

Fig. 4. Molecular model of octa-*cis*-2,*trans*-6-diene-1,8-dioic acid.

and 90° respectively. These deformations are evidently induced by the presence of a bulk side group on the double bond.

In the case of octa-*cis*-2,*trans*-6-diene-1,8-dioic acid the deviation from the skew conformation is probably a result of both intermolecular and intramolecular interactions. In fact, a skew conformation would further decrease the distance between O(4) and H(4b) which is already unusually short (2.22 Å). The short intramolecular contacts C(4)---O(4) (2.925 Å) and O(4)---H(4b) (2.22 Å) are also responsible for the large values of the

valence angles O(4)–C(1)–C(2) (122.7°); C(1)–C(2)–C(3) (125.2°), C(2)–C(3)–C(4) (128.7°).

References

- ABRAHAMSSON, S., RYDERSTEDT, I. & NAHRINGBAUER, J. R. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1261.
 BERGHUIS, J., HAANAPPEL, IJ. M., POTTERS, M., LOOPSTRA, B. O., MACGILLAVRY, C. H. & VEENENDAAL, A. L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.
 CESARI, M. (1964). *Polymer Letters.* **2**, 453.
 CORRADINI, P., GANIS, P., AVITABILE, G. & MARTUSCELLI, E. (1966). *Ric. Sci.* **36**, 681.
 CORRADINI, P., GANIS, P., PEDONE, C., SIRIGU, A. & TEMUSSI, P. A. (1967). *Ric. Sci.* **37**, 676.
 CRUICKSHANK, D. W. J. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 65.
 DAMIANI, A., DE SANTIS, P., GIGLIO, E. & RIPAMONTI, A. (1962). *Ric. Sci.* **32** (II-A), 195.
 GANIS, P. & MARTUSCELLI, E. (1966). *Ric. Sci.* **36**, 439.
 GANIS, P., MARTUSCELLI, E. & AVITABILE, G. (1966). *Ric. Sci.* **36**, 689.
 JEFFREY, G. A. (1944). *Trans. Faraday Soc.* **40**, 517.
 McWEENEY, R. (1961). *Acta Cryst.* **4**, 513.
 MARTUSCELLI, E. (1967). *Acta Cryst.* **23**, 1086.
 MARTUSCELLI, E. & AVITABILE, G. (1967). *Ric. Sci.* **37**, 102.
 MARTUSCELLI, E. & PEDONE, C. (1968). *Acta Cryst.* **B24**, 175.
 NATTA, G., CORRADINI, P. & BASSI, I. W. (1961). *J. Polym. Sci.* **51**, 505.
 NATTA, G. & BASSI, I. W. (1967). *European Polymer Journal*, **3**, 43.
 PHILLIPS, D. C. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 819.
 SCHOMAKER, V., WASER, J., MARSH, R. E. & BERGMAN, G. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 600.

Acta Cryst. (1969). **B25**, 2029

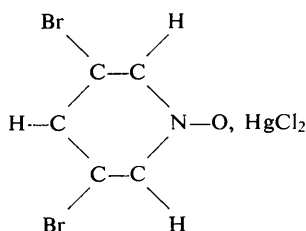
Affinement de la Structure Cristalline du Composé Pyridinoxyde Dibrome, Chlorure Mercurique

PAR FRANÇOISE GENET ET JEAN-CLAUDE LEGUEN

Laboratoire de Cristallographie C.N.E.T.–C.N.R.S. du Centre de Recherches de Lannion, Côtes-du-Nord et Laboratoire de Cristallographie de Bellevue, Hauts-de-Seine, France

(Reçu le 24 juin 1968, revu le 12 décembre 1968)

The refinement of the crystal structure of dibromopyridine oxide–mercuric chloride has clearly shown a bending of the mercuric chloride molecule. The structure is made up of mercuric chloride chains linked together by the organic molecules.



L'étude de ce composé a été entreprise dans le cadre général d'une étude de la liaison aminoxyde et, dans ce cas, de chlorure mercurique au voisinage d'une liaison polaire: la liaison azote–oxygène du pyridinoxyde.

Le cristal appartient au système monoclinique, les paramètres sont les suivants (Bompont, 1962) $a = 9,2 \pm 0,1$, $b = 27,1 \pm 0,1$, $c = 4,08 \pm 0,05$ Å, $\beta = 97^\circ \pm 1^\circ$.

L'application de la méthode de l'atome lourd a permis d'obtenir une représentation approchée de la struc-

ture cristalline (Bompont, 1962; Genet, Leguen & Tsoucaris, 1966).

Affinement de la structure

L'affinement de ces résultats a été entrepris en employant la méthode des moindres carrés [programme *ORFLS* (Busing, Martin & Levy, 1962) adapté au calculateur CAE 9040].

Il faut noter que toutes les réflexions n'ont pu être enregistrées à partir du même cristal. En effet, les cristaux diminuent progressivement de volume au cours de l'exposition aux rayons X (seule la partie du cristal touchée par le faisceau s'altère) et finissent par disparaître. De ce fait, nous n'avons pas pu apporter de corrections d'absorption.

Une première série de cycles de calcul a permis d'obtenir de bonnes valeurs des positions des atomes légers. Une projection de la 'série de différence' obtenue parallèlement à l'axe *c* a mis particulièrement en évidence l'anisotropie des atomes de brome qui vibrent dans le plan du noyau concentriquement à ce noyau.

Nous avons alors effectué de nouveaux cycles de calcul en attribuant aux cinq atomes lourds des coefficients de température anisotropes. Après trois cycles de calcul, le facteur *R* est de 0,10. Les résultats obtenus sont résumés dans le Tableau 1. Le Tableau 2 indique les facteurs de structure observés et calculés.

Description de la structure

L'étude de la structure cristalline montre que les deux

molécules (chlorure mercurique d'une part, et pyridinoxyde d'autre part) gardent leur individualité dans la structure, mais subissent des déformations.

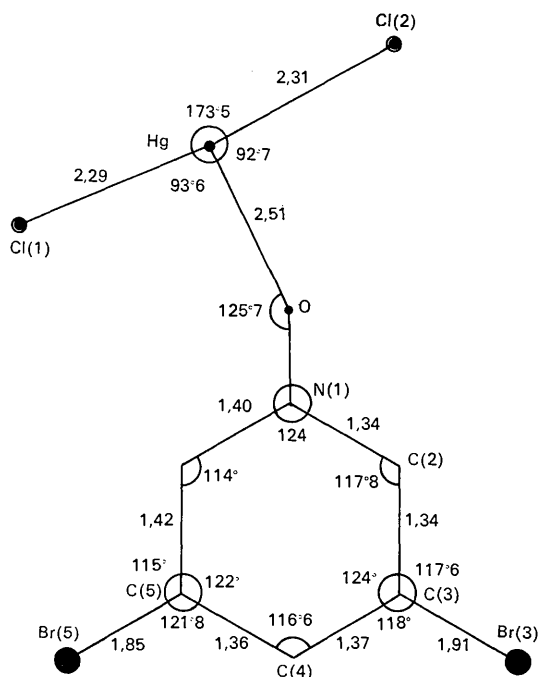


Fig. 1. Distances et angles de valence dans les molécules de pyridinoxyde et de chlorure mercurique.

Tableau 1. Coordonnées atomiques et facteurs de température

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$\beta(1,1)$	$\beta(2,2)$	$\beta(3,3)$	$\beta(1,2)$	$\beta(1,3)$	$\beta(2,3)$
Hg	0,0343	0,0841	0,0881	0,0071	0,0009	0,0387	0,0002	0,0043	-0,0007
Cl(1)	0,1242	0,4499	0,8031	0,0119	0,0007	0,0458	-0,0004	0,0009	-0,0011
Cl(2)	0,0804	0,2424	0,8389	0,0135	0,0005	0,0542	0,0004	0,0049	0,0003
Br(5)	0,1518	0,0299	0,7710	0,0084	0,0008	0,0295	0,0007	0,0058	-0,0003
Br(3)	0,4015	0,3696	0,4155	0,0067	0,0012	0,0229	-0,0008	0,0021	0,0010
O	0,2339	0,1477	0,1061	0,0086	0,0009	0,0449	0	0,0024	0
N(1)	0,3458	0,1502	0,3236	0,0047	0,0005	0,0246	0	0,0013	0
C(2)	0,3939	0,1942	0,4439	0,0067	0,0007	0,0351	0	0,0018	0
C(3)	0,0104	0,3051	0,6743	0,0052	0,0005	0,0270	0	0,0014	0
C(4)	0,0880	0,3464	0,7863	0,0060	0,0006	0,0312	0	0,0016	0
C(5)	0,0304	0,3909	0,6803	0,0073	0,0008	0,0381	0	0,0020	0

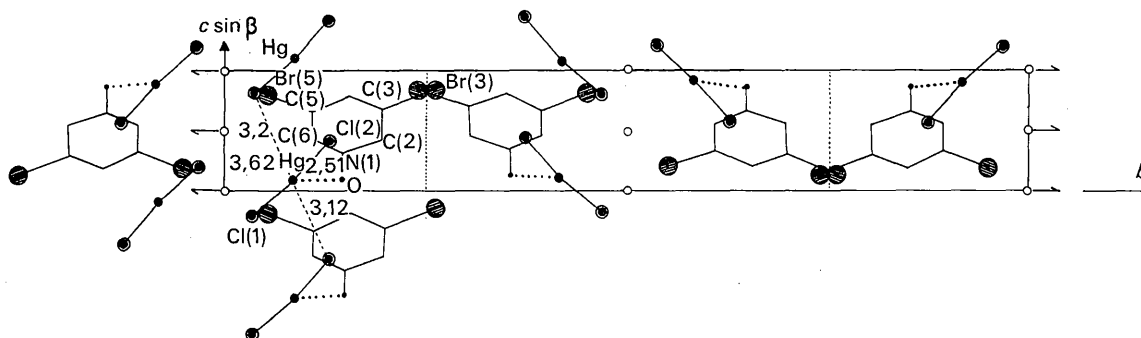


Fig. 2. Représentation de la structure cristalline en projection parallèlement à l'axe *c*.

(a) Molécule organique

Les distances et les angles de valence sont indiqués dans la Fig. 1. Les distances et angles observés dans la molécule organique sont légèrement différentes de celles observées pour d'autres substances. Ces écarts ne sont pas à prendre en considération. Il faut probablement attribuer cela au fait qu'il est difficile de mesurer avec précision des distances entre atomes légers

alors que des atomes relativement très lourds existent dans la structure, et qu'il n'a pas été possible de faire de corrections d'absorption.

On peut cependant noter qu'une des distances brome-carbone est nettement supérieure à l'autre.

La distance N-O est de 1,27 Å. Elle se rapproche de celle observée pour le complexe chlorure de cuivre, pyridinoxyde (1,24 Å).

Tableau 2. Facteurs de structure observés et calculés

Les colonnes sont hkl , $|F_o|$ et $|F_c|$.

0 6 0	384	-364	2 10 6	125	119	4 4 3	69	-75	5 27 0	28	29	1 1 0	53	-55	11 1 0	39	-38	1 15 1	101	-92	3 3 1	34	-34
0 8 0	66	-50	2 11 0	142	136	4 4 0	116	-133	5 28 0	40	45	8 2 0	48	39	11 2 0	17	-109	1 16 1	118	-109	3 3 1	41	111
0 12 0	202	173	2 12 0	217	224	4 5 0	136	-145	5 29 0	49	67	8 3 0	186	-175	11 4 0	35	-29	1 17 1	129	-116	3 5 1	68	57
0 14 0	26	-16	2 13 0	196	-91	4 6 0	109	165	5 31 0	64	-25	8 5 0	40	-44	11 5 0	35	36	1 18 1	51	37	3 6 1	55	-57
0 16 0	56	-41	2 14 0	34	32	4 7 0	164	162	5 32 0	29	-21	8 6 0	6	0	11 6 0	38	38	1 19 1	208	-202	3 7 1	99	-94
0 18 0	211	-211	2 15 0	36	31	4 8 0	60	-60	5 34 0	102	-125	8 7 0	46	44	11 8 0	66	53	1 20 1	62	70	3 8 1	196	196
0 20 0	62	50	2 16 0	39	-37	4 9 0	127	115	6 2 0	100	102	8 8 0	42	-40	11 9 0	62	58	1 22 1	89	86	3 9 1	99	83
0 22 0	81	81	2 17 0	29	12	4 10 0	187	192	6 3 0	122	-126	8 9 0	141	128	11 10 0	65	-63	1 24 1	69	-65	3 10 1	87	87
0 24 0	127	136	2 18 0	164	-162	4 11 0	156	150	6 4 0	32	-31	8 10 0	31	-27	11 11 0	26	-26	1 25 1	99	99	3 11 1	43	39
0 26 0	26	22	2 19 0	109	101	4 12 0	182	179	6 5 0	102	-99	8 11 0	166	158	11 12 0	66	-64	1 26 1	72	-74	3 12 1	65	-57
0 28 0	65	-74	2 20 0	36	-32	4 13 0	140	-133	6 6 0	106	-99	8 12 0	65	-64	11 13 0	64	-64	1 28 1	25	25	3 13 1	98	99
0 30 0	81	81	2 21 0	22	11	4 14 0	109	106	6 7 0	174	169	8 13 0	34	-38	11 14 0	74	-74	1 30 1	107	107	3 14 1	205	-211
0 32 0	33	-33	2 22 0	56	57	4 15 0	92	-87	6 10 0	80	70	8 15 0	92	-95	11 15 0	65	-63	1 32 1	17	23	3 15 1	33	-20
0 34 0	24	-32	2 23 0	109	115	4 16 0	21	-88	6 11 0	55	50	8 16 0	25	-21	11 16 0	75	-71	1 34 1	21	-29	3 16 1	165	-162
1 0 0	138	183	2 25 0	67	-69	4 17 0	69	-63	6 13 0	42	-39	8 17 0	42	-39	0 2 1	104	107	1 35 1	41	49	3 18 1	51	-44
1 1 0	44	-43	2 26 0	27	29	4 18 0	101	-96	6 14 0	41	-36	8 18 0	35	31	0 3 1	160	-151	1 37 1	20	24	3 19 1	111	-127
1 2 0	36	34	2 27 0	47	-47	4 19 0	88	89	6 15 0	171	-157	8 19 0	25	29	0 4 1	228	211	1 39 1	12	15	3 20 1	145	147
1 3 0	240	-235	2 28 0	47	-51	4 20 0	79	-81	6 16 0	69	-64	8 21 0	87	98	0 5 1	289	-289	1 41 1	209	-280	3 21 1	20	12
1 4 0	20	14	2 29 0	34	-28	4 21 0	49	46	6 17 0	90	-88	8 22 0	15	-25	0 6 1	149	124	1 43 1	15	14	3 22 1	22	-15
1 5 0	161	-172	2 30 0	53	-63	4 22 0	39	41	6 18 0	53	-49	8 23 0	15	-25	0 7 1	121	-100	1 45 1	209	-260	3 23 1	20	12
1 6 0	77	62	2 31 0	36	44	4 24 0	32	38	6 20 0	48	-45	9 1 0	58	-54	0 8 1	267	239	1 47 1	72	66	3 24 1	55	56
1 7 0	142	129	2 32 0	26	-29	4 25 0	55	-57	6 21 0	100	99	9 2 0	90	-88	0 9 1	101	88	1 49 1	201	-227	3 25 1	52	54
1 8 0	165	174	2 33 0	49	53	4 26 0	46	50	6 22 0	49	49	9 3 0	35	-27	0 10 1	267	236	1 51 1	26	27	3 26 1	45	-53
1 9 0	177	160	-141	31	14	4 27 0	64	-71	6 23 0	30	29	9 4 0	26	-20	0 11 1	149	124	1 53 1	26	27	3 27 1	41	-43
1 11 0	267	259	3 2 0	45	-45	4 28 0	64	-71	6 24 0	30	29	9 5 0	24	-11	0 12 1	49	36	1 55 1	140	140	3 28 1	22	22
1 12 0	183	-162	3 3 0	17	9	4 31 0	32	36	7 2 0	163	-165	9 6 0	33	29	0 13 1	249	-228	1 57 1	140	140	3 29 1	17	-24
1 13 0	66	-57	3 4 0	66	-70	5 1 0	34	125	7 3 0	35	24	9 7 0	64	63	0 14 1	94	-81	1 59 1	64	60	3 30 1	34	45
1 14 0	77	-68	3 5 0	179	-191	5 2 0	157	-172	7 4 0	176	-170	9 8 0	52	51	0 15 1	151	-125	1 61 1	175	-162	3 31 1	94	97
1 15 0	160	-141	3 6 0	209	-214	5 3 0	54	-52	7 5 0	21	-17	9 9 0	16	-15	0 16 1	18	-15	1 63 1	160	-160	3 32 1	160	-168
1 16 0	28	-18	3 7 0	209	-214	5 4 0	165	-179	7 6 0	21	-17	9 10 0	26	-23	0 17 1	114	-0	1 65 1	140	140	3 33 1	193	-216
1 17 0	266	-271	3 8 0	230	236	5 5 0	81	-78	7 7 0	18	17	9 11 0	76	-60	0 18 1	62	57	1 67 1	140	140	3 34 1	193	-216
1 18 0	77	68	3 9 0	74	-68	5 6 0	30	-25	7 8 0	80	76	9 12 0	98	-104	0 19 1	27	22	1 69 1	19	12	3 35 1	53	-58
1 19 0	20	13	3 10 0	103	96	5 7 0	110	-107	7 9 0	101	93	9 13 0	24	24	0 20 1	108	106	1 71 1	63	4	3 36 1	226	-247
1 20 0	76	77	3 11 0	104	96	5 8 0	170	-170	7 10 0	60	54	9 14 0	16	16	0 21 1	17	17	1 73 1	95	94	3 37 1	60	85
1 21 0	43	81	3 12 0	59	-50	5 9 0	93	-85	7 11 0	60	54	9 15 0	54	54	0 22 1	37	-24	1 75 1	84	73	3 38 1	76	75
1 22 0	113	122	3 13 0	164	154	5 10 0	147	139	7 12 0	29	-13	9 16 0	24	-26	0 23 1	62	57	1 77 1	140	140	3 39 1	81	78
1 23 0	47	-51	3 14 0	214	-217	5 11 0	73	69	7 13 0	74	-69	9 17 0	67	76	0 24 1	30	1	1 79 1	118	119	4 0 1	82	78
1 24 0	28	23	3 15 0	16	-63	5 12 0	66	56	7 14 0	79	-77	10 0 0	39	-36	0 25 1	19	-22	1 81 1	48	41	4 1 1	137	134
1 25 0	41	41	3 16 0	61	-68	5 13 0	29	26	7 15 0	52	-48	10 1 0	56	-52	0 26 1	34	1	1 83 1	35	31	4 2 1	63	54
1 26 0	95	81	3 17 0	65	-57	5 14 0	105	-96	7 16 0	32	-25	10 2 0	42	-44	1 1 1	80	103	1 85 1	24	21	4 3 1	97	93
1 27 0	54	61	3 18 0	35	-33	5 15 0	43	-38	7 17 0	17	-11	10 3 0	35	39	1 2 1	67	-186	1 87 1	70	69	4 4 1	24	15
1 28 0	24	-24	3 19 0	112	-115	5 16 0	74	-76	7 20 0	88	88	10 4 0	36	30	1 3 1	63	-103	1 89 1	27	15	4 5 1	78	-63
1 29 0	40	42	3 20 0	67	64	5 19 0	41	34	7 21 0	61	-63	10 5 0	77	75	1 4 1	58	46	1 91 1	28	27	4 6 1	34	24
1 30 0	105	-110	3 21 0	35	24	5 22 0	103	103	7 22 0	74	-74	10 6 0	10	10	1 5 1	168	-168	1 93 1	31	31	4 7 1	55	-45
1 31 0	95	-98	3 22 0	96	100	5 21 0	21	9	7 23 0	34	-38	10 7 0	11	11	1 6 1	106	102	1 95 1	44	44	4 8 1	118	114
1 32 0	348	-352	3 23 0	77	76	5 22 0	26	22	7 25 0	10	-11	10 8 0	42	-45	1 7 1	158	141	1 97 1	20	-17	4 9 1	121	114
1 33 0	295	-296	3 24 0	57	63	5 23 0	64	68	7 26 0	71	-74	10 9 0	16	-13	1 8 1	216	201	1 99 1	37	43	4 10 1	88	87
1 34 0	27	29	3 25 0	48	38	5 24 0	32	-35	7 27 0	26	36	10 10 0	46	-51	1 9 1	112	103	1 101 1	45	47	4 11 1	29	33
1 35 0	59	-59	4 0 0	48	38	5 25 0	14	13	7 28 0	45	-54	10 11 0	29	29	1 10 1	162	155	1 103 1	4	4	4 12 1	29	33
1 36 0	26	-26	4 1 0	136	-156	5 26 0	109	-120	8 0 0	25	15	10 12 0	49	49	1 11 1	44	-29	1 105 1	184	184	4 13 1	26	20
4 25 1	94	-97	6 25 1	40	-44	9 14 1	30	-32	-2 3 1	54	-67	1 0 1	141	146	-6 0 1	174	197	-8 9 1	141	-140	1 2 1	17	-14
4 27 1	70	-76	6 26 1	59	-58	9 16 1	25	-27	-2 5 1	27	28	1 1 1	59	56	-6 2 1	159	166	-8 10 1	10	10	1 3 1	245	-239
4 29 1	30	-31	6 28 1	20	-23	9 17 1	13	16	-2 6 1	226	-233	1 2 1	165	165	-6 3 1	149	160	-8 11 1	43	33	1 4 1	235	-249
4 31 1	61	-61	6 29 1	31	-31	9 18 1	20	21	-2 7 1	67	-63	1 3 1	169	-204	-6 4 1	99	96	-8 12 1	60	54	1 5 1	2	2
5 1 1	32	31	7 2 1	99	-99	9 19 1	34	37	-2 8 1	134	-119	1 4 1	84	-85	-6 5 1	26	14	-8 13 1	11	11	1 6 1	59	-47
5 2 1	146	-154	7 3 1	30	-26	9 20 1	28	32	-2 9 1	149	134	1 5 1	109	-104	-6 6 1	195	-101	-8 14 1	25	27	1 7 1	2	2
5 3 1	94	-99	7 4 1	127	-126	10 0 1	71	-82	-2 10 1	276	267	1 6 1	163	-156	-6 7 1	29	22	-8 15 1	99	92	1 8 1	291	234

Tableau 2 (suite)

3 9 2	75	78	5 18 2	28	-25	9 17 2	19	-76	24	2	79	-7	1 2	80	77	0 23 3	26	24	3 5 3	63	61	
3 10 2	152	144	5 19 2	28	25	9 18 2	26	45	25	2	74	-30	-7 5 2	114	-103	0 24 3	26	-28	3 5 3	111	118	
3 11 2	32	29	5 20 2	27	73	84	1 2	35	26	2	67	-7 6 2	68	-56	0 25 3	55	-44	3 8 3	50	51		
3 12 2	42	33	5 21 2	26	49	62	1 2	43	22	2	49	-7 7 2	156	-149	0 26 3	110	-110	3 18 3	118	109		
3 13 2	98	100	5 22 2	26	62	73	9 9 2	50	23	2	67	-7 8 2	76	-72	0 27 3	82	-65	3 11 3	93	-93		
3 15 2	68	-65	5 24 2	22	31	9 10 2	46	9	25	2	35	-7 10 2	52	-44	0 28 3	21	11	3 13 3	37	-39		
3 16 2	90	-98	5 26 2	11	-24	9 11 2	46	-69	26	2	35	-7 11 2	125	-117	1 2 3	28	-142	3 16 3	43	-59		
3 18 2	44	38	5 27 2	12	-17	10 0 2	40	-18	27	2	56	-7 12 2	66	55	1 4 3	108	-139	3 17 3	32	33		
3 19 2	53	-49	6 0 2	108	-102	10 6 2	32	63	28	2	23	-7 13 2	110	107	1 7 3	23	27	3 18 3	52	54		
3 20 2	78	74	6 1 2	94	-102	11 0 2	32	51	27	2	159	-7 14 2	56	50	1 8 3	71	82	3 19 3	28	27		
3 22 2	90	92	6 3 2	86	-92	11 1 2	30	28	27	2	30	-7 16 2	70	65	1 9 3	51	-60	3 22 3	36	33		
3 23 2	80	-89	6 4 2	52	51	-1 2 2	115	-132	3 2 2	21	27	-7 17 2	51	-44	1 10 3	85	97	3 23 3	23	-24		
3 24 2	20	-29	6 5 2	80	-92	-1 3 2	17	-11	4 2 2	47	-34	-7 19 2	59	-56	1 11 3	48	-63	3 24 3	77	-81		
3 26 2	43	-56	6 6 2	71	72	-1 4 2	153	-166	5 4 2	59	61	-7 21 2	23	31	1 13 3	55	-61	3 25 3	39	-27		
3 28 2	52	-67	6 7 2	46	46	-1 5 2	162	-172	6 5 2	101	-111	-7 22 2	195	189	1 14 3	63	-69	3 26 3	54	-46		
3 29 2	46	64	6 8 2	68	74	-1 7 2	90	-91	7 6 2	155	100	-7 23 2	34	40	1 15 3	38	44	4 2 3	34	-26		
4 0 2	25	24	6 9 2	32	30	-1 8 2	98	97	8 7 2	33	23	-7 24 2	152	142	1 16 3	95	-100	4 3 3	75	-64		
4 1 2	95	6 10 2	40	-37	-1 9 2	85	-84	-11 2	147	153	-5 17 2	158	-156	-8 6 2	120	-118	1 17 3	36	45	4 4 3	80	75
4 3 2	178	-195	6 11 2	40	-36	-1 10 2	146	100	3 12 2	25	-18	-5 18 2	68	-64	-8 7 2	42	-38	1 19 3	82	86		
4 4 2	118	128	6 12 2	37	-35	-1 11 2	42	39	-13 2 2	61	57	-5 19 2	120	-113	-8 9 2	72	-66	1 20 3	65	66		
4 5 2	99	-104	6 13 2	27	-29	-1 12 2	33	-33	-14 2 2	120	-121	-5 20 2	32	30	-8 10 2	49	40	1 22 3	77	83		
4 6 2	25	17	6 14 2	25	-23	-1 13 2	56	39	-15 2 2	25	-19	-5 21 2	23	-18	-8 11 2	37	-33	1 23 3	42	43		
4 7 2	34	31	6 16 2	44	47	-1 14 2	128	-121	-16 2 2	106	-99	-5 22 2	52	51	-8 12 2	128	135	1 24 3	41	-38		
4 8 2	30	26	6 17 2	33	-35	-1 15 2	74	61	-17 2 2	152	-156	-5 23 2	47	50	-8 14 2	31	26	1 25 3	51	-39		
4 9 2	102	98	6 18 2	41	48	-1 16 2	131	-125	-18 2 2	75	-69	-5 26 2	40	-48	-8 15 2	34	35	1 26 3	60	-50		
4 10 2	143	-147	6 19 2	45	53	-1 17 2	76	-69	-19 2 2	94	-90	-5 29 2	22	-40	-8 16 2	32	-29	2 0 3	97	-100		
4 11 2	62	50	6 21 2	26	40	-1 18 2	40	38	-20 2 2	76	70	-8 0 2	150	157	-8 18 2	68	-80	2 1 3	54	-58		
4 12 2	42	35	6 22 2	22	35	-1 19 2	82	-80	-21 2 2	42	-40	-6 1 2	112	103	-8 19 2	28	-28	2 2 3	115	-120		
4 13 2	44	-39	7 1 2	45	-42	-1 20 2	62	58	-22 2 2	32	24	-6 2 2	77	75	-8 20 2	17	-21	2 3 3	32	-33		
4 14 2	74	-65	7 2 2	37	-44	-1 21 2	39	34	-23 2 2	112	125	-6 3 2	112	103	-8 21 2	29	-33	2 5 3	31	34		
4 15 2	91	-80	7 3 2	53	62	-1 22 2	97	100	-24 2 2	32	39	-6 4 2	60	-44	-9 10 2	46	-53	2 6 3	79	82		
4 16 2	28	21	7 4 2	52	62	-1 23 2	118	133	-25 2 2	27	29	-6 5 2	30	20	-9 11 2	19	21	2 7 3	70	81		
4 17 2	34	31	7 5 2	44	47	-1 24 2	82	-80	-26 2 2	42	-47	-6 6 2	11	2	-9 12 2	39	42	2 8 3	40	51		
4 18 2	42	36	7 10 2	26	25	-1 25 2	72	-70	-27 2 2	219	230	-6 7 2	83	76	-9 14 2	30	35	2 9 3	168	179		
4 19 2	65	69	7 11 2	90	-106	-1 26 2	21	25	-28 2 2	189	206	-6 8 2	101	-89	-9 15 2	34	-21	2 10 3	32	32		
4 20 2	67	69	7 13 2	60	-69	-1 31 2	21	-30	-29 2 2	70	-57	-6 9 2	51	-33	-9 16 2	20	43	2 12 3	60	-67		
4 21 2	71	75	7 14 2	32	-42	0 2 2	87	94	-30 2 2	107	-107	-6 10 2	50	34	-9 17 2	36	-20	2 13 3	40	-51		
4 22 2	27	24	7 15 2	67	82	-1 01 2	82	-81	-31 2 2	42	-47	-6 11 2	22	17	-10 1 2	123	-117	2 14 3	47	51		
4 23 2	23	-19	7 17 2	67	82	-1 02 2	92	120	-32 2 2	147	-147	-6 12 2	156	150	-10 2 2	16	17	2 16 3	42	47		
4 25 2	37	-50	7 18 2	24	-33	-1 03 2	185	-215	-33 2 2	63	55	-6 13 2	22	-20	-10 3 2	21	13	2 17 3	41	-41		
5 0 2	80	-90	7 19 2	53	70	0 2 2	201	-224	-34 2 2	143	-139	-6 14 2	49	44	-10 4 2	28	37	2 18 3	39	41		
5 1 2	87	-101	7 20 2	27	39	0 3 2	130	-151	-35 2 2	29	-30	-6 15 2	38	37	-10 5 2	38	37	2 19 3	85	91		
5 2 2	58	47	7 21 2	14	24	0 4 2	65	-64	-36 2 2	10	2	-6 16 2	21	21	-11 2 2	41	-48	2 20 3	20	-18		
5 3 2	82	78	7 23 2	17	-31	0 5 2	26	-21	-37 2 2	72	66	-6 17 2	52	-46	-11 3 2	35	37	2 23 3	24	25		
5 4 2	52	58	8 0 2	39	-59	0 6 2	60	-65	-38 2 2	12	2	-6 18 2	72	-72	-11 4 2	88	-95	2 24 3	55	-41		
5 5 2	86	90	8 1 2	50	-49	0 7 2	102	-96	-39 2 2	14	73	-6 19 2	24	24	-11 5 2	33	-36	2 26 3	23	20		
5 6 2	38	34	8 2 2	61	54	0 8 2	182	-181	-40 2 2	15	29	-6 22 2	49	52	-11 6 2	31	-31	2 27 3	52	-45		
5 7 2	47	41	8 3 2	24	24	0 9 2	65	-64	-41 2 2	16	119	-6 23 2	73	80	-11 7 2	75	75	3 1 3	68	-66		
5 8 2	45	-42	8 4 2	44	55	0 10 2	29	-26	-42 2 2	17	47	-6 26 2	15	17	-12 0 2	27	-30	3 2 3	93	-91		
5 9 2	49	-45	8 5 2	28	31	0 11 2	119	-115	-43 2 2	18	89	-6 27 2	17	27	0 21 3	100	100	3 4 3	114	-116		
5 11 2	123	-131	8 13 2	22	-25	0 12 2	56	-42	-44 2 2	20	52											
5 14 2	92	-105	8 15 2	15	-24	0 13 2	111	-111	-45 2 2	22	48											
5 16 2	86	88	8 16 2	21	34	0 14 2	101	-108	-46 2 2	22	83											

Tableau 2 (suite)

6 4 3	95	-78	26 3	26	16	-5 5	4 3	74	-87	8 4 3	68	40
6 5 3	71	-58	26 3	34	-66	-5 5	3	97	-113	8 6 3	85	56
6 6 3	71	-64	28 3	23	94	-5 5	3	94	-52	8 8 3	53	31
6 7 3	88	-68	28 3	19	18	-5 5	7 3	89	-96	8 9 3	40	40
6 10 3	95	-76	2 3 3	71	-91	-5 5	8 3	59	56	8 10 3	33	33
6 12 3	69	-60	4 3 3	54	-79	-5 5	9 3	38	34	8 12 3	23	23
6 14 3	72	-52	5 3 3	43	-54	-5 5	11 3	96	92			
6 16 3	51	-44	6 3 3	43	-54	-5 5	11 3	96	92			
6 18 3	67	52	8 3 3	149	161	-5 5	12 3	38	37			
6 20 3	49	50	9 3 3	37	42	-5 5	13 3	131	112			
7 1 3	96	-77	10 3 3	94	100	-5 5	14 3	55	-47			
7 4 3	27	-20	11 3 3	25	127	-5 5	15 3	48	42			
7 5 3	82	67	12 3 3	69	66	-5 5	17 3	45	-43			
7 7 3	45	34	13 3 3	123	-113	-5 5	18 3	20	21			
7 11 3	64	-51	14 3 3	45	-41	-5 5	19 3	80	-64			
7 13 3	45	-36	15 3 3	58	-56	-5 5	20 3	48	42			
7 14 3	36	-30	16 3 3	102	-93	-5 5	21 3	90	-27			
7 15 3	12	29	17 3 3	35	-33	-5 5	22 3	24	15			
-1 1 3	59	-123	18 3 3	65	-58	-5 5	23 3	64	49			
-1 2 3	19	35	19 3 3	99	90	-5 5	25 3	69	51			
-1 3 3	64	-93	20 3 3	25	-27	-5 5	0 3	141	154			
-1 4 3	30	-46	21 3 3	13	15	-5 5	3 3	60	-69			
-1 5 3	34	-34	22 3 3	13	15	-5 5	5 3	39	-40			
-1 6 3	110	141	23 3 3	26	18	-5 5	6 3	124	-136			
-1 7 3	29	-37	24 3 3	25	15	-5 5	7 3	30	24</			

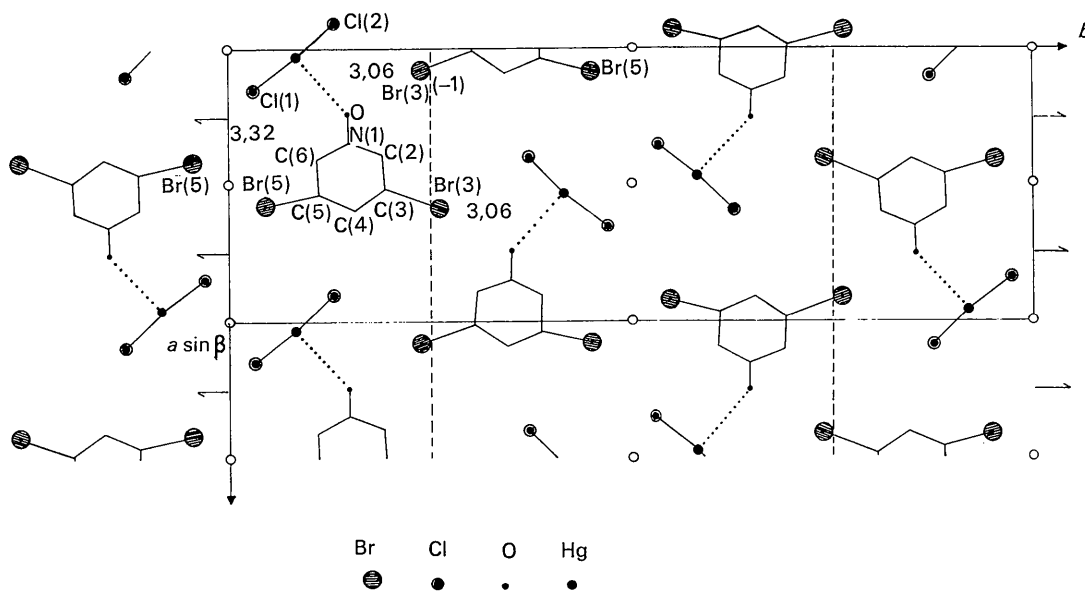


Fig.3. Représentation de la structure cristalline en projection parallèlement à l'axe a .

chaînes qui se déduisent l'une de l'autre par le plan de glissement.

On a constaté dans diverses substances: chlorure mercurique pur HgCl_2 (Grdenic, 1960), chlorure mercurique dioxane (Bränden, 1964), chlorure mercurique bisméthanol (Brusset & Madaule-Aubry, 1966), oxychlorure trimercurique (Aurivillius, 1964), chlorure mercurique quinoléine oxyde (McPhail & Sim, 1965), la présence de chaînes chlore-mercure qui sont liées aux autres molécules par l'intermédiaire de l'atome de mercure, soit à une seule molécule, soit à plusieurs molécules. La présence de ces chaînes $\text{Hg}\dots\text{Cl}\dots\text{Hg}$ semble être la caractéristique des composés d'additions du chlorure de mercure, le nombre des liaisons entre les chaînes et leur écartement dépendant prin-

cipalement de la nature des composés qui s'additionnent au chlorure mercurique.

Références

- AURIVILLIUS, K. (1964). *Ark. Kemi*, **23**, 13, 205.
 BOMPOINT, J. (1962). Diplôme d'Etudes Supérieures, Paris.
 BRÄNDEN, C.-I. (1964). *Ark. Kemi*, **22**, 83.
 BRUSSET, H. & MADAULE-AUBRY, F. (1966). *Bull. Soc. chim. Fr.* **10**, 3121.
 BUSING, W. A., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). ORNL-TM-305. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
 GENET, F., LEGUEN, J. C. & TSOUCARIS, G. (1966). *C.R. Acad. Sci. Paris*, **262**, 989.
 GRDENIĆ, D. (1960). *Ark. Kemi*, **22**, 14.
 MCPHAIL, A. T. & SIM, G. A. (1965). *Chem. Comm.* 768, 21.