

SHORT COMMUNICATIONS

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible.

Acta Cryst. (1978). B34, 699–700

Ammonium-trifluorostannat(II). Von G. BERGERHOFF und H. NAMGUNG, *Anorganisch-Chemisches Institut der Universität, D-5300 Bonn, Max-Planck-Strasse 1, Bundesrepublik Deutschland*

(Eingegangen am 16. Juni 1977; angenommen am 12. Oktober 1977)

NH_4SnF_3 , trigonal, $R\bar{3}$ (No. 148), $a = 6.612$ (1) Å, $\alpha = 62.27$ (1)°, $Z = 2$. The structure has been refined in a corrected space group [Bergerhoff & Goost, *Acta Cryst.* (1973), B29, 632–633].

Die Vermessung grosser, gezüchteter Einkristalle des NH_4SnF_3 durch Acker, Recker & Haussühl (1976) zeigte, dass nicht nur Donaldson & O'Donoghue (1964), sondern auch uns durch die Tracht der untersuchten Individuen des NH_4SnF_3 in der Bestimmung der Raumgruppe ein Irrtum unterlaufen war. Mit einem automatischen Diffraktometer CAD-4 der Fa. Nonius wurde deshalb erneut ein angenähert kugelförmig geschliffener Kristall vermessen (Durchmesser 0,37 mm, Mo $K\alpha$, $\mu = 59,13$ cm⁻¹, $\theta_{\text{max}} = 47^\circ$). In Übereinstimmung mit Acker, Recker & Haussühl (1976) ergab sich eine trigonale Symmetrie. Die integralen Auslöschungen weisen auf ein rhomboedrisches Gitter hin. Die Basisvektoren der zugehörigen Elementarzelle gehen aus denjenigen der früher angegebenen monoklinen Zelle (Bergerhoff & Goost, 1973) über folgende Vektorgleichungen hervor: $\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{a} + \mathbf{b} - \frac{1}{2}\mathbf{c}$, $\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{a} + \mathbf{b} + \frac{1}{2}\mathbf{c}$, $\mathbf{a}_3 = \mathbf{b}$.

Tabelle 1. *Atomparameter*

Standardabweichungen in Klammern; der Temperaturfaktor für fluor entspricht der Form $\exp(-a^2/4)(B_{11}h^2 + B_{22}k^2 + B_{33}l^2 + 2B_{12}hk + 2B_{13}hl + 2B_{23}kl)$, für Sn und N blieb der Temperaturfaktor auch bei anisotroper Verfeinerung im Rahmen der Standardabweichungen isotrop.

Sn	2(c)	$x = 0,1380$ (2)	$B = 1,74$ (2) Å ²		
N	2(c)	$x = 0,383$ (3)	$B = 2,8$ (3) Å ²		
F	6(f)	$x = -0,022$ (1)	$y = 0,437$ (1)	$z = 0,253$ (1)	
		$B_{11} = 4,0$ (3)	$B_{22} = 2,5$ (3)	$B_{33} = 2,7$ (3) Å ²	
		$B_{12} = -0,1$ (2)	$B_{13} = -0,4$ (2)	$B_{23} = -1,3$ (2) Å ²	

Tabelle 2. *Atomabstände (Å) und Winkel (°)*

Mittlere Standardabweichung 0,02.

	Sn–F	F–Sn–F
SnF_3^-	3 × 2,08	3 × 82,39
	3 × 2,87	3 × 117,73
NH_4^+	N–(H)–F	F–(H)–N–(H)–F
	3 × 2,75	3 × 108,23
	3 × 3,00	3 × 54,40
	N–Sn	F–N–Sn
	3,89	3 × 110,69

Aus 4016 gemessenen Reflexen wurden 857 unabhängige Strukturamplituden erhalten, wobei die durchschnittliche Abweichung äquivalenter Werte voneinander 5% betrug. Aus den fehlenden zonalen Auslöschungen und der mangelnden Piezoelektrizität (Haussühl, 1976) folgen die Raumgruppen $R\bar{3}m$ oder $R\bar{3}$; die Nichtäquivalenz der Strukturamplituden $F(hkl)$ und $F(khl)$ entscheidet aber eindeutig zugunsten von $R\bar{3}$.

Eine Verfeinerung nach der Methode der kleinsten Quadrate (XRAY 67 system, 1967) mit den aus der monoklinen Zelle transformierten Parametern als Ausgangswerten führte auf einen R -Wert von 7,8% (Tabelle 1). Wasserstoffatome konnten nicht eindeutig lokalisiert werden. Eine Absorptionskorrektur und eine Gewichtung blieben ohne Einfluss auf das Ergebnis. Die Atomformfaktoren wurden der Arbeit von Cromer & Waber (1965) entnommen.*

Die frühere Beschreibung der Struktur bleibt gültig, Abstände und Winkel entsprechen jetzt natürlich der erwarteten trigonalen Symmetrie (Tabelle 2). Stickstoff hat auf einer Seite drei Fluor-Nachbarn in Abständen und Winkeln, die normalen N–H–F Brückenbindungen entsprechen (Morosin, 1970). Die vierte 'Tetraederrichtung' weist zum Zinn, d.h. in die Mitte der Basis der trigonalpyramidalen SnF_3 -Gruppe, so dass hier offenbar eine Mehrzentrenbindung gebildet wird. Solche SnF_3 – HNH_3 Formeleinheiten liegen auf den dreizähligen Achsen in Paaren, wobei die gegeneinander gerichteten Zinnatome der SnF_3 -Pyramiden nur einen Abstand von 4,39 Å haben. Über die bereits erwähnten Fluor-Nachbarn der Ammoniumgruppen erfolgt eine dreidimensionale Verknüpfung, die dazu führt, dass Zinn weitere drei Fluor-Nachbarn in 38% grösserer Entfernung besitzt.

* Die Tabelle der beobachteten und berechneten Strukturamplituden ist bei der British Library Lending Division hinterlegt (Supplementary Publication No. SUP 33097: 7 pp.). Kopien sind erhältlich durch: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, England.

Literatur

ACKER, E., RECKER, K. & HAUSSÜHL, S. (1976). *J. Cryst. Growth*, **35**, 165–168.

BERGERHOFF, G. & GOOST, L. (1973). *Acta Cryst.* B29, 632–633.
 CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1965). *Acta Cryst.* 18, 104–109.
 DONALDSON, J. D. & O'DONOGHUE, J. D. (1964). *J. Chem. Soc.* S. 271–275.

HAUSSÜHL, S. (1976). Institut für Kristallographie der Universität Köln. Persönliche Mitteilung.
 MOROSIN, B. (1970). *Acta Cryst.* B26, 1635–1637.
 XRAY 67 SYSTEM (1967). Tech. Rep. TR 67-58. Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland.

Acta Cryst. (1978). B34, 700

Hexamethylenetetramine–hydroquinone(1:1): correction of a printer's error. By THOMAS C. W. MAK, CHI-SANG TSE, YUET-HAN CHONG and FOR-CHE MOK, *Department of Chemistry, The Chinese University of Hong Kong, Shatin, NT, Hong Kong*

(Received 5 December 1977)

In the paper by Mak, Tse, Chong & Mok [*Acta Cryst.* (1977), B33, 2980–2982] the seventh line of the Abstract should read: tetramine and hydroquinone molecules are *m* and $\bar{1}$. . .

All the relevant information is contained in the Abstract.

Book Review

Works intended for notice in this column should be sent direct to the Book-Review Editor (J. H. Robertson, School of Chemistry, University of Leeds, Leeds LS2 9JT, England). As far as practicable books will be reviewed in a country different from that of publication.

Neutron scattering in chemistry. By G. E. BACON. Pp. 186, Figs. 119, Tables 15. London, Boston: Butterworths, 1977. Price £12.50.

The aim of this little book, according to the author, 'is to give an account of those areas in chemistry where neutron techniques make well-established contributions and of the newer areas in which recent work promises very significant advances'. In this he succeeds very well. Chemists trained in diffraction methods will find the book thorough and easy to understand; those not acquainted with diffraction theory and methods will find the book more difficult to follow because of its concentrated nature.

The book starts with a very brief introductory chapter containing a short history of diffraction methods and a general discussion of diffraction theory and the range of potential applications. This is followed by chapters describing the principles of neutron scattering and experimental methods. In a chapter on structural studies, the author gives a good account of typical analyses of single crystals by neutron diffraction to illustrate the scope of present methods, running from a study of sucrose and simple molecules like HCl, H₂S, D₂, O₂, etc. through studies of heavy-element compounds, amino-acid derivatives and hydrogen bonds and molecular overcrowding.

After a short discussion of direct methods of structure analysis and a chapter on correlation of X-ray and neutron data, the book contains a series of chapters describing modern applications of neutron scattering techniques: studies of biological materials, measurements of covalency, defects and non-stoichiometry, molecular spectroscopy, polymers and liquids, glasses and gases. Three appendices list the coherent scattering amplitudes of elements and isotopes for neutrons, elements and isotopes showing significant incoherent scattering and corresponding values of wavelength and energy for neutrons with equivalent values of optical wave-number for energy transfer. There is a short bibliography and adequate index. Each chapter contains a list of references listing most of the classical studies and some very recent papers (up to 1976).

Any chemist, or other scientist for that matter, interested in neutron scattering studies should read this book to get a basic understanding of the theory and a knowledge of the wide range of applications.

LYNNE L. MERRITT JR

*Department of Chemistry
 Indiana University
 Bloomington
 Indiana 47401
 USA*