

### Structure des Complexes Peroxydiques des Métaux de Transition.

## III. Structure Cristalline du Tetraperoxoniate de Potassium et de Magnésium à Sept Molécules d'Eau, $\text{KMgNb}(\text{O}_2)_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$

PAR G. MATHERN ET R. WEISS

Laboratoire de Cristallographie associé au C.N.R.S., Institut de Chimie de Strasbourg,  
BP 296/R8, 67-Strasbourg, France

(Reçu le 8 octobre 1970)

The crystal structure of potassium magnesium tetraperoxoniate  $\text{KMgNb}(\text{O}_2)_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  has been determined by X-ray diffraction. Crystals are monoclinic with  $a = 11.95 \pm 0.01$ ,  $b = 12.19 \pm 0.01$ ,  $c = 14.08 \pm 0.01$  Å;  $\beta = 141.2 \pm 0.1^\circ$ ;  $Z = 4$ ; space group  $P2_1/c$ .  $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$  cations are disposed in layers which are parallel to the (100) plane. The non-bonded water molecules and the  $\text{K}^+$  and  $\text{NbO}_3^{3-}$  ions are disposed between these layers. The  $\text{Nb}(\text{O}_2)_4^{3-}$  ion has nearly  $D_{2d}$  symmetry. The O-O mean distance is 1.50 Å.

#### Introduction

La structure cristalline du perchromate de potassium a été étudiée par Wilson (1942) d'abord qui trouvait une longueur de liaison O-O de 1,34 Å. Pauling (1960) a interprété le raccourcissement de la liaison O-O en supposant que le chrome possède le degré d'oxydation 3 et qu'il est coordonné à 2 groupements peroxydiques  $\text{O}_2^{2-}$  et à 2 groupements superoxydiques  $\text{O}_2^-$  avec délocalisation des électrons de sorte que chaque groupement  $\text{O}_2$  joue un rôle intermédiaire entre celui de peroxyde et celui de superoxyde. Plus tard, cette structure a été reprise par Stomberg & Brosset (1960) qui ont trouvé une distance O-O de 1,49 Å ( $\sigma = 0,02$ ) puis Swallen & Ibers (1962) qui ont trouvé une distance O-O de  $1,405 \pm 0,04$  Å puis à nouveau par Stomberg (1963) qui a confirmé les résultats de sa première étude. La structure cristalline de  $\text{Zn}(\text{NH}_3)_4\text{Mo}(\text{O}_2)_4$  a également été déterminée par Stomberg (1969); la distance O-O trouvée vaut 1,55 Å ( $\sigma = 0,05$  Å). Dans les deux composés, le polyèdre de coordination du chrome ou du molybdène est un dodécaèdre de symétrie  $D_{2d}-\bar{4}2m$ . L'isotypie du perchromate  $\text{K}_3\text{CrO}_8$  et du perniobate  $\text{K}_3\text{NbO}_8$  a été démontrée par Boehm (1926). Swallen & Ibers (1962) ont donné une interprétation électronique par la

méthode du champ cristallin concernant l'ion  $\text{CrO}_8^{3-}$ , qui leur a permis d'expliquer la différence de longueur entre les 2 liaisons Cr-O et le raccourcissement de la liaison O-O qu'ils ont observés.

#### Partie expérimentale

##### 1. Préparation

Le composé  $\text{KMgNbO}_8 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  a été signalé par Balke & Smith (1908), qui l'obtenaient sous forme de précipité floconneux par double décomposition entre le chlorure de magnésium et le perorthoniobate de potassium. Nous l'avons obtenu en faisant réagir la magnésie sur une solution de niobate de potassium dans de l'eau oxygénée à 20%. L'eau oxygénée qui n'a pas réagi se décompose lentement et le produit se dépose au bout de quelques jours sous forme de beaux cristaux. Ces cristaux sont stables à l'air, à température ordinaire. Les résultats des différents dosages sont présentés dans le Tableau suivant:

	% calculé	% trouvé
Nb	22,6	22,8
Mg	5,9	4,8
$\text{O}_2^{2-}$	31,1	30,7
$\text{O}_2^- + \text{H}_2\text{O}$	53,6	52,6

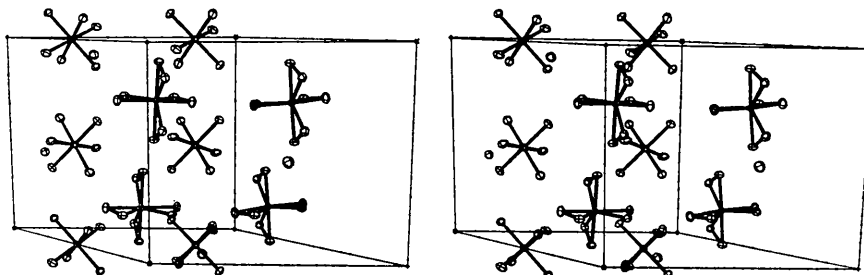


Fig. 1. Disposition des atomes dans la maille (vue stéréoscopique).

Le niobium a été dosé par gravimétrie de l'oxyde  $\text{Nb}_2\text{O}_5$  précipité à  $\text{pH}$  2. Lorsque tout le niobium a été précipité, on peut doser le magnésium par le phosphate ammoniaco-magnésien. Mais une partie du magnésium est retenue par l'oxyde de niobium.

L'oxygène actif a été dosé par le permanganate en milieu très acide, de façon à éviter la précipitation de  $\text{Nb}_2\text{O}_5$ . La somme peroxyde+eau de cristallisation a pu être dosée par calcination ménagée du produit à  $700^\circ$ , conformément à la réaction



## 2. Données cristallographiques et enregistrement des intensités

Les cristaux appartiennent au système monoclinique. Les formes principales sont  $\{100\}$ ,  $\{001\}$ ,  $\{\bar{1}01\}$ ,  $\{010\}$ ,  $\{11\bar{2}\}$ . La face la plus développée est  $\{100\}$ . Les ex-

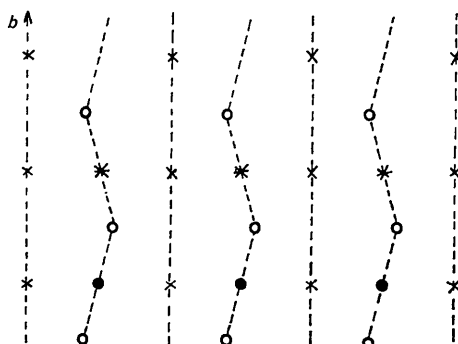


Fig. 2. Empilement des motifs. L'axe  $c$  est perpendiculaire au plan de la Figure:  $\times$   $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$ ,  $\circ$   $\text{NbO}_6^{3-}$ ,  $\bullet$   $\text{K}^+$ ,  $*$   $\text{H}_2\text{O}$ .

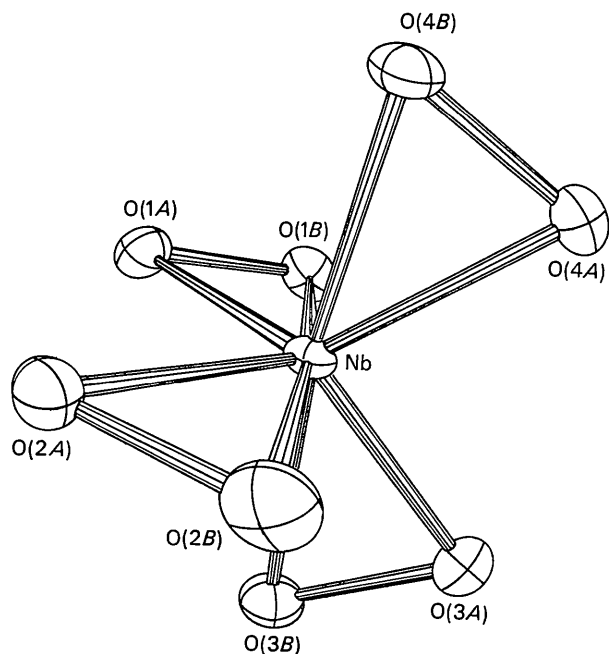


Fig. 3. L'ion  $\text{NbO}_6^{3-}$ : géométrie et nomenclature des atomes.

inctions systématiques sont conformes au groupe spatial  $P2_1/c$ . En plus des extinctions systématiques, on observe un affaiblissement des réflexions ( $l = 2n + 1$ ); aucune position spéciale du groupe spatial  $P2_1/c$  ne possède des extinctions de ce type. Si les réflexions affaiblies étaient toutes rigoureusement éteintes, le paramètre direct  $c$  aurait la valeur moitié et le groupe spatial serait  $P2_1/m$ , qui comporte un miroir vrai en  $y = \frac{1}{4}$ . Dans le réseau de  $\text{KMgNb}(\text{O}_2)_4, 7\text{H}_2\text{O}$ , le miroir avec glissement situé en  $y = \frac{1}{4}$  fait donc également office de pseudo-miroir  $m$ .

Les paramètres de la maille ont été mesurés sur des clichés ( $hk0$ ) et ( $h0l$ ) obtenus à l'aide d'une chambre de précession étalonnée. Ils ont les valeurs suivantes:

$$a = 11,95 \pm 0,01, \quad b = 12,19 \pm 0,01, \quad c = 14,08 \pm 0,01 \text{ \AA};$$

$$\beta = 141,2 \pm 0,1^\circ;$$

$$V = 1286 \text{ \AA}^3; \quad Z = 4; \quad M = 410,4.$$

La densité mesurée par picnométrie dans le xylène est de  $2,14 \pm 0,03$ ; la densité calculée est de 2,12.

Les intensités des réflexions ont été mesurées à l'aide d'un diffractomètre automatique Pailred. Le cristal utilisé avait les dimensions  $0,85 \times 0,40 \times 0,55$  mm. L'axe cristallographique  $b$  coïncidait avec l'axe  $\omega$  de l'appareil. Nous avons enregistré les strates  $h0l-h21l$ .

Le discriminateur d'énergie, centré sur le pic  $K\alpha$  du molybdène, laissait passer 95% du faisceau transmis; la vitesse de balayage en  $\omega$  valait  $2,5^\circ$  min; le fond était mesuré pendant 20 sec de part et d'autre de chaque réflexion; le demi-angle de balayage variait de  $1^\circ$  à  $2,4^\circ$ ; l'ouverture du compteur était de  $2^\circ$ .

Nous avons conservé 4006 réflexions indépendantes telles que  $\sigma(I)/I < 0,2$  (Mathern & Weiss, 1971a). La résolution vaut  $0,53 \text{ \AA}$  dans les trois directions ( $2\theta = 80^\circ$ ). Les corrections d'absorption ont été effectuées à l'aide du programme *GNABS* (Burnham, 1966). Le cristal était délimité par les 12 faces  $\{100\}$ ,  $\{001\}$ ,  $\{\bar{1}01\}$ ,  $\{\bar{1}00\}$ ,  $\{00\bar{1}\}$ ,  $\{10\bar{1}\}$ ,  $\{010\}$ ,  $\{0\bar{1}0\}$ ,  $\{110\}$ ,  $\{1\bar{1}0\}$ ,  $\{1\bar{1}0\}$  et  $\{\bar{1}\bar{1}0\}$ . Le coefficient de transmission variait de 0,62 à 0,77 ( $\mu = 13,56 \text{ cm}^{-1}$ ). La mesure périodique d'une réflexion de référence n'a montré aucune variation avec le temps.

## Résolution et affinement de la structure

L'étude de la fonction de Patterson nous a permis de trouver les coordonnées des atomes de niobium, de potassium et de magnésium. Les autres atomes ont pu facilement être localisés à l'aide de sections de densité électronique. Les facteurs de diffusion utilisés étaient ceux de Lee & Pakes (1969). Les corrections de dispersion anormale ont été apportées au niobium et au potassium. Tous les atomes vérifiaient au départ la symétrie de pseudo-miroir situé en  $y = \frac{1}{4}$ . L'atome O(7) était le symétrique du potassium. Un affinement des coordonnées atomiques et des facteurs d'agitation thermique isotrope a ensuite été entrepris et a permis de lever la pseudo-symétrie. Le facteur de reliabilité  $R_1$  valait 0,06 à ce stade là. Par la suite, les atomes ont

été dotés de facteurs d'agitation thermique anisotrope. La fonction minimisée était  $\Sigma\omega(|F_o|-|F_c|)^2$ , où  $F_o$  et  $F_c$  sont les facteurs de structure observés et calculés et  $\omega$  une pondération définie par Stout & Jensen (1968):

$$\omega = \frac{1}{\sigma^2}, \quad \sigma = \frac{1}{2} \frac{k}{(LP)^{1/2}} \left[ \frac{I_M + \tau^2(F_1 + F_2) + (SI_N)^2}{I_N} \right]^{1/2}$$

Tableau 1. Paramètres atomiques

Les écarts-type sur les différents paramètres sont indiqués entre parenthèses. Les facteurs de température sont de la forme  $\exp[-(\beta_{11}h^2 + \beta_{22}k^2 + \beta_{33}l^2 + 2\beta_{12}hk + 2\beta_{13}hl + 2\beta_{23}kl)]$ . Les coefficients BEQ sont les facteurs de température isotrope équivalents ( $\text{\AA}^2$ ), calculés à partir des  $\beta_{ij}$ .

	x	y	z	BEQ
Nb	0,11940 (3)	0,24494 (1)	0,04154 (2)	0,85
K <sup>+</sup>	-0,05408 (10)	0,05717 (5)	0,17005 (8)	1,99
Mg(1)	0,50000 (0)	0,0 (0)	0,0 (0)	1,16
Mg(2)	0,50000 (0)	0,0 (0)	0,50000 (0)	1,11
O(1B)	0,20017 (30)	0,24020 (16)	0,23517 (24)	1,69
O(1A)	0,00202 (30)	0,23236 (15)	0,09045 (27)	1,68
O(2A)	-0,12667 (27)	0,24741 (14)	-0,17829 (23)	1,70
O(2B)	0,01715 (32)	0,25974 (17)	-0,15693 (25)	1,95
O(3B)	0,13410 (29)	0,41359 (14)	0,05967 (25)	1,65
O(3A)	0,30149 (28)	0,36203 (15)	0,13362 (24)	1,55
O(4B)	0,14357 (28)	0,07906 (14)	0,04543 (24)	1,61
O(4A)	0,31077 (27)	0,13874 (16)	0,12775 (24)	1,57
O(1)	0,70014 (33)	0,05734 (16)	0,21638 (25)	2,44
O(2)	0,73500 (32)	0,04010 (17)	0,72450 (24)	2,25
O(3)	0,31606 (32)	0,10073 (17)	-0,05804 (27)	1,92
O(4)	0,35746 (40)	0,11741 (20)	0,47763 (35)	2,80
O(5)	0,56065 (28)	0,12504 (16)	-0,06025 (24)	1,72
O(6)	0,55995 (28)	0,11895 (17)	0,43735 (24)	1,74
O(7)	0,88349 (31)	0,42446 (16)	0,08647 (28)	1,95

	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{33}$	$\beta_{12}$	$\beta_{13}$	$\beta_{23}$
Nb	0,00438 (3)	0,00108 (1)	0,00278 (2)	0,00010 (2)	0,00267 (2)	0,00006 (1)
K <sup>+</sup>	0,00935 (11)	0,00297 (3)	0,00650 (7)	-0,00092 (5)	0,00599 (8)	-0,00036 (4)
Mg(1)	0,00511 (22)	0,00171 (5)	0,00337 (15)	-0,00012 (9)	0,00296 (17)	-0,00005 (7)
Mg(2)	0,00464 (22)	0,00174 (5)	0,00334 (15)	0,00009 (8)	0,00286 (16)	0,00025 (7)
O(1B)	0,00872 (32)	0,00316 (11)	0,00461 (20)	0,00075 (15)	0,00518 (23)	0,00045 (13)
O(1A)	0,00793 (33)	0,00245 (9)	0,00725 (26)	-0,00003 (14)	0,00637 (27)	0,00025 (12)
O(2A)	0,00568 (26)	0,00224 (9)	0,00427 (18)	0,00003 (16)	0,00272 (20)	0,00017 (13)
O(2B)	0,00947 (35)	0,00400 (13)	0,00441 (20)	0,00038 (18)	0,00513 (25)	0,00053 (14)
O(3B)	0,00771 (35)	0,00164 (8)	0,00634 (27)	-0,00010 (14)	0,00520 (28)	-0,00013 (11)
O(3A)	0,00660 (34)	0,00281 (9)	0,00529 (25)	-0,00068 (15)	0,00475 (27)	-0,00036 (12)
O(4B)	0,00834 (37)	0,00147 (7)	0,00580 (25)	0,00025 (13)	0,00516 (27)	-0,00011 (11)
O(4A)	0,00624 (34)	0,00292 (10)	0,00475 (24)	0,00155 (15)	0,00414 (26)	0,00071 (12)
O(1)	0,01131 (43)	0,00238 (10)	0,00357 (23)	-0,00189 (17)	0,00324 (27)	-0,00052 (13)
O(2)	0,00945 (40)	0,00292 (10)	0,00382 (24)	-0,00197 (17)	0,00325 (27)	-0,00027 (13)
O(3)	0,00959 (39)	0,00307 (11)	0,00723 (29)	0,00209 (17)	0,00694 (31)	0,00141 (14)
O(4)	0,01783 (61)	0,00412 (14)	0,01264 (42)	0,00513 (24)	0,01360 (48)	0,00371 (20)
O(5)	0,00765 (39)	0,00259 (10)	0,00528 (28)	-0,00010 (15)	0,00469 (30)	0,00059 (13)
O(6)	0,00676 (37)	0,00325 (11)	0,00504 (27)	0,00053 (16)	0,00434 (29)	0,00128 (13)
O(7)	0,00864 (37)	0,00292 (11)	0,00758 (30)	0,00085 (16)	0,00650 (31)	0,00046 (14)

Tableau 2. Plans moyens

Plan	N		U	V	W	D	$d_m$	$\chi$	P
1	5	Nb, O(1A), O(1B), O(2A), O(2B)	-0,0646	0,9974	0,0305	2,9272	0,060	932	< 0,001
2	4	O(1A), O(1B), O(2A), O(2B)	-0,1101	0,9939	0,0046	2,9347	0,010	21	< 0,001
3	5	Nb, O(3A), O(3B), O(4A), O(4B)	-0,5297	-0,0575	0,8462	-0,3755	0,030	144	< 0,001
4	4	O(3A), O(3B), O(4A), O(4B)	-0,5145	-0,0569	0,8556	-0,3314	0,010	35	< 0,001

N est le nombre d'atomes définissant le plan moyen. Les équations des plans moyens sont  $UX + VY + WZ = D$ , en coordonnées trirectangles. La matrice de passage des coordonnées relatives aux coordonnées absolues ( $\text{\AA}$ ) dans le système trirectangle est

$$M = \begin{vmatrix} 11,950 & 0,000 & -10,971 \\ 0,000 & 12,190 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 8,824 \end{vmatrix}$$

$d_m$  est la déviation maximum ( $\text{\AA}$ ) au plan. Le coefficient  $\chi_0^2$  est égal à  $\Sigma d_i^2 / \sigma_i^2$  où les  $d_i$  sont les distances des atomes au plan moyen et les  $\sigma_i$  les écarts-type correspondants sur ces distances. P est la probabilité (dans cas d'une distribution en  $\chi^2$ ) d'obtenir un coefficient  $\chi^2$  supérieur à  $\chi_0^2$ . Les coefficients U, V, W, D ont été calculés par moindres carrés d'après la méthode de Schoemaker, Waser, Marsh & Bergman (1959).

où

$I_M$	intensité mesurée
$\tau$	rapport des temps de comptage tache/fonds
$F_1, F_2$	fonds
$S$	constante de stabilité des mesures
$I_N$	intensité nette: $I_N = I_M - \tau(F_1 + F_2)$
$k$	constante d'échelle
$L$	facteur de Lorentz
$P$	facteur de polarisation

La constante de stabilité a été choisie égale à 0,07. Nous avons retiré 89 réflexions intenses qui étaient fortement affectées par l'extinction secondaire. Après le dernier cycle d'affinement, les facteurs de reliabilité étaient  $R_1 = 3,5$ ,  $R_2 = 4,6\%$ . L'écart-type sur une observation de poids unitaire est de 1,01. La pondération utilisée satisfait au critère de Cruickshank (1965). Les déplacements sur les paramètres atomiques au cours du dernier cycle d'affinement étaient tous inférieurs au sixième de l'écart-type correspondant. Les plus grands résidus sur la série différence valaient  $0,5 e^-$ , sauf à l'emplacement du niobium où ils étaient de  $1,5 e^-$ . Les valeurs finales des coordonnées atomiques et des facteurs d'agitation thermique anisotrope sont groupés dans le Tableau 1. Tableau 7 donne les facteurs de structure calculés et observés.

## Discussion

### 1. L'édifice cristallin

Il se compose d'ions  $\text{NbO}_3^{3-}$ ,  $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$ ,  $\text{K}^+$  et de molécules d'eau non directement liées. Les ions  $\text{NbO}_3^{3-}$  et  $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$  occupent sensiblement le même volume (les distances Nb-O et Mg-O ont des valeurs voisines). Ils sont disposés en rangées parallèles à l'axe cristallographique  $c$ ; les rangées d'ions  $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$

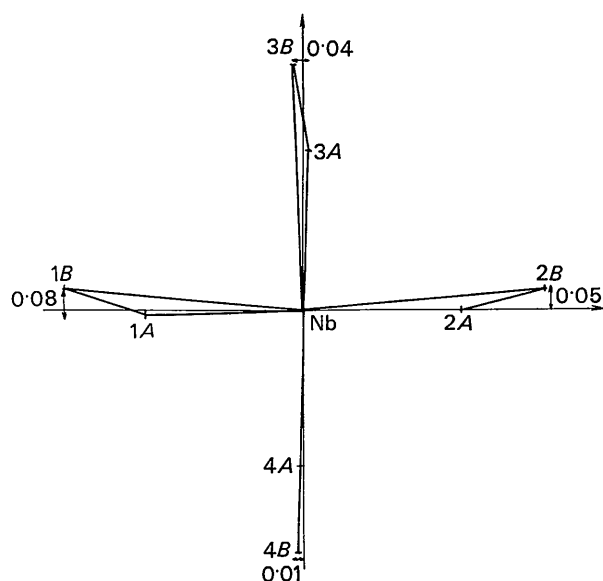


Fig. 4. Projection parallèlement à la droite d'intersection des plans moyens des 2 trapézoïdes (axe 4 du dodécaèdre idéal).

forment des couches parallèles au plan (100); les ions  $\text{NbO}_3^{3-}$ , les ions  $\text{K}^+$  et les molécules d'eau comportant l'atome d'oxygène O(7) sont disposés entre les couches d'ions  $\text{Mg}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}$  (Figs. 1 et 2).

### 2. L'ion $\text{NbO}_3^{3-}$ (Fig. 3)

Comme dans le cas des ions  $\text{CrO}_3^{3-}$  et  $\text{MoO}_3^{3-}$  (Stomberg, 1963, 1969), le polyèdre de coordination du niobium est un dodécaèdre. Les deux plans moyens formés des atomes O(1A), O(1B), O(2A), O(2B) d'une part et O(3A), O(3B), O(4A), O(4B) d'autre part sont perpendiculaires. Mais alors que dans le cas des composés  $\text{K}_3\text{CrO}_8$  et  $\text{Zn}(\text{NH}_3)_4\text{MoO}_8$  le dodécaèdre possède la symétrie  $D2d-42m$  imposée par le site de l'atome central, dans celui de  $\text{KMgNbO}_8 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  la symétrie  $D2d$  du dodécaèdre n'est qu'approchée. Comme dans le cas de l'ion  $\text{Zr}(\text{C}_2\text{O}_4)_4^{4-}$  (Glen, Silverton & Hoard 1963), on peut distinguer deux sortes de distorsions: en premier lieu celle qui résulte du fait que les atomes Nb, O(1A), O(1B), O(2A), O(2B) s'écartent significativement d'un plan moyen (il en est de même pour les atomes Nb, O(3A), O(3B), O(4A), O(4B): Tableau 2 et Fig. 4), et en second lieu celle qui résulte de l'inégalité des deux distances O(1A)-O(2A) et O(3A)-O(4A) (Tableau 3).

Ces distorsions sont moins prononcées que dans le cas de l'ion oxalatozirconate. Les longueurs des liaisons Nb-O et O-O sont voisines de celles que nous avons trouvées pour les ions  $\text{Nb}(\text{O}_2)_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3^{3-}$  (Mathern & Weiss, 1971b) et  $\text{Nb}(\text{O}_2)_3(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)^-$  (Mathern & Weiss, 1971c). La longueur de la liaison O-O est de 1,500 Å en moyenne et ne diffère pas significativement de celle que l'on rencontre dans l'ion  $\text{O}_2^{2-}$ , ou dans la molécule  $\text{H}_2\text{O}_2$ . Les longueurs des liaisons Nb-O varient entre 1,99 et 2,07 Å. Lorsque les deux liaisons Nb-O(A) et Nb-O(B) formées avec le même groupement peroxydique ont des longueurs différentes, c'est toujours la liaison Nb-O(A) qui est la plus courte (Tableau 4). Ce phénomène a déjà été observé dans le cas de l'ion  $\text{CrO}_3^{3-}$ , mais alors que pour cet ion la différence de longueur entre les liaisons Cr-O(A) et Cr-O(B) vaut environ 0,10 Å pour chacun des 4 groupements peroxydiques, dans le cas de l'ion  $\text{NbO}_3^{3-}$  la différence varie de 0 à 0,07 Å suivant le groupement peroxydique considéré.

Tableau 3. Polyèdre de coordination: distances O-O

O(1A)-O(2A)	2,765 Å	O(2A)-O(3A)	3,521 Å
O(1A)-O(2B)	3,641	O(2A)-O(3B)	2,961
O(1A)-O(3A)	3,505	O(2A)-O(4A)	3,542
O(1A)-O(3B)	2,937	O(2A)-O(4B)	2,951
O(1A)-O(4A)	3,489		
O(1A)-O(4B)	2,903	O(2B)-O(3A)	2,859
		O(2B)-O(3B)	2,851
O(1B)-O(2A)	3,704	O(2B)-O(4A)	2,939
O(1B)-O(2B)	4,062	O(2B)-O(4B)	2,923
O(1B)-O(3A)	2,901		
O(1B)-O(3B)	2,856	O(3A)-O(4A)	2,728
O(1B)-O(4A)	2,946	O(3A)-O(4B)	3,654
O(1B)-O(4B)	2,939		
		O(3B)-O(4A)	3,667 Å
		O(3B)-O(4B)	4,089

Tableau 4. Distances et angles: groupements peroxydiques

	Nb-O(A)	Nb-O(B)	O(A)-O(B)
O(1A), O(1B)	1,993 (4) Å	2,066 (3) Å	1,500 (3) Å
O(2A), O(2B)	2,011 (2)	2,004 (3)	1,504 (6)
O(3A), O(3B)	2,015 (2)	2,063 (2)	1,495 (4)
O(4A), O(4B)	2,014 (2)	2,038 (2)	1,502 (3)
	O(A)-Nb-O(B)	Nb-O(A)-O(A)	Nb-O(B)-O(A)
O(1A), O(1B)	43,3 (0,1)°	70,9 (0,1)°	65,7 (0,1)°
O(2A), O(2B)	44,0 (0,1)	67,7 (0,1)	68,3 (0,1)
O(3A), O(3B)	43,0 (0,1)	70,2 (0,1)	66,8 (0,1)
O(4A), O(4B)	43,5 (0,1)	69,1 (0,1)	67,4 (0,1)

Tableau 5. Distances et angles: ion Mg(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub><sup>2+</sup>

Mg-O(1)	Mg-O(3)	Mg-O(5)	O(1)-Mg-O(3)	O(1)-Mg-O(5)	O(3)-Mg-O(5)
2,034 (2) Å	2,052 (3) Å	2,128 (3) Å	92,0 (0,1)°	91,0 (0,1)°	90,2 (0,1)°
Mg-O(4)	Mg-O(2)	Mg-O(6)	O(4)-Mg-O(2)	O(4)-Mg-O(6)	O(2)-Mg-O(6)
2,053 (4)	2,070 (2)	2,093 (3)	92,6 (0,1)	91,9 (0,1)	91,3 (0,1)

Tableau 6. Environnement des molécules d'eau et du potassium

I:K <sup>+</sup>						I:O(1)					
J	EQ	TX	TY	TZ	D	J	EQ	TX	TY	TZ	D
O(1A)	1	0	0	0	2,727 Å	O(3B)	1	0	0	0	2,684 Å
O(7)	3	1	-1	0	2,763	O(2A)	3	1	-1	0	2,714
O(4B)	2	0	0	0	2,837	O(3)	4	1	0	0	2,837
O(3)	2	0	0	0	2,881	O(5)	2	1	0	0	2,918
O(2B)	4	0	0	0	2,900	O(3)	1	0	0	0	2,939
O(5)	1	-1	0	0	3,021	O(5)	1	0	0	0	2,968
O(2)	2	1	0	1	3,054	O(3A)	2	1	0	0	3,193
I:O(2)						I:O(3)					
J	EQ	TX	TY	TZ	D	J	EQ	TX	TY	TZ	D
O(4B)	2	1	0	1	2,717	O(4A)	1	0	0	0	2,705
O(2A)	1	1	0	1	2,732	O(1B)	4	0	-1	0	2,806
O(4)	2	1	0	1	2,847	O(1)	2	1	0	0	2,837
O(6)	1	0	0	0	2,910	K <sup>+</sup>	2	0	0	0	2,881
O(6)	2	1	0	1	2,976	O(1)	1	0	0	0	2,939
O(4)	1	0	0	0	2,981	O(5)	2	1	0	0	2,949
K <sup>+</sup>	2	1	0	1	3,054	O(5)	2	1	0	0	2,962
O(4B)	1	1	0	1	3,178						
I:O(4)						I:O(5)					
J	EQ	TX	TY	TZ	D	J	EQ	TX	TY	TZ	D
O(1B)	1	0	0	0	2,725	O(3A)	4	0	0	-1	2,719
O(3A)	4	0	0	0	2,761	O(1)	1	0	0	0	2,918
O(2)	2	1	0	1	2,847	O(3)	2	1	0	0	2,949
O(6)	1	0	0	0	2,884	O(3)	1	0	0	0	2,962
O(6)	2	1	0	1	2,978	O(1)	2	1	0	0	2,968
O(2)	1	0	0	0	2,981	K <sup>+</sup>	1	1	0	0	3,021
						O(6)	4	0	0	-1	3,121
						O(1B)	4	0	0	-1	3,196
I:O(6)						I:O(7)					
J	EQ	TX	TY	TZ	D	J	EQ	TX	TY	TZ	D
O(7)	4	0	0	0	2,643 Å	O(6)	4	0	0	-1	2,643 Å
O(4A)	1	0	0	0	2,775	O(1A)	1	1	0	0	2,715
O(4)	1	0	0	0	2,884	O(3B)	2	1	1	0	2,739
O(2)	1	0	0	0	2,910	K <sup>+</sup>	3	1	0	0	2,763
O(2)	2	1	0	1	2,976						
O(4)	2	1	0	1	2,978						
O(1B)	1	0	0	0	3,114						
O(5)	4	0	0	-1	3,121						

*D* est la distance entre les atomes *I* et *J*. EQ est le numéro de la position équivalente de l'atome *J*, dans l'ordre où elles sont données dans *International Tables for X-ray Crystallography* (1969). TX, TY, TZ sont les translations apportées à l'atome *J* suivant les axes, en unités relatives. Nous n'avons porté dans le Tableau que les distances *D* inférieures à 3,20 Å.

Tableau 7. Facteurs de structure calculés et observés  
10  $F_c$  et  $|F_o|$

H	K	L	$F_c$	$F_D$	H	K	L	$F_c$	$F_D$	H	K	L	$F_c$	$F_D$	H	K	L	$F_c$	$F_D$	H	K	L	$F_c$	$F_D$					
-17	0	24	149	167	-4	0	16	305	309	-7	0	10	-692	673	-8	0	4	923	910	-14	1	22	-324	327	-21	1	16	-174	180
-21	0	24	-299	270	-3	0	16	-257	265	-9	0	10	-1023	1001	-7	0	4	-602	600	-15	1	22	-321	326	-14	1	15	-178	192
-18	0	24	278	298	-2	0	16	-276	286	-10	0	10	564	572	-6	0	4	-784	812	-17	1	22	210	221	-12	1	15	201	212
-17	0	24	362	365	-1	0	16	-390	379	-11	0	10	744	775	0	0	4	634	656	-18	1	22	279	284	-11	1	15	136	149
-16	0	24	491	304	0	0	14	-198	176	-12	0	10	526	527	1	0	2	-1098	1044	-19	1	22	210	221	-10	1	15	146	153
-13	0	24	-216	235	-1	0	14	-683	694	-13	0	10	182	197	2	0	4	-954	942	-5	1	20	-196	205	-9	1	15	235	233
-12	0	24	-191	173	-2	0	14	-259	285	-15	0	10	-449	477	3	0	4	-1561	1471	-8	1	20	236	230	-1	1	14	263	247
-11	0	24	-167	169	-4	0	14	454	454	-16	0	10	-435	425	4	0	4	-298	320	-9	1	20	515	528	-2	1	14	-318	325
-7	0	22	201	210	-5	0	14	219	225	-17	0	10	-196	201	5	0	4	-355	336	-10	1	20	391	379	-3	1	14	-363	354
-8	0	22	308	304	-4	0	14	683	657	-16	0	8	-303	274	6	0	4	402	419	-12	1	20	-243	245	-4	1	14	-243	248
-11	0	22	-376	404	-8	0	14	-544	526	-15	0	8	-494	480	7	0	4	173	190	-13	1	20	-351	351	-6	1	14	537	530
-12	0	22	-264	271	-9	0	14	-815	795	-12	0	8	671	680	8	0	4	270	278	-14	1	20	-130	319	-7	1	14	680	651
-13	0	22	-386	382	-10	0	14	-231	225	-11	0	8	768	755	11	0	2	-282	248	-16	1	20	286	298	-8	1	14	639	625
-15	0	22	188	179	-12	0	14	563	538	-10	0	8	1216	1182	9	0	2	313	305	-17	1	20	273	253	-10	1	14	-368	360
-16	0	22	382	384	-13	0	14	750	727	-9	0	8	-443	486	9	2	636	627	-18	1	20	296	286	-11	1	14	-597	605	
-17	0	22	161	153	-14	0	14	474	465	-8	0	8	-268	267	7	0	2	518	524	-19	1	20	182	195	-12	1	14	-612	607
-20	0	22	-205	192	-17	0	14	-533	537	-6	0	8	-1353	1249	6	0	2	834	821	-21	1	20	-216	209	-14	1	14	203	200
-21	0	22	-130	143	-18	0	14	-298	304	-5	0	8	-629	639	5	0	2	-222	244	-13	1	19	129	146	-15	1	14	292	296
-23	0	20	-331	310	-19	0	14	-204	179	-4	0	8	1109	1063	4	0	2	-490	532	-3	1	18	-212	205	-16	1	14	237	234
-19	0	20	-289	294	-20	0	12	239	232	-3	0	8	667	676	3	0	2	-1269	1153	-2	1	18	-364	371	-17	1	14	147	164
-16	0	20	317	311	-17	0	12	-275	260	-2	0	8	412	399	1	0	2	-837	822	-5	1	18	-354	358	-18	1	14	-210	210
-15	0	20	299	298	-14	0	12	360	350	0	0	8	-512	510	-6	0	2	-846	816	-7	1	18	229	219	-19	1	14	-294	276
-14	0	20	304	327	-13	0	12	501	507	1	0	8	-1034	1001	-8	0	2	771	765	-8	1	18	472	475	-20	1	14	-217	197
-11	0	20	-476	494	-17	0	12	554	550	2	0	8	-569	575	-9	0	2	609	596	-9	1	18	473	460	-14	1	13	155	158
-8	0	20	351	312	-14	0	12	263	251	-8	0	8	444	446	6	0	2	300	227	-17	1	18	385	399	-12	1	13	131	136
-7	0	20	205	204	-10	0	12	-195	183	5	0	8	352	337	-13	0	2	-355	352	-13	1	18	-313	324	-11	1	13	227	231
-6	0	20	241	253	-9	0	12	-785	777	6	0	8	556	536	3	0	0	-423	413	-14	1	18	-167	156	-10	1	13	133	136
-2	0	18	-196	189	-8	0	12	-250	261	9	0	6	-279	278	4	0	0	-788	750	-15	1	18	144	158	-8	1	13	-272	275
-3	0	18	-240	244	-7	0	12	-956	914	7	0	6	183	171	5	0	0	-1367	1317	-16	1	18	429	433	-7	1	13	-245	245
-4	0	18	315	312	-6	0	12	151	147	8	0	6	444	446	6	0	0	300	227	-17	1	18	385	399	-6	1	13	-244	228
-7	0	18	348	353	-5	0	12	609	594	6	0	6	154	145	7	0	0	573	572	-18	1	18	259	261	-7	1	12	-186	193
-9	0	18	-477	463	-4	0	12	1078	1029	4	0	6	393	383	8	0	0	519	534	-20	1	18	-208	194	-3	1	12	210	193
-10	0	18	-402	390	-2	0	12	391	392	3	0	6	-731	715	9	0	0	413	421	-21	1	18	-241	220	2	1	12	258	246
-11	0	18	-481	441	-1	0	12	-240	232	2	0	6	-626	630	10	0	0	194	211	-8	1	17	-139	155	-1	1	12	336	342
-14	0	18	431	418	-2	0	12	-787	782	0	0	6	160	168	11	0	0	-330	340	0	1	16	205	221	-1	1	12	-379	367
-15	0	18	353	332	1	0	12	-161	157	-1	0	6	499	449	12	0	0	-363	312	-2	1	16	-157	163	-6	1	12	-748	748
-16	0	18	419	419	2	0	12	177	186	-4	0	6	-984	949	13	0	0	-266	254	-3	1	16	-437	439	-3	1	12	-626	616
-19	0	18	-313	299	3	0	12	175	169	-5	0	6	-1037	939	-15	1	26	-215	210	-4	1	16	-259	251	-4	1	12	-363	370
-19	0	18	-309	291	4	0	12	221	215	-6	0	6	-772	699	-16	1	26	-196	192	-5	1	16	-161	160	-5	1	12	371	371
-15	0	16	518	518	-5	0	10	187	177	8	0	6	-138	152	-19	1	26	197	198	-7	1	16	305	306	-6	1	12	919	874
-17	0	16	-500	498	4	0	10	211	204	-10	0	6	600	718	-10	1	24	210	237	-8	1	16	441	438	-7	1	12	655	647
-14	0	16	534	529	2	0	10	-262	252	-12	0	6	368	382	-11	1	24	193	199	-10	1	16	-240	231	-8	1	12	265	250
-13	0	16	358	349	1	0	10	-621	607	-13	0	6	-366	362	-14	1	24	-184	202	-11	1	16	-354	354	-9	1	12	-425	438
-11	0	16	-727	705	0	0	10	-601	596	-14	0	6	-340	327	-15	1	24	-230	213	-12	1	16	-781	762	-10	1	12	-649	652
-2	0	16	-444	440	-1	0	10	-310	300	-15	0	6	-527	515	-16	1	24	-131	172	-13	1	16	-399	397	-11	1	12	-648	633
-9	0	16	-455	452	-2	0	10	612	605	-15	0	6	-204	173	-18	1	24	190	194	-15	1	16	294	290	-12	1	12	-184	209
-8	0	16	-133	137	-3	0	10	596	608	-14	0	4	-228	205	-15	1	24	242	240	-16	1	16	318	317	-11	1	12	226	221
-7	0	16	324	327	-4	0	10	1364	1275	-13	0	4	-586	565	-9	1	22	165	167	-17	1	16	252	243	-14	1	12	516	501
-6	0	16	610	601	-5	0	10	259	263	-10	0	4	602	607	-10	1	22	240	248	-19	1	16	-209	225	-15	1	12	597	592
-5	0	16	423	416	-6	0	10	284	282	-9	0	4	492	520	-13	1	22	-241	246	-20	1	16	-183	184	-16	1	12	246	233
-18	1	12	-314	246	-6	1	8	941	898	-1	1	5	623	621	-7	1	2	-865	882	-2	1	18	208	207	-9	2	13	117	134
-19	1	12	-214	220	-7	1	8	377	378	0	1	5	306	305	-8	1	2	-337	362	-3	1	18	182	213	-3	2	13	-136	145
-13	1	11	-174	172	-4	1	8	-334	332	-1	1	5	144	156	-6	1	2	156	201	-5	1	18	-301	298	-6	2	13	-196	196
-10	1	11	-156	147	-9	1	8	-641	659	3	1	5	-106	117	-10	1	2	234	209	-6	1	18	-365	367	3	2	13	-134	151
-10	1	11	-149	201	-10	1	8	-238	255	4	1	5	-143	132	-11	1	2	466	463	-7	1	18	-449	442	2	2	12	182	211
-9	1	11	-199	194	-11	1	8	173	167	5	1	5	-19																

1604 STRUCTURE DES COMPLEXES PEROXYDIQUES DES MÉTAUX DE TRANSITION. III

Tableau 7 (suite)

H	K	L	FC	FO	H	K	L	FC	FO	H	K	L	FC	FO	H	K	L	FC	FO	H	K	L	FC	FO	H	K	L	FC	FO	H	K	L	FC	FO
-2	2	9	209	211	-5	2	5	-170	190	-3	2	2	-1153	1092	-13	3	20	313	304	-15	3	14	-427	418	-8	3	9	224	213					
6	2	8	-704	714	-4	2	5	-340	353	-4	2	2	227	203	-14	3	20	161	164	-16	3	14	-457	440	-7	3	9	148	150					
5	2	8	-390	379	-2	2	5	281	277	-5	2	2	765	712	-16	3	20	-153	149	-19	3	14	198	184	-4	3	9	-149	127					
3	2	8	161	169	0	2	5	728	728	2	2	2	109	109	-1	3	20	-609	305	-2	3	14	279	217	-3	3	9	-146	151					
2	2	8	644	648	1	2	5	373	319	-7	2	2	202	233	-18	3	20	-345	343	-5	3	13	-149	184	-1	3	9	-137	130					
1	2	8	240	255	1	2	5	216	214	-8	2	2	-196	203	-21	3	20	149	163	-4	3	13	-151	144	0	3	8	200	190					
0	2	8	332	329	4	2	5	187	195	-9	2	2	-514	515	-22	3	20	203	197	2	2	12	-283	289	7	3	8	178	166					
-1	2	8	-294	304	11	2	4	194	175	-10	2	2	-207	197	-4	3	18	255	268	1	3	12	-157	177	5	3	8	-373	365					
-2	2	8	-477	440	10	2	4	225	215	-11	2	2	-178	175	-5	3	18	184	181	-1	3	12	266	293	4	3	8	-475	456					
-3	2	8	-1454	1335	5	2	4	-168	175	-12	2	2	299	303	-7	3	18	-280	290	-2	3	12	341	316	3	3	8	-530	519					
-4	2	8	-451	449	7	2	4	-407	397	-13	2	2	293	261	-8	3	18	-487	494	-3	3	12	409	423	2	3	8	-299	286					
-5	2	8	-253	245	6	2	4	-174	170	-14	2	2	323	291	-9	3	18	-286	278	-5	3	12	-501	499	0	3	8	366	372					
-6	2	8	747	738	5	2	4	-293	304	-6	2	1	-307	318	-11	3	18	341	333	-6	3	12	-674	682	-1	3	8	204	216					
-7	2	8	-37	63	1	2	4	614	642	-7	2	1	-147	141	-13	3	18	494	486	-9	3	12	154	169	-4	3	8	-774	740					
-8	2	8	1765	1227	3	2	4	614	656	-3	2	1	-439	455	-14	3	18	229	205	-10	3	12	531	535	-5	3	8	-753	743					
-10	2	8	-139	154	2	2	4	-486	470	1	2	1	-399	407	-16	3	18	-287	284	-11	3	12	646	655	-6	3	8	-658	628					
-11	2	8	-464	492	1	2	4	-891	828	2	2	1	-455	477	-17	3	18	-615	606	-12	3	12	458	450	-7	3	8	193	190					
-14	2	8	385	363	-1	2	4	-744	260	3	2	1	-126	126	-11	3	18	-217	157	-14	3	12	-273	281	-8	3	8	658	666					
-15	2	8	348	333	-2	2	4	1297	1232	4	2	1	193	193	20	3	18	183	200	-15	3	12	-308	310	-9	3	8	677	678					
-16	2	8	373	352	-4	2	4	702	641	7	2	1	130	140	-2	3	16	241	238	-16	3	12	-244	247	-10	3	8	448	456					
-19	2	8	163	149	-5	2	4	1380	1289	8	2	1	156	163	-3	3	16	312	305	-18	3	12	183	174	-12	3	8	-236	237					
-7	2	8	152	173	-7	2	4	666	682	12	2	0	292	292	-4	3	16	482	475	-19	3	12	230	205	-13	3	8	-625	604					
-3	2	8	-87	63	-1	2	4	614	642	10	2	0	-726	721	-6	3	16	-260	264	-13	3	12	-262	246	-14	3	8	-249	219					
-2	2	8	-174	178	-9	2	4	-592	617	9	2	0	-762	736	-7	3	16	-396	358	-11	3	11	-136	139	-15	3	8	-249	219					
0	2	8	-426	430	-10	2	4	-404	401	9	2	0	-550	544	-8	3	16	-327	307	-10	3	11	-177	179	-17	3	8	178	177					
-1	2	8	-251	247	-11	2	4	-440	430	7	2	0	-589	609	-9	3	16	-410	417	-5	3	11	119	129	-9	3	7	-165	169					
-2	2	8	-459	445	-14	2	4	298	278	4	2	0	1093	1044	-11	3	16	521	503	4	3	10	-223	223	-6	3	7	-153	138					
6	2	8	-313	307	-1	2	4	243	243	3	2	0	856	846	-11	3	16	384	384	3	3	10	-225	224	-3	3	7	-134	136					
5	2	8	-201	208	-4	2	3	250	262	-15	2	6	706	726	-13	3	16	380	384	2	3	10	-225	224	-3	3	7	-134	136					
4	2	8	358	348	-2	2	3	195	141	-11	3	24	-172	160	-15	3	16	-291	297	1	3	10	193	194	-2	3	7	-147	127					
3	2	8	320	330	-3	2	3	311	311	-14	3	24	267	295	-16	3	16	-347	335	0	3	10	355	358	0	3	7	178	159					
2	2	8	977	952	-1	2	3	263	283	-15	3	24	267	283	-19	3	16	202	178	-1	3	10	806	794	1	3	7	138	132					
-1	2	8	581	581	1	2	3	162	162	-16	3	24	171	181	-20	3	16	324	311	-2	3	10	737	729	2	3	7	117	124					
-1	2	8	-1010	958	2	2	3	-353	350	-18	3	24	-215	215	-21	3	16	913	913	-3	3	10	-155	155	3	3	7	-254	242					
-2	2	8	-397	372	3	2	3	-134	149	-19	3	24	-244	239	-10	3	15	147	162	-4	3	10	-677	660	9	3	6	252	242					
-3	2	8	-724	699	4	2	3	-265	275	-20	3	24	-271	233	-8	3	15	129	125	-5	3	10	-182	192	8	3	6	228	228					
-4	2	8	368	367	5	2	3	-233	217	-9	3	27	-217	238	2	3	14	-272	244	-6	3	10	-408	417	7	3	6	206	203					
-5	2	8	-479	448	6	2	3	714	705	-10	3	27	-232	229	1	3	14	-232	247	-7	3	10	-724	716	5	3	6	-230	238					
-6	2	8	1183	1154	10	2	2	158	169	-11	3	27	-225	216	0	3	14	-201	201	-8	3	10	-463	432	-5	3	7	-132	135					
-7	2	8	-688	705	9	2	2	-226	228	-13	3	27	212	210	-2	3	14	268	269	-9	3	10	460	464	3	3	6	-183	179					
-10	2	8	-476	449	8	2	2	-285	279	-14	3	27	235	246	-4	3	14	367	374	-10	3	10	136	144	1	3	6	149	153					
-11	2	8	-723	718	7	2	2	-550	541	-15	3	27	235	246	-4	3	14	327	299	-11	3	10	136	144	1	3	6	149	153					
-12	2	8	714	714	6	2	2	264	261	-17	3	27	-155	161	-7	3	14	-477	473	-13	3	10	-654	641	0	3	6	846	846					
-15	2	8	252	273	4	2	2	968	968	-18	3	27	-228	228	-4	3	12	273	266	-3	3	9	324	321	-13	4	6	-227	238					
-16	2	8	200	186	3	2	2	300	316	-22	3	27	177	171	-10	3	14	450	448	-15	3	10	-162	144	-3	3	6	-476	457					
-11	2	8	-134	128	2	2	2	868	871	-5	3	20	214	239	-11	3	14	642	641	-17	3	10	248	242	-5	3	6	-1013	931					
-8	2	8	-135	117	1	2	2	-89	103	-8	3	20	-203	201	-12	3	14	282	274	-18	3	10	266	266	-6	3	6	-690	665					
-9	2	8	-227	236	0	2	2	-653	622	-9	3	20	-295	298	-13	3	14	179	195	-19	3	10	192	196	-7	3	6	-145	157					
-6	2	8	-227	249	7	2	2	-797	722	-10	3	20	-354	362	-14	3	14	-190	183	-9	3	9	101	120	-9	3	6	780	800					
-10	3	6	424	433	3	2	2	-403	381	-7	4	20	232	295	-5	4	14	409	402	-5	4	10	93	120	1	4	7	-152	145					
-12	3	6	-217	225	3	2	2	-233	232	-8	4	20	270	284	-6	4	16	302	306	-6	4	10	368	352	7	4	6	237	244					
-13	3	6	-400	394	2	3	2	810	807	-10	4	20	-170	186	-7	4	14	-198	204	-7	4	10	-455	482	6	4	6	-419	406					
-14	3	6	-149	171	1	3	2	-665	749	-11	4	20	-396	391	-8	4	14	-232	227	-8	4	10	-620	771	5	4	6	203	210					
-16	3	6	257	266	0	3	2	-381	386	-12	4	20	-337	327	-9	4	14	-952	922	-9	4	10	-300	309	4	4	6	-268	258					
-17	3	6	211	205	-1	3	2	-447	400	-14	4	20	312	319	-10	4	14	-292	280	-10	4	10	176	169	3	4	6	-552	550					
-11	3	6	-807	807	-2	3	2	-807	807	-15	4	20	219	219	-11	4	16	612	598	-11	4	10	137	141	2	4	6	-236	243					
-6	3	6	304	312	-6	3	2	499	521	-16																								

Tableau 7 (suite)

H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD
-15	4	4	-234	274	5	4	0	-471	465	-16	5	16	406	409	3	5	10	441	442	-1	5	7	-140	137	-11	5	4	353	353
-12	4	3	-199	178	4	0	154	101	-17	5	16	195	193	2	5	10	485	476	1	5	7	-224	228	-12	5	4	266	284	
-11	4	3	-184	174	3	4	C	-1664	1065	-20	5	16	-184	199	1	5	10	222	241	2	5	7	-223	212	-16	5	4	-253	258
-8	4	3	206	216	2	4	0	720	739	-14	5	15	173	171	0	5	10	-191	208	9	5	6	-196	171	-6	5	3	-216	229
-7	4	3	473	480	-16	5	26	-205	214	-10	5	15	-207	204	-1	5	10	-567	565	7	5	6	-172	197	-3	5	3	196	215
-6	4	3	417	427	-11	5	24	-185	180	-9	5	15	-155	168	-2	5	10	-348	337	5	5	6	-503	498	-2	5	3	109	91
-5	4	3	156	160	-14	5	24	-213	209	7	5	14	166	214	-4	5	10	490	476	4	5	6	477	475	-1	5	3	123	112
-3	4	3	492	505	-15	5	24	-171	185	1	5	14	248	252	-5	5	10	622	618	3	5	6	444	441	0	5	3	276	279
-2	4	3	314	296	-17	5	24	194	216	-1	5	14	-162	172	-6	5	10	772	766	2	5	6	251	257	-4	5	2	121	125
-1	4	3	511	515	-10	5	22	175	185	-2	5	14	-160	151	-7	5	10	337	334	1	5	6	-231	228	10	5	2	-215	271
0	4	3	427	412	-11	5	22	-263	274	-3	5	14	-344	345	-8	5	10	-596	601	0	5	6	-1385	1290	9	5	2	-290	281
1	4	3	598	103	-14	5	22	-341	344	-4	5	14	-343	338	-6	5	10	-774	785	-1	5	6	-726	723	7	5	2	301	296
4	4	3	-103	125	-17	5	22	247	241	-5	5	14	228	220	-10	5	10	-913	914	-3	5	6	-94	98	-6	5	2	878	874
4	4	3	-363	376	-18	5	22	312	319	-6	5	14	535	516	-1	5	10	-634	653	-4	5	6	775	754	5	5	2	326	339
5	4	3	-376	331	-19	5	22	214	214	-7	5	14	743	714	-17	5	10	-124	155	-5	5	6	849	808	3	5	2	-363	373
11	4	2	-253	238	-6	5	20	-158	181	-8	5	14	540	522	-13	5	10	503	515	-4	5	6	-161	183	2	5	2	-1313	1247
6	4	2	641	140	-6	5	20	-376	398	-9	5	14	677	767	-14	5	10	385	401	-7	5	6	-997	991	0	5	2	-1010	965
7	4	2	394	397	-9	5	20	417	425	-10	5	14	-436	443	-15	5	10	193	210	-8	5	6	-462	457	-1	5	2	1340	1337
6	4	2	249	260	-10	5	20	377	392	-11	5	14	-614	596	-12	5	9	143	154	-5	5	6	-539	565	-2	5	2	477	470
5	4	2	-245	317	-12	5	20	-208	209	-12	5	14	-333	313	-11	5	9	166	142	-10	5	6	-218	224	-4	5	2	883	854
4	4	2	-375	323	-13	5	20	-455	443	-13	5	14	-201	197	-9	5	9	-130	121	-11	5	6	364	390	-6	5	2	-875	706
-16	4	2	641	140	-6	5	20	-376	398	-9	5	14	677	767	-14	5	10	385	401	-7	5	6	-997	991	0	5	2	-1010	965
2	4	2	-320	312	-17	5	20	313	324	-15	5	14	273	272	-7	5	9	-244	242	-12	5	6	640	638	-7	5	2	-525	551
1	4	2	473	418	-18	5	20	249	243	-16	5	14	192	187	-5	5	9	155	161	-14	5	6	229	219	-10	5	2	507	486
-1	4	2	677	647	-22	5	20	-185	188	-19	5	14	-294	302	-3	5	9	189	196	-16	5	6	-223	218	-11	5	2	308	305
-4	4	2	-364	358	-4	5	18	-398	354	-20	5	14	-269	273	-2	5	9	178	169	-17	5	6	-180	183	-12	5	2	232	222
-7	4	2	520	537	-7	5	18	-414	417	-10	5	13	-170	122	4	5	8	405	386	-10	5	5	146	145	-15	5	2	-240	215
-8	4	2	570	537	-7	5	18	-414	417	-10	5	13	-170	122	4	5	8	405	386	-10	5	5	146	145	-15	5	2	-240	215
-9	4	2	389	383	-8	5	18	371	344	-5	5	13	172	161	0	5	8	-378	388	-7	5	5	-219	226	-4	5	1	-170	168
-10	4	2	574	511	-9	5	18	375	376	3	5	12	244	259	-1	5	8	-752	750	-6	5	5	-245	252	-3	5	1	-202	206
-11	4	2	-270	254	-10	5	18	315	317	2	5	12	353	343	-2	5	8	-271	293	-4	5	5	-93	96	-2	5	1	221	225
-12	4	2	-252	246	-11	5	18	-164	156	-1	5	12	-335	340	-3	5	8	366	362	-2	5	5	-105	110	2	5	1	82	100
-13	4	2	641	140	-6	5	20	-376	398	-9	5	14	677	767	-14	5	10	385	401	-7	5	6	-997	991	0	5	2	-1010	965
-8	4	1	265	266	-13	5	18	-244	232	-3	5	12	-899	868	-5	5	8	263	276	4	5	1	-320	276	4	5	1	-320	320
-7	4	1	143	136	-15	5	18	147	151	-5	5	12	251	243	-6	5	8	1248	1186	10	5	4	-231	222	5	5	1	-113	119
-4	4	1	-247	250	-16	5	18	371	371	-7	5	12	766	722	-7	5	8	368	386	9	5	4	-375	356	12	5	0	-214	207
-5	4	1	-348	342	-17	5	18	454	450	-8	5	12	126	127	-8	5	8	-330	353	8	5	4	-345	325	11	5	0	-277	281
-2	4	1	-434	436	-18	5	18	454	454	-8	5	12	126	127	-8	5	8	-330	353	8	5	4	-345	325	11	5	0	-277	281
1	4	1	-196	214	-20	5	18	-207	218	-10	5	12	-632	629	-10	5	8	-145	155	6	5	4	278	238	9	5	0	-245	220
2	4	1	-144	154	-21	5	18	-219	221	-11	5	12	-317	335	-12	5	8	338	354	5	5	4	517	516	7	5	0	234	226
4	4	1	121	117	0	5	16	256	251	-12	5	12	-187	188	-13	5	8	449	451	4	5	4	609	610	7	5	0	544	565
5	4	1	141	162	-3	5	16	-279	281	-13	5	12	256	261	-17	5	8	-279	274	3	5	4	236	247	6	5	0	582	587
6	4	1	135	140	-4	5	16	-311	316	-14	5	12	648	646	-15	5	7	-128	129	-2	5	4	-997	1018	-12	5	0	-270	272
8	4	1	189	184	-7	5	16	287	274	-15	5	12	562	546	-10	5	7	131	142	1	5	4	-996	972	4	5	0	864	899
9	4	1	151	164	-8	5	16	217	202	-16	5	12	264	262	-5	5	7	-134	121	0	5	4	-1042	976	3	5	0	-771	788
13	4	0	-311	311	-10	5	16	-256	255	-18	5	12	-218	231	-8	5	7	-206	218	-2	5	4	492	487	2	5	0	-1121	1091
10	4	0	-191	229	-11	5	16	-656	661	-19	5	12	-303	300	-7	5	7	-201	210	-6	5	4	-641	635	-17	6	26	-177	186
10	4	0	252	279	-12	5	16	-521	512	-13	5	11	180	172	-6	5	7	-103	100	-7	5	4	-997	1018	-12	6	24	-217	217
9	4	0	262	263	-13	5	16	-437	435	-12	5	11	176	177	-6	5	7	275	253	-8	5	4	-1099	1095	-13	6	24	-157	149
8	4	0	920	912	-15	5	16	295	295	6	5	10	-184	188	-3	5	7	396	398	-9	5	4	-950	957	-16	6	24	-195	172
-17	6	24	-319	340	-15	6	16	-323	335	5	6	10	-720	718	-2	6	7	-383	365	-11	6	4	-244	244	9	6	0	-557	567
-18	6	24	-185	193	-17	6	16	277	274	4	6	10	-187	191	-1	6	7	-304	314	-12	6	4	223	221	8	6	0	-451	454
-20	6	24	184	196	-18	6	16	393	384	2	6	10	361	350	C	6	7	-317	334	-13	6	4	227	218	7	6	0	-598	604
-8	6	22	-210	212	-13	6	15	-249	246	1	6	10	383	377	1	6	7	-192	189	-14	6	4	327	331	6	6	0	168	149
-9	6	22	-167	180	-12	6	15	-234	235	-1	6	10	441	440	-1	6	7	-207	201	-8	6	4	-149	161	5	6	0	452	476
-11	6	22	174	193	-11	6	15	-138	152	-2	6	10	-274	231	6	6	6	-281	278	-6	6	4	366	364	6	6	0	190	167
-12	6	22	349	345	-10	6	15	-214																					



1606 STRUCTURE DES COMPLEXES PEROXYDIQUES DES MÉTAUX DE TRANSITION. III

Tableau 7 (suite)

H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD
-11	7	16	230	224	-14	7	12	-377	386	-6	7	8	-575	593	2	7	4	450	466	3	7	1	-167	179	10	8	16	-302	299
-12	7	16	591	571	-15	7	12	-404	396	-7	7	8	254	255	1	7	4	1520	1437	4	7	1	-175	181	-11	8	16	-354	348
-13	7	16	240	236	-18	7	12	271	250	-8	7	8	592	598	0	7	4	595	965	11	7	0	117	319	-13	8	16	366	370
-15	7	16	-230	232	-19	7	12	216	203	-9	7	8	689	599	-1	7	4	689	653	10	7	0	301	316	-14	8	16	594	589
-16	7	16	-240	245	-10	7	11	160	169	-10	7	8	436	445	-2	7	4	-201	181	9	7	0	199	207	-15	8	16	181	175
-17	7	16	-185	192	-6	7	11	151	149	-12	7	8	-436	432	-1	7	4	-615	325	7	7	0	-314	325	-7	8	16	192	187
-19	7	16	270	237	-10	7	11	33	115	-13	7	8	-321	323	-4	7	4	-621	652	6	7	0	-406	422	-17	8	16	-259	258
-20	7	16	197	201	-7	7	11	184	185	-14	7	8	-390	388	-7	7	4	834	859	5	7	0	-352	386	-19	8	16	-245	248
-26	7	15	-112	154	-5	7	11	-795	290	-7	7	7	200	289	-8	7	4	995	982	4	7	0	599	621	-1	8	14	-318	324
2	7	14	-177	142	-4	7	11	-270	257	-6	7	7	582	567	-9	7	4	148	163	2	7	0	961	974	-6	8	14	498	498
1	7	14	-249	233	-3	7	11	-344	344	-5	7	7	435	419	-11	7	4	-442	445	-13	8	24	-207	214	-5	8	14	400	389
0	14	-167	141	-2	7	11	-255	257	-4	7	7	377	371	-12	7	4	-483	468	-17	8	24	192	214	-6	8	14	448	441	
-2	7	14	244	255	4	7	10	-222	215	-3	7	7	164	161	-13	7	4	-225	228	-8	8	22	180	183	-7	8	14	-193	175
-3	7	14	414	398	3	7	10	-344	357	9	7	6	140	212	-15	7	4	221	224	-11	8	22	-285	318	-8	8	14	-408	404
-4	7	14	214	211	-2	7	10	-286	284	8	7	6	277	256	-16	7	4	171	185	-13	8	22	-168	184	-9	8	14	-686	677
-5	7	14	-234	241	0	7	10	384	365	7	7	6	165	174	-10	7	3	-190	189	-15	8	22	232	232	-10	8	14	-464	459
-7	7	14	-407	387	-1	7	10	643	657	4	7	6	-459	463	-9	7	3	-267	285	-16	8	22	391	403	-11	9	14	-230	230
-8	7	14	-537	531	-2	7	10	776	745	3	7	6	-278	282	-8	7	3	-293	299	-19	8	22	-151	183	-12	8	14	233	231
-9	7	14	134	157	-3	7	10	147	158	1	7	6	514	522	-4	7	3	125	143	-6	8	20	165	188	-13	8	14	329	337
-10	7	14	461	457	-4	7	13	-153	151	0	7	6	420	427	-2	7	3	-142	135	-7	8	20	213	207	-14	8	14	201	208
-11	7	14	441	439	6	7	10	-670	649	-1	7	6	897	854	0	7	3	-92	84	-8	8	20	214	231	-17	8	14	-395	392
-12	7	14	477	477	-4	7	10	-673	621	-2	7	6	250	264	1	7	3	235	236	-10	8	20	-216	246	-20	8	14	152	176
-14	7	14	-259	256	-7	7	10	-248	253	-3	7	6	-1184	1099	2	7	3	305	309	-11	8	20	-452	502	-10	8	13	190	174
-15	7	14	-390	340	-9	7	10	603	616	-4	7	6	-1029	975	3	7	3	286	304	-12	8	20	-219	227	-9	8	13	240	240
-16	7	14	-292	254	-13	7	10	644	634	-5	7	6	-811	814	4	7	3	234	225	-13	8	20	-205	235	4	8	12	200	208
-17	7	14	-245	247	-7	7	9	-349	340	-7	7	5	301	315	-3	7	4	-639	637	-10	8	20	210	217	-9	8	12	-326	344
-19	7	14	210	214	-10	7	10	-306	308	-8	7	4	726	735	10	7	2	385	374	-15	8	20	252	209	0	8	12	-318	304
-20	7	14	168	177	-13	7	10	-351	368	-9	7	4	443	442	9	7	2	323	313	-16	8	20	300	327	-1	8	12	-444	434
-13	7	13	-766	272	-14	7	10	-488	495	-10	7	4	243	252	7	7	2	-276	280	-19	8	20	-186	200	-2	8	12	152	167
-12	7	13	-194	188	-15	7	10	-277	262	-12	7	6	-431	434	6	7	2	-513	515	-20	8	20	-201	189	-3	8	12	165	169
-11	7	13	-233	233	-13	7	10	-313	313	-9	7	6	212	209	-5	7	4	-632	637	-12	8	20	-284	287	-4	8	12	-324	314
-10	7	13	-142	149	-11	7	9	-243	243	-14	7	6	-184	186	4	7	2	-219	241	-5	8	18	189	181	-5	8	12	362	358
-9	7	13	195	201	-10	7	9	-205	221	-16	7	4	202	187	3	7	2	214	232	-6	8	18	339	335	-6	8	12	436	423
-8	7	13	330	316	-9	7	9	-120	129	-12	7	5	134	159	2	7	2	581	604	-7	8	18	336	344	-7	8	12	-330	326
-7	7	13	-435	430	-8	7	9	-249	250	-7	7	5	145	145	-7	7	2	750	776	-8	8	24	234	242	-9	8	12	-326	330
-6	7	13	131	144	-7	7	9	-132	141	-5	7	5	254	246	-1	7	2	-96	91	-10	8	18	-177	159	-10	8	12	133	141
-5	7	12	-255	237	-6	7	9	-206	207	-4	7	5	204	193	-2	7	2	-1033	1002	-11	8	18	-317	324	-11	8	12	281	279
1	7	12	-329	316	-4	7	9	-156	163	-3	7	5	-271	278	-3	7	2	-1194	1139	-14	8	18	332	333	-12	8	12	510	518
-1	7	12	251	247	0	7	9	146	152	-2	7	5	-446	423	-4	7	2	-683	714	-15	8	18	189	170	-13	8	12	462	461
-2	7	12	435	430	1	7	9	236	240	-1	7	5	-327	329	-5	7	2	648	669	-16	8	18	264	253	-14	8	12	243	245
-3	7	12	432	428	6	7	8	-172	185	0	7	5	-325	325	-6	7	2	-132	760	-18	8	18	-179	172	-18	8	12	-261	271
-4	7	12	206	203	4	7	8	-433	413	2	7	5	305	323	-7	7	2	738	773	-19	8	18	-347	349	-17	8	12	-406	407
-5	7	12	-905	474	3	7	8	-434	437	3	7	5	234	251	-4	7	2	610	609	-20	8	18	-172	193	-6	8	11	-176	165
-6	7	12	-904	884	2	7	8	-389	386	4	7	5	189	204	-10	7	2	-221	212	-7	8	17	-182	219	-5	8	11	-294	286
-7	7	12	-420	422	0	7	8	346	337	5	7	4	220	210	-11	7	2	-342	329	-1	8	16	-318	330	-4	8	11	-161	154
-8	7	12	-289	299	-1	7	8	358	349	-6	7	4	301	315	-8	7	4	-135	141	-2	8	16	-284	287	-5	8	10	214	216
-9	7	12	350	351	-2	7	8	207	205	6	7	4	-314	315	-5	7	1	-442	264	-3	8	16	-212	229	4	8	10	211	212
-10	7	12	595	596	-3	7	8	-275	281	5	7	4	-600	598	-4	7	1	352	372	-6	8	16	233	225	1	8	10	-415	411
-11	7	12	623	614	-4	7	8	-282	280	4	7	4	-495	494	-2	7	1	-181	190	-3	8	16	-181	196	0	8	10	-368	373
-12	7	12	331	325	-5	7	8	-1068	1001	3	7	4	-164	160	1	7	1	-281	297	-9	8	16	-461	460	-2	8	10	-248	239
-4	8	10	640	635	-5	8	6	-542	561	-1	8	2	727	692	-17	9	18	268	278	-12	9	11	257	252	2	9	7	-265	246
-6	8	10	-157	159	-6	8	6	-311	259	-2	8	2	983	960	-18	9	18	221	229	-11	9	11	219	217	3	9	7	-243	238
-7	8	10	-793	768	-7	8	6	-543	576	-6	8	2	-532	535	-20	9	19	-184	202	-10	9	11	147	155	8	9	6	-264	243
-8	8	10	-450	451	-8	8	6	-460	459	-7	8	2	357	358	-13	9	16	-337	328	4	10	10	194	185	5	9	6	179	167
-11	8	10	454	459	-5	8	6	213	213	-9	8	2	193	197	-9	9	16	-218	218	6	10	16	-218	218	6	10	6	271	278
-12	8	10	602	605	-10	8	6	798	812	-10	8	2	341	349	-7	9	16	243	244	2	10	10	322	332	3	9	6	274	254
-13	8	10	603	602	-11	8																							

Tableau 7 (suite)

H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD					
-5	9	3	-203	211	-10	10	20	225	216	-5	10	12	-579	576	-13	10	8	-270	279	-6	10	3	-202	223	-12	11	20	170	182
-3	9	3	239	251	-12	10	20	224	227	-6	10	12	118	144	-14	10	8	201	202	-4	10	3	85	90	-11	20	343	339	
-2	9	3	164	358	-14	10	20	-162	176	-7	10	12	393	384	-15	10	8	221	215	-2	10	3	83	72	-14	11	20	274	272
-1	9	3	344	341	-15	10	20	-301	300	-8	10	12	538	515	-16	10	8	220	205	-1	10	3	-267	262	-17	11	20	-231	239
0	9	3	417	400	-19	10	20	209	271	-9	10	12	236	220	-9	10	7	-206	214	0	10	3	-356	338	-18	11	20	-205	212
1	9	3	397	406	-20	10	20	215	206	-10	10	12	398	487	-8	10	7	-252	262	1	10	3	-200	202	-4	11	18	234	330
2	9	3	103	111	-7	10	18	-284	309	-11	10	12	-182	188	-5	10	7	151	194	2	10	3	-184	187	-5	11	18	255	279
10	9	2	-104	281	-9	10	18	213	221	-12	10	12	-363	362	-4	10	7	171	155	4	10	3	141	142	-8	11	18	-341	354
9	9	2	-265	265	-10	10	18	420	424	-13	10	12	-370	382	-3	10	7	146	141	5	10	3	223	217	-9	11	18	-314	319
7	9	2	347	341	-12	10	18	249	245	-16	10	12	249	265	7	10	6	-247	295	6	10	3	163	175	-11	11	18	159	171
6	9	2	375	373	-14	10	18	-284	259	-11	10	11	-217	209	5	10	6	-247	262	9	10	2	-287	299	-12	11	18	168	166
5	9	2	504	523	-15	10	18	-397	374	-10	10	11	-127	149	3	10	6	241	221	6	10	2	-372	386	-13	11	18	263	246
3	9	2	-443	505	-15	10	18	199	189	-8	10	11	177	177	2	10	6	481	483	7	10	2	-424	430	-16	11	18	-234	241
2	9	2	-354	363	-1	10	16	170	195	-7	10	11	336	334	-1	10	6	-673	675	6	10	2	-613	177	-17	11	18	-293	316
1	9	2	-347	404	-2	10	16	247	253	-6	10	11	272	255	-2	10	6	-735	719	5	10	2	-211	231	-12	11	17	179	194
0	9	2	-254	255	-10	10	16	-414	422	-5	10	11	180	161	-3	10	6	-864	833	4	10	2	639	649	-11	11	17	213	221
-1	9	2	237	290	-6	10	16	-315	308	5	10	10	-181	198	-4	10	6	-301	282	3	10	2	317	340	-10	11	17	176	175
-2	9	2	892	869	-7	10	16	-228	224	2	10	10	283	309	-5	10	6	400	395	2	10	2	179	210	-3	11	16	211	200
-3	9	2	281	294	-9	10	16	219	215	1	10	10	319	311	-6	10	6	664	691	0	10	2	160	154	-4	11	16	255	272
-4	9	2	-523	548	-10	10	16	517	505	0	10	10	426	416	-7	10	6	-370	399	-1	10	2	-855	786	-7	11	16	-265	262
-5	9	2	-689	712	-11	10	16	244	245	-3	10	10	-776	717	-8	10	6	547	565	-2	10	2	-129	128	-8	11	16	-220	204
-6	9	2	213	209	-12	10	16	139	164	-4	10	10	-377	364	-9	10	6	-309	312	-4	10	2	760	784	-11	11	16	421	417
-11	9	2	349	327	-13	10	16	-268	266	-5	10	10	-429	408	-10	10	6	-218	219	-5	10	2	608	647	-12	11	16	354	351
-12	9	2	237	224	-14	10	16	-225	238	-8	10	10	400	599	-11	10	6	-282	297	-6	10	2	794	814	-13	11	16	305	313
-10	9	1	159	168	-15	10	16	-273	211	-9	10	10	146	154	-14	10	6	345	343	-8	10	2	-212	232	-15	11	16	-244	240
-9	9	1	192	181	-16	10	16	144	168	-11	10	10	-408	421	-9	10	5	-161	151	-9	10	2	-457	450	-16	11	16	-266	252
-8	9	1	219	212	-10	10	14	-312	312	-10	10	10	-304	301	-11	10	4	-314	317	-10	10	2	318	317	-10	11	16	227	224
-7	9	1	303	314	0	10	14	278	269	-13	10	10	-292	296	-5	10	5	280	291	-11	10	2	-224	217	-2	11	14	232	220
-6	9	1	163	157	-1	10	14	322	302	-15	10	10	201	203	-4	10	5	363	346	-12	10	2	169	186	-3	11	14	249	237
-2	9	1	152	163	-2	10	14	274	280	-16	10	10	342	329	-3	10	5	172	178	-7	10	1	-158	178	-4	11	14	195	188
-1	9	1	-254	270	-3	10	14	-164	195	-14	10	9	185	179	-1	10	5	-126	137	-6	10	1	-218	228	-6	11	14	-347	340
4	9	1	-334	342	-6	10	14	-250	244	-7	10	9	239	231	1	10	5	-312	307	-3	10	1	203	227	-6	11	14	-326	330
5	9	1	-266	284	-4	10	14	455	454	-3	10	9	-187	188	2	10	5	-160	151	-2	10	1	169	184	-10	11	14	273	274
11	9	0	-339	351	-9	10	14	311	309	6	10	8	-296	295	7	10	4	-295	249	1	10	1	-159	172	-11	11	14	513	516
15	9	0	-341	344	-10	10	14	-191	206	5	10	8	-592	573	-2	10	4	618	635	2	10	1	-261	278	-12	11	14	227	224
8	9	0	188	170	-11	10	14	-163	152	8	10	8	462	448	3	10	4	-494	522	12	10	0	385	377	-12	11	14	-217	211
7	9	0	321	320	-12	10	14	-334	325	1	10	8	523	523	2	10	4	663	667	9	10	0	-312	336	-16	11	14	-230	229
6	9	0	355	376	-13	10	14	-501	509	0	10	8	300	295	1	10	4	163	169	8	10	0	-232	234	-14	11	13	-323	244
5	9	0	317	336	-14	10	14	-203	206	-1	10	8	-178	194	-1	10	4	-815	794	7	10	0	-350	361	-13	11	13	-174	174
4	9	0	-332	350	-15	10	14	-191	206	-3	10	8	-592	573	-2	10	4	-150	172	6	10	0	-285	281	-12	11	13	-155	169
3	9	0	-421	458	-16	10	14	220	224	-4	10	8	-214	208	-3	10	4	-221	223	3	10	0	161	155	-10	11	13	-170	184
2	9	0	-591	619	-17	10	14	235	263	-5	10	8	117	114	-6	10	4	667	650	4	10	0	570	600	-9	11	13	188	194
-12	10	24	206	217	-14	10	14	261	244	-6	10	8	784	778	-9	10	4	-450	461	2	10	0	78	83	-8	11	13	180	186
-16	10	24	-197	210	-11	10	13	-329	325	-7	10	8	424	438	-10	10	4	-300	306	-14	11	22	258	242	3	11	12	-172	199
-17	10	24	-274	274	-10	10	13	-254	261	-8	10	8	690	709	-11	10	4	-346	354	-17	11	22	-200	205	2	11	12	-245	241
-10	10	22	-363	338	-3	10	13	-154	159	-8	10	8	-175	155	-6	10	4	-141	176	-10	11	22	-214	216	-6	11	12	-297	318
-16	10	22	-223	234	0	10	12	318	329	-10	10	8	-364	387	-14	10	4	278	261	-8	11	20	-241	232	-2	11	12	510	521
-17	10	22	-176	203	-3	10	12	-392	398	-11	10	8	-568	581	-8	10	3	-280	267	-9	11	20	-296	301	-3	11	12	514	505
-7	10	20	-227	243	-4	10	12	-312	317	-12	10	8	-321	337	-7	10	3	-310	310	-10	11	20	-271	277	-4	11	12	150	156
-5	11	17	-201	185	-11	11	8	-561	548	-11	11	4	-258	259	-14	12	20	155	180	-13	12	12	217	213	0	12	7	275	276
-6	11	12	-464	461	-7	11	8	-177	191	-12	11	4	-290	296	-15	12	20	191	198	-14	12	12	299	307	1	12	7	209	222
-7	11	12	-565	536	-8	11	8	304	267	-10	11	3	-234	242	-16	12	20	182	150	-15	12	12	-179	204	7	12	6	217	227
-8	11	12	-614	603	-9	11	8	398	402	-9	11	3	-216	217	-9	12	19	-184	190	-17	12	12	-210	199	6	12	6	318	323
-10	11	12	413	398	-13	11	8	-358	378	-8	11	3	-192	198	-6	12	18	381	402	-8	12	12	-210	199	6	12	6	318	323
-11	11	12	396	392	-8	11	7	275	266	-6	11	3	-199	213	-10	12	18	-184	173	-10	12	11	-210	198	2	12	6	-421	420
-13	11	12																											

1608 STRUCTURE DES COMPLEXES PEROXYDIQUES DES MÉTAUX DE TRANSITION. III

Tableau 7 (suite)

H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD	H	K	L	FC	FD					
1	12	3	390	383	-16	13	18	207	203	-10	13	10	-329	320	3	13	5	-229	223	3	13	1	-200	207	-8	14	10	486	483
2	12	3	351	348	-17	13	18	276	296	-13	13	10	365	374	6	13	4	336	320	4	13	1	-161	155	-9	14	10	214	232
3	12	3	211	218	-4	13	18	-284	314	-14	13	10	317	319	5	13	4	431	431	10	13	0	-238	257	-11	14	10	-315	365
4	12	2	376	385	-7	13	16	301	299	-11	13	9	148	170	4	13	4	311	317	7	13	0	197	203	-12	14	10	-268	276
7	12	2	376	329	-8	13	16	264	266	-7	13	9	142	154	3	13	4	173	186	6	13	0	314	328	-13	14	10	-329	352
6	12	2	162	190	-9	13	16	274	272	-4	13	9	204	198	2	13	4	-317	321	4	13	0	-172	185	-16	14	10	217	205
5	12	2	-332	343	-11	13	16	-256	245	-3	13	9	229	224	1	13	4	-785	779	3	13	0	-573	611	-13	14	9	198	212
4	12	2	-338	311	-12	13	16	-267	271	-4	13	8	321	327	0	13	3	-775	770	2	13	0	-364	702	-12	14	9	185	205
3	12	2	-442	654	-16	13	16	247	248	3	13	8	329	335	-1	13	4	-209	212	-11	14	20	238	251	-1	14	9	-201	190
2	12	2	-384	397	-3	13	14	-320	311	0	13	8	-761	241	-3	13	4	344	344	-12	14	20	233	243	0	14	9	-173	177
1	12	2	165	176	-4	13	14	-222	216	-1	13	8	-407	406	-4	13	4	551	560	-15	14	20	-222	231	5	14	8	-218	229
0	12	2	748	719	-7	13	14	315	323	-4	13	8	247	245	-5	13	4	174	172	-7	14	18	-259	283	2	14	8	340	356
-2	12	2	676	583	-8	13	14	258	277	-5	13	8	448	444	-6	13	2	-278	286	-10	14	18	212	213	1	14	8	170	183
-3	12	2	-207	210	-10	13	14	-347	335	-6	13	8	369	376	-7	13	4	-420	432	-11	14	18	209	213	0	14	8	302	302
-4	12	2	-271	295	-11	13	14	-307	291	-7	13	8	-286	293	-8	13	4	-374	382	-15	14	18	-261	254	-1	14	8	-186	172
-5	12	2	-932	944	-12	13	14	-739	236	-8	13	8	-484	492	-9	13	4	-245	255	-8	14	17	197	221	-2	14	8	-315	301
-6	12	2	-174	132	-14	13	14	234	240	-9	13	8	-408	422	-10	13	4	217	231	-5	14	16	-254	272	-3	14	8	-421	404
-8	12	2	400	405	-15	13	14	333	347	-10	13	8	-407	419	-11	13	4	382	363	-10	14	16	333	322	-4	14	8	-194	204
-9	12	2	312	317	-16	13	14	248	249	-12	13	8	278	290	-12	13	4	329	330	-11	14	16	173	189	-5	14	8	-253	245
-10	12	2	286	288	-12	13	13	163	172	-13	13	8	338	325	-9	13	3	177	187	-13	14	16	-273	264	-6	14	8	441	434
-7	12	1	196	205	-9	13	13	-165	168	-14	13	9	167	181	-6	13	3	-217	209	-14	14	16	-236	225	-7	14	8	487	490
-8	12	1	242	259	-8	13	13	-169	173	-7	13	9	-243	237	-5	13	3	-171	194	-15	14	16	-227	223	-8	14	8	297	301
-9	12	1	733	741	-5	13	13	199	205	-6	13	7	-261	257	-4	13	3	-109	110	-4	14	14	-235	219	-11	14	8	-385	395
-10	12	1	119	125	-4	13	13	204	217	-5	13	7	-152	152	-2	13	3	265	247	-5	14	14	-343	342	-7	14	7	-187	183
-9	12	1	-145	174	-12	13	12	-234	230	-1	13	7	145	147	-1	13	3	371	307	-8	14	14	333	339	-9	14	7	-189	193
1	12	1	346	391	-3	13	12	-345	364	-2	13	7	219	216	0	13	3	203	200	-9	14	14	389	393	-8	14	7	-233	260
2	12	1	360	360	-5	13	12	395	402	1	13	7	-166	162	3	13	3	-189	168	-10	14	14	336	333	-7	14	7	-195	186
4	12	0	724	724	-4	13	12	458	435	2	13	7	-171	190	-6	13	3	-185	195	-13	14	14	-286	313	-6	14	7	125	125
4	12	0	-245	250	-7	13	12	450	441	1	13	6	764	268	9	13	2	-269	256	-11	14	13	-194	184	-7	14	7	235	244
6	12	1	-189	209	-8	13	12	176	181	3	13	6	205	192	7	13	2	189	195	-10	14	13	-288	284	-4	14	7	277	259
7	12	1	-226	201	-9	13	12	-202	157	1	13	6	-212	211	6	13	2	447	494	-9	14	13	-214	222	-3	14	7	251	235
11	12	0	-190	210	-9	13	12	-519	513	0	13	6	-519	519	5	13	2	330	335	0	14	12	242	232	6	14	6	-220	214
6	12	0	300	300	-11	13	12	-368	363	-1	13	6	-425	440	4	13	2	308	305	-3	14	12	-237	238	4	14	6	176	165
7	12	0	607	623	-12	13	12	-266	267	-4	13	6	512	512	2	13	2	-374	374	-2	14	12	373	344	-2	14	6	232	232
7	12	0	172	196	-14	13	12	264	256	-1	13	6	703	685	1	13	2	-363	374	-5	14	12	-338	343	2	14	6	384	362
6	12	0	159	148	-15	13	12	254	249	-5	13	6	670	620	-1	13	2	272	249	-8	14	12	405	407	-1	14	6	-470	459
5	12	0	-545	558	-9	13	11	-167	170	-6	13	6	356	378	-2	13	2	460	433	-9	14	12	189	184	-2	14	6	-355	358
4	12	0	-626	644	-7	13	11	-157	171	-7	13	6	-210	219	-3	13	2	833	953	-11	14	12	-189	181	-3	14	6	-404	404
4	12	0	-787	804	-8	13	11	-164	170	-8	13	6	-366	377	-5	13	2	315	315	-12	14	12	247	247	-2	14	6	-416	416
2	12	0	168	174	-3	13	11	207	182	-9	13	6	-366	377	-5	13	2	-350	371	-13	14	12	-111	425	-6	14	6	514	524
1	12	0	636	574	5	13	10	295	309	-10	13	6	-207	203	-6	13	2	-504	535	-16	14	12	204	212	-7	14	6	138	145
-10	13	20	231	245	0	13	10	-213	215	-12	13	6	260	246	-7	13	2	-504	519	-7	14	11	165	158	-9	14	6	-278	238
-13	13	20	-210	206	-1	13	10	-534	532	-13	13	6	219	211	-8	13	2	-448	440	-6	14	11	314	306	-10	14	6	-390	386
-17	13	20	243	242	-2	13	10	-515	511	-7	13	6	166	168	-10	13	2	296	306	-12	14	12	256	261	-6	14	6	446	278
-8	13	14	217	227	-3	13	10	-217	210	-6	13	5	-317	336	-8	13	1	144	168	-1	14	11	-198	203	-14	14	6	197	191
-8	13	14	269	270	-4	13	10	203	201	-5	13	5	-329	341	-5	13	1	-148	178	0	14	10	322	325	-6	14	5	147	157
-9	13	14	195	187	-5	13	10	298	273	-4	13	5	-231	222	-4	13	1	-218	222	-3	14	10	-354	354	-5	14	5	141	153
-11	13	14	-321	324	-6	13	10	447	456	-2	13	5	177	171	-2	13	1	165	160	-2	14	10	-191	181	-4	14	5	288	275
-12	13	14	-331	328	-9	13	10	334	325	-1	13	5	194	197	1	13	1	98	101	-5	14	10	-218	226	-9	14	5	228	240
-13	13	14	-313	309	-9	13	10	-323	321	2	13	5	-309	314	2	13	1	-107	114	-7	14	10	221	211	-1	14	5	-145	150
0	14	5	-276	272	4	14	0	479	490	-12	15	8	-181	204	5	15	2	-262	281	-9	16	10	-240	251	-8	16	4	177	172
1	14	5	-335	333	3	14	0	702	217	-7	15	7	134	142	4	15	2	132	157	-12	16	10	262	273	-10	16	4	330	334
7	14	4	-249	244	2	14	0	103	103	-6	15	7	197	193	3	15	2	229	223	-10	16	9	196	185	-8	16	3	215	188
4	14	4	228	235	1	14	0	-448	408	-4	15	7	-166	162	2	15	2	316	393	-6	16	9	-269	247	-7	16	3	205	165
3	14	4	150	151	-12	15	13	217	229	-3	15	7	-249	230	0	15	2	517	528	-5	16	9	-239	220	-6	16	3	-245	231
2	14	4	486	504	-8	15	16	-205	215	-2																			

