

they range from 2.270 (4) to 2.358 (6) Å if we exclude the long Cu(1)–Cl(2) bond of 2.740 (4) Å. This observation is in agreement with the different hybridization states of the copper atoms in the two structures. As far as the long Cu–Cl bond is concerned a comparison with the analogous iodide shows that the three-coordinate iodine atom is nearly equidistant from its three copper atoms, the Cu–I distances varying from 2.721 (6) to 2.784 (5) Å. On the contrary Cl(2) is involved in two short and one long Cu–Cl bond, the difference amounting to 0.4 Å. This results in a strengthening of the Cu(1)–Cu(2) distance [3.108 (7) Å for I and 2.908 (4) Å for Cl] and, correspondingly, in a lengthening of Cu(1)–Cu(2') [2.682 (7) Å for I and 2.915 (3) Å for Cl]. It is not clear whether these differences are due to steric and/or electronic factors.

No significant differences are found in the Cu–P bond lengths of all these complexes. Bond lengths and angles are given in Table 2. The structure found in the solid state is in agreement with molecular weight measurements (Marsich, Camus & Cebulec, 1972) in CHCl₃ and C₂H₄Cl₂

solutions and conductivity measurements in C₂H₄Cl₂. The values of the molecular weight suggest that a dimeric species is present in solution whereas the non-conducting solution in C₂H₄Cl₂ indicates that no dissociation into ions occurs. These results, as already suggested (Marsich, Nardin & Randaccio, 1973), indicate that the compounds have the same structure in the solid state and in solutions of slightly polar solvents.

We acknowledge financial assistance from the C.N.R., Roma (Italy), and thank Dr N. Marsich for supplying crystals.

References

- CHURCHILL, M. R. & KARLA, K. L. (1973). *J. Amer. Chem. Soc.* **95**, 5772–5773.
 MARSICH, N., CAMUS, A. & CEBULEC, E. (1972). *J. Inorg. Nucl. Chem.* **34**, 933–946.
 MARSICH, N., NARDIN, G. & RANDACCIO, L. (1973). *J. Amer. Chem. Soc.* **95**, 4053–4054.

Acta Cryst. (1974). **B30**, 1379

Données cristallographiques sur la phase ordonnée du *p*-terphényle à –160°C. Par JEAN-LOUIS BAUDOUR et GUY-PAUL CHARBONNEAU, Département de Physique Cristalline et Chimie Structurale, E.R.A. au CNRS n° 15, Université de Rennes, avenue du Général Leclerc, 35031-Rennes Cedex, France

(Reçu le 20 décembre, 1973 accepté le 15 janvier 1974)

Crystal data are given for the ordered phase of *p*-terphenyl at –160°C: $a = 16.01$ (3); $b = 11.09$ (3), $c = 13.53$ (3) Å, $\beta = 92.0$ (2)°, $Z = 8$.

Les calculs d'énergie potentielle effectués par Rietveld, Maslen & Clews (1970) montrent que les mouvements de libration des cycles benzéniques du *p*-terphényle, autour de l'axe long de la molécule, se font dans un puits double de potentiel. La configuration quasi plane obtenue par diffraction X (Dejace, 1969) n'étant alors qu'une moyenne, ne correspond pas à un équilibre stable. A basse température les spectres infrarouge (Wincke, Hadni & Gerbaux, 1970) ainsi que les spectres Raman (Marqueton & Decamps, 1970) montrent plus de bandes que n'en laisse prévoir le groupe spatial centrosymétrique $P2_1/a$. Le spectre de diffusion inélastique de neutrons réalisé à 130°K par Reynolds & White (1972) renforce l'hypothèse d'une légère perturbation à basse température de la symétrie du groupe spatial. Enfin, une comparaison des tenseurs de libration du *p*-terphényle et de la forme dimère de l'isocyanate de phényle qui sont isomorphes (Baudour, Delugeard & Sanquer, 1974) permet aussi de conclure à une configuration d'équilibre non plane. On pouvait espérer, les molécules se stabilisant dans cette configuration d'équilibre à –160°C, observer les modifications correspondantes par diffraction X.

Des clichés d'oscillation et de Weissenberg effectués à –160°C avec l'appareillage Renaud-Fourme (Renaud & Fourme, 1967) montrent l'existence d'une surstructure monoclinique ayant les paramètres suivants:

$a = 16,01$ (3), $b = 11,09$ (3), $c = 13,53$ (3) Å, $\beta = 92,0(2)^\circ$;
 $Z = 8$ molécules par maille.

Par rapport à la maille primitive les paramètres a et b sont doublés, c est inchangé, à la contraction thermique près.

Les indices des réflexions satisfont à la condition: $h + k = 2n$, ce qui indique que la maille est centrée sur la face (001).

Il n'est pas possible, à ce stade, de choisir avec certitude le groupe d'espace. Les intensités des réflexions de surstructure sont très faibles, car probablement à –160°C, l'ordre n'est pas totalement réalisé, et les changements dans la structure cristalline sont peu importants.

Des mesures à trois dimensions sont en cours.

Références

- BAUDOUR, J. L., DELUGEARD, Y. & SANQUER, M. (1974). *Acta Cryst.* **B30**, 691–696.
 DEJACE, J. (1969). *Bull. Soc. Fr. Minér. Crist.* **92**, 141–159.
 MARQUETON, Y. & DECAMPS, E. A. (1970). *C.R. Acad. Sci. Paris*, **271**, 644–647.
 RENAUD, M. & FOURME, R. (1967). *Acta Cryst.* **22**, 695–698.
 REYNOLDS, P. A. & WHITE, J. W. (1972). *J. Chem. Soc. Faraday*, **8**, 1434–1438.
 RIETVELD, H. M., MASLEN, E. N. & CLEWS, C. J. B. (1970). *Acta Cryst.* **B26**, 693–706.
 WINCKE, B., HADNI, A. & GERBAUX, X. (1970). *J. Phys. Radium*, **31**, 893–898.