

permanent cure for the psychotically abnormal, but also to the prevention of this tragic disease.

The author is indebted to the University Research Grants Committee, and to the Council for Scientific and Industrial Research for the use of their automatic diffractometer and for a computing grant. Appreciation is recorded to Professor W. Schaffer and to Mr M. H. Linck of the University of Cape Town for their interest and support. The author thanks the members of the crystallography division of the C.S.I.R., and gratefully acknowledges the generous assistance and skilled advice given by the head of the division, Dr G. Gafner, who also organized the collection of the diffractometer data.

References

- ABRAHAMS, S. C. (1956). *Quart. Rev. Chem. Soc. London*, **10**, 407.
- BAK, B., CHRISTENSEN, D., HANSEN-NYGAARD, L. & RASTRUP-ANDERSEN, J. (1961). *J. Mol. Spect.* **7**, 58.
- BELL, J. D., BLOUNT, J. F., BRISCOE, O. V. & FREEMAN, H. C. (1968). *Chem. Comm.* p. 1656.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). USAEC Report ORNL-TM-305, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, U.S.A.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1964). USAEC Report ORNL-TM-306, Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, U.S.A.
- CRUICKSHANK, D. W. J. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 65.
- CRUICKSHANK, D. W. J. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 774.
- CULL NANE, N. M. & REES, W. T. (1940). *Trans. Faraday Soc.* **36**, 507.
- Extra Pharmacopoeia* (1967). Martindale, 25th ed.
- HANSON, H. P., HERMAN, F., LEA, J. D. & SKILLMAN, S. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 1040.
- HOSOYA, S. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 429.
- JACOBSON, R. A., WUNDERLICH, J. A. & LIPSCOMB, W. N. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 598.
- KARREMAN, G., ISENBERG, I. & SZENT-GYÖRGYI, A. (1959). *Science*, **130**, 1191.
- KENNARD, O. (1962). *International Tables for X-ray Crystallography*. Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
- KITAJGORODSKIJ, A. I. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 585.
- LONGUET-HIGGINS, H. C. (1949). *Trans. Faraday Soc.* **45**, 173.
- LYNTON, H. & COX, E. G. (1956). *J. Chem. Soc.* p. 4886.
- McDOWELL, J. J. H. (1969). *Acta Cryst.* **B 25**, 2175.
- PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*. Ithaca: Cornell Univ. Press.
- Progress in Drug Research* (1963). Vol. 5, p. 269. Basel, Stuttgart: Birkhäuser Verlag.
- PULLMAN, B. & PULLMAN, A. (1958). *Proc. Nat. Acad. Sci. Wash.* **44**, 1197.
- ROWE, I. & POST, B. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 372.
- SCHOMAKER, V. & PAULING, L. (1939). *J. Amer. Chem. Soc.* **61**, 1769.
- SCHOMAKER, V., WASER, J., MARSH, R. E. & BERGMAN, G. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 600.
- Scientific Basis of Drug Therapy in Psychiatry* (1964). Symposium, London.
- SPENCER, C. J. & LIPSCOMB, W. N. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 250.
- SUTTON, L. E. (1965). *Tables of Interatomic Distances and Configurations in Molecules and Ions*. Special Publication No. 18. London: The Chemical Society.
- SZENT-GYÖRGYI, A. (1960). *Introduction to a Submolecular Biology*, New York: Academic Press.
- WOOD, R. G., McCALC, C. H. & WILLIAMS, G. (1941). *Phil. Mag.* **31**, 71.

Acta Cryst. (1970). **B26**, 964

La Structure Cristalline du Palladocyanure de Rubidium Monohydraté

PAR LÉON DUPONT

Cristallographie Approfondie et Physique de l'Etat Solide, Université de Liège au Sart-Tilman (par Liège 1)

(Reçu le 13 octobre 1969)

$\text{Rb}_2\text{Pd}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ crystallizes in space group *Pncn* with $a=10.01$, $b=13.74$, $c=7.44$ Å and with four molecules in the unit cell. The structure was determined from three-dimensional film data and refined with anisotropic thermal parameters using the method of least squares. The $\text{Pd}(\text{CN})_4^{2-}$ group is planar and square within experimental errors with average distances Pd-C 2.01, C=N 1.13 Å, and with average angle C-Pd-C, 90°. Rb atoms coordinations are respectively 7 and 8.

Introduction

On sait que les structures des complexes tétracyanés, à base de Pt, Pd et Ni, se caractérisent par un empilement des plans $\text{X}(\text{CN})_4^{2-}$ (X=Pt, Pd ou Ni). De nombreuses études tant spectroscopiques que structurales ont déjà été effectuées en vue d'arriver à une meilleure

connaissance de la liaison inter-complexes responsable de cette propriété. On a pu ainsi observer une certaine corrélation entre la distance séparant les groupes $\text{X}(\text{CN})_4^{2-}$ et leur angle de rotation relatif, suivant l'idée émise par Brasseur (1938). Par ailleurs, en comparant les propriétés optiques et structurales des cyanures complexes, on a pu mettre en évidence l'évolution ré-

gulière des spectres optiques avec le rapprochement des groupements plans (*cf.* Fontaine, Moreau-Colin & Simon (1968), où l'on peut trouver une bibliographie assez complète sur le sujet).

Afin de préciser les lois empiriques, il est nécessaire d'accumuler des résultats expérimentaux précis. C'est dans ce cadre que s'insère l'étude structurale du $\text{Rb}_2\text{Pd}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$.

Cette structure a été déterminée antérieurement (Dupont, 1967), à partir des synthèses de Fourier (001) et (100). Nous avons par la suite affiné les valeurs des paramètres atomiques par la méthode des moindres carrés, en utilisant des données tri-dimensionnelles. C'est l'objet de cet article.

Expérimentation

Les cristaux de $\text{Rb}_2\text{Pd}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ sont incolores, allongés suivant **c**. Leur densité, mesurée expérimentalement au moyen de la balance de Berman, est égale à $2,56 \pm 0,04 \text{ g.cm}^{-3}$. Ils sont orthorhombiques. Les paramètres de la maille, déterminés par voie diffractométrique (radiation $\text{Cu K}\alpha$), sont les suivants:

$$a = 10,01 \pm 0,02 \quad b = 13,74 \pm 0,02 \quad c = 7,44 \pm 0,02 \text{ \AA}$$

Les extinctions systématiques ($hk0: h+k=2n+1; 0kl: k+l=2n+1; h0l: l=2n+1$) conduisent au groupe de recouvrement *Pncn*. Il y a quatre molécules de $\text{Rb}_2\text{Pd}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ dans une maille unité.

Les intensités des réflexions *hkl* ont été recueillies par voie photographique (technique du film multiple) par la méthode du Weissenberg intégrateur (radiation $\text{Cu K}\alpha$). Les oscillations ont eu lieu autour des axes *a* et *c*, avec la géométrie de l'équinclinaison. Le domaine du réseau réciproque exploré a été limité aux noeuds *hk0* à *hk4* et *0kl* à *3kl*. Le cristal utilisé pour les oscillations autour de **c** est une aiguille de 0,04 mm de diamètre; pour les oscillations autour de **a**, nous nous sommes servi d'une plaquette ayant les dimensions suivantes: respectivement 1,2, 0,06 et 0,4 mm parallèlement aux axes *a*, *b* et *c*. Les intensités ont été mesurées au moyen du microdensitomètre Nonius. 508 réflexions avaient une intensité suffisante pour être mesurées; leurs valeurs ont été corrigées des facteurs de polarisation et de Lorentz, ainsi que de l'absorption au moyen d'un programme écrit par Dideberg (1966). Le coefficient d'absorption linéaire, μ , pour la radiation $\text{Cu K}\alpha$, est égal à $26,7 \text{ mm}^{-1}$.

Détermination et affinement de la structure

Les positions atomiques obtenues antérieurement (Dupont, 1967), ont été confirmées par synthèse de Fourier tri-dimensionnelle. Les paramètres atomiques ont, ensuite, été affinés par la méthode des moindres carrés, utilisant la matrice entière des équations normales, au moyen du programme écrit par Busing, Martin & Levy (1962). Les facteurs de diffusion utilisés pour les atomes Pd, C et N sont ceux calculés par Hanson, Herman, Lea & Skillman (1964) au moyen des fonctions d'onde de Hartree-Fock-Slater; pour Rb^+ , ce sont ceux obtenus par Cromer, Larson & Waber (1964) à partir de calculs du champ 'self-consistent' de Hartree; pour les facteurs de diffusion de l'atome O de l'eau, nous avons adopté les valeurs utilisées pour O^{2-} par Busing, Martin & Levy (1962).

Les valeurs des intensités observées ont été pondérées suivant le système de poids proposé par Cruickshank, Pilling, Bujosa, Lovell & Truter (1961):

$$w = (a + F_o + cF_o^2)^{-1} \text{ avec } a = 2F_{o \text{ min}} \text{ et } c = 2/F_{o \text{ max}},$$

les $F_{o \text{ min}}$ et $F_{o \text{ max}}$ étant déterminés dans chacun des neuf plans du réciproque.

Au cours des derniers cycles de l'affinement, 316 intensités supplémentaires, trop faibles pour être mesurées, ont été introduites, en donnant aux facteurs de structure correspondants, une valeur égale à $\frac{1}{2} F_{o \text{ min}}$ et un poids tel que wA^2 soit le même pour l'ensemble des facteurs de structure observés et pour celui des inobservés. D'autre part, 10 réflexions pour lesquelles $wA^2 > 3$ ont été éliminées.

$$\text{Le facteur } R = \left[\frac{\sum w(F_o - F_c)^2}{\sum wF_o^2} \right]^{1/2} \text{ est égal, à la fin de}$$

Tableau 1. Coordonnées des atomes de la maille du $\text{Rb}_2\text{Pd}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

	$x/a(10^5\sigma_x)$	$y/b(10^5\sigma_y)$	$z/c(10^5\sigma_z)$
Pd	0,00000	0,00000	0,00000
Rb(1)	0,25000	0,25000	0,81687 (44)
Rb(2)	0,50000	0,09625 (20)	0,25000
	$x/a(10^4\sigma_x)$	$y/b(10^4\sigma_y)$	$z/c(10^4\sigma_z)$
C(1)	0,0305 (26)	0,1414 (14)	0,5048 (27)
C(2)	0,2006 (23)	-0,0206 (16)	0,4724 (33)
N(1)	0,0458 (18)	0,2254 (11)	0,5067 (26)
N(2)	0,3075 (16)	-0,0309 (16)	0,4494 (29)
H ₂ O	0,2500	0,2500	0,2114 (43)

Tableau 2. Coefficients ($\beta \times 10^5$) des facteurs de température anisotrope du $\text{Rb}_2\text{Pd}(\text{CN})_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$

	$\beta_{11}(\sigma_{11})$	$\beta_{22}(\sigma_{22})$	$\beta_{33}(\sigma_{33})$	$\beta_{12}(\sigma_{12})$	$\beta_{13}(\sigma_{13})$	$\beta_{23}(\sigma_{23})$
Pd	469 (19)	396 (10)	1479 (47)	0	0	0
Rb(1)	798 (33)	691 (18)	1769 (59)	-228 (22)	0	0
Rb(2)	775 (31)	467 (13)	2057 (56)	0	74 (43)	0
C(1)	1106 (330)	456 (119)	2227 (310)	19 (149)	72 (387)	-30 (155)
C(2)	705 (232)	597 (150)	2381 (511)	-253 (147)	-74 (333)	389 (214)
N(1)	646 (167)	364 (86)	2886 (368)	-116 (105)	386 (298)	57 (126)
N(2)	356 (162)	860 (148)	2538 (414)	-115 (119)	214 (274)	531 (198)
H ₂ O	1754 (481)	904 (207)	2979 (596)	752 (290)	0	0

Tableau 3. Liste des facteurs de structure observés et calculés

Les en-tête des colonnes sont respectivement: h, k, l, F_o et F_c .
Les valeurs F_o inférieures à 10,0 correspondent à des réflexions inobservées.

2	4	0	0	154.2	149.2	3	15	0	66.8	53.5	4	7	1	6.5	13.1	4	16	1	9.5	2.7
2	4	0	0	322.4	420.4	5	15	0	55.7	55.0	5	7	1	25.7	18.4	0	17	1	19.2	20.3
6	8	0	0	125.8	122.9	0	16	0	16.9	16.1	6	7	1	69.7	89.0	1	17	1	9.5	6.1
6	8	0	0	165.0	163.1	2	16	0	4.5	3.3	7	7	1	45.6	33.5	0	0	2	72.9	71.2
10	0	0	0	66.7	67.3	4	16	0	20.0	19.8	8	7	1	6.5	1.5	1	0	2	86.3	108.7
12	0	0	0	81.1	76.7	1	17	0	35.4	37.6	9	7	1	6.5	20.6	2	0	2	137.1	144.6
1	1	1	0	102.2	95.5	0	1	1	30.5	21.2	10	7	1	43.9	47.7	3	0	2	86.6	89.2
3	5	1	0	97.6	90.0	1	1	1	25.1	56.3	11	7	1	6.5	15.6	4	0	2	6.5	7.1
5	5	1	0	57.2	48.3	2	1	1	136.4	161.0	1	8	1	70.6	71.6	5	0	2	54.8	46.4
7	7	1	0	47.8	42.9	3	1	1	98.8	98.9	2	8	1	6.5	4.7	6	0	2	101.7	97.7
9	9	1	0	37.6	33.8	4	1	1	6.5	18.9	3	8	1	66.5	72.3	7	0	2	44.3	34.1
11	1	1	0	22.5	20.9	5	1	1	6.5	1.6	4	8	1	6.5	9.0	8	0	2	36.0	35.2
13	1	1	0	87.9	94.4	6	1	1	101.9	103.4	5	8	1	53.5	44.8	9	0	2	6.5	18.8
15	1	1	0	221.0	262.3	7	1	1	52.9	45.5	6	8	1	6.5	8.7	10	0	2	52.7	49.9
17	1	1	0	51.6	50.7	8	1	1	6.5	11.6	7	8	1	54.2	50.6	11	0	2	6.5	13.1
19	1	1	0	222.1	235.7	9	1	1	6.5	5.3	8	8	1	6.5	3.1	12	0	2	6.5	5.6
21	1	1	0	33.1	29.4	10	1	1	50.5	50.3	9	8	1	26.7	19.3	13	0	2	6.5	6.4
23	1	1	0	131.4	132.8	11	1	1	6.5	11.6	10	8	1	6.5	5.8	14	0	2	202.1	240.6
25	1	1	0	22.5	27.5	12	1	1	6.5	5.9	11	8	1	6.5	26.9	15	0	2	6.5	10.8
27	1	1	0	127.8	142.1	1	2	1	103.0	119.4	0	9	1	98.0	99.2	16	0	2	173.4	180.8
29	1	1	0	140.7	144.8	3	2	1	105.6	112.8	1	9	1	46.3	41.0	17	0	2	6.5	6.6
31	1	1	0	133.2	128.1	4	2	1	6.5	17.2	2	9	1	6.5	1.0	18	0	2	124.7	131.9
33	1	1	0	106.9	102.4	5	2	1	80.3	72.8	3	9	1	46.7	39.6	19	0	2	6.5	2.9
35	1	1	0	91.7	89.7	6	2	1	6.5	21.3	4	9	1	81.5	78.7	20	0	2	101.2	100.6
37	1	1	0	58.4	53.5	7	2	1	64.3	63.4	5	9	1	6.5	8.0	21	0	2	6.5	1.8
39	1	1	0	216.9	268.2	8	2	1	6.5	10.4	6	9	1	6.5	3.1	22	0	2	62.7	62.7
41	1	1	0	104.8	106.1	9	2	1	42.2	36.7	7	9	1	6.5	13.3	23	0	2	6.5	1.5
43	1	1	0	160.8	162.3	10	2	1	6.5	3.1	8	9	1	45.5	44.0	24	0	2	46.2	45.0
45	1	1	0	27.9	23.7	11	2	1	31.1	28.0	9	9	1	6.5	4.4	25	0	2	63.0	58.2
47	1	1	0	73.7	66.2	12	2	1	6.5	3.3	10	9	1	6.5	1.7	26	0	2	56.9	55.9
49	1	1	0	36.0	37.8	13	2	1	129.3	196.2	1	10	1	6.5	15.1	27	0	2	147.3	155.1
51	1	1	0	212.6	265.3	1	3	1	6.5	15.6	2	10	1	6.5	11.0	28	0	2	56.9	53.6
53	1	1	0	208.3	229.6	2	3	1	42.6	39.6	3	10	1	6.5	4.2	29	0	2	44.6	34.8
55	1	1	0	175.6	173.0	3	3	1	52.8	49.8	4	10	1	6.5	11.1	30	0	2	54.8	48.5
57	1	1	0	143.6	135.7	4	3	1	146.4	169.4	5	10	1	6.5	19.9	31	0	2	85.2	81.3
59	1	1	0	91.1	98.8	5	3	1	6.5	22.2	6	10	1	6.5	12.5	32	0	2	44.0	37.5
61	1	1	0	68.3	71.3	6	3	1	6.5	9.3	7	10	1	6.5	1.6	33	0	2	36.1	39.6
63	1	1	0	49.1	45.2	7	3	1	45.2	42.9	8	10	1	6.5	5.9	34	0	2	6.5	22.1
65	1	1	0	113.2	117.8	8	3	1	91.6	92.8	9	10	1	6.5	14.3	35	0	2	37.1	46.6
67	1	1	0	44.6	41.1	9	3	1	6.5	22.3	10	10	1	6.5	3.0	36	0	2	67.5	76.5
69	1	1	0	109.8	102.2	10	3	1	6.5	1.6	11	10	1	42.6	46.2	37	0	2	6.5	0.6
71	1	1	0	6.0	21.7	11	3	1	6.5	14.0	1	11	1	6.5	3.0	38	0	2	81.1	83.0
73	1	1	0	69.0	63.4	12	3	1	32.5	40.0	2	11	1	25.7	10.3	39	0	2	6.5	3.0
75	1	1	0	146.3	154.2	1	4	1	64.6	75.3	3	11	1	6.5	7.9	40	0	2	78.2	76.2
77	1	1	0	125.6	130.9	2	4	1	6.5	6.3	4	11	1	45.2	40.2	41	0	2	6.5	1.6
79	1	1	0	128.7	130.9	3	4	1	67.9	62.2	5	11	1	6.5	12.3	42	0	2	76.6	70.2
81	1	1	0	92.0	99.7	4	4	1	58.1	57.4	6	11	1	6.5	10.1	43	0	2	59.4	56.9
83	1	1	0	81.4	80.5	5	4	1	6.5	13.0	7	11	1	6.5	16.4	44	0	2	6.5	4.1
85	1	1	0	44.2	49.5	6	4	1	42.8	31.3	8	11	1	26.0	27.1	45	0	2	44.1	42.9
87	1	1	0	188.5	215.5	7	4	1	6.5	2.3	9	11	1	6.5	12.0	46	0	2	6.5	5.0
89	1	1	0	40.3	44.0	8	4	1	40.6	34.2	1	12	1	42.0	36.5	47	0	2	124.6	170.8
91	1	1	0	157.6	165.6	10	4	1	6.5	8.3	2	12	1	6.5	9.7	48	0	2	73.5	81.4
93	1	1	0	26.9	34.3	11	4	1	6.5	10.6	3	12	1	28.9	25.9	49	0	2	186.0	250.9
95	1	1	0	94.9	91.4	12	4	1	6.5	6.6	4	12	1	6.5	7.4	50	0	2	67.5	67.3
97	1	1	0	21.4	22.9	13	4	1	62.9	73.3	5	12	1	46.3	34.7	51	0	2	106.9	111.4
99	1	1	0	61.5	61.3	1	5	1	70.3	78.3	6	12	1	6.5	14.6	52	0	2	47.2	46.8
101	1	1	0	47.5	48.1	2	5	1	76.6	92.0	7	12	1	6.5	13.1	53	0	2	171.3	182.9
103	1	1	0	41.7	36.4	3	5	1	58.1	59.0	8	12	1	6.5	3.1	54	0	2	39.8	30.0
105	1	1	0	36.0	33.5	4	5	1	31.1	50.6	9	12	1	6.5	22.2	55	0	2	59.3	51.9
107	1	1	0	25.2	12.0	5	5	1	31.1	24.4	10	12	1	6.0	14.6	56	0	2	6.5	21.2
109	1	1	0	78.0	72.9	6	5	1	58.6	53.9	1	13	1	6.5	19.6	57	0	2	97.4	99.7
111	1	1	0	168.2	172.9	7	5	1	6.5	11.0	2	13	1	62.1	55.8	58	0	2	6.5	11.7
113	1	1	0	70.8	64.3	8	5	1	31.4	24.5	3	13	1	6.5	7.8	59	0	2	6.5	32.3
115	1	1	0	121.7	127.7	9	5	1	6.5	5.0	4	13	1	6.5	12.2	60	0	2	46.4	44.5
117	1	1	0	51.6	46.6	10	5	1	30.8	26.0	5	13	1	6.5	14.6	61	0	2	6.5	6.3
119	1	1	0	70.1	74.7	11	5	1	6.5	1.3	6	13	1	42.9	39.2	62	0	2	35.5	32.4
121	1	1	0	4.5	2.5	12	5	1	6.5	12.4	7	13	1	6.5	0.9	63	0	2	6.5	5.4
123	1	1	0	25.7	23.4	1	6	1	44.7	48.9	8	13	1	6.5	7.4	64	0	2	38.8	30.0
125	1	1	0	16.0	13.2	2	6	1	6.5	13.2	1	14	1	36.2	23.8	65	0	2	6.5	9.1
127	1	1	0	24.3	25.3	3	6	1	32.9	26.9	2	14	1	6.5	2.0	66	0	2	6.5	14.6
129	1	1	0	113.2	109.7	4	6	1	6.5	1.8	3	14	1	30.0	26.2	67	0	2	6.5	6.1
131	1	1	0	50.7	45.9	5	6	1	42.2	40.5	4	14	1	6.5	5.2	68	0	2	6.5	20.9
133	1	1	0	107.1	99.6	6	6	1	6.5	9.1	5	14	1	6.5	13.8	69	0	2	6.5	5.0
135	1	1	0	42.8	37.0	7	6	1	47.7	12.7	6	14	1	6.5	4.3	70	0	2	6.5	11.8
137	1	1	0	75.7	71.2	8	6	1	6.5	5.0	7	14	1	6.5	20.4	71	0	2	6.5	5.0
139	1	1	0	66.5	62.8	9	6	1	6.5	24.4	8	15	1	20.2	21.6	72	0	2	6.5	30.0
141	1	1	0	65.1	55.8	10	6	1	6.5	4.0	1	15	1	6.5	4.9	73	0	2	6.5	46.7
143	1	1	0																	

Table 3 (suite)

7	6	2	45.1	33.5	7	14	2	5.5	7.4	10	6	3	5.5	9.0	1	17	3	5.5	5.0
E	6	2	116.9	116.9	1	15	2	5.5	11.1	11	6	3	5.5	3.5	2	17	3	5.5	8.2
9	6	2	5.5	23.4	2	2	2	5.5	2.0	0	7	3	3.0	30.1	C	0	4	165.3	236.5
10	6	2	5.5	66.4	2	15	2	5.5	11.8	1	7	3	74.5	77.7	1	0	4	26.3	45.0
11	6	2	5.5	16.3	4	15	2	5.5	3.0	2	7	3	72.7	81.6	2	0	4	166.3	154.5
11	7	2	64.9	65.3	5	15	2	5.5	10.7	3	7	3	56.9	56.9	3	0	4	46.4	48.2
2	7	2	5.5	5.9	6	15	2	5.5	3.5	4	7	3	36.8	33.4	4	0	4	165.9	165.4
7	7	2	56.7	60.2	0	16	2	5.5	27.2	5	7	3	54.0	56.7	5	0	4	55.5	57.5
4	7	2	5.5	7.5	1	16	2	5.5	6.3	6	7	3	40.0	42.7	6	0	4	125.1	132.8
7	7	2	64.6	57.0	2	16	2	5.5	53.3	7	7	3	5.5	23.7	7	0	4	46.6	52.0
6	7	2	5.5	7.5	3	16	2	5.5	5.9	8	7	3	36.0	26.9	8	0	4	82.8	79.6
7	7	2	46.1	52.2	4	16	2	5.5	32.8	9	7	3	5.5	21.9	9	0	4	47.5	38.0
9	7	2	5.5	7.2	1	17	2	5.5	14.2	10	7	3	5.5	17.6	10	0	4	67.5	69.0
9	7	2	36.9	35.6	2	17	2	5.5	1.3	1	8	3	51.6	54.3	1	1	4	51.0	56.7
10	7	2	5.5	3.4	0	1	3	22.6	51.0	2	8	3	5.5	0.3	2	1	4	9.6	6.5
11	7	2	5.5	35.2	1	1	3	65.1	113.0	3	8	3	59.5	58.8	3	1	4	47.5	44.8
8	8	2	61.7	59.2	2	1	3	62.9	68.5	4	8	3	5.5	9.1	4	1	4	5.5	3.4
1	8	2	44.6	39.5	3	1	3	63.7	64.3	5	8	3	42.2	38.2	5	1	4	46.0	43.5
2	8	2	119.9	136.6	4	1	3	34.5	28.3	6	8	3	5.5	1.5	6	1	4	5.5	4.5
4	8	2	46.2	37.9	5	1	3	98.7	96.5	7	8	3	42.0	35.2	7	1	4	5.5	26.4
4	8	2	42.8	41.8	6	1	3	54.1	47.7	8	8	3	5.5	4.0	8	1	4	5.5	3.1
8	8	2	44.2	35.3	7	1	3	42.7	35.9	9	8	3	36.6	22.9	9	1	4	5.5	27.2
6	8	2	54.2	92.7	8	1	3	5.5	8.4	10	8	3	5.5	4.4	10	1	4	5.5	2.9
7	8	2	5.5	25.1	9	1	3	50.3	45.1	0	9	3	35.0	36.3	11	1	4	5.5	18.9
8	8	2	5.5	21.1	10	1	3	28.9	24.9	1	9	3	31.8	35.9	C	2	4	87.8	130.5
9	8	2	5.5	17.3	11	1	3	5.5	20.5	2	9	3	34.6	34.5	1	2	4	75.1	93.6
10	8	2	5.5	52.9	12	1	3	5.5	4.1	3	9	3	36.1	35.4	2	2	4	91.5	93.7
11	8	2	5.5	11.6	1	2	3	67.8	97.5	4	9	3	37.7	36.2	3	2	4	68.9	70.3
9	9	2	126.2	135.2	2	2	3	5.5	10.7	5	9	3	46.2	41.1	4	2	4	105.4	107.0
2	9	2	5.5	2.1	3	2	3	74.0	73.4	6	9	3	5.5	15.4	5	2	4	52.1	52.5
2	9	2	105.6	111.3	4	2	3	5.5	14.9	7	9	3	33.8	26.5	6	2	4	97.4	90.6
4	9	2	5.5	2.7	5	2	3	66.8	64.6	8	9	3	36.2	31.0	7	2	4	32.7	29.3
4	9	2	101.0	101.3	6	2	3	5.5	6.0	9	9	3	32.9	28.3	8	2	4	65.7	65.3
6	9	2	5.5	5.9	7	2	3	46.9	47.7	10	9	3	5.5	4.7	9	2	4	5.5	18.4
7	9	2	72.7	67.5	8	2	3	5.5	10.1	1	10	3	5.5	12.6	10	2	4	52.7	58.9
E	9	2	5.5	7.9	9	2	3	36.7	30.9	2	10	3	5.5	4.1	11	2	4	5.5	13.5
9	9	2	55.8	55.5	10	2	3	5.5	1.4	3	10	3	5.5	8.7	1	3	4	81.5	97.5
10	9	2	5.5	6.1	11	2	3	5.5	24.3	4	10	3	5.5	15.2	2	3	4	5.5	4.5
C	10	2	44.5	44.9	12	2	3	5.5	2.7	5	10	3	5.5	9.6	3	3	4	51.7	91.3
1	10	2	39.8	32.5	C	3	3	86.6	121.5	6	10	3	5.5	2.0	4	3	4	5.5	11.0
2	10	2	5.5	19.3	1	3	3	50.8	111.7	7	10	3	5.5	7.1	5	3	4	93.3	87.1
3	10	2	36.0	26.7	2	3	3	51.6	53.3	8	10	3	5.5	13.5	6	3	4	5.5	5.8
4	10	2	43.1	40.4	3	3	3	76.0	30.7	9	10	3	5.5	6.4	7	3	4	70.2	70.2
5	10	2	5.5	22.3	4	3	3	84.6	35.4	C	11	3	33.3	28.1	8	3	4	5.5	4.9
6	10	2	5.5	5.9	5	3	3	76.5	72.9	1	11	3	35.2	35.1	9	3	4	59.3	59.3
7	10	2	5.5	16.4	6	3	3	51.1	47.1	2	11	3	5.5	1.3	10	3	4	5.5	1.7
7	10	2	34.3	31.4	7	3	3	44.4	40.0	3	11	3	76.0	33.4	11	3	4	34.4	43.4
9	10	2	5.5	11.3	E	3	3	46.7	45.5	4	11	3	5.5	19.6	C	4	4	55.7	55.7
10	10	2	5.5	5.3	9	3	3	40.0	29.6	5	11	3	32.9	24.3	1	4	4	35.9	46.2
1	11	2	92.3	87.0	10	3	3	5.5	24.6	6	11	3	5.5	5.9	2	4	4	37.7	34.5
3	11	2	86.7	82.8	11	3	3	5.5	21.0	7	11	3	5.5	15.0	3	4	4	46.8	45.5
4	11	2	5.5	5.5	1	4	3	52.8	62.2	8	11	3	5.5	8.1	4	4	4	37.2	35.3
5	11	2	84.1	78.1	2	4	3	5.5	6.5	1	12	3	77.1	30.0	5	4	4	50.1	49.5
6	11	2	5.5	8.4	3	4	3	41.7	40.4	2	12	3	5.5	4.5	6	4	4	42.9	37.5
7	11	2	78.9	72.4	4	4	3	5.5	17.8	3	12	3	5.5	24.3	7	4	4	44.0	41.3
8	11	2	5.5	8.0	5	4	3	46.9	44.0	4	12	3	5.5	11.5	8	4	4	5.5	16.3
9	11	2	46.5	50.6	6	4	3	33.9	24.0	5	12	3	5.5	27.0	9	4	4	5.5	32.4
C	12	2	6.7	3.9	E	4	3	5.5	6.5	6	12	3	5.5	5.5	10	4	4	5.5	27.2
1	12	2	5.5	16.3	9	4	3	5.5	20.7	7	12	3	5.5	13.2	1	5	4	126.8	158.2
2	12	2	5.5	89.4	10	4	3	5.5	1.1	8	12	3	5.5	9.6	2	5	4	5.5	3.1
3	12	2	5.5	16.4	11	4	3	5.5	15.1	C	13	3	26.6	26.6	3	5	4	174.9	137.4
4	12	2	5.5	8.0	0	5	3	21.2	15.0	1	13	3	71.6	12.6	4	5	4	5.5	4.2
5	12	2	5.5	15.7	1	5	3	66.7	66.7	2	13	3	35.7	30.6	5	5	4	121.6	119.1
6	12	2	42.2	42.7	2	5	3	5.5	6.2	3	13	3	5.5	19.7	6	5	4	5.5	6.5
7	12	2	5.5	14.3	3	5	3	40.7	61.7	4	13	3	22.9	21.2	7	5	4	96.7	96.3
8	12	2	5.5	12.4	4	5	3	5.5	7.6	5	13	3	5.5	12.7	8	5	4	5.5	3.6
9	12	2	5.5	10.9	5	5	3	60.7	50.6	6	13	3	25.4	25.7	9	5	4	62.4	69.7
1	13	2	61.1	57.7	6	5	3	30.0	21.4	7	13	3	5.5	19.1	10	5	4	5.5	7.4
2	13	2	5.5	1.0	7	5	3	5.5	46.9	1	14	3	5.5	15.4	11	5	4	26.9	46.9
3	13	2	55.0	46.4	8	5	3	5.5	13.7	2	14	3	5.5	6.6	C	6	4	36.8	42.1
4	13	2	5.5	1.9	9	5	3	36.5	37.9	3	14	3	5.5	30.6	1	6	4	55.3	57.3
5	13	2	46.9	45.0	10	5	3	5.5	14.7	4	14	3	5.5	7.0	2	6	4	5.5	18.0
6	13	2	5.5	4.7	11	5	3	26.9	21.5	5	14	3	5.5	17.1	3	6	4	53.8	49.9
7	13	2	21.5	28.9	1	6	3	36.3	32.7	6	14	3	5.5	2.0	4	6	4	41.9	31.9
E	13	2	5.5	1.0	2	6	3	5.5	4.5	C	15	3	14.1	11.0	5	6	4	46.7	35.4
0	14	2	70.6	76.6	3	6	3	40.7	42.0	1	15	3	5.5	14.0	6	6	4	29.6	27.0
1	14	2	5.5	15.6	4	6	3	5.5	6.5	2	15	3	5.5	4.1	7	6	4	32.3	29.7
2	14	2	5.5	51.0	5	6	3	36.4	20.1	3	15	3	5.5	17.0	8	6	4	5.5	50.7
3	14	2	5.5	13.0	6	6	3	5.5	7.4	4	15	3	5.5	4.9	9	6	4	5.5	17.0
4	14	2	60.4	54.7	7	6	3	5.5	15.7	5	15	3	5.5	5.0	10	6	4	26.3	23.4
5	14	2	5.5	16.0	8	6	3	5.5	6.1	6	16	3	5.5	4.1	1	7	4	96.3	96.3
6	14	2	5.5	11.3	9	6	3	5.5	16.7	7	16	3	5.5	3.7	2	7	4	61.1	56.1

Description de la structure

Les Tableaux 4 et 5 donnent les valeurs de quelques distances inter-atomiques et de quelques angles, ainsi que leurs déviations standards; ces valeurs ont été calculées au moyen du programme

Table 3 (suite)

4	7	4	5.5	6.5	4	11	4	5.5	4.2	3	4	5	34.2	34.9	2	10	6	22.0	24.0
5	7	4	84.1	81.0	5	11	4	5.5	12.0	0	5	5	21.0	19.8	1	11	6	41.8	45.2
6	7	4	5.5	6.5	6	11	4	5.5	5.0	1	5	5	46.4	47.5	3	11	6	36.9	41.2
7	7	4	67.5	67.7	7	11	4	5.5	17.3	3	5	5	42.6	42.7	0	12	6	26.5	31.0
8	7	4	5.5	7.6	8	11	4	5.5	6.5	0	7	5	75.1	68.9	1	13	6	22.5	26.1
9	7	4	50.1	51.6	1	12	4	5.5	23.2	1	7	5	35.5	35.1	0	1	7	65.4	53.5
10	7	4	5.5	7.6	2	12	4	5.5	54.3	3	7	5	32.9	34.8	1	2	7	28.8	26.4
11	8	4	67.4	67.5	3	12	4	5.5	20.9	1	8	5	36.8	35.1	0	2	7	26.6	23.2
12	8	4	42.5	39.4	4	12	4	5.5	48.9	3	8	5	28.2	30.4	0	3	7	6.1	0.9
13	8	4	62.6	76.6	5	12	4	5.5	15.3	0	9	5	25.9	19.6	2	3	7	57.8	53.9
14	8	4	40.5	34.9	6	12	4	5.5	46.1	3	9	5	32.4	30.7	1	4	7	21.0	18.2
15	8	4	74.5	67.7	7	12	4	5.5	11.4	0	11	5	6.4	7.7	3	4	7	19.6	17.8
16	8	4	5.5	31.5	1	13	4	5.5	44.0	2	11	5	22.9	25.1	0	5	7	39.1	34.8
17	8	4	64.9	60.5	2	13	4	5.5	2.5	1	11	5	16.8	16.9	2	5	7	26.4	26.8
18	8	4	5.5	23.5	3	13	4	5.5	38.0	3	12	5	23.4	17.1	0	7	7	36.6	37.5
19	8	4	37.7	38.0	4	13	4	5.5	34.0	3	12	5	16.3	17.3	0	9	7	6.9	9.1
20	8	4	5.5	18.4	5	13	4	5.5	4.6	0	13	5	22.2	24.3	2	9	7	29.4	32.3
21	8	4	23.7	36.8	6	14	4	5.5	27.3	0	15	5	1.9	1.9	0	11	7	2.0	3.4
22	9	4	45.5	40.4	1	14	4	5.5	9.5	0	0	6	76.5	74.7	0	0	8	41.1	35.1
23	9	4	39.4	32.6	2	14	4	5.5	23.4	1	0	6	35.5	34.6	2	0	8	90.1	84.1
24	9	4	5.5	10.3	3	14	4	5.5	10.9	3	0	6	37.6	31.5	1	1	9	22.7	22.2
25	9	4	5.5	36.1	4	14	4	5.5	21.5	1	1	6	112.2	105.4	0	1	8	18.5	17.1
26	9	4	5.5	6.6	5	14	4	5.5	9.8	3	1	6	90.1	90.8	0	2	8	63.4	61.2
27	9	4	5.5	20.5	1	15	4	5.5	43.3	2	2	6	75.2	74.9	2	2	8	26.0	17.0
28	9	4	5.5	6.4	2	15	4	5.5	0.7	3	2	6	16.7	16.5	1	3	8	36.1	35.5
29	9	4	5.5	18.1	3	15	4	5.5	40.7	1	3	6	42.1	44.3	3	3	8	32.6	32.5
30	10	4	102.6	91.4	4	15	4	5.5	3.3	3	3	6	46.1	36.2	0	4	8	2.6	3.7
31	10	4	39.6	27.0	5	15	4	5.5	2.9	0	4	6	122.2	122.1	2	4	8	39.4	36.7
32	10	4	86.1	78.2	6	16	4	5.5	5.4	0	4	6	49.3	49.6	1	5	8	50.6	50.0
33	10	4	5.5	24.0	1	16	4	5.5	10.2	3	4	6	24.2	23.4	3	5	8	41.9	43.3
34	10	4	82.6	77.3	0	1	5	66.6	59.6	1	5	6	22.8	21.5	0	6	8	36.4	34.2
35	10	4	5.5	24.6	1	1	5	55.9	35.0	3	5	6	22.5	20.0	1	7	8	25.3	34.9
36	10	4	64.7	64.2	2	1	5	64.7	63.3	0	6	6	56.4	57.6	3	7	8	30.3	34.0
37	10	4	5.5	17.7	1	2	5	57.1	53.9	2	6	6	102.0	103.2	0	8	8	16.4	16.6
38	10	4	49.2	50.7	2	2	5	50.5	50.2	1	7	6	36.6	35.3	2	8	8	35.4	41.1
39	10	4	5.5	16.0	0	3	5	12.8	13.5	3	7	6	29.9	30.0	0	1	9	16.4	19.2
40	12	4	61.2	55.1	1	3	5	52.7	52.8	0	8	6	72.8	70.9	2	3	9	23.0	23.8
1	11	4	5.5	5.3	2	3	5	64.9	64.6	1	9	6	52.9	55.1	0	5	9	6.6	11.0
2	11	4	5.5	5.3	3	3	5	52.6	54.2	0	9	6	51.2	57.2					
3	11	4	5.5	5.4	1	4	5	31.4	30.9	0	10	6	1.9	1.5					

seconde relation de Busing & Levy (1964) valable lorsque la valeur de la distance n'est pas affectée par les vibrations de l'atome lourd ('riding motion'); quant aux valeurs $d_{cor}(C-N)$, elles n'ont pas été calculées, la corrélation entre les mouvements thermiques des atomes C et N n'étant pas connue; l'examen des paramètres de leurs ellipsoïdes de vibration indique cependant que les valeurs de $d_{cor}(C-N)$ sont fort voisines de $d(C-N)$, conformément à ce qu'ont trouvé Sequeira & Chidambaram (1966) dans le cas du $K_2Zn(CN)_4$ où

la correction à apporter à la distance C-N est égale à +0,002 Å. Les valeurs angulaires sont toutes calculées à partir des positions atomiques moyennes.

Tableau 4. Distances interatomiques (Å)

	$d \pm \sigma(d)$	$d_{cor} \pm \sigma(d)$
Pd—Pd(')	3,720 ± 0,010	3,737 ± 0,010
Pd—C(1')	1,967 ± 0,020	1,980 ± 0,020
Pd—C(2 ^{vi})	2,038 ± 0,023	2,050 ± 0,023
C(1)—N(1)	1,164 ± 0,026	
C(2)—N(2)	1,093 ± 0,028	
Rb(1)—N(1)	3,101 ± 0,020	3,132 ± 0,020
Rb(1)—N(1 ^{iv})	3,256 ± 0,018	3,291 ± 0,018
Rb(1)—N(2 ⁱⁱⁱ)	3,220 ± 0,023	3,249 ± 0,023
Rb(1)—H ₂ O	4,505 ± 0,025	4,536 ± 0,034
Rb(1)—H ₂ O(^{viii})	2,935 ± 0,033	2,983 ± 0,033
Rb(2)—N(1')	3,141 ± 0,017	3,172 ± 0,017
Rb(2')—N(2')	2,994 ± 0,017	3,035 ± 0,017
Rb(2')—N(2 ^{vii})	3,085 ± 0,020	3,117 ± 0,020
Rb(2')—H ₂ O	3,228 ± 0,005	3,237 ± 0,007
H ₂ O—N(1)	3,020 ± 0,029	3,067 ± 0,029
H ₂ O—N(1')	3,393 ± 0,026	3,433 ± 0,026
H ₂ O—N(2)	4,285 ± 0,026	4,320 ± 0,026
H ₂ O—N(2 ^{vi})	3,632 ± 0,027	3,871 ± 0,027
Rb(1)—Rb(2)	5,340 ± 0,010	5,358 ± 0,010
Rb(2)—Rb(1 ^{ix})	4,595 ± 0,007	4,815 ± 0,007
Rb(2)—Rb(2')	4,564 ± 0,009	4,583 ± 0,009
N(1 ^{iv})—N(2')	4,445 ± 0,025	4,471 ± 0,025
N(2')—N(1')	4,124 ± 0,026	4,153 ± 0,026
N(2')—N(1)	4,467 ± 0,028	4,493 ± 0,028
N(1')—N(2 ^{vii})	4,124 ± 0,036	4,890 ± 0,036

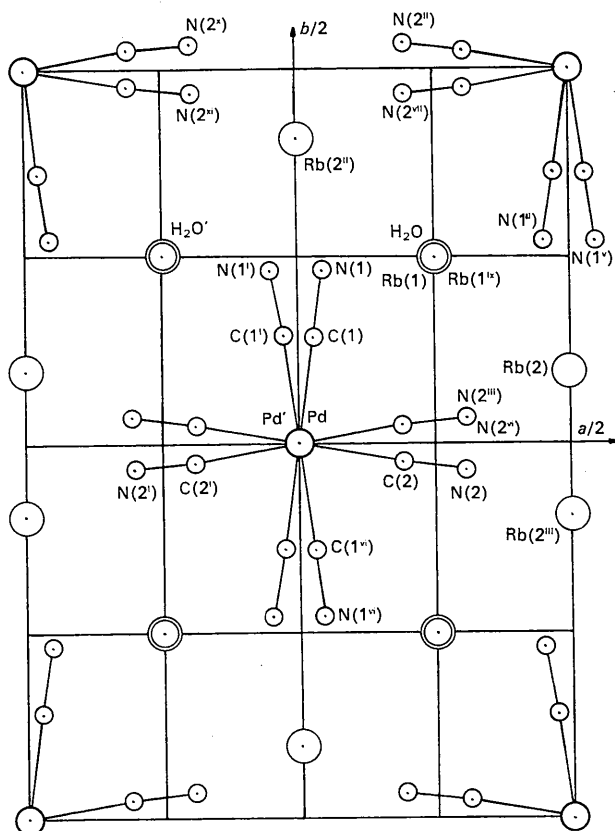


Fig. 1. Projection (001) de la maille unité.

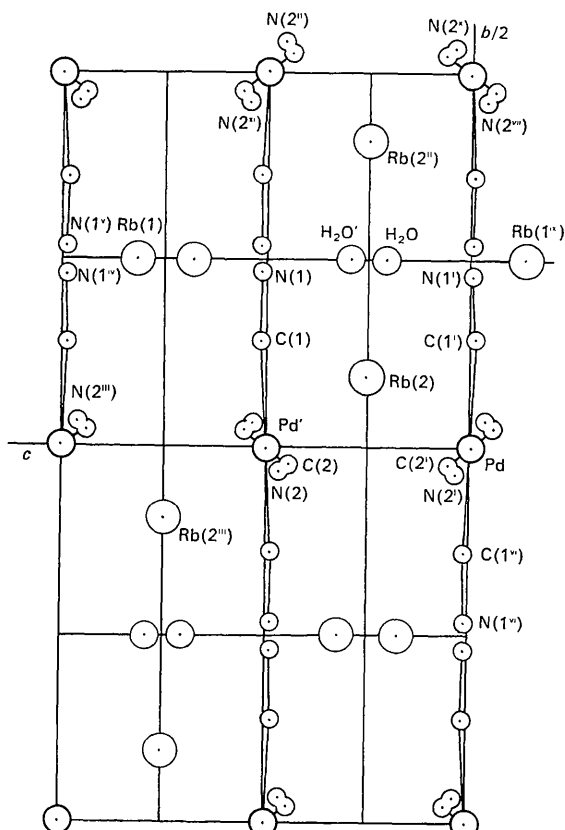


Fig. 2. Projection (100) de la maille unité.

Tableau 5. Angles avec leurs déviations standard

C(1 ^{vi})-Pd-C(2 ^{vi})	90,80 ± 1,00°
C(1 ^{vi})-Pd-C(2')	89,20 ± 1,00
C(1')-Pd-C(1 ^{vi})	180,00 ± 0,00
Pd-C(1')-N(1')	178,59 ± 2,27
Pd-C(2')-N(2')	176,74 ± 2,42
Axe a-Pd'-C(1)	98,93 ± 0,77
Axe b-Pd'-C(1)	8,99 ± 0,77
Axe c-Pd'-C(1)	91,04 ± 0,58
Axe a-Pd'-C(2)	-9,88 ± 0,66
Axe b-Pd'-C(2)	-97,99 ± 0,60
Axe c-Pd'-C(2)	84,22 ± 0,69
Plan(a,b)-Plan[Pd', C(1), C(2)]	-5,89 ± 0,69
Plan(a,c)-Plan[Pd', C(1), C(2)]	91,92 ± 0,59
Plan(b,c)-Plan[Pd', C(1), C(2)]	95,57 ± 0,69
Plan(a,c)-Plan[Pd, Pd', C(2)]	-8,93 ± 0,77
Plan(b,c)-Plan[Pd, Pd', C(1)]	-8,02 ± 0,60

L'examen du modèle obtenu montre que les groupements Pd(CN)₄ sont plans dans les limites des erreurs expérimentales (équation du meilleur plan calculée par moindres carrés: $0,1109x + 0,0333y + 0,9933z = 0$); ils se superposent le long de l'axe *c*, les Pd étant en $z=0$ et $z=\frac{1}{2}$; deux plans successifs sont tournés, l'un par rapport à l'autre, autour de *c*, d'un angle dièdre égal à 17 degrés; leurs normales forment un angle de 6 degrés environ avec *c*.

Les distances Pd-C(2) et C(2)-N(2) s'écartent quelque peu des valeurs 2,00 et 1,55 Å, respectivement, déduites des rayons de covalence; mais des écarts ne sont pas vraiment significatifs ('Possibly significant': Cruickshank, 1949).

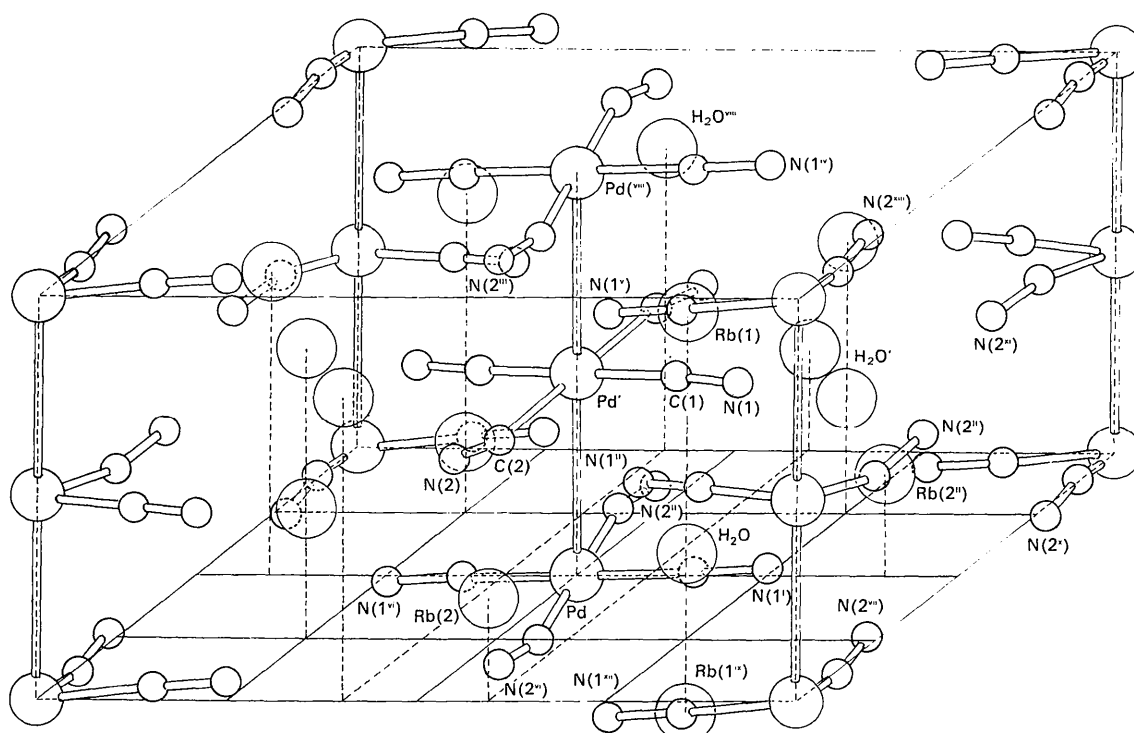


Fig. 3. La maille du Rb₂Pd(CN)₄.H₂O. (Pour ne pas surcharger inutilement le dessin, deux des quatre groupements CN liés aux Pd situés sur les arêtes de la maille ne sont pas représentés).

L'accord des distances C(1)-N(1) et C(2)-N(2) est meilleur avec la moyenne 1,135 Å des valeurs expérimentales obtenues dans les cyanures complexes à symétrie D_{4h} : Ba Ni(CN)₄.4H₂O (Larsen, Hazel & Rasmussen, 1969), CaNi(CN)₄.5H₂O (Holt & Watson, 1969), CaPd(CN)₄.5H₂O (Fontaine, 1967) et KNaPt(CN)₄.3H₂O (Moreau-Colin, 1968). Quant aux distances Pd-C, les données expérimentales sont trop peu nombreuses pour leur comparer valablement le Rb₂Pd(CN)₄.H₂O.

Il y a dans la structure deux sortes d'atomes de Rb, ayant chacun une coordination différente: Rb(1) est entouré de 6 atomes N (à 3,13, 3,25 et 3,29 Å) et d'une molécule d'eau (à 2,98 Å), (Fig. 4). L'environnement de Rb(2) est composé, lui, de 6 atomes N (à 3,03, 3,12 et 3,17 Å) et de 2 H₂O (à 3,34 Å), (Fig. 5). Le manque de symétrie de ces deux coordinations du Rb est assez inhabituel.

Bien que cette étude structurale, par diffraction des rayons X, ne nous permette pas de fixer les positions des atomes d'hydrogène, l'examen de l'entourage immédiat de la molécule d'eau nous suggère l'emplacement probable de ces H, comme le montre bien la Fig. 6, l'atome de Rb étant beaucoup plus faiblement électro-négatif que les atomes N. Il y aurait, ainsi, formation de deux faibles liaisons H, légèrement coudées.

Les paramètres de l'ellipsoïde de vibration des différents atomes sont donnés dans le Tableau 6.

Les ellipsoïdes des atomes lourds et de la molécule d'eau ont leur orientation partiellement fixée par les éléments de symétrie sur lesquels ils se trouvent. Le Pd a son amplitude de vibration maxima parallèle à

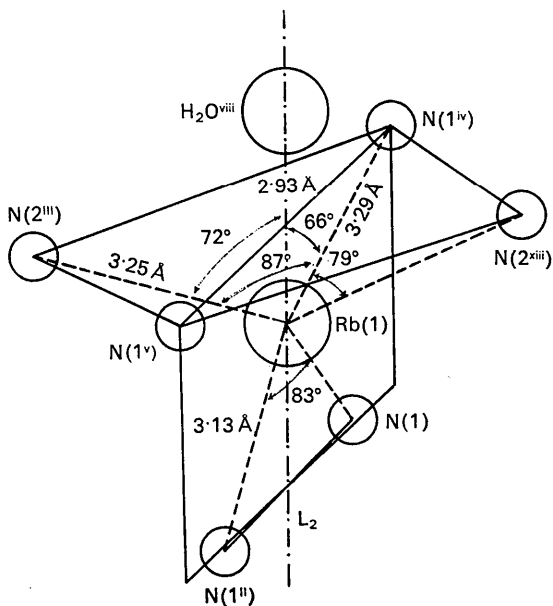


Fig. 4. Entourage de Rb(1).

Tableau 6. Paramètres des ellipsoïdes de vibration

Axe <i>i</i>	l'ellipsoïde	Angles avec les axes cristallographiques			
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
Rb(1)	1	0,181 (4) Å	154 (2)°	116 (2)°	90°
	2	0,223 (4)	90	90	0
	3	0,272 (4)	64 (2)	154 (2)	90
Rb(2)	1	0,197 (4)	172 (5)	90	82 (5)
	2	0,212 (3)	90	0	90
	3	0,241 (3)	98 (5)	90	172 (5)
Pd	1	0,154 (3)	180	90	90
	2	0,196 (2)	90	0	90
	3	0,204 (3)	90	90	180
C(1)	1	0,209 (27)	83 (48)	170 (46)	97 (26)
	2	0,236 (36)	21 (90)	81 (49)	109 (92)
	3	0,252 (25)	110 (92)	87 (27)	160 (90)
C(2)	1	0,157 (33)	143 (18)	124 (14)	77 (16)
	2	0,222 (28)	123 (20)	59 (18)	132 (19)
	3	0,294 (31)	75 (14)	131 (15)	135 (18)
N(1)	1	0,150 (27)	141 (19)	126 (21)	77 (9)
	2	0,202 (23)	125 (21)	36 (21)	81 (11)
	3	0,292 (20)	106 (11)	91 (8)	164 (11)
N(2)	1	0,120 (35)	162 (12)	102 (8)	76 (11)
	2	0,229 (22)	108 (12)	54 (11)	138 (11)
	3	0,324 (25)	89 (7)	141 (10)	129 (11)
H ₂ O	1	0,188 (39)	46 (9)	136 (9)	90
	2	0,289 (29)	90	90	0
	3	0,374 (44)	136 (9)	134 (9)	90

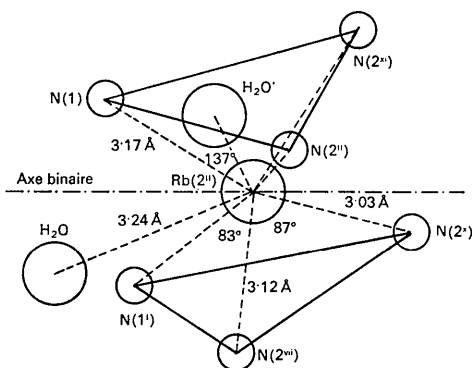


Fig. 5. Entourage de Rb(2).

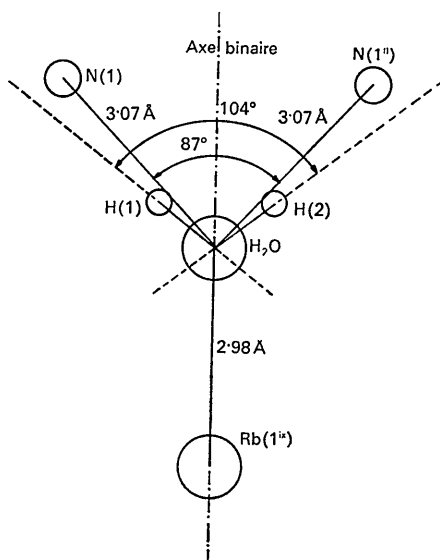


Fig. 6. Position des atomes H.

l'axe c de la maille tandis que celle de Rb(2) est à peu près parallèle au même axe (8 degrés). Le plus grand axe de Rb(1) est situé, lui, dans le plan (a, b) à 84 degrés de a .

Les ellipsoïdes de C(2) et N(2) ont des orientations assez voisines; ce n'est pas le cas pour C(1) et N(1), mais évidemment les valeurs concernant C(1) sont assez imprécises. C(1) et N(1) vibrent principalement dans une direction à peu près normale à b , alors que les mouvements de C(2) et N(2) sont plus grands perpendiculairement à a .

Je remercie MM. Les Professeurs H. Brasseur et J. Toussaint pour l'intérêt qu'ils ont accordé à ce travail. Ma gratitude va également au Fonds National de la Recherche Scientifique qui a bien voulu subsidier cette recherche.

Références

- BRASSEUR, H. (1938). *Bull. Soc. Roy. Sc. Lg.* **7**, 205.
 BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *A Fortran Crystallographic Least-squares Program*. Oak Ridge National Laboratory Report, ORNL-TM-305.
 BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1964). *A Fortran Crystallographic Function and Error Program*. Oak Ridge National Laboratory Report, ORNL-TM-306.
 BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 142.
 CROMER, D. T., LARSON, A. C. & WABER, J. T. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 1044.
 CRUICKSHANK, D. W. J. (1949). *Acta Cryst.* **22**, 65.
 CRUICKSHANK, D. W. J., PILLING, D. E., BUJOSA, A., LOVELL, F. M. & TRUTER, M. R. (1961). *Computing Methods and the Phase Problem in X-ray Crystal Structure Analysis*, paper 6. Oxford: Pergamon Press.
 DIDEBERG, O. (1966). *Bull. Soc. Roy. Sc. Lg.* **35**, 734.
 DUPONT, L. (1967). *Bull. Soc. Roy. Sc. Lg.* **36**, 471.
 FONTAINE, F. (1967). Thèse de Doctorat, Univ. de Liège.
 FONTAINE, F., MOREAU-COLIN, M. L. & SIMON, J. (1968). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **91**, 400.
 HANSON, H. P., HERMAN, F., LEA, J. D. & SKILLMAN, S. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 1040.
 HOLT, E. M. & WATSON, K. J. (1969). *Acta Chem. Scand.* **23**, 14.
 LARSEN, A. C., HAZELL, R. G. & RASMUSSEN, S. E. (1969). *Acta Chem. Scand.* **23**, 61.
 MOREAU-COLIN, M. L. (1968). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **91**, 332.
 SEQUEIRA, A. & CHIDAMBARAM, R. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 910.