

### Ergebnisse und Diskussion

Hier soll nur auf die mit der Neubestimmung erreichten Verbesserungen der Struktur eingegangen werden. Die grössten Unterschiede der Bindungslängen und Bindungswinkel (Fig. 1) betragen im Benzolring nur noch 0,012 Å und 0,4° gegenüber 0,027 Å und 1,4° in der älteren Arbeit. Die dort als geordnet beschriebene Auffüllung des Wasserstoffbrückensystems mit Hydroxy-Protonen erfährt eine sichere Bestätigung durch die nunmehr möglich gewordene voraussetzungsfree Lokalisierung und anisotrope Verfeinerung aller Wasserstoffatome in eindeutigen Positionen.

Die O...O- und H...O- Abstände und O-H...O-Winkel in Fig. 2 lassen zusätzlich zu den beiden beschriebenen (Brown, 1966) intermolekularen eine dritte, intramolekulare, Wasserstoffbrücke erkennen, mit der am Hydroxy-Proton H(2) insgesamt eine gegabelte Konfiguration besteht. Tatsächlich wird diese bereits durch die Kleinheit des Bindungswinkels C(2)-C(1)-O(1) von 117,0° gegenüber C(6)-C(1)-O(1) von 123,3° angezeigt, ein Indiz, das auch bei der Kristallstrukturanalyse eines substituierten Brenzcatechins nicht beachtet wurde (Bergin & Carlström, 1968).

Für den flüssigen und den gelösten Zustand von Brenzcatechin konnte die intramolekulare Wasserstoffbrücke

schon früher durch Vergleich des Siedepunktes bzw. des Infrarot-Lösungsspektrums dieser Substanz mit denen ihrer Isomeren Resorcin und Hydrochinon nachgewiesen werden (Pauling, 1960).

Wir danken dem Rechenzentrum der Technischen Universität Braunschweig und dem Deutschen Rechenzentrum in Darmstadt für Rechenzeit sowie der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie für Leihgaben und Sachmittel.

### Literatur

- BERGIN, R. & CARLSTRÖM, D. (1968). *Acta Cryst.* B24, 1506.  
 BROWN, C. J. (1966). *Acta Cryst.* 21, 170.  
 HANSON, H. P., HERMAN, F., LEA, I. D. & SKILLMAN, S. (1964). *Acta Cryst.* 17, 1040.  
 PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*, p. 494. Ithaca: Cornell Univ. Press.  
 STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* 42, 3175.  
 WUNDERLICH, H. & MOOTZ, D. (1971). Vortrag E1 auf der Wintertagung 1971 der American Crystallographic Association in Columbia, S. C., U.S.A.

*Acta Cryst.* (1971). B27, 1686

**Die Kristallstruktur des Kaliumtrifluorostannat(II)-Hemihydrat,  $\text{KSnF}_3 \cdot \frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$ .** Von G. BERGERHOFF, L. GOOST und E. SCHULTZE-RHONHOF, *Anorganisch-chemisches Institut der Universität Bonn, 53 Bonn 1, Meckenheimer Allee 168, Deutschland (BRD)*.

(Eingegangen am 21. Mai 1971)

Table 1 in *Acta Cryst.* (1968). B24, 803 contains errors, and a corrected table is available on request from the first-named author.

In der oben zitierten Arbeit ist Tabelle 1 fehlerhaft. Auf Wunsch steht eine verbesserte Tabelle zur Verfügung. Interessenten werden gebeten, sich mit dem 1. Autor direkt in Verbindung zu setzen.

### Literatur

- BERGERHOFF, G., GOOST, L. & SCHULZE-RHONHOF, E. (1968). *Acta Cryst.* B24, 803.

## Notes and News

*Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. The notes (in duplicate) should be sent to the Executive Secretary of the International Union of Crystallography (J. N. King, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, England).*

### Sir Lawrence Bragg 1890-1971

Sir Lawrence Bragg, F.R.S., Professor Emeritus and formerly Director of the Royal Institution, died on 1 July 1971. Sir Lawrence, in conjunction with his father Sir William Bragg, carried out the earliest crystal structure determinations by X-ray spectrometry, receiving for this work the Nobel Prize for Physics in 1915. It was a result of these

investigations that it first became possible to obtain absolute values of lattice parameters. Sir Lawrence and his school thereafter developed the quantitative aspects of X-ray diffraction techniques and worked out large numbers of more complicated crystal structures, especially those of silicate minerals. Sir Lawrence took a leading part in the formation of the International Union of Crystallography in 1947, and he became its first President.

A full obituary will be published later in *Acta Crystallographica*, Section A.