8,173 \text{ \AA}$ berechneten (d_{calc}) d -Werte [ohne die Korrektur nach Azároff & Buerger. (1958)].

Tabelle 2. Abstände im $\alpha\text{-Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$

Te—Ag(1)	4,09 (1) Å	
Te—Ag(2)	2,89 (1)	}
Ag(1)—Ag(2)		
Te—O(1)	2,90 (1)	}
Ag(1)—O(2)		
Ag(2)—O(1)	2,13 (1)	
N(1)—O(1)	1,22	}
O(1)—O(1')		

(eingeebene Werte)

Diskussion

Die Struktur von $\alpha\text{-Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ kann mit der von $\alpha\text{-Ag}_2\text{Te}$ (Rahlf's, 1936) verglichen werden. (In Fig. 1 ist ein Achtelwürfel aus der Struktur von $\alpha\text{-Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ dargestellt. Die wichtigsten Abstände sind in Tabelle 2 zusammengestellt.) In beiden Strukturen bilden die Telluratome ein festes, kubisch flächenzentriertes Anionenteilgitter. In beiden Strukturen besetzt auch ein Teil der Silberatome feste Gitterplätze, [im Unterschied zum $\alpha\text{-AgJ}$ (Strock, 1934), wo alle Silberatome statistisch verteilt sind] während der Rest der Silberatome auf eine grössere Zahl von Plätzen statistisch verteilt ist.

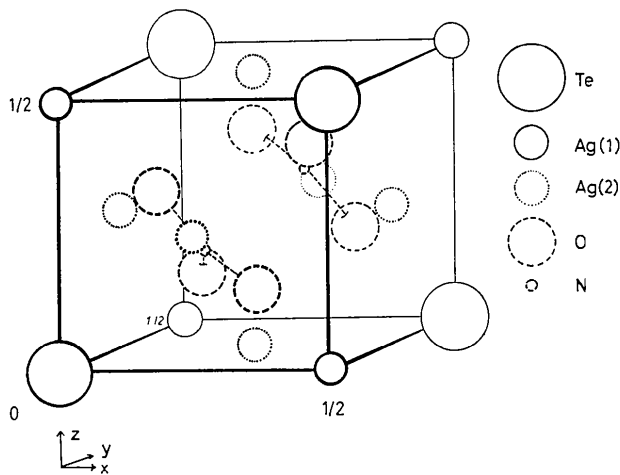


Fig. 1. Struktur von $\alpha\text{-Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$. (Gezeichnet ist $\frac{1}{8}$ der Elementarzelle). Voll ausgezogen: Atome in fester Position. Unterbrochene Linien: statistisch besetzte Lagen.

Die vier Silberatome Ag(1) auf festen Gitterplätzen bilden im $\alpha\text{-Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$ ebenfalls ein kubisch flächenzentriertes, gegenüber dem der Telluratom um $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ verschobenes Teilgitter. Te und Ag(1) zusammen lassen sich also als Kochsalzstruktur beschreiben. (Beim

Tabelle 3. Beobachtete und berechnete Strukturamplituden, Intensitäten und d -Werte für $\alpha\text{-Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$

h k l	F_{obs}	F_{calc}	I/I_o (obs)	I/I_o (calc)	d_{obs}	d_{calc}
0 1 1	57.49	-63.90	5	7	5.67	5.78
2 0 0	113.45	+115.09	5	5	4.03	4.09
2 2 0	148.73	+190.38	9	16	2.863	2.890
0 3 1	67.20	-46.94	3	2	2.563	2.585
2 2 2	729.28	+680.01	100	93	2.342	2.359
4 0 0	589.36	+588.25	38	41	2.031	2.043
4 1 1	86.91	+39.77	}	}	}	}
0 3 3	8.71	+8.05				
4 2 0	148.83	+165.34				
4 2 2	98.39	+135.14	3	6	1.661	1.668
4 4 0	451.33	+508.14	25	34	1.440	1.445
6 0 0	103.79	+105.91	}	}	}	}
4 4 2	107.07	+109.26				
6 2 0	136.98	+109.26	4	3	1.2887	1.2923
6 2 2	443.26	+427.89	40	40	1.2291	1.2321
4 4 4	410.33	+409.93	11	12	1.1770	1.1797
6 4 0	124.51	+98.42	3	2	1.1312	1.1334
6 4 2	113.67	+104.26	5	5	1.0902	1.0922
8 0 0	318.36	+344.44	5	6	1.0202	1.0216
8 2 0	104.10	+94.75	}	}	}	}
6 4 4	112.85	+102.71				
8 2 2	125.01	+90.23	5	3	0.9621	0.9632
6 6 0	129.03	+98.93	}	}	}	}
6 6 2	327.31	+301.15				
8 4 0	283.04	+293.87	25	24	0.9366	0.9375
8 4 2	91.80	+93.94	21	24	0.9130	0.9178
6 6 4	122.15	+85.72	5	6	0.8911	0.8918
8 4 4	267.38	+243.51	5	3	0.8707	0.8712
10 0 0	84.70	+95.92	32	29	0.8338	0.8342
8 6 0	73.80	+83.58	}	}	}	}
10 2 0	58.19	+75.84				
8 6 2	62.42	+81.36	4	6	0.8171	0.8173
9 5 1	32.63	+13.87	}	}	}	}
7 7 3	32.63	+13.87				
10 2 2	243.77	+227.75	8	15	0.8013	0.8014
6 6 6	244.40	+228.34	84	79	0.7864	0.7865

Tabelle 4. Berechnete Strukturamplituden der nicht beobachteten Reflexe von $\alpha\text{-Ag}_4\text{Te}(\text{NO}_3)_2$

h k l	F_c	h k l	F_c
1 1 1	+19.75	7 3 3	+14.97
2 1 1	-5.94	6 5 3	+3.96
3 1 1	+18.85	8 3 1	+1.86
2 1 3	+20.43	0 0 7	-4.18
3 3 1	+17.80	4 3 7	+9.48
2 3 3	+12.97	7 5 1	+14.76
0 5 1	+25.94	5 5 5	+14.76
4 3 1	+21.30	2 7 5	+5.59
5 1 1	+16.92	0 0 9	-10.06
3 3 3	+16.92	8 3 3	+8.89
2 1 5	-3.58	9 1 1	+14.55
0 5 3	+9.59	7 5 3	+14.55
4 3 3	-3.14	2 1 9	+7.09
5 3 1	+16.26	6 1 7	+6.94
6 1 1	-5.36	6 5 5	-1.41
2 5 3	-6.92	0 0 9	+6.21
4 1 5	-13.03	8 5 1	+5.34
5 3 3	+15.80	4 7 5	-5.33
6 3 1	-7.56	9 3 3	+14.33
0 0 7	+18.44	2 9 3	+1.34
0 0 5	-10.14	6 3 7	+0.52
7 3 3	+2.89	4 1 9	-0.48
5 1 1	+15.45	8 5 3	-5.36
5 1 1	+15.45	0 0 7	+10.23
1 1 7	-11.59	9 9 3	+14.11
2 8 5	-2.85	7 7 3	+14.11
3 6 4	+3.64	7 7 5	+14.11
5 1 9	+15.19	10 1 1	+0.24
3 3 3	+3.80	7 7 7	-1.15
6 3 1	-16.84	0 0 9	+1.97
4 1 7	-0.49	3 3 9	-2.75
4 5 5	+3.18		

α -Ag₂Te bilden die entsprechenden Atome stattdessen eine Zinkblendestruktur.) Die 12 weiteren Silberatome Ag(2) sind auf die 24 Gitterplätze auf den Flächenmitten der Achtelwürfel, die man durch Halbieren der Gitterkonstanten a erhält, statistisch verteilt. Diese Plätze liegen jeweils in der Mitte zwischen zwei Telluratomen; der Abstand Ag(2)–Te beträgt 2,89 (1) Å und entspricht damit sehr gut einem der von Rahlfs (1936) genannten Ag–Te-Abstände im α -Ag₂Te (2,85 Å).

Gegenüber dem α -Ag₂Te [$a=6,572$ (10) Å; Rahlfs, 1936] ist das α -Ag₄Te(NO₃)₂ aber wegen der zusätzlichen Silberatome und Nitratgruppen beträchtlich aufgeweitet [$a=8,173$ (4) Å]. Auf diese Weise entsteht im Inneren eines jeden Achtelwürfels Platz für eine Nitratgruppe. Für die drei Sauerstoffatome jeder Nitratgruppe stehen sechs benachbarte Gitterplätze zur Verfügung, die näherungsweise ein Oktaeder bilden [Kantenlängen: O(1)–O(1'): 2,11 Å; O(1)–O(2): 2,19 Å]. Für die Rechnung wurde unterstellt, dass die Atome einer Nitratgruppe, wie in Fig. 1 eingezeichnet, ausschliesslich entweder die Plätze N(1) und O(1) oder N(2) und O(2) besetzen. Es darf aber angenommen werden, dass die Nitratgruppen auch, abhängig von der jeweiligen Besetzung der benachbarten Ag(2)-Plätze, in eine Lage auf einer der vier anderen Flächen des Oktaeders 'umklappen' können. Da das statistisch geschieht und da das Stickstoffatom Röntgenstrahlen verhältnismässig schwach streut, ist dieser Vorgang röntgenographisch nicht nachzuweisen. Er wird aber dadurch wahrscheinlich, dass einige der Abstände zwischen O(1) bzw. O(2) und Ag(2) mit 1,5 Å so klein sind, dass die betreffenden Gitterplätze nicht gleichzeitig besetzt sein können. Eine Wanderung eines Silberatoms dürfte daher gleichzeitiges Umklappen benachbarter Nitratgruppen zur Folge haben.

Binäre Verbindungen mit statistisch verteilten, 'vagabundierenden' Kationen wie z.B. α -AgJ (Strock, 1934) und α -Ag₂Te (Rahlfs, 1936) sind schon lange bekannt. Ternäre Verbindungen dieses Typs mit einem Kation und zwei einatomigen Anionen, z.B. Ag₃SBr und β -

Ag₃SJ (Reuter & Hardel, 1965) sowie mit zwei Kationen und einem Anion, z.B. α -Ag₂HgJ₄ und α -Cu₂HgJ₄ (Ketelaar, 1934) sowie α - und β -Cu₅FeS₄ (Morimoto, 1964) wurden ebenfalls bereits mehrfach beschrieben. In der vorliegenden Arbeit wurde erstmals die Struktur einer aus einem Kation und zwei Anionen bestehenden Verbindung mit vagabundierendem Kation aufgeklärt, in der das eine der beiden Anionen ein mehratomiges komplexes Anion ist.

Literatur

- AZÁROFF, L. V. & BUERGER, M. J. (1958). *The Powder Method*, S. 234–239. New York, Toronto, London: McGraw-Hill.
- BRADLEY, A. J. (1935). *Proc. Phys. Soc.* **47**, 879–899.
- FORSYTH, J. B. & WELLS, M. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 412–415.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1962). Bd. III, 1. Aufl., S. 166. Birmingham: Kynoch Press.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1969). Bd. I, 3. Aufl. S. 53–54. Birmingham: Kynoch Press.
- KENNARD, O., HANAWALT, J. D., WILSON, A. J. C., DE WOLFF, P. M. & FRANK-KAMENETSKY, V. A. (1971). *J. Appl. Cryst.* **4**, 81–86.
- KETELAAR, J. A. A. (1934). *Z. Kristallogr.* **87**, 435.
- MORIMOTO, N. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 351–360.
- RAHLFS, P. (1936). *Z. Phys. Chem.* **B31**, 157–194.
- REUTER, B. & HARDEL, K. (1965). *Z. anorg. allgem. Chem.* **340**, 168–180.
- SCHERINGER, C. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 564.
- SCHULTZE-RHONHOF, E. (1966). *World List of Crystallographic Computer Programs*, 2. Aufl., Nr. 5063–5068.
- SCHULTZE-RHONHOF, E. & BERGERHOFF, G. (1966). *Z. anorg. allgem. Chem.* **347**, 240–247.
- SCHULTZE-RHONHOF, E. & BERGERHOFF, G. (1969). *Acta Cryst.* **B25**, 2645–2648.
- STRAUMANIS, M. & IEVIŅŠ, A. (1936). *Z. Phys.* **98**, 461–475.
- STROCK, L. W. (1934). *Z. Phys. Chem.* **B25**, 441–459.
- TAVHONEN, P. E. (1947). *Ann. Acad. Sci. Fennicae Ser. AI*, **43**.