

- Larsen, L., Rowe, D. J., Garner, C. D. & Joule, J. A. (1989). *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1*, pp. 2317–2327.
- Molecular Structure Corporation (1985). *TEXSAN. TEXRAY Structure Analysis Package*. MSC, 3200 Research Forest Drive, The Woodlands, TX 77381, USA.
- Motherwell, W. D. S. & Clegg, W. (1978). *PLUTO*. Program for plotting molecular and crystal structures. Univ. of Cambridge, England.
- Rajagopalan, K. V. (1991). In *Advances in Enzymology and Related Areas of Molecular Biology*, Vol. 64, edited by A. Meister, pp. 215–290. New York: John Wiley.
- Rowe, D. J., Garner, C. D. & Joule, J. A. (1985). *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1*, pp. 1907–1910.
- Russell, J. R., Garner, C. D. & Joule, J. A. (1992a). *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1*, pp. 1245–1249.
- Russell, J. R., Garner, C. D. & Joule, J. A. (1992b). *Tetrahedron Lett.* **33**, 3371–3374.
- Sheldrick, G. M. (1985). *SHELXS86*. In *Crystallographic Computing 3*, edited by G. M. Sheldrick, C. Krüger & R. Goddard, pp. 175–189. Oxford Univ. Press.
- Sutton, P. A., Cody, V. & Smith, G. D. (1986). *J. Am. Chem. Soc.* **108**, 4155–4158.
- Taylor, E. C. & Goswami, S. (1991). *Tetrahedron Lett.* **32**, 7357–7360.
- Taylor, E. C., Perlman, K. L., Sword, I. P., Séquin-Frey, M. & Jacobi, P. A. (1973). *J. Am. Chem. Soc.* **95**, 6407–6412.
- Taylor, E. C., Ray, P. S., Darwish, I. S., Johnson, J. L. & Rajagopalan, K. V. (1989). *J. Am. Chem. Soc.* **111**, 7664–7665.
- Walker, N. & Stuart, D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 158–166.
- Weygand, F. (1940). *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **73**, 1259–1291.
- Weygand, F., Simon, H., Keil, K. D. & Millauer, H. (1964). *Chem. Ber.* **97**, 1002–1023.
- Weygand, F., Wacker, A. & Schmied-Kowarzik, V. (1949). *Chem. Ber.* **82**, 25–32.

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. (1993). **C49**, 416

Über die Fehlordnung von Triethylammoniumchlorid. Von IRINA SENS und ULRICH MÜLLER, *Fachbereich Chemie der Universität, Hans-Meerwein-Strasse, D-W-3550 Marburg, Deutschland*

(Eingegangen am 16. März 1992; angenommen am 10. Oktober 1992)

Abstract

The known disorder in triethylammonium chloride results from stacking faults of like layers. In each layer the ethyl groups of all $\text{HN}(\text{C}_2\text{H}_5)_3^+$ ions have the same orientation, but there is a random stacking sequence of layers having either one of two different orientations. This is evidenced by diffuse streaks parallel to c^* in X-ray diffraction patterns. The symmetry of a single layer is $P(3)11$. A redetermination of the averaged structure in the space group $P6_3mc$ fully confirms previous structure determinations.

die gemittelte Struktur wieder, d.h. eine Projektion in Richtung c . Die diffusen Streifen verraten das Vorliegen einer eindimensionalen Fehlordnung. Demnach besteht die Struktur aus in sich geordneten Schichten, die ohne periodische Ordnung gestapelt sind. Blickt man in Richtung der c -Achse, so sind in der einzelnen Schicht die Ethylgruppen aller Kationen gleichsinnig orientiert, die Schichtsymmetrie ist $P(3)11$. Zwei Schichtsorten kommen vor, mit Orientierung der Ethylgruppen im Uhrzeiger- oder im Gegenuhrzeigersinn. Es wechseln sich Schichten ab, bei denen das N-Atom die Lage $\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, -0,060$ bzw. $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0,440$ einnimmt, wobei die beiden Schichtsorten statistisch vorkommen. Die statistische Abfolge der Schichtsorten folgt aus dem Intensitätsverlauf auf den diffusen Streifen; dieser ist nämlich sehr gleichmäßig, ohne Intensitätsmaxima, d.h. so wie es sein muß, wenn die Reichweite nach Jagodzinski (1949) $s = 0$ beträgt.

Wir haben auch die Atomparameter für die gemittelte Struktur mit neuen Meßdaten erneut bestimmt; sie weichen nicht signifikant von denen nach James, Cameron, Knop, Neuman & Falk (1985) ab.

Die Kristallstruktur von Triethylammoniumchlorid, $[\text{HN}(\text{C}_2\text{H}_5)_3]^+\text{Cl}^-$, wurde von Genet (1965) bestimmt und von James, Cameron, Knop, Neuman & Falk (1985) verfeinert. Danach ist die Raumgruppe $P6_3mc$. Die Cl^- -Ionen sowie die N-Atome der Kationen befinden sich auf den 6_3 -Achsen. Für die C-Atome der Ethyl-Gruppen wurden zwei fehlgeordnete Lagen mit jeweils halber Besetzungswahrscheinlichkeit gefunden; die beiden Lagen sind über die Spiegelebenen der Raumgruppe symmetrieäquivalent.

Auf Präzessionsaufnahmen, die wir jetzt angefertigt haben, lassen sich diffuse Streifen parallel zu c^* erkennen; diesen Streifen sind die Bragg'schen Reflexe aufgesetzt. Bei den bisherigen Strukturbestimmungen wurden nur die Bragg'schen Reflexe berücksichtigt; sie geben deshalb nur

Literatur

- GENET, F. (1965). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **88**, 463–482.
- JAGODZINSKI, H. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 201–207.
- JAMES, M. A., CAMERON, T. S., KNOP, O., NEUMAN, M. & FALK, M. (1985). *Can. J. Chem.* **63**, 1750–1758.