

Metallkomplexe mit Cyanoguanidin als Liganden: Kristallstrukturen von $[\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{Br}_2$ und $\text{Hg}(\text{cnge})\text{Cl}_2$ (cnge = Cyanoguanidin)

Metal Complexes with Cyanoguanidine as Ligand:

Crystal Structures of $[\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{Br}_2$ and $\text{Hg}(\text{cnge})\text{Cl}_2$
(cnge = Cyanoguanidine)

Joachim Pickardt*, Britta Kühn

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Technische Universität Berlin,
Straße des 17. Juni 135, D-10623 Berlin

Z. Naturforsch. **51 b**, 1701–1706 (1996); eingegangen am 30. Juli 1996

Cyanoguanidine, Cadmium Halide Complexes, Mercuric Chloride Complex, Crystal Structure

Crystals of $[\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**), $\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{Br}_2$ (**2**) and $\text{Hg}(\text{cnge})\text{Cl}_2$ (**3**) (cnge = cyanoguanidine) were obtained by crystallisation from solutions of CdF_2 , CdBr_2 or HgCl_2 and cyanoguanidine in water/ethanol or methanol. **1** crystallizes monoclinically, space group $\text{C}2$, $Z = 2$, $a = 1629.2(4)$, $b = 1056.6(4)$, $c = 353.9(1)$ pm, $\beta = 101.05(2)^\circ$; **2** is monoclinic, space group $\text{P}2_1/n$, $Z = 2$, $a = 391.9(1)$, $b = 850.7(2)$, $c = 1722.1(4)$ pm, $\beta = 94.06(2)^\circ$; **3** is triclinic, space group $\text{P}1$, $Z = 1$, $a = 686.7(1)$, $b = 693.0(5)$, $c = 387.2(4)$ pm, $\alpha = 94.45(5)^\circ$, $\beta = 95.05(4)^\circ$, $\gamma = 78.58(5)^\circ$. In **1** and **2** each Cd atom is bonded to four halogen atoms to form polymeric $(\text{CdF}_2)_n$ and $(\text{CdBr}_2)_n$ chains, resp., and to two cyanoguanidine molecules. In **3** each Hg atom is bonded to four chlorine atoms also forming $(\text{HgCl}_2)_n$ chains, which are connected via cyanoguanidine molecules acting as a bidentate bridging ligands to form a network.

Einleitung

Cyanoguanidin ($\text{H}_2\text{N})_2\text{C}=\text{N}(\text{CN})$ kann durch seine unterschiedlichen Koordinationsmöglichkeiten als einzähniger oder als zweizähniger Ligand recht verschiedenartige Strukturen aufbauen. So fungiert Cyanoguanidin in $\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{I}_2$ [1] als einzähniger Ligand, so daß monomere Moleküle entstehen. In $[\text{Cd}(\text{cnge})(\text{H}_2\text{O})_2\text{SO}_4]_2$ [2] ist der Ligand durch Koordination der Stickstoffatome beider Cyanogruppen zweizähnig und es werden zentrosymmetrische Dimere aufgebaut, die über Sulfatanionen verbrückt sind. In $\text{Cd}(\text{cnge})\text{Cl}_2$ [3] schließlich wird durch Koordination beider Cyanogruppen an verschiedene Cadmiumatome eine polymere Struktur aufgebaut. Wir haben nun versucht, durch Reaktion dieses Liganden mit Cadmium- und Quecksilberhalogeniden weitere derartige Verbindungen mit polymeren Strukturen zu erhalten.

Experimentelles

$[\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**)

Die Verbindung wurde durch Kristallisation aus einer Mischung von gleichen Teilen gesättigter wäßriger Cadmiumfluoridlösung und ethanolischer, ebenfalls gesättigter Cyanoguanidin-Lösung in Form farbloser Kristalle erhalten; sie wurde IR-spektroskopisch sowie durch CHN-Analyse charakterisiert.

$[\text{Cd}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (372,61 g/mol)

Ber. C 12,89 H 3,79 N 30,07%,

Gef. C 13,11 H 3,40 N 28,79%.

$\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{Br}_2$ (**2**)

Farblose, quaderförmige Kristalle wurden durch langsames Eindunsten eines Gemischs von wäßriger CdBr_2 -Lösung und methanolischer Cyanoguanidin-Lösung (beide $c = 0,2$ mol/l) erhalten und wie **1** charakterisiert.

$\text{Cd}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)_2\text{Br}_2$ (440,38 g/mol)

Ber. C 10,91 H 1,83 N 25,44%,

Gef. C 11,33 H 2,15 N 26,12%.

$\text{Hg}(\text{cnge})\text{Cl}_2$ (**3**)

Durch langsames Eindunsten eines stöchiometrischen Gemisches von HgCl_2 , gelöst in Methanol und Cyano-

* Sonderdruckeranforderungen an Prof. Dr. J. Pickardt.

Tab. I. Kristallstrukturdaten von $[\text{Cd}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**), $\text{Cd}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)_2\text{Br}_2$ (**2**) und $\text{Hg}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)\text{Cl}_2$ (**3**).

	1	2	3
Summenformel	$\text{CdO}_3\text{N}_8\text{C}_4\text{F}_2\text{H}_{14}$	$\text{CdBr}_2\text{N}_8\text{C}_4\text{H}_8$	$\text{HgCl}_2\text{N}_4\text{C}_2\text{H}_4$
Molmasse [g/mol]	372,61	440,40	355,58
Kristallgröße [mm ³]	0,4 × 0,3 × 0,1	0,4 × 0,15 × 0,05	0,05 × 0,05 × 0,5
Kristallsystem	monoklin	monoklin	triklin
Gitterkonstanten <i>a</i> [pm]	16,292(4)	3,9187(6)	6,867(1)
<i>b</i> [pm]	10,566(4)	8,507(2)	6,930(5)
<i>c</i> [pm]	3,5394(11)	17,221(4)	3,872(4)
α [°]	90	90	94,45(5)
β [°]	101,05(2)	94,06(2)	95,05(4)
γ [°]	90	90	78,58(5)
Zellvolumen [10 ⁶ pm ³]	598,0(3)	572,7(2)	179,6(2)
Raumgruppe	C2 (Nr.5)	P2 ₁ /n (Nr.14)	P1 (Nr.1)
Zahl der Formeleinheiten	2	2	1
Dichte (ber.) [g/cm ³]	2,07	2,55	3,29
Linearer Absorptionskoeffizient [cm ⁻¹]	18,7	88,7	213,5
F(000)	368	412	158
Meßgerät	Vierkreisdiffraktometer, Syntex P2 ₁		
Strahlung	MoK α = 71,069 pm (Graphitmonochromator)		
Meßtemperatur [K]	298	298	298
Meßbereich	0 < 2 θ < 55	3 < 2 θ < 55	0 < 2 θ < 55
<i>h, k, l</i> - Grenzen	-21 → -20, 0 → 13, 0 → 4	0 → -6, 0 → 12, -23 → 23	-8 → -8, -8 → 8, 0 → 5
Abtastung	ω -Scan	ω -Scan	ω -Scan
Zahl der gemessenen Reflexe	1748	1647	937
Zahl der unabhängigen Reflexe	733 [<i>R</i> (int) = 0,0694]	1272 [<i>R</i> (int) = 0,1943]	937
Zahl der Reflexe mit <i>F</i> _o > 4 σ (<i>F</i> _o)	729	1125	931
Korrekturen	Lorentz-, Polarisations- und Absorptionskorrektur (DIFABS)		
Restelektronendichte [e/10 ⁶ pm ³]	0,58/-0,78	1,70/-1,49	2,96/-2,39
Anzahl der verfeinerten Parameter	84	87	83
<i>R</i> 1 = $\sum F_o - F_c / \sum F_o $	0,0347 (alle Reflexe)	0,0475 (alle Reflexe)	0,0421 (alle Reflexe)
<i>wR</i> ₂ [*]	0,0907 (alle Reflexe)	0,0876 (alle Reflexe)	0,1031 (alle Reflexe)
Goodness-of-fit (<i>F</i> ²)	1,074	1,038	1,049

$$^* wR2 = [\sum w(F_o^2 - F_c^2)^2 / \sum w(F_o^2)]^{1/2}$$

guanidin in H₂O (beide *c* = 0,062 mol/l), wurden innerhalb von 4d quaderförmige, durchsichtige Kristalle erhalten.

$\text{Hg}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)\text{Cl}_2$ (355,58 g/mol)

Ber. C 6,76 H 1,13 N 15,76%,
Gef. C 6,88 H 0,91 N 15,79%.

Geeignete Einkristalle der Verbindungen wurden auf einem Vierkreisdiffraktometer Syntex P2₁ untersucht (MoK α -Strahlung, λ = 71,069 pm, Graphitmonochromator, Raumtemperatur). Durch Verfeinerung der Winkel von 25 Reflexen für **1** und **2**, bzw. von 17 Reflexen für **3** erfolgte die Gitterkonstantenbestimmung. Die Intensitäten wurden einer Lorentz-, Polarisations-, sowie einer empirischen Absorptionskorrektur (DIFABS [4]) unterworfen. Die wichtigsten Kristalldaten und Angaben zur Struktur-

bestimmung sind in Tab. I zusammengefaßt*. Die Strukturlösung erfolgte für **1** mit Hilfe direkter Methoden, für **2** und **3** wurde die Patterson-Methode angewandt (SHELX-86 [5]). Alle Nichtwasserstoffatome wurden mit anisotropen Temperaturfaktoren verfeinert (SHELXL-93 [6]); die Wasserstoffatome wurden bei **1** für idealisierte Positionen berechnet und mit Temperaturfaktoren, die um das 1,2-fache höher liegen als die der Bindungspartner, versehen; die Wasserstoffatome der Kristallwassermoleküle konnten nicht lokalisiert werden. Bei **2** wurden die Wasserstoffatome berechnet und anschließend frei verfeinert, bei **3** wurden die Wasserstoffatome ebenfalls berechnet

*Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturuntersuchung können beim Fachinformationszentrum Karlsruhe, D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen, unter Angabe der Hinterlegungsnummern CSD-405835 für (**1**), CSD-405833 für (**2**), bzw. CSD-405834 für (**3**) angefordert werden.

Tab. II. Bindungslängen [pm] und -winkel [°] in $[\text{Cd}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**).

Cd(1)-F(1)	226,6(9)	F(1)-Cd(1)-F(2)	179,2(3)	N(1)-Cd(1)-N(1)c	176,6(8)
Cd(1)-F(2)	229,1(7)	F(1)-Cd(1)-N(1)	91,5(4)	Cd(1)-F(1)-Cd(1)b	102,7(5)
Cd(1)-F(2)b	229,1(7)	F(1)-Cd(1)-F(1)a	102,7(4)	Cd(1)-F(2)-Cd(1)a	101,2(4)
N(1)-C(1)	116,6(11)	F(1)-Cd(1)-F(2)b	78,1(3)	Cd(1)-N(1)-C(1)	157,6(12)
N(2)-C(1)	128,6(10)	F(1)-Cd(1)-N(1)c	90,6(4)	C(1)-N(2)-C(2)	119,4(7)
N(2)-C(2)	133,2(10)	F(2)-Cd(1)-N(1)	88,5(4)	N(1)-C(1)-N(2)	172,4(12)
N(3)-C(2)	133,5(10)	F(2)-Cd(1)-F(2)b	101,2(3)	N(2)-C(2)-N(3)	124,2(7)
N(4)-C(2)	133,1(10)	F(2)-Cd(1)-N(1)c	89,4(4)	N(2)-C(2)-N(4)	118,5(7)
		F(2)b-Cd(1)-N(1)	89,4(4)	N(3)-C(2)-N(4)	117,2(7)

Symmetriecode: $a = x, y, -1+z$; $b = x, y, 1+z$; $c = -x, y, -1-z$.Tab. III. Bindungslängen [pm] und -winkel [°] in $\text{Cd}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)_2\text{Br}_2$ (**2**).

Cd(1)-Br(1)	277,41(8)	Br(1)-Cd(1)-N(1)	91,33(12)	Cd(1)-N(1)-C(1)	140,6(4)
Cd(1)-N(1)	233,0(4)	Br(1)-Cd(1)-Br(1)a	90,08(2)	C(1)-N(2)-C(2)	120,2(5)
N(1)-C(1)	115,4(6)	Br(1)-Cd(1)-N(1)c	88,67(12)	N(1)-C(1)-N(2)	171,4(6)
N(2)-C(1)	130,1(7)	Br(1)-Cd(1)-Br(1)d	89,92(2)	N(2)-C(2)-N(3)	123,6(5)
N(2)-C(2)	134,4(7)	Br(1)a-Cd(1)-N(1)	88,42(12)	N(2)-C(2)-N(4)	116,5(5)
N(3)-C(2)	130,8(7)	Br(1)d-Cd(1)-N(1)	91,58(12)	N(3)-C(2)-N(4)	119,8(5)
N(4)-C(2)	131,8(8)	Cd(1)-Br(1)-Cd(1)b	90,08(2)		

Symmetriecode: $a = -1+x, y, z$; $b = 1+x, y, z$; $c = -1-x, -y, -z$; $d = -x, -y, -z$.Tab. IV. Bindungslängen [pm] und -winkel [°] in $\text{Hg}(\text{C}_2\text{N}_4\text{H}_4)\text{Cl}_2$ (**3**).

Hg(1)-Cl(1)	235,4(10)	Cl(1)-Hg(1)-Cl(2)	167,9(3)	Cl(1)a-Hg(1)-N(2)c	91,5(5)
Hg(1)-Cl(2)	231,9(11)	Cl(1)-Hg(1)-N(1)	102,4(7)	Cl(2)b-Hg(1)-N(2)c	79,1(6)
Hg(1)-Cl(1)a	297,1(11)	Cl(1)-Hg(1)-Cl(1)a	92,6(3)	Hg(1)-Cl(1)-Hg(1)b	92,6(3)
Hg(1)-Cl(2)b	300,2(11)	Cl(1)-Hg(1)-Cl(2)b	85,8(3)	Hg(1)-Cl(2)-Hg(1)a	92,5(3)
Hg(1)-N(1)	277(2)	Cl(1)-Hg(1)-N(2)c	88,3(6)	Hg(1)-N(1)-C(1)	117(2)
Hg(1)-N(2)c	270(2)	Cl(2)-Hg(1)-N(1)	89,6(7)	C(1)-N(2)-C(2)	118(2)
N(1)-C(1)	123(4)	Cl(1)a-Hg(1)-Cl(2)	87,1(3)	Hg(1)a-N(2)-C(1)	110,2(15)
N(2)-C(1)	134(3)	Cl(2)-Hg(1)-Cl(2)b	92,5(3)	Hg(1)a-N(2)-C(2)	125,8(14)
N(2)-C(2)	131(3)	Cl(2)-Hg(1)-N(2)c	79,6(6)	N(1)-C(1)-N(2)	172(3)
N(3)-C(2)	147(5)	Cl(1)a-Hg(1)-N(1)	99,2(7)	N(2)-C(2)-N(3)	120(2)
N(4)-C(2)	136(6)	Cl(2)b-Hg(1)-N(1)	90,3(7)	N(2)-C(2)-N(4)	132(3)
		N(1)-Hg(1)-N(2)c	164,4(8)	N(3)-C(2)-N(4)	108(4)
		Cl(1)a-Hg(1)-Cl(2)b	170,5(3)		

Symmetriecode: $a = x, y, -1+z$; $b = x, y, 1+z$; $c = 1+x, y, z$.

und mit festen Temperaturfaktoren von $8,0 \times 10^2 \text{ pm}^2$ dem Strukturmodell hinzugefügt.

Die Verbindung **3** kristallisiert in der Raumgruppe P1, eine höhersymmetrische Zelle konnte nicht gefunden werden. Im Verlauf der Verfeinerung zeigte sich, daß der Flack-Parameter [7] den Wert 0,52 annahm, was auf das Vorliegen eines fast vollständigen Inversionszwilings hindeutet. Dies wurde bei der weiteren Verfeinerung berücksichtigt. In den Tab. II - IV sind wichtige Bindungsabstände und -winkel aufgeführt.

Kristallstruktur von $[\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**)

Die Verbindung $[\text{Cd}(\text{cnge})_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ kristallisiert monoklin in der Raumgruppe C2. Das Cadmiumatom, die beiden Fluoratome und ein Sauerstoffatom besetzen spezielle Lagen (2a) bzw. (2b) auf zweizähligen Drehachsen, die restlichen Atome allgemeine Lagen (4c). Das Cadmiumatom ist oktaedrisch von vier Fluoridionen und zwei Stickstoffatomen des Cyanoguanidins koordiniert.

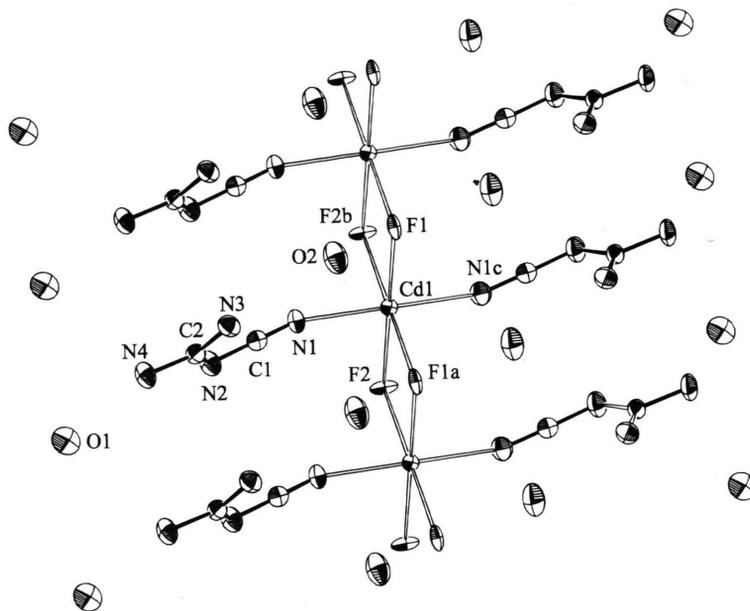


Abb. 1. ORTEP-Darstellung [18] von $[\text{Cd}(\text{cng})_2\text{F}_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (1). Die Rotationsellipsoide entsprechen einer Aufenthaltswahrscheinlichkeit von 50% (Wasserstoffatome nicht eingezeichnet).

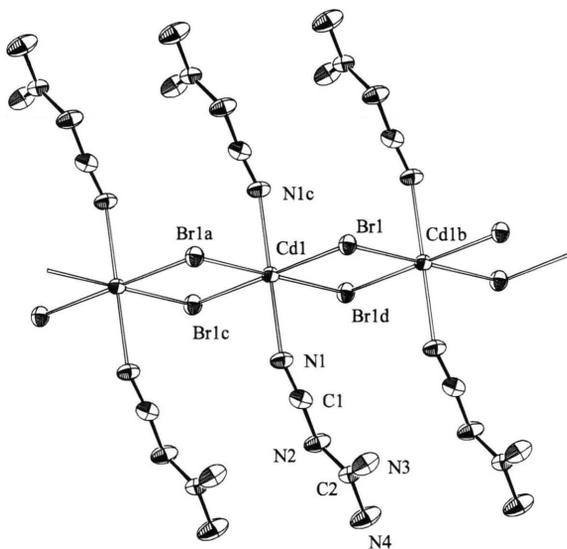


Abb. 2. ORTEP-Darstellung von $\text{Cd}(\text{cng})_2\text{Br}_2$ (2). Die Rotationsellipsoide entsprechen einer Aufenthaltswahrscheinlichkeit von 50% (Wasserstoffatome nicht eingezeichnet).

Bemerkenswert an dieser Struktur ist die Ausbildung von Fluoridbrücken, wobei polymere Ketten in Richtung der *c*-Achse gebildet werden. Die beiden Brückenbindungen sind in der Länge etwas verschieden. So beträgt die Länge der $\text{Cd}(1)\text{-F}(1)$ -Bindung 226,6(9) pm, während der Abstand

$\text{Cd}(1)\text{-F}(2)$ bei 229,1(7) pm liegt. Die Winkel am Cd-Atom betragen: $\text{F}(1)\text{-Cd}(1)\text{-F}(1)\text{a}$ $78,1(3)^\circ$, $\text{F}(1)\text{-Cd}(1)\text{-F}(2)\text{b}$ $102,7(4)^\circ$, $\text{F}(1)\text{-Cd}(1)\text{-F}(2)$ $179,2(3)^\circ$. Der Cd-Cd-Abstand entspricht der Kantenlänge *c*, er beträgt 353,9(1) pm und übersteigt damit beträchtlich das Zweifache des Atomradius, der mit 152 pm (KZ = 12) angegeben ist [8]. Ein vergleichbarer Cd-Cd-Abstand mit verbrückten, aber nicht bindenden Cadmiumatomen wird z.B. in $\text{Cd}_2(\text{F}_3\text{CCO}_2)_4(\text{PPh}_3)_2$ mit 345,2(1) pm [9] gefunden. Es wurden zahlreiche Kristallstrukturen von Verbindungen ermittelt, in denen Cadmiumatome über Chlorid- [10], Bromid- [11], oder auch Iodid-Brücken [12, 13] miteinander verknüpft sind, jedoch wurde unseres Wissens noch keine Struktur beschrieben, in der Cadmiumatome über Fluoridbrücken verknüpft sind.

Das Cyanoguanidin fungiert hier als einzähniger Ligand, wobei das Stickstoffatom der endständigen Cyanogruppe mit dem Cadmiumatom koordiniert; die Cd-N-Bindungslänge beträgt 224,9(5) pm. Dies entspricht etwa der Länge in $[\text{Cd}(\text{cng})(\text{H}_2\text{O})_2\text{SO}_4]_2$, die mit 223(1) pm angegeben ist [2]; die F-Cd-N-Bindungswinkel liegen zwischen $88,5(4)^\circ$ und $91,5(4)^\circ$. Die Bindungsabstände im komplexierten Cyanoguanidinmolekül entsprechen denen im ungebundenen Liganden [14]. So betragen die Abstände $\text{N}(1)\text{-C}(1)$ 116,6(11),

molekulare HgCl-Abstand beträgt 334 pm, wird jedoch nicht mehr als zwischenmolekulare Bindung interpretiert, so daß man sich HgCl₂ als aus linearen Molekülen aufgebaut denkt [17].

Die Cyanoguanidin-Moleküle fungieren als Brücken, wobei die koordinierenden Stickstoffatome beide den Cyanogruppen angehören. Dadurch entstehen ebenfalls Ketten, die entlang der *a*-Achse angeordnet sind, so daß eine Netzstruktur resultiert. Die Hg-N-Abstände betragen Hg(1)-N(1) 270(2) pm und Hg(1)-N(2) 277(2) pm. Auch in dieser Verbindung wird die Kristallstruktur durch die Ausbildung von Wasserstoffbrückenbindungen

vervollständigt. So besteht eine intramolekulare Wasserstoffbrücke von N(4) zu Cl(2), wobei der Donor-Akzeptor-Abstand bei 348(5) pm liegt, weitere intermolekulare Wasserstoffbrücken existieren zwischen N(3) und Cl(1) sowie Cl(2) mit Abständen von 319(5) bzw. 329(5) pm, ferner zwischen N(3) und N(4) zu N(1) mit Distanzen von 304(6) bzw. 324(7) pm.

Dank

Dem Fonds der chemischen Industrie danken wir für die finanzielle Unterstützung dieser Arbeit.

-
- [1] A. C. Villa, L. Coghi, A. G. Manfredotti, C. Guastini, *Cryst. Struct. Commun.* **3**, 739 (1974).
- [2] P. Hubberstey, C. P. Falshaw, *J. Chem. Res.* **176**, 1809 (1982).
- [3] A. C. Villa, L. Coghi, A. Mangia, M. Nardelli, G. Pelizzi, *J. Cryst. Mol. Struct.* **1**, 291 (1971).
- [4] N. Walker, D. Stewart, DIFABS, *Acta Crystallogr.* **A39**, 158 (1983).
- [5] G. M. Sheldrick, SHELXS-86, Program for Crystal Structure Solution, Universität Göttingen (1986).
- [6] G. M. Sheldrick, SHELXL-93, Program for Crystal Structure Determination, Universität Göttingen (1993).
- [7] H. D. Flack, *Acta Crystallogr.* **A39**, 876 (1983).
- [8] A. F. Wells, *Structural Inorganic Chemistry*, Oxford University Press (1984).
- [9] T. Allmann, R. C. Goel, N. K. JHA, A. L. Beauchamp, *Inorg. Chem.* **23**, 914 (1984).
- [10] E. A. H. Griffith, N. G. Charles, E. L. Amma, *Acta Crystallogr.* **B38**, 942 (1982).
- [11] G. Aguirre-Zamalloa, G. Madariaga, M. Couzi, T. Breczewski, *Acta Crystallogr.* **B49**, 691 (1993).
- [12] M. Nieuwenhuyzen, Huo Wen, C. J. Wilkens, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **615**, 143 (1992).
- [13] J. Pickardt, *Z. Naturforsch.* **36b**, 1225 (1981).
- [14] F. L. Hirshfeld, H. Hope, *Acta Crystallogr.* **B36**, 406 (1980).
- [15] K. A. Byriel, K. R. Dunster, L. R. Gahan, C. H. L. Kennard, J. L. Latten, *Inorg. Chim. Acta* **196**, 35 (1992).
- [16] S. E. Miller, D. A. House, W. T. Robinson, *Inorg. Chim. Acta*, **184**, 111 (1991).
- [17] V. Subramanian, K. Seff, *Acta Crystallogr.* **B36**, 2132 (1980).
- [18] L. Zsolnai, H. Pritzkow, ORTEP Program for Personal Computer, Universität Heidelberg (1994).
- [19] A. L. Spek, PLUTON, University of Utrecht (1992).