

## 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.* (1990). **C46**, 1577

**Über Tetraphenylphosphoniumbromid-monohydrat.** VON VOLKER KRUG UND ULRICH MÜLLER, *Fachbereich Chemie der Universität Marburg, Hans-Meerweinstraße, D-3550 Marburg, Bundesrepublik Deutschland*

(Eingegangen am 20. Mai 1989; angenommen am 27. Februar 1990)

### Abstract

The crystal structure of  $[\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_4]\text{Br}\cdot\text{H}_2\text{O}$ , recently published by Vincent, Knop, Linden, Cameron & Robertson [*Can. J. Chem.* (1988), **66**, 3060–3069], was determined independently. The results are confirmed. Using the same (non-standard) cell setting for  $P\bar{1}$ , the present lattice parameters are  $a = 10.035$  (4),  $b = 10.685$  (4),  $c = 10.677$  (3) Å,  $\alpha = 102.45$  (3),  $\beta = 83.30$  (3),  $\gamma = 108.08$  (3)°; these differ slightly from the earlier determination by 0.020 to 0.030 Å and 0.01 to 0.16°, respectively. Atomic coordinates coincide within  $2\sigma$ .

### Experimentelles

Nachdem wir die Kristallstruktur von  $\text{PPh}_4\text{Br}\cdot\text{H}_2\text{O}$  bestimmt hatten, erschien die Arbeit von Vincent, Knop, Linden, Cameron & Robertson (1988), in der die gleiche Struktur beschrieben wird. Wir können deren Ergebnisse in vollem Umfang bestätigen. Lediglich bei den Gitterparametern haben wir (bei gleicher Meßtemperatur 293 K) geringfügige Abweichungen gefunden (siehe *Abstract*); sie wurden mit 19 Reflexen  $16 < \theta < 19^\circ$  bestimmt. Die Atomkoordinaten beider Untersuchungen stimmen innerhalb

von  $2\sigma$ , vielfach auch innerhalb von  $1\sigma$  überein, so daß wir auf ihre Wiedergabe verzichten. Die Strukturbestimmung erfolgte mit 1398 unabhängigen Reflexen mit  $F > 2\sigma(F)$  von 1560 gemessenen Reflexen. Vierkreisdiffraktometer Enraf-Nonius CAD-4, Mo  $K\alpha$  Strahlung,  $\lambda = 0,7107$  Å,  $\omega$ -scan, Absorptionskorrektur des vermessenen Kristalls ( $0,21 \times 0,22 \times 0,34$  mm), Transmissionsfaktoren 0,62 bis 0,68. Verfeinerung durch Minimieren von  $\sum w(|F_o| - |F_c|)^2$ ,  $w = 1,4/\sigma^2(F)$ ,  $R = 0,034$ ,  $wR = 0,027$ . Rechenprogramm: *SHELX76*, Sheldrick (1976). In der Struktur sind die Anionen und Wassermoleküle zu zentrosymmetrischen Ringen  $(\text{Br}^- \cdot \text{H}_2\text{O})_2$  assoziiert; die  $\text{PPh}_4^+$  Ionen bilden Zickzacklinien wie beim  $\beta$ - $\text{AsPh}_4[\text{UCl}_6] \cdot 2\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (Strukturtyp II nach Müller, Klingelhöfer, Eicher & Bohrer, 1984).

### Literatur

- MÜLLER, U., KLINGELHÖFER, P., EICHER, J. & BOHRER, R. (1984). *Z. Kristallogr.* **168**, 121–131.  
 SHELDRIK, G. M. (1976). *SHELX76*. Programm für die Strukturbestimmung. Univ. Cambridge, England.  
 VINCENT, B. R., KNOP, O., LINDEN, A., CAMERON, T. S. & ROBERTSON, K. N. (1988). *Can. J. Chem.* **66**, 3060–3069.

*Acta Cryst.* (1990). **C46**, 1577–1578

**Structure of potassium nitroprusside monohydrate. Corrigendum.** By Y. LE PAGE, *Chemistry Div. NRC, Ottawa, Canada K1A 0R9* and E. E. CASTELLANO, *Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 369, 13.560 São Carlos, Brazil*

(Received 5 February 1990; accepted 2 March 1990)

### Abstract

Re-examination of the structure of potassium nitroprusside 0.8 hydrate [Castellano, Rivero, Piro & Amalvy (1989). *Acta Cryst.* **C45**, 1207–1210] with the program *MISSYM* [Le Page (1987). *J. Appl. Cryst.* **20**, 264–269; Le Page (1988). *J. Appl. Cryst.* **21**, 983–984] suggested that a center of symmetry could have been overlooked in the original analysis. In fact, refinement in the centric space group *Pnam* (*Pnma*, number 62 with  $y$  and  $z$  axes relabelled  $z$  and

$-y$ ) with the original data, produced the atomic coordinates reported in the present paper and gave residuals  $R = 0.074$  and  $wR = 0.080$ . The structure is essentially that proposed originally except for the fact that the water content of this compound is *one* rather than 0.8 per nitroprusside complex (thus the modified name of the compound in the present communication).

Atomic coordinates from the refinement in space group *Pnam* are given in Table 1.