

La structure peut être décrite comme résultant de l'imbrication étroite des deux sites différents du baryum.

Le polyèdre relatif à l'atome Ba₁ est constitué de sept atomes de chlore et d'un atome d'oxygène (Fig. 5). Le baryum est au centre d'un prisme droit quasi régulier, dont la hauteur est orientée suivant une direction **u** perpendiculaire à *Ox* et faisant avec le plan *xOy* un angle d'environ 25°. Les six sommets des deux triangles isocèles qui en forment les bases sont respectivement occupés par cinq atomes de chlore (Cl₁₁, Cl₁₄, et Cl₁₅ de cote $z = -0,11$, Cl₂₁ et Cl₂₂ de cote $z = -0,30$) et un atome d'oxygène. Les distances baryum-chlore varient de 3,38 à 3,06 Å. Les deux autres atomes de chlore (Cl₂₄ et Cl₂₅) sont situés à 3,25 Å du baryum, les directions des liaisons étant presque perpendiculaires à deux faces du prisme. Au-delà de la troisième face du prisme mais à une distance beaucoup plus grande du baryum (4,63 Å) est situé un autre atome de chlore, Cl₁₁ de cote $z = -0,61$.

Le polyèdre relatif à l'atome de baryum Ba₂ est constitué de neuf atomes de chlore et d'un atome d'oxygène (Fig. 6). Le baryum est situé au centre d'un prisme dont la base inférieure est déformée et dont la hauteur est parallèle à l'axe *Oz*. Les bases sont des triangles équilatéraux, dont les sommets sont occupés par six atomes de chlore (Cl₂₁, Cl₂₂ et Cl₂₃ pour la base supérieure, Cl₂₄, Cl₂₅ et Cl₂₆ pour la base inférieure). Les distances baryum-chlore sont respectivement de 3,10 et 3,81 Å. Dans chacun des trois plans de symétrie de ce polyèdre et à une distance de 3,26 Å un autre atome de chlore est lié au baryum. L'atome d'oxygène est situé sur son axe de symétrie, légèrement en-dessous de la base inférieure et à une distance de 2,54 Å du baryum.

Les environnements polyédriques des atomes Ba₁ et Ba₂ possèdent quatre sommets communs, trois occupés par des atomes de chlore (Cl₁₁, Cl₂₄ et Cl₂₅) le quatrième par l'atome d'oxygène.

A la Fig. 7 nous avons représenté l'environnement du baryum dans la variété orthorhombique de type PbCl₂ du chlorure de baryum. La comparaison des Figs. 5, 6 et 7 montre que les deux types d'environnement du baryum dans Ba₄OCl₆ dérivent nettement de celui qu'il possède dans BaCl₂.

On peut remarquer dans la structure étudiée l'environnement tétraédrique presque parfait des atomes d'oxygène par les atomes de baryum (Ba₁-O = 2,49 Å et Ba₂-O = 2,54 Å).

On peut noter également les sites octaédriques vacants formés par les six atomes de chlore (Cl₁₁, Cl₁₄, Cl₁₅, Cl₁₆, Cl₁₇ et Cl₁₈) autour de l'axe *Oz* (axe hélicoïdal 6₃).

D'une manière générale, les distances interatomiques sont en assez bon accord avec les valeurs théoriques calculées à partir des rayons ioniques proposés par Ahrens (Ba-Cl = 3,16, Ba-O = 2,75, Cl-Cl = 3,62 Å) (Ahrens, 1952).

Références

- AHRENS, L. H. (1952). *Geochem. Cosmochim. Acta*, **2**, 155.
 FRIT, B., MOAKIL CHBANY, M. & HAGENMULLER, P. (1968). *Bull. Soc. chim. Fr.* **1**, 127.
 FRIT, B., TANGUY, B. & HAGENMULLER, P. (1966). *Bull. Soc. chim. Fr.* **7**, 2190.
International Tables for X-ray Crystallography (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
 SUZUKI, T. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 279.

Acta Cryst. (1970). **B26**, 19

Die Kristallstruktur des Tetranatrium-dekafluorotristannat(II), Na₄Sn₃F₁₀

VON G. BERGERHOFF UND L. GOOST

Anorganisch-chemisches Institut der Universität, 53 Bonn, Meckenheimer Allee 168, Deutschland

(Eingegangen am 23. Dezember 1968 und wiedereingereicht am 7. März 1969)

The crystal structure of Na₄Sn₃F₁₀, the only compound in the system NaF-SnF₂-H₂O besides NaSn₂F₅, has been determined by Patterson and Fourier syntheses. The structure consists of Sn₃F₁₀ groups formed by connected and distorted tetragonal pyramids SnF₄ with Sn at the top. These groups are arranged in such a manner that there is an empty channel along *c*.

Einleitung

Im System NaF-SnF₂-H₂O haben wir - wie schon Donaldson & O'Donoghue (1964) - zwei Verbindungen gefunden. Die Struktur des NaSn₂F₅ (A) wurde bereits von McDonald, Larson & Cromer (1964) untersucht. Die zweite Verbindung erwies sich bei der

vorliegenden Untersuchung als Na₄Sn₃F₁₀ (B). In Fig. 1 sind die Molverhältnisse der Ausgangsverbindungen NaF, SnF₂ und H₂O angegeben, die nach Auflösen in heissem Wasser beim Erkalten die Verbindungen (A) und (B) ergaben. Es ist unwahrscheinlich, dass im System noch eine dritte Verbindung der Zusammensetzung NaSnF₃ auftritt. Das von Donaldson & O'Don-

oghue (1964) hierfür angegebene Pulverdiagramm ist mit dem Diagramm des $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$ identisch (Tabelle 1). Die Identität wurde auch mit Hilfe der Originalsubstanzen bestätigt.

Experimentelles

Bei den angegebenen Molverhältnissen erhält man schöne dicke Säulen in Richtung c. Weissenberg- und Präzessionsaufnahmen mit $\text{MoK}\alpha$ -Strahlung lieferten die Gitterkonstanten:

$$a=12,18; b=18,47; c=5,50 \text{ \AA}; \beta=91^\circ.$$

Aus den Auslöschungen folgen die Raumgruppen $C2/c$ (C_{2h}^6) oder Cc (C_2^1). Zur photometrischen Intensitätsmessung der 639 unabhängigen Reflexe im messbaren Bereich dienten integrierte Weissenbergauf-

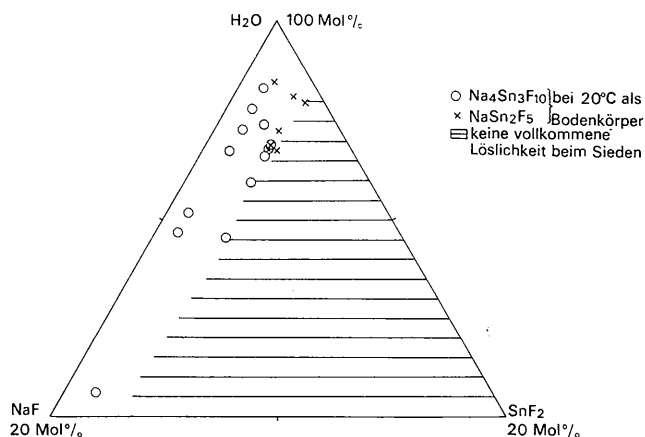


Fig. 1. System $\text{NaF-SnF}_2\text{-H}_2\text{O}$

Tabelle 1. Pulveraufnahme des $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$ mit $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung

$I(1) = \log I$ berechnet nach Tabelle 3.

$\theta(1) = \theta$ berechnet aus den Gitterkonstanten.

$\theta(2) = \theta$ aus einer Zählrohrpulveraufnahme.

$I(2) =$ Intensitäten der Zählrohrpulveraufnahme.

$\theta(3) = \theta$ nach Donaldson & O'Donoghue (1964).

$I(3) =$ Intensitäten nach Donaldson & O'Donoghue (1964).

h	k	l	$I(1)$	$\theta(1)$	$\theta(2)$	$I(2)$	$\theta(3)$	$I(3)$
1	1	0	2,34	4,34	4,39	s		
0	2	0	1,87	4,78	4,84	s		
2	0	0	2,87	7,27	7,36	m	7,34	mst
1	3	0	3,16	8,06	8,15	st	8,18	st
2	2	0	3,10	8,72	8,81	st	8,90	mst
1	1	1	3,31	9,11	9,21	m	9,23	sst
1	1	1	2,12	9,27				
0	2	1	2,63	9,39				
0	4	0	2,96	9,61	9,70	st	9,75	m
3	1	0	2,33	11,21	11,32	s	10,75	ms
1	3	1	3,02	11,39				
1	3	1	2,53	11,48	11,51	s	11,63	m
2	2	1	3,49	11,83				
2	2	1	3,44	12,00	11,94	st	12,15	sst
2	4	0	2,09	12,10	12,40	st		
1	5	0	2,00	12,59	12,72	st	12,79	st
0	4	1	3,42	12,59				
3	3	0	2,59	13,15	13,27	m	13,37	s
3	1	1	2,61	13,75				
3	1	1	2,92	13,98	14,15	m	14,25	m
0	6	0	2,18	14,50	14,65	s		
2	4	1	2,54	14,53				
4	0	0	3,10	14,66	14,81	st	14,93	st
2	4	1	2,63	14,67				
1	5	1	2,58	14,99				
1	5	1	2,79	15,06	15,21	s	15,24	m
3	3	1	1,62	15,39				
4	2	0	1,61	15,46	15,51	s	15,62	m
3	3	1	1,61	15,60				
0	0	2	2,64	16,28				
2	6	0	3,14	16,29	16,44	st	16,57	st
3	5	0	1,45	16,39				
0	6	1	0,84	16,67				
1	1	2	1,91	16,82				
1	1	2	1,92	16,95				
0	2	2	1,28	17,01	17,15	ss	17,30	s
1	7	0	1,96	17,39				
4	4	0	2,60	17,65	17,54	s		
4	2	1	0,30	17,40				
4	2	1	1,79	17,65				
2	0	2	1,63	17,79	17,81	ss	17,94	ms

Tabelle 2. Parameter in der Raumgruppe C2/c

	Punktlage	x	y	z	B
Sn(1)	8(f)	0,2522 ± 0,0001	0,0814 ± 0,0001	0,6690 ± 0,0005	1,17 ± 0,05
Sn(2)	4(e)	0	0,1569 ± 0,0002	0,25	1,92 ± 0,07
Na(1)	8(f)	0,1714 ± 0,0008	0,2712 ± 0,0006	0,7497 ± 0,003	1,2 ± 0,2
Na(2)	4(e)	0	0,342 ± 0,001	0,25	2,9 ± 0,4
Na(3)	4(e)	0	0,546 ± 0,001	0,25	1,7 ± 0,3
F(1)	8(f)	0,120 ± 0,001	0,377 ± 0,001	0,541 ± 0,004	1,3 ± 0,3
F(2)	8(f)	0,165 ± 0,002	0,180 ± 0,001	0,428 ± 0,004	2,0 ± 0,3
F(3)	8(f)	0,107 ± 0,001	0,452 ± 0,001	0,118 ± 0,004	2,2 ± 0,4
F(4)	8(f)	0,232 ± 0,001	0,332 ± 0,001	0,120 ± 0,004	2,7 ± 0,4
F(5)	8(f)	0,041 ± 0,001	0,238 ± 0,001	0,016 ± 0,004	2,1 ± 0,4

Tabelle 3. Beobachtete und berechnete Strukturamplituden für Na₄Sn₃F₁₀

Die Spalten geben nacheinander an: h, k und l, F_o und F_c.

h	k	l	F _o	F _c
1	1	0	201	176
1	1	0	117	107
1	1	0	91	73
1	1	0	174	107
1	1	0	127	123
1	1	0	66	49
1	1	0	98	139
2	0	0	185	173
2	0	0	201	192
2	0	0	172	159
2	0	0	371	393
2	0	0	177	209
2	0	0	276	277
2	0	0	177	184
2	0	0	37	103
2	0	0	177	168
2	0	0	102	81
2	0	0	87	88
3	0	0	115	107
3	0	0	170	164
3	0	0	51	69
3	0	0	70	89
3	0	0	104	101
3	0	0	147	151
3	0	0	70	89
4	0	0	463	469
4	0	0	225	231
4	0	0	121	112
4	0	0	171	188
4	0	0	56	105
4	0	0	344	354
4	0	0	159	148
4	0	0	171	163
4	0	0	113	121
4	0	0	34	36
4	0	0	36	45
4	0	0	110	104
4	0	0	85	89
5	0	0	94	88
5	0	0	126	117
5	0	0	20	15
5	0	0	139	126
6	0	0	80	80
6	0	0	111	108
6	0	0	276	272
6	0	0	86	81
6	0	0	338	359
6	0	0	134	131
6	0	0	194	186
6	0	0	122	121
6	0	0	88	87
6	0	0	110	104
6	0	0	172	176
6	0	0	107	101
6	0	0	67	57
6	0	0	137	132
7	0	0	73	74
7	0	0	116	111
7	0	0	113	107
7	0	0	92	84
7	0	0	149	151
7	0	0	239	249
7	0	0	78	81
7	0	0	147	139
7	0	0	27	31
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0	0	107	107
7	0	0	190	188
7	0	0	91	82
7	0	0	107	107
7	0	0	100	94
7	0			

nahmen ($\text{MoK}\alpha$ -Strahlung) der reziproken Gitterebenen $hk0$ bis $hk3$, wobei jeweils mehrere Aufnahmen mit verschiedenen Zeiten belichtet wurden. Der für die Aufnahmen benutzte Kristall besass Begrenzungsflächen (110), (610) und (250) mit einem Umkreis vom Durchmesser 0,06 mm und einer Länge von 0,35 mm. Die Korrektur der Intensitäten mit Lorentz- und Polarisationsfaktor sowie auf Absorption und alle weiteren Rechnungen wurden mit einer Programmkette (Schultze-Rhonhof, 1966) durchgeführt, die auf Programmen von Scheringer (1963) bzw. Busing & Levy (1957) aufbaut, und die Atomformfaktoren von Cromer & Waber (1965) benutzt. Unter der Messbarkeitsgrenze liegende Intensitäten wurden mit $\frac{2}{3}$ der niedrigsten Intensität eingesetzt.

Strukturbestimmung

Während die Pattersonprojektion Zinnatome in einer acht und einer vierzähligen Punktlage der Raumgruppe $C2/c$ zu lokalisieren gestattete, liessen sich in einer dreidimensionalen Pattersonsynthese nur die Maxima der achtzähligen Lage zuordnen. Eine Fouriersynthese mit hieraus folgenden Vorzeichen zeigte jedoch auch die vierzählige Zinnlage. Das Fehlen der Pattersonmaxima erklärt der durch den niedrigen I -Index bedingte Abbrucheffect, was eine Differenzpattersonsynthese bestätigte. Der Zuverlässigkeitsindex betrug hier $R=26\%$ und eine anschliessende Fouriersynthese zeigte Maxima in zwei vierzähligen und sechs achtzähligen Punktlagen (insgesamt 56 Punkte) für 12 Natrium- und 36 Fluoratome (insgesamt 48 Leichtatome für 12 Formeleinheiten NaSnF_3). Besetzt man eine der achtzähligen Punktlagen nicht, so sinkt der R -Wert zwar auf 15%, Differenzfouriersynthesen gestatten aber nicht, eine bestimmte achtzählige Punkt-

lage als nicht besetzt zu betrachten. Verteilt man jedoch 16 Natrium- und 40 Fluoratome auf die durch Maxima angezeigten Punktlagen, so fällt der R -Wert bei einer Verfeinerung nach der Methode der kleinsten Quadrate sprunghaft in ein ruhiges Minimum bei $R=9,2\%$ für alle $F(hkl)$ und die Differenzfouriersynthese ist sehr ausgeglichen. Für die so verlangte Zusammensetzung

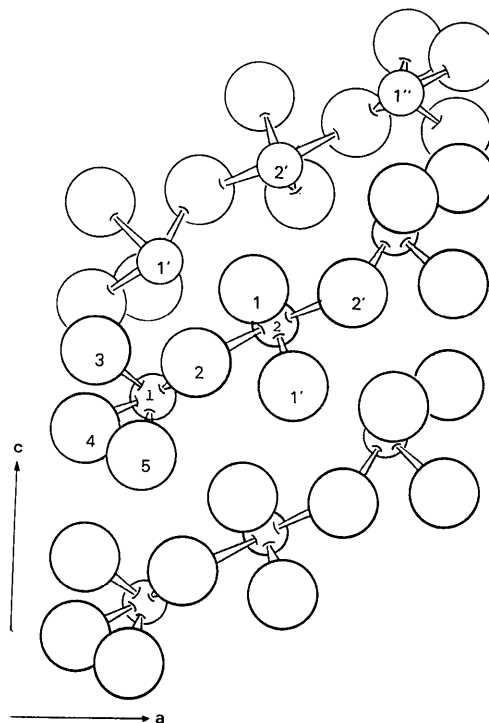


Fig. 2. Lage der $\text{Sn}_3\text{F}_{10}^{4-}$ Gruppen im $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$. (Kleine Kreise: Sn; grosse Kreise: F.)

Tabelle 4. Atomabstände (in Å) und Bindungswinkel (in Grad) in einigen Fluorostannaten(II)

E =endständiges Atom, B =Brückenatom, N =Nachbarn, G =gegenüberliegend, (Atom-Nr. laut Fig. 2 und 3)

	$\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$	NaSn_2F_5	$\text{KSnF}_3 \cdot \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$
Sn(2)-F(B)	2,26 (2)	2,22	2,27
Sn(1)-F(B)	2,49 (2)	2,53	
Sn(1)-F(E)	2,11 (3)	2,08	2,05
	2,15 (4)	2,07	1,99
	1,99 (5)		
Sn(2)-F(E)	2,04 (1)		
F(E)-Sn(1)-F(E)	87,5 (3-5)	89,3	89,7
F(E)-Sn(2)-F(E)	85,7 (1-1')		
F(B)-Sn(1)-F(B)	145,9 (2-4)	142,3	156,0
F(B)-Sn(2)-F(B)	158,3 (2-2')		
F(E)-Sn(1)-F(B)	75,5 (2-3)	84,1	78,5
	75,7 (2-5)	81,2	85,5
	79,1 (4-3)	74,0	
	80,9 (4-5)	69,0	
F(E)-Sn(2)-F(B)	84,8 (2-1)		
	79,3 (2-1')		
Sn(1)-F(B)-Sn(2)	117,4	134,4	
Sn-Sn(N)	4,07	4,41	3,97
	4,08		
Sn-Sn(G)	6,04	4,41	4,66
Na-F	2,24	2,21	

und grösser

zung $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$ ergibt sich ein plausibler kristallchemischer Aufbau. Die theoretische Dichte von $3,42 \text{ g.cm}^{-3}$ stimmt mit einem experimentellen Wert von $3,34 \text{ g.cm}^{-3}$ gut überein. Da die analytischen Daten für NaSnF_3 und $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$ nicht so sehr verschieden voneinander sind, dürfte die Existenz einer Phase $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$ gesichert sein. Die Parameter des letzten Verfeinerungszyklus zeigt Tabelle 2, beobachtete und berechnete Strukturamplituden Tabelle 3 (mit $F_{\text{beo}} = 0$

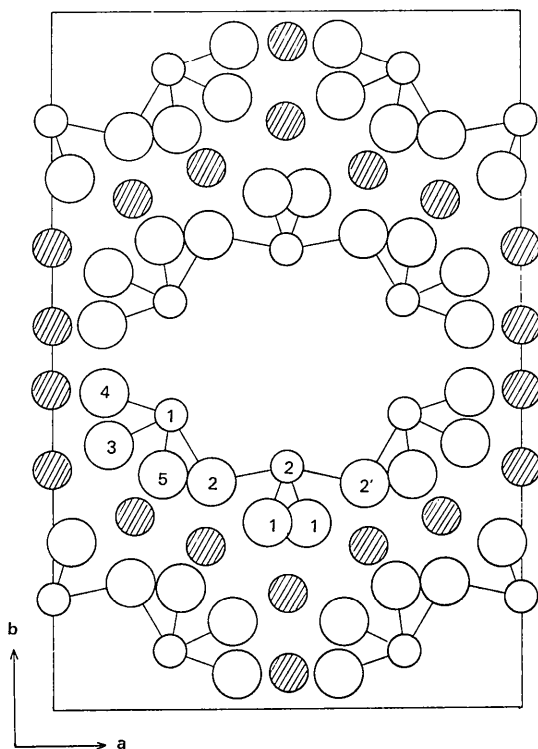


Fig. 3. Projektion der $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$ -Struktur in Richtung c auf die ab-Ebene. (Kleine Kreise: Sn; grosse Kreise: F; schraffierte Kreise: Na.)

aufgeführte Reflexe fallen in den Schatten des Nullstrahlängers).

Diskussion der Struktur

Die Koordinationsfigur des Zinns ist eine verzerrte vierseitige Pyramide mit Zinn an der Spitze und vier Fluoratomen in der Basis. Atomabstände und Winkel gehen aus Tabelle 4 hervor, in der die Werte der beiden andern bekannten Fluorokomplexe NaSn_2F_5 (McDonald, Larson & Cromer, 1964) und $\text{KSnF}_3 \cdot \frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$ (Bergerhoff, Goost & Schultze-Rhonhof, 1968) ebenfalls aufgeführt sind. Im $\text{Na}_4\text{Sn}_3\text{F}_{10}$ sind die Pyramiden durch gemeinsame Fluoratome zu Dreiergruppen verknüpft (Fig. 2), die, einander mit den Zinnatomen auf Lücke gegenüberliegend, einen leeren Kanal durch die Struktur in Richtung c umschliessen. Dies macht die Projektion (Fig. 3) besonders deutlich. Die Struktur zeigt damit bei Fluorostannaten(II) ein drittes Mal die Bauelemente: verknüpfte vierseitige Pyramiden, Zinnatome in direkter Nachbarschaft, leere Kanäle durch die Struktur.

Die Mittel für die Untersuchung stellten die Deutsche Forschungsgemeinschaft und der Fonds der Chemie zur Verfügung. Sämtliche Rechnungen wurden im Rheinisch-Westfälischen Institut für Instrumentelle Mathematik durchgeführt.

Literatur

- BERGERHOFF, G., GOOST, L. & SCHULTZE-RHONHOF, E. (1968). *Acta Cryst.* **B24**, 803.
 BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 180.
 CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 104.
 DONALDSON, J. D. & O'DONOGHUE, J. D. (1964). *J. Chem. Soc.*, p. 271.
 McDONALD, R. R., LARSON, A. C. & CROMER, D. T. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 1104.
 SCHERINGER, C. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 546.
 SCHULTZE-RHONHOF, E. (1966). *World List of Crystallographic Computer Programs*, No. 5063–5068. Utrecht: Oosthoek.