

is not significantly different from that of MBHCl (109.6°).

Hydrogen bonds and intermolecular packing

The structure of MBHBr projected along the *a* axis is shown diagrammatically in Fig. 6. The intermolecular bond distances involving hydrogen atoms are given in Table 6. The molecules are linked together by a three-dimensional network of hydrogen bonds of the type N-H...Br, lengths varying from 3.346 ± 0.015 to 3.423 ± 0.015 Å.

There are six hydrogen atoms in the molecule available for hydrogen bond formation e.g. two each at N(1), N(2) and N(4). It has been found that only four, two at N(1) and two at N(4), take part in forming hydrogen bonds with the Br ions. It may be noted that there is no acceptor available within the hydrogen bond forming distances of N(2). The distances N(1)...Brⁱ and N(1)...Brⁱⁱ are 3.416 and 3.346 Å respectively, while the angles C(1)-N(1)-Brⁱ and C(1)-N(1)-Brⁱⁱ are 142.7 and 114.9° respectively. The hydrogen atoms at N(4) form hydrogen bonds of lengths 3.423 and 3.396 Å with Brⁱⁱⁱ and Br^{iv} respectively and the angles C(2)-N(4)-Brⁱⁱⁱ and C(2)-N(4)-Br^{iv} are 113.8 and 128.9° respectively.

Acta Cryst. (1973). B29, 560

Structure Cristalline de C₆H₁₂SnSO₂, Composé d'Insertion d'Anhydride Sulfureux dans une Liaison Carbone-Etain

PAR DARIA GINDEROW ET MICHEL HUBER

Laboratoire de Métallurgie et Physico-Chimie des Surfaces, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris, 11, rue Pierre et Marie Curie, 75005 Paris, France

(Reçu le 16 octobre 1972, accepté le 10 novembre 1972)

C₆H₁₂SnSO₂ crystallizes in space group *P*2₁/*n*, with *a*=9.72, *b*=11.24, *c*=9.18 Å; β=95.33° and *Z*=4. The structure was solved by the heavy-atom technique. X-ray intensity data were collected with a manual diffractometer and refined by the full-matrix least-squares method to a final *R* of 0.065 for 509 reflexions. The crystal structure consists of infinite chains parallel to [101]. These chains are formed by oxygen bridges linking tin and sulphur atoms. The tin atoms are five-coordinated.

Introduction

Le composé (CN₃)₃Sn-O-S(O)-CH₂-C≡CH fait partie de la série des produits d'insertion étudiés par Fong & Kitching (1970). A partir d'études de spectroscopie infrarouge, ces auteurs ont avancé plusieurs hypothèses structurales possibles.

Nous avons entrepris l'étude cristallographique du composé pour lever l'indétermination qui subsistait sur sa conformation moléculaire. Ce composé fait partie d'une série qui a été synthétisé au laboratoire de Chimie Organique de l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris.

References

- DONOHUE, J. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 655-672.
 DONOHUE, J. (1970). Private communication.
 DUTTA GUPTA, J. K. & SAHA, N. N. (1971). *Indian J. Phys.* **44**, 561-564.
 HANDA, R. & SAHA, N. N. (1971). *J. Cryst. Mol. Struct.* **1**, 235-244.
International Tables for X-ray Crystallography (1960). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
 KARTHA, G., AHMED, F. R. & BARNES, W. H. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 525-531.
 LIDE, D. R. JR (1962). *Tetrahedron*, **17**, 125-134.
 McDONALD, T. R. R. & BEEVERS, C. A. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 654-659.
 PALMER, K. J. & LEE, K. S. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 790-795.
 PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*. Ithaca: Cornell Univ. Press.
 RAY, P. (1961). *Chem. Rev.* **61**, 313-359.
 SAHA, N. N. & DUTTA GUPTA, J. K. (1970). Fifth I.B.S. Symp. Bombay.
 SCHWARZENBACH, D. (1968). *J. Chem. Phys.* **48**, 4134-4140.
 SEN, D. (1966). D. Sc. Thesis, Univ. of Calcutta.
 SHAPIRO, S. L., PARRINO, V. A. & FREEDMAN, L. (1959). *J. Amer. Chem. Soc.* **81**, 3725-3728.
 SRIKANTA, S. (1964). Private communication.
 WOOLFSOON, M. M. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 804-810.

Partie expérimentale

Les cristaux sont obtenus par recristallisation dans le méthanol; ce sont des parallélépipèdes transparents et instables. Voici les principales données cristallographiques:

Formule brute	C ₆ H ₁₂ SnSO ₂
Masse moléculaire	266,91
Système cristallin	Monoclique
Groupe spatial	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>
<i>a</i>	9,72 (1) Å
<i>b</i>	11,24 (2)

<i>c</i>	9,18 (1)
<i>β</i>	95,33 (2)°
<i>Z</i>	4
<i>F</i> (000)	520 <i>e</i>
Densité calculée	1,78 g cm ⁻³
Densité mesurée (par flottaison dans un mélange de 1-2 dibromo éthane et de trichloréthylène)	1,80 g cm ⁻³
Nombre de réflexions indépendantes mesurées	509
Radiation utilisée Mo <i>Kα</i>	0,7107 Å
Coefficient d'absorption linéaire	27 cm ⁻¹ .

Les mesures ont été faites sur un diffractomètre à compteur, le cristal étant positionné manuellement suivant les angles d'Euler pour chacun des plans *hkl*. La décomposition du cristal, placé dans un tube de Lindemann scellé, a entraîné une limitation sévère du nombre de mesures.

Les intensités ont été affectées des corrections de Lorentz et de polarisation. Les effets de l'absorption ont été négligés.

Détermination de la structure et affinement

La résolution de la fonction de Patterson tridimensionnelle montre que l'atome d'étain a trois positions possibles. La solution qui ne présente pas d'impossibilité stérique place l'atome d'étain en $x = \frac{1}{4}, y = \frac{1}{4}, z = \frac{1}{4}$. La fonction de Patterson a permis de situer l'atome de soufre et les atomes d'oxygène.

L'ambiguïté relative aux positions des atomes de carbone a pu être levée grâce à une série différence appliquée à des facteurs de structure calculés pour les atomes Sn, S et O; en effet, l'atome d'étain seul, ne permet pas de calculer les phases des $F_{h,2h+1,l}$ à cause de sa position en $y = \frac{1}{4}$. Par ailleurs la série différence évite, en partie, les imprécisions consécutives au numéro atomique élevé de l'étain et à la terminaison rapide de la série, $\theta_{\text{max}} = 16,30^\circ$.

Les facteurs de diffusion atomique utilisés sont ceux de *International Tables for X-ray Crystallography* (1962).

L'affinement des coordonnées atomiques et des coefficients de température a été réalisé par la méthode des moindres carrés (matrice complète).

Les atomes d'hydrogène n'appartenant pas aux groupes méthyles apparaissent de façon significative sur la série différence. Dans le dernier cycle de l'affinement, ils ont été fixés à leur position théorique et affectés d'un facteur de température identique à celui de l'atome de carbone auquel ils sont liés. Les hydrogènes des méthyles n'ont pas pu être repérés.

En fin d'affinement, nous avons introduit un schéma de pondération de la forme:

et $\omega = 14 + 0,12|F_o|$ pour $|F_o| < 148$
 $\omega = -6,4|F_o| + 0,044|F_o|^2$ pour $|F_o| \geq 148$.

Dans ces conditions, la valeur finale du facteur résiduel *R*, égal à $\sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|$ est de 0,065.

Les facteurs de structure observés et calculés sont donnés dans le Tableau 1. Le Tableau 2 donne les valeurs des coordonnées des atomes et les facteurs d'agitation thermique obtenus à la fin de l'affinement. Les coefficients β_{ij} des facteurs d'agitation thermique anisotrope sont ceux de l'expression: $\exp [-(\beta_{11}h^2 + \beta_{22}k^2 + \beta_{33}l^2 + \beta_{12}hk + \beta_{13}hl + \beta_{23}kl)]$.

Tableau 1. Facteurs de structure observés et calculés

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>F_o</i>	<i>F_c</i>	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>F_o</i>	<i>F_c</i>	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>F_o</i>	<i>F_c</i>	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>F_o</i>	<i>F_c</i>
1	0	1	184,4	189,0	1	1	0	82,2	81,4	1	1	1	211,2	210,0					
1	0	2	118,0	118,0	1	1	1	108,0	108,0	1	1	2	122,0	122,0					
1	0	3	100,0	100,0	1	1	2	100,0	100,0	1	1	3	90,0	90,0					
1	0	4	100,0	100,0	1	1	3	100,0	100,0	1	1	4	100,0	100,0					
1	0	5	100,0	100,0	1	1	4	100,0	100,0	1	1	5	100,0	100,0					
1	0	6	100,0	100,0	1	1	5	100,0	100,0	1	1	6	100,0	100,0					
1	0	7	100,0	100,0	1	1	6	100,0	100,0	1	1	7	100,0	100,0					
1	0	8	100,0	100,0	1	1	7	100,0	100,0	1	1	8	100,0	100,0					
1	0	9	100,0	100,0	1	1	8	100,0	100,0	1	1	9	100,0	100,0					
1	0	10	100,0	100,0	1	1	9	100,0	100,0	1	1	10	100,0	100,0					
1	0	11	100,0	100,0	1	1	10	100,0	100,0	1	1	11	100,0	100,0					
1	0	12	100,0	100,0	1	1	11	100,0	100,0	1	1	12	100,0	100,0					
1	0	13	100,0	100,0	1	1	12	100,0	100,0	1	1	13	100,0	100,0					
1	0	14	100,0	100,0	1	1	13	100,0	100,0	1	1	14	100,0	100,0					
1	0	15	100,0	100,0	1	1	14	100,0	100,0	1	1	15	100,0	100,0					
1	0	16	100,0	100,0	1	1	15	100,0	100,0	1	1	16	100,0	100,0					
1	0	17	100,0	100,0	1	1	16	100,0	100,0	1	1	17	100,0	100,0					
1	0	18	100,0	100,0	1	1	17	100,0	100,0	1	1	18	100,0	100,0					
1	0	19	100,0	100,0	1	1	18	100,0	100,0	1	1	19	100,0	100,0					
1	0	20	100,0	100,0	1	1	19	100,0	100,0	1	1	20	100,0	100,0					
1	0	21	100,0	100,0	1	1	20	100,0	100,0	1	1	21	100,0	100,0					
1	0	22	100,0	100,0	1	1	21	100,0	100,0	1	1	22	100,0	100,0					
1	0	23	100,0	100,0	1	1	22	100,0	100,0	1	1	23	100,0	100,0					
1	0	24	100,0	100,0	1	1	23	100,0	100,0	1	1	24	100,0	100,0					
1	0	25	100,0	100,0	1	1	24	100,0	100,0	1	1	25	100,0	100,0					
1	0	26	100,0	100,0	1	1	25	100,0	100,0	1	1	26	100,0	100,0					
1	0	27	100,0	100,0	1	1	26	100,0	100,0	1	1	27	100,0	100,0					
1	0	28	100,0	100,0	1	1	27	100,0	100,0	1	1	28	100,0	100,0					
1	0	29	100,0	100,0	1	1	28	100,0	100,0	1	1	29	100,0	100,0					
1	0	30	100,0	100,0	1	1	29	100,0	100,0	1	1	30	100,0	100,0					
1	0	31	100,0	100,0	1	1	30	100,0	100,0	1	1	31	100,0	100,0					
1	0	32	100,0	100,0	1	1	31	100,0	100,0	1	1	32	100,0	100,0					
1	0	33	100,0	100,0	1	1	32	100,0	100,0	1	1	33	100,0	100,0					
1	0	34	100,0	100,0	1	1	33	100,0	100,0	1	1	34	100,0	100,0					
1	0	35	100,0	100,0	1	1	34	100,0	100,0	1	1	35	100,0	100,0					
1	0	36	100,0	100,0	1	1	35	100,0	100,0	1	1	36	100,0	100,0					
1	0	37	100,0	100,0	1	1	36	100,0	100,0	1	1	37	100,0	100,0					
1	0	38	100,0	100,0	1	1	37	100,0	100,0	1	1	38	100,0	100,0					
1	0	39	100,0	100,0	1	1	38	100,0	100,0	1	1	39	100,0	100,0					
1	0	40	100,0	100,0	1	1	39	100,0	100,0	1	1	40	100,0	100,0					
1	0	41	100,0	100,0	1	1	40	100,0	100,0	1	1	41	100,0	100,0					
1	0	42	100,0	100,0	1	1	41	100,0	100,0	1	1	42	100,0	100,0					
1	0	43	100,0	100,0	1	1	42	100,0	100,0	1	1	43	100,0	100,0					
1	0	44	100,0	100,0	1	1	43	100,0	100,0	1	1	44	100,0	100,0					
1	0	45	100,0	100,0	1	1	44	100,0	100,0	1	1	45	100,0	100,0					
1	0	46	100,0	100,0	1	1	45	100,0	100,0	1	1	46	100,0	100,0					
1	0	47	100,0	100,0	1	1	46	100,0	100,0	1	1	47	100,0	100,0					
1	0	48	100,0	100,0	1	1	47	100,0	100,0	1	1	48	100,0	100,0					
1	0	49	100,0	100,0	1	1	48	100,0	100,0	1	1	49	100,0	100,0					
1	0	50	100,0	100,0	1	1	49	100,0	100,0	1	1	50	100,0	100,0					
1	0	51	100,0	100,0	1	1	50	100,0	100,0	1	1	51	100,0	100,0					
1	0	52	100,0	100,0	1	1	51	100,0	100,0	1	1	52	100,0	100,0					
1	0	53	100,0	100,0	1	1	52	100,0	100,0	1	1	53	100,0	100,0					
1	0	54	100,0	100,0	1	1	53	100,0	100,0	1	1	54	100,0	100,0					
1	0	55	100,0	100,0	1	1	54	100,0	100,0	1	1	55	100,0	100,0					
1	0	56	100,0	100,0	1	1	55	100,0	100,0	1	1	56	100,0	100,0					
1	0	57	100,0	100,0	1	1	56	100,0	100,0	1	1	57	100,0	100,0					
1	0	58	100,0	100,0	1	1	57	100,0	100,0	1	1	58	100,0	100,0					
1	0	59	100,0	100,0	1	1	58	100,0	100,0	1	1	59	100,0	100,0					
1	0	60	100,0	100,0	1	1	59	100,0	100,0	1	1	60	100,0	100,0					
1	0	61	100,0	100,0	1	1	60	100,0	100,0	1	1	61	100,0	100,0					
1	0	62	100,0	100,0	1	1	61	100,0	100,0	1	1	62	100,0	100,0					
1	0	63	100,0	100,0	1	1	62	100,0	100,0	1	1	63	100,0	100,0					
1	0	64	100,0	100,0	1	1	63	100,0	100,0	1	1	64	100,0	100,0					
1	0	65	100,0	100,0	1	1	64	100,0	100,0	1	1	65	100,0	100,0					
1	0	66	100,0	100,0	1	1	65	100,0	100,0	1	1	66	100,0	100,0					
1	0	67	100,0	100,0	1	1	66	100,0	100,0	1	1	67	100,0	100,0					
1	0	68	100,0	100,0	1	1	67	100,0	100,0	1	1	68	100,0	100,0					
1	0	69	100,0	100,0	1	1	68	100,0	100,0	1	1	69	100,0	100,0					
1	0	70	100,0	100,0	1	1	69	100,0	100,0	1	1	70	100,0	100,0					
1	0	71	100,0	100,0	1	1	70	100,0	100,0	1	1	71	100,0	100,0					
1	0	72	100,0	100,0	1	1	71	100,0	100,0	1	1	72	100,0	100,0					
1	0	73	100,0	100,0	1	1	72	100,0	100,0	1	1	73	100,0	100,0					
1	0	74	100,0	100,0	1	1	73	100,0	100,0	1	1	74	100,0	100,0					
1	0	75	100,0	100,0	1	1	74	100,0	100,0	1	1	75	100,0	100,0					
1	0	76	100,0	100,0	1	1	75	100,0	100,0	1	1	76	100,0	100,0					
1	0	77	100,0	100,0	1	1	76	100,0	100,0	1	1	77	100,0	100,0					
1	0	78	100,0	100,0	1	1	77	100,0	100,0	1	1	78	100,0	100,0					
1	0	79	100,0	100,0	1	1	78	100,0	100,0	1	1	79	100,0	100,0					
1	0	80	100,0	100,0	1	1	79	100,0	100,0	1	1	80	100,0	100,0					
1	0	81	100,0	100,0	1	1	80	100,0	100,0	1	1	81	100,0	100,0					
1	0	82	100,0	100,0	1	1	81	100,0	100,0	1	1	82	100,0	100,0					
1	0	83	100,0	100,0	1	1	82	100,0	100,0	1	1	83	100,0	100,0					
1	0	84	100,0	100,0	1	1	83	100,0	100,0	1	1	84	100,0	100,0					
1	0	85	100,0	100,0	1	1	84	100,0	100,0	1	1	85	100,0	100,0					

Description et discussion de la structure

Nos résultats mettent nettement en évidence l'agencement des molécules sous forme de polymère. Les chaînes sont réalisées par les ponts oxygènes qui relient les atomes d'étain et de soufre, elles s'allongent suivant la direction de l'axe b (Fig. 1).

Les distances interatomiques et les angles de valence sont détaillés dans le Tableau 3.

Tableau 3. Distances interatomiques et angles de valence

Distances		Angles	
Sn—O(1)	2,306 (10) Å	O(1)—Sn—C(4)	90,39 (47)°
Sn—O(2)	2,296 (10)	O(1)—Sn—C(5)	86,54 (44)
Sn—C(4)	2,171 (15)	O(1)—Sn—C(6)	92,65 (50)
Sn—C(5)	2,156 (14)	O(1)—Sn—O(2)	178,68 (35)
Sn—C(6)	2,157 (16)	O(2)—Sn—C(4)	88,32 (48)
S—O(1)	1,535 (11)	O(2)—Sn—C(5)	94,34 (45)
S—O(2)	1,514 (11)	O(2)—Sn—C(6)	87,76 (50)
S—C(1)	1,863 (21)	C(4)—Sn—C(5)	120,35 (55)
C(1)—C(2)	1,439 (27)	C(5)—Sn—C(6)	119,66 (57)
C(2)—C(3)	1,160 (28)	C(6)—Sn—C(4)	120,00 (59)
		Sn—O(1)—S	125,30 (57)
		Sn—O(2)—S	134,36 (69)
		O(1)—S—O(2)	107,83 (58)
		O(1)—S—C(1)	98,82 (74)
		O(2)—S—C(1)	100,92 (75)
		S—C(1)—C(2)	114,44 (140)
		C(1)—C(2)—C(3)	179,17 (202)

Dans cette structure l'atome d'étain est pentacoordonné, les deux distances Sn—O de 2,306 (10) et 2,296 (10) Å, sont plus longues que celle de 2,15 (5) Å trouvée par Hall & Britton (1972) où l'atome d'étain est également pentacoordonné mais avec un atome d'oxygène, un atome d'azote et trois groupes méthyles. Ces valeurs sont plus élevées que la distance covalente normale de 2,05 Å (Sutton, 1965).

Les équations des plans moyens (Tableau 4) calculés par la méthode de Blow (1960) précisent la conformation spatiale de la molécule. Celle-ci est constituée de deux plans P_1 et P_2 faisant un angle dièdre de 61°. P_1 est perpendiculaire à l'axe O(1)—Sn—O(2) et les atomes C(4) et C(5) sont sensiblement à égale distance de P_2 .

Les angles de torsion sont représentés sur la Fig. 2.

La Fig. 3 montre la disposition des polymères dans la maille cristalline. Les atomes d'étain sont approximativement situés sur les axes hélicoïdaux de la maille.

Le Tableau 5 contient les distances intermoléculaires inférieures à 4 Å. Trois d'entre-elles apparaissent nettement inférieures à la somme des rayons de van der Waals des atomes correspondants, ce sont les suivantes:

Tableau 4 (suite)

(b) Distances aux plans moyens

	P_1	P_2
Sn	0,004 (1) Å	-0,003 (1) Å
C(4)	-0,001 (15)	-1,784 (15)
C(5)	-0,001 (14)	1,792 (14)
C(6)	-0,001 (16)	-0,019 (16)
O(1)	-2,297 (10)	
O(2)	2,294 (10)	
S		0,052 (4)
C(1)		
C(2)		-0,030 (18)
C(3)		

(1) 3,625 Å entre C(4) de la molécule de base (x, y, z) et C(3) de la molécule située à $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$.

(2) 3,711 Å entre C(6) de la molécule de base (x, y, z) et C(4) de la molécule située à $(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z)$.

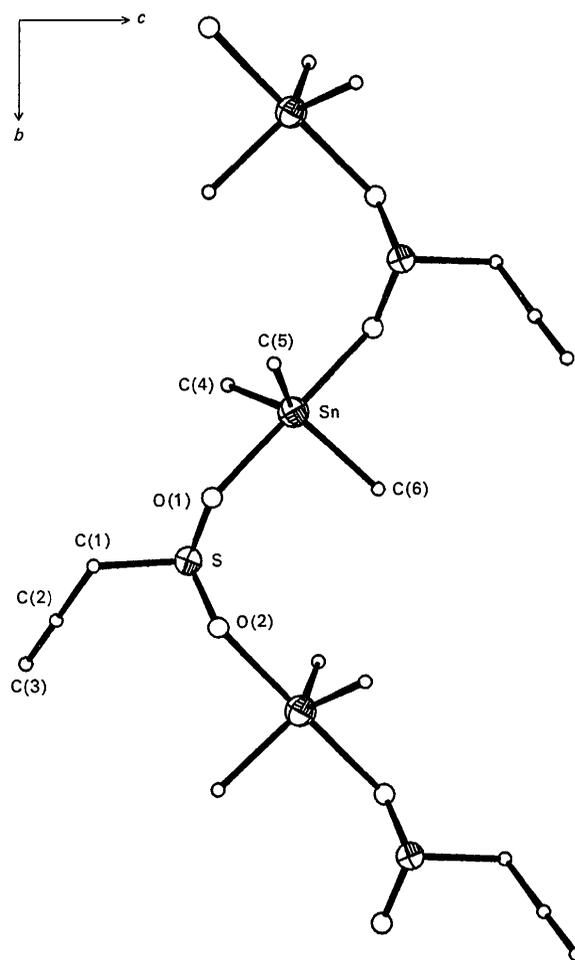
Fig. 1. Le polymère $C_6H_{12}SnSO_2$ vu suivant l'axe a .

Tableau 4. Plans moyens

(a) Les équations sont de la forme $lx + my + nz - p = 0$. Système d'axes orthonormés avec x parallèle à a et z parallèle à c .

Plan	Atomes	l	m	n	p
1	Sn, C(4), C(5), C(6)	0,2922	-0,7266	-0,6218	-2,8612
2	Sn, C(6), S, C(2)	-0,9876	0,1143	-0,1077	-1,9654

(3) 3,781 Å entre C(5) de la molécule de base (x, y, z) et C(4) de la molécule située à $(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} + z)$.

Tableau 5. Distances intermoléculaires inférieures à 4 Å, entre des atomes de la molécule (x, y, z) et ceux correspondant aux transformations de coordonnées indiquées

La dernière colonne donne la somme des rayons de van der Waals correspondants.

	d (Å)	$R_1 + R_2$
C(4)···C(3 ⁱ)	3,625 (26)	4,0
C(6)···C(4 ⁱⁱ)	3,711 (22)	4,0
C(5)···C(4 ⁱⁱ)	3,781 (20)	4,0
C(1)···O(1 ⁱ)	3,798 (22)	3,4
C(5)···C(1 ⁱⁱ)	3,825 (24)	4,0
C(5)···C(2 ⁱⁱ)	3,853 (24)	4,0

Transformations de coordonnées:

i	$-x$	$-y$	$-z$
ii	$\frac{1}{2} + x$	$\frac{1}{2} - y$	$\frac{1}{2} + z$

Les calculs ont été effectués au Centre de Calcul du C.N.R.S. (C.I.R.C.E.) à Orsay, sur les ordinateurs IBM 360/75 et CDC 3600, à l'aide des programmes suivants:

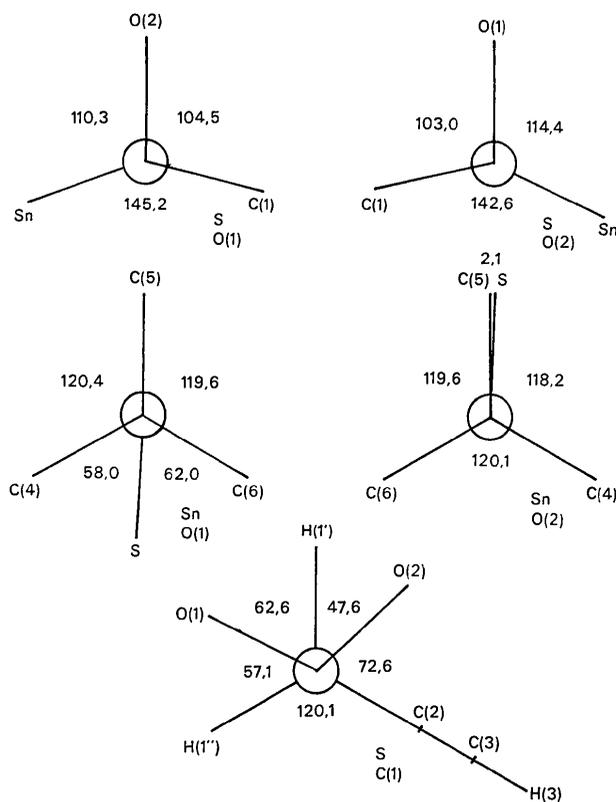


Fig. 2. Angles de torsion.

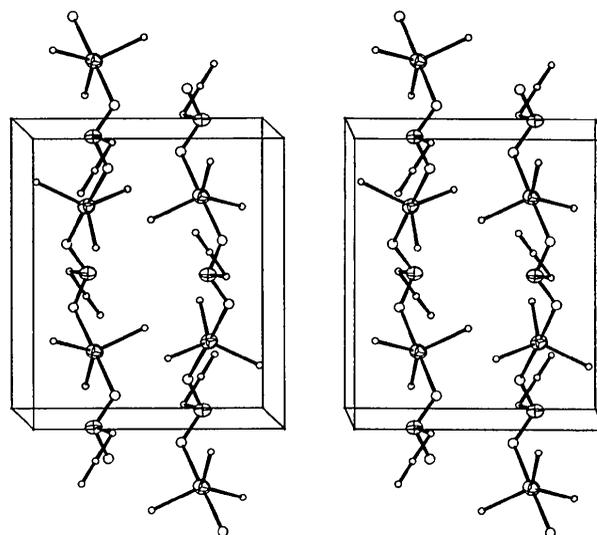


Fig. 3. Maille cristalline de $C_6H_{12}SnSO_2$, projection stéréoscopique vue suivant c , a étant l'axe horizontal et b l'axe vertical.

- Affinement: une modification de *ORFLS* de Busing, Martin & Levy (1962).
- Distances, angles, plans moyens: des programmes de la série NRC de Ahmed, Hall, Pippy & Huber (1966).
- Tracés du polymère: programme *ORTEP* de Johnson (1965).

Nous remercions Minh Lequan de nous avoir proposé cette étude et fourni les cristaux.

Références

- AHMED, F. R., HALL, S. R., PIPPY, M. E. & HUBER, C. P. (1966). NRC Crystallographic Programs. *World List of Crystallographic Computer Programs*, 2nd Ed., p. 52. Utrecht: Oosthoek.
- BLOW, D. M. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 168.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1964). *ORFLS*. Report ORNL-TM-305, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- FONG, C. W. & KITCHING, W. (1970). *J. Organometal. Chem.* **22**, 95-106.
- HALL, J. B. & BRITTON, D. (1972). *Acta Cryst.* **B28**, 2133-2136.
- HAMILTON, W. C. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 609-610.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-TM-3794, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- SUTTON, L. E. (1965). *Interatomic Distances and Configuration in Molecules and Ions*, Supplement. London: The Chemical Society.