

Table 1. *Scattering values for ammonium and nitrogen*

$\sin \theta/\lambda$	0	0.05	0.10	0.15	0.20	0.25	0.30	0.40	0.50	0.60
$f(\text{NH}_4^+)$	10.0	7.9	5.6	3.6	2.5	1.8	1.3	1.0	0.9	0.7
$f(\text{N})$	7.0	6.8	6.2	5.4	4.6	3.9	3.2	2.4	1.9	1.7

The calculation was carried out by using the formula

$$f(k) = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin kr \cdot dr}{kr}$$

where $k = 4\pi \sin \theta/\lambda$.

The function $4\pi r^2 \rho(r) dr$ was given as a function of r by Banyard & March, so it was only necessary to multiply this by $\sin kr/kr$ over the range for which the electron density was given and integrate. The integration was carried out graphically for various values of k and the results are compared with the scattering curve for nitrogen in Table 1. This scattering factor curve was

then used in further cycles of least-squares in which the ammonium ion behaved well and there was a reduction in the R index from 0.13 to 0.11 in two cycles. Thus there appears to be an advantage in using this scattering curve rather than that of nitrogen for an ammonium ion.

References

- BANYARD, K. E. & MARCH, N. H. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 357.
 GRIMES, N. W. G., KAY, H. F. & WEBB, M. W. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 823.

Acta Cryst. (1965). **18**, 299

Die Elementarzelle des Quecksilber(II)-thiocyanats. Von H. PUFF und H. BECKER, Institut für Anorganische Chemie der Universität Kiel, Kiel, Olshausenstrasse 40-60, Deutschland

(Eingegangen am 14. September 1964)

Im Zusammenhang mit unseren Untersuchungen über ternäre Verbindungen von Quecksilberchalkogeniden mit Quecksilber(II)-halogeniden und -pseudohalogeniden (Puff & Kohlschmidt, 1962; Puff & Küster, 1962 *a, b*) benötigten wir zum Vergleich die Röntgendaten der Verbindung $\text{Hg}(\text{SCN})_2$. Da in der Literatur ausser einer Liste der d -Werte (*X-ray Powder Data File*, 1961) keine Angaben zu finden sind, teilen wir hier die Elementarzelle und die Auslöschungsgesetze mit.

$\text{Hg}(\text{SCN})_2$ wurde aus einer schwach angesäuerten $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ -Lösung durch Zugabe von KSCN gefällt (Hermes, 1866). Einkristalle wurden aus der heissen wässrigen Lösung der Verbindung durch sehr langsames Abkühlen und Eindunstenlassen erhalten. Für die Untersuchungen wurde ein blättchenförmiger Kristall verwendet, da sich die in der Literatur beschriebenen Nadeln als skelettartige Aggregate erwiesen. Die Drehkristallaufnahme mit einer Kante des Blättchens als Drehachse ergab eine Identitätsperiode von 4,07 Å. Aus einer Weissenbergaufnahme der 0. Schichtlinie wurden angenäherte Werte für zwei weitere Achsen der Elementarzelle (etwa 5,4 und 6,4 Å) und für den zugehörigen Winkel (etwa 95°) erhalten. Eine Weissenbergaufnahme der 1. Schichtlinie ergab, dass eine der beiden Achsen verdoppelt werden musste, was zu einer monoklinen Elementarzelle führte.

Mit diesen Näherungswerten wurde eine Zählrohrdiffraktometer-Pulveraufnahme ($\text{Cu K}\alpha$ -Strahlung) indiziert, bei der die Lage der Reflexe durch Beimischung von Bleinitrat (*International Tables for X-ray Crystallography*, 1962) kontrolliert wurde (Gitterkonstante bei der Aufnahmetemperatur von 24° C: 7, 8566 Å (Swanson, Gilfrich & Ugrinic 1955)). Für das Quecksilber(II)-thiocyanat ergaben sich daraus mit einer Ausgleichsmethode der kleinsten Quadrate folgende Gitterkonstanten, wobei a und b in der Blättchenebene liegen:

$$a = 10,88_4, b = 4,05_0, c = 6,44_6 \text{ Å}; \beta = 95,3_5^\circ.$$

Die Diffraktometeraufnahmen aller Präparate zeigten einen sehr starken Textureffekt.

Die Dichtezahl, die mit Brombenzol als Pyknometerflüssigkeit gemessen wurde, beträgt 3,71. Daraus errechnet man für die Zahl der Formeleinheiten pro Elementarzelle $Z = 1,99 \approx 2$.

Die Röntgendichte hat den Wert 3,71₀ g.cm⁻³.

Die beobachtete Auslöschungsbedingung

$$hkl \text{ nur mit } h+k=2n \text{ vorhanden,}$$

die sich aus den beiden Weissenbergaufnahmen ergab, weist darauf hin, dass als Raumgruppen

$$C_{2h}^3 - C2/m(12), C_s^3 - Cm(8), C_2^3 - C2(5)$$

in Frage kommen.

Eine Strukturbestimmung ist von unserer Seite nicht beabsichtigt.

Literatur

- HERMES, O. (1866). *J. prakt. Chem.* **97**, 477.
International Tables for X-ray Crystallography (1962).
 Vol. III, p. 122. Birmingham: Kynoch Press.
 PUFF, H. & KOHLSCHMIDT, R. (1962). *Naturwissenschaften* **49**, 299.
 PUFF, H. & KÜSTER, J. (1962a). *Naturwissenschaften* **49**, 299.
 PUFF, H. & KÜSTER, J. (1962b). *Naturwissenschaften* **49**, 464.
 SWANSON, H. E., GILFRICH, N. T. & UGRINIC, G. M. (1955). *Nat. Bur. Stand. Circular* **5**, 539.
X-ray Powder Data File (1961). No. 11-586.