

and O(3) of the molecule at x, y, z are linked to O(2¹) and H(3¹) respectively of the molecule at $x, y-1, z-1$. These bonds occur as a double bridging linkage in the centre of the yz plane and approximately parallel to the short diagonal of the bc face.

There are thus only two crystallographically distinct hydrogen bonds, N(17)–H(17)···O(6) and N(3)–H(3)···O(2¹). However, each molecule has associated with it a total of eight hydrogen bonds which emanate as four centrosymmetric pairs.

We thank the South African CSIR for the diffractometer data collection. We further thank the CSIR and the University of Cape Town for their respective awards of research grants.

References

- CAIRA, M., FAZAKERLEY, G., LINDER, P. & NASSIMBENI, L. (1973). *Acta Cryst.* B29, 2898–2904.
 CRAVEN, B. & VIZZINI, E. (1969). *Acta Cryst.* B25, 1993–2009.
 CROMER, D. T. & MANN, J. (1968). *Acta Cryst.* A24, 321–324.
 FAZAKERLEY, G., LINDER, P., NASSIMBENI, L. & RODGERS, A. (1973). *Cryst. Struct. Commun.* 2, 647–653.
 FAZAKERLEY, G., LINDER, P., NASSIMBENI, L. & RODGERS, A. (1974a). *Inorg. Chim. Acta*, 9, 193–201.
 FAZAKERLEY, G., LINDER, P., NASSIMBENI, L. & RODGERS, A. (1974b). *Cryst. Struct. Commun.* In the press.

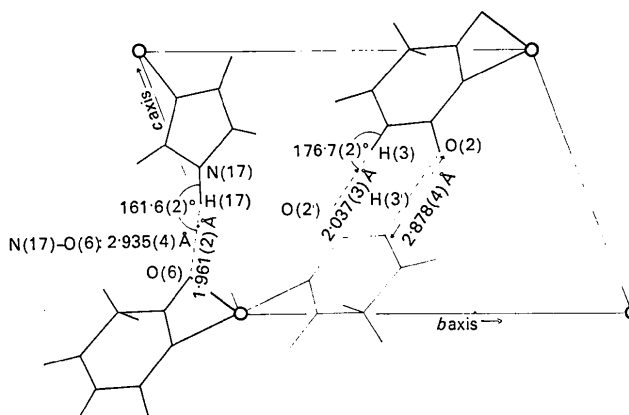


Fig. 5. The geometry of the hydrogen-bond interactions.

- FREEMAN, H., GUS, H. & SINCLAIR, R. (1968). *Chem. Commun.* pp. 485–487.
 LUNDBERG, B. (1966). *Acta Cryst.* 21, 901–909.
 MIGHELL, A., REIMANN, C. & MAUER, F. (1969). *Acta Cryst.* B25, 60–66.
 NASSIMBENI, L. & RODGERS, A. (1974). *Acta Cryst.* B30, 1953–1961.
 WANG, B. C. & CRAVEN, B. M. (1971). *Chem. Commun.* pp. 290–291.
 X-RAY System (1972). Version of June 1972. Technical Report TR-192 of the Computer Science Centre, Univ. of Maryland.

Acta Cryst. (1974). B30, 2602

Structure du Sulfate d'Ammonium et de Glycinium $NH_4NH_3CH_2COOHSO_4$

PAR SERGE VILMINOT, ETIENNE PHILIPPOT ET LOUIS COT

Laboratoire de Chimie Minérale C, Chimie des Matériaux ERA 314, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, Place Eugène Bataillon, 34060 Montpellier Cedex, France

(Reçu le 4 juin 1974, accepté le 18 juin 1974)

The crystal structure of ammonium glycine sulphate (NGS) has been solved from three-dimensional data collected on a Weissenberg camera with $Cu K\alpha$ radiation. The crystal of NGS is monoclinic, space group $P2_1/c$ with $a = 8.262$ (7), $b = 10.073$ (8), $c = 8.632$ (8) Å, $\beta = 92.66$ (5)° and $Z = 4$. The structure has been refined to give an R index of 0.079 for 922 independent reflexions. The glycine molecule is a monoprotonated ion. Thus the chemical formula should be written $NH_4^+(NH_3CH_2COOH)^+SO_4^{2-}$. The glycine ion is not planar.

Introduction

Il semble que la présence de très courtes liaisons hydrogène O–H···O (ou O–H···F), soit entre deux groupements glycine, soit entre un groupement glycine et un atome d'oxygène (ou de fluor) de l'anion, joue un rôle important dans le comportement ferroélectrique des composés de glycine, en particulier pour le sulfate et

fluoroberyllate de triglycine et le nitrate de diglycine (Sato, 1968; Warkusz & Łukaszewicz, 1973).

Nous avons préparé de nouveaux composés contenant un seul groupement glycine: il s'agit des sulfates et fluoroberyllates de glycine et d'ammonium, de glycine et de potassium (Vilminot & Cot, 1973).

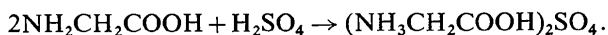
L'objet de cette publication est la présentation de la structure à 22°C de l'un d'entre eux: le sulfate double

d'ammonium et de glycinium, NH₄NH₃CH₂COOH SO₄ (nommé par la suite NGS).

Les corrections d'absorption ont été calculées à la fin de l'affinement isotrope de la structure.

Partie expérimentale

Les cristaux de NGS sont obtenus par évaporation lente d'une solution de sulfate d'ammonium et de sulfate de diglycine. Ce dernier sel, non isolé à l'état solide, est obtenu par action de l'acide sulfurique dilué sur la glycine selon la réaction:



Les monocristaux obtenus sont transparents et ont la forme de parallélépipèdes présentant de nombreuses troncutures. NGS cristallise dans le système monoclinique, groupe d'espace *P*2₁/*c* avec les paramètres suivants:

$$\begin{aligned} a &= 8,262 \pm 0,007 \text{ \AA} & \beta &= 92,66 \pm 0,05^\circ \\ b &= 10,073 \pm 0,008 & V &= 717,1 \pm 2 \text{ \AA}^3 \\ c &= 8,632 \pm 0,008 & Z &= 4 \\ \rho_x &= 1,760 \pm 0,005 \text{ g cm}^{-3} \end{aligned}$$

coefficient d'absorption linéaire $\mu = 39,67 \text{ cm}^{-1}$ pour Cu *K* α .

$$\text{Extinctions } \begin{cases} h0l & l = 2n + 1 \\ 0k0 & k = 2n + 1. \end{cases}$$

L'étude structurale a été entreprise sur un monocristal dont l'axe d'allongement est l'axe *c* et de volume $0,16 \times 10^{-2} \text{ mm}^3$.

Les réflexions *hk0-hk7* ont été enregistrées en utilisant la méthode des films multiples avec une chambre de Weissenberg fonctionnant en équi-inclinaison. Les intensités ont été estimées visuellement par comparaison avec une échelle d'intensité préparée à partir d'une réflexion convenable du cristal.

Les valeurs des cinq films d'une même strate ont été mises à l'échelle ensemble, avec un poids selon la formule:

$$W = \{1,0 + |(I - 12,0)/6,0|\}^{-1}.$$

Les 922 réflexions indépendantes observées ont alors été corrigées des facteurs de Lorentz et de polarisation.

Détermination et affinement de la structure

La structure a été résolue à l'aide d'une synthèse de Patterson tridimensionnelle qui nous a permis de localiser l'atome de soufre (atome lourd de la structure).

Sur cette base, une série d'affinements isotropes des atomes connus suivis de synthèse de Fourier tridimensionnelle nous a permis de localiser progressivement les atomes d'oxygène du groupement SO₄ puis l'ensemble des atomes restants: oxygène, azote, carbone.

A ce stade, les facteurs de structure sont corrigés des effets d'absorption. Trois cycles d'affinement tenant

Tableau 1. NH₄NH₃CH₂COOH SO₄ - Positions atomiques et coefficients d'agitation thermique

Expression du facteur de température

$$T = \exp [-2\pi^2(U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}hla^*c^* + 2U_{23}klb^*c^*)]$$

et $T = \exp \left[-2\pi^2 U \left(\frac{2 \sin \theta}{\lambda} \right)^2 \right]$.

Les écarts types sont indiqués entre parenthèses.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
S	0,1785 (2)	0,0310 (1)	0,2485 (2)
O(1)	0,0067 (6)	0,0320 (5)	0,2022 (7)
O(2)	0,2754 (6)	0,0813 (4)	0,1187 (6)
O(3)	0,7661 (5)	0,1059 (4)	0,7165 (6)
O(4)	0,2110 (6)	0,1165 (4)	0,3825 (6)
O(5)	0,6546 (6)	0,0946 (5)	0,0890 (7)
O(6)	0,6034 (6)	0,1064 (4)	0,3363 (6)
N(1)	0,4305 (8)	0,1631 (6)	0,6308 (8)
N(2)	0,9293 (8)	0,2498 (6)	0,4806 (9)
C(1)	0,3598 (9)	0,1093 (6)	0,7704 (10)
C(2)	0,6312 (7)	0,0410 (6)	0,2250 (8)
H(1)	0,392 (8)	0,135 (6)	0,549 (9)
H(2)	0,534 (12)	0,146 (9)	0,612 (12)
H(3)	0,417 (10)	0,252 (9)	0,107 (10)
H(4)	0,242 (12)	0,118 (9)	0,780 (10)
H(5)	0,411 (8)	0,142 (6)	0,870 (9)
H(6)	0,689 (7)	0,037 (6)	0,050 (8)
H(7)	0,877 (6)	0,201 (5)	0,548 (7)
H(8)	1,015 (13)	0,173 (12)	0,453 (13)
H(9)	0,987 (14)	0,324 (13)	0,514 (14)
H(10)	0,863 (13)	0,290 (10)	0,421 (13)

Tableau 1 (suite)

	<i>U</i> ₁₁	<i>U</i> ₂₂	<i>U</i> ₃₃	<i>U</i> ₁₂	<i>U</i> ₁₃	<i>U</i> ₂₃
S	0,0261 (7)	0,0246 (5)	0,0267 (11)	0,001 (1)	0,003 (1)	0,000 (1)
O(1)	0,035 (2)	0,054 (3)	0,056 (4)	0,010 (5)	0,002 (6)	-0,002 (6)
O(2)	0,047 (2)	0,007 (2)	0,037 (3)	-0,014 (3)	0,030 (4)	-0,001 (5)
O(3)	0,040 (2)	0,032 (2)	0,046 (4)	0,008 (4)	0,008 (5)	0,001 (4)
O(4)	0,040 (2)	0,043 (2)	0,036 (4)	0,001 (4)	-0,001 (6)	0,018 (4)
O(5)	0,038 (2)	0,030 (2)	0,049 (4)	0,003 (4)	0,012 (5)	0,005 (5)
O(6)	0,052 (3)	0,036 (2)	0,037 (3)	0,004 (5)	0,011 (5)	-0,004 (5)
N(1)	0,040 (3)	0,029 (3)	0,030 (5)	0,004 (4)	0,005 (7)	-0,006 (5)
N(2)	0,036 (3)	0,037 (3)	0,031 (4)	0,009 (4)	0,017 (5)	0,010 (5)
C(1)	0,050 (4)	0,031 (3)	0,039 (5)	0,010 (5)	-0,001 (5)	-0,014 (6)
C(2)	0,033 (3)	0,028 (3)	0,030 (5)	0,007 (4)	-0,000 (7)	0,002 (9)

Les facteurs de température isotropes des atomes d'hydrogène n'ont pas été affinés. Pour chacun d'eux *U*₁₁ = *U* = 0,020.

compte de l'agitation thermique isotrope des atomes et d'un facteur d'échelle par strate convergent vers une valeur de:

$$R = 0,102 \left(R = \frac{\sum |F_o - |F_c||}{\sum F_o} \right).$$

Une synthèse de différence de Fourier (avec des écarts maxima de $0,69 \text{ e } \text{\AA}^{-3}$) permet alors de localiser, avec une assez bonne précision, les atomes d'hydrogène du motif.

Un affinement final, tenant compte de l'agitation thermique anisotrope des atomes de soufre, oxygène, azote et carbone, et isotrope des atomes d'hydrogène conduit à une valeur de $R = 0,079$.*

Le Tableau 1 rassemble les coordonnées des atomes du motif avec leurs facteurs de température isotropes et anisotropes correspondants. En fin d'affinement, les facteurs de structure observés ont été pondérés suivant la formule proposée par Cruickshank (1965): $W = (a + F_o + cF_o^2 + dF_o^3)^{-1}$.

Une pondération homogène a été obtenue pour $a = 20,0$ et $c = 0,15$.

Les facteurs de diffusion atomique utilisés sont ceux calculés par Doyle & Turner (1968) pour les atomes 'lourds' et relevés sur *International Tables for X-ray Crystallography* (1965) pour les atomes d'hydrogène.

Description de la structure

Comme le montre la Fig. 1, la structure de NGS est formée de couches alternées d'ensembles $(\text{NH}_4\text{SO}_4)_n^-$ et $n(\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOH})^+$ parallèles au plan bc . A l'intérieur d'une couche $(\text{NH}_4\text{SO}_4)_n^-$, chaque ion ammonium est entouré par quatre proches voisins sulfate et réciproquement. Les tétraèdres SO_4^{2-} sont disposés de façon telle qu'ils forment des tunnels d'axe parallèle à l'axe c et dans lesquels sont situés les ions NH_4^+ . Des liaisons hydrogène simples $\text{N}-\text{H} \cdots \text{O}$ assurent la cohésion à l'intérieur de ces couches (voir Fig. 2).

Dans les couches de cations $(\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOH})^+$, l'ion glycinium est orienté de façon telle que l'axe de la liaison $\text{C}(1)-\text{C}(2)$ est sensiblement parallèle à la direction de l'axe b . Des liaisons hydrogène s'établissent entre les ions glycinium et les oxygènes des ions sulfates (voir Fig. 2).

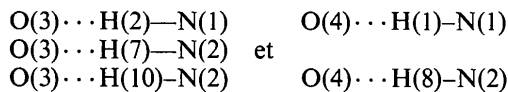
L'ion sulfate

Le tétraèdre sulfate est légèrement distordu avec une longueur moyenne de liaison de $1,472 \text{ \AA}$, en bon accord avec les données de la littérature (Tableau 2). La légère distorsion des tétraèdres SO_4^{2-} peut s'expliquer en considérant l'environnement des différents atomes d'oxygène:

– l'atome O(1) ne participe qu'à une liaison hydrogène avec l'ion ammonium: $\text{O}(1) \cdots \text{H}(9)-\text{N}(2)$

– l'atome O(2) établit deux liaisons hydrogène avec le groupe glycinium: $\text{O}(2) \cdots \text{H}(3)-\text{N}(1)$ et $\text{O}(2) \cdots \text{H}(6)-\text{O}(5)$

– les atomes O(3) et O(4) établissent des liaisons hydrogène à la fois avec l'ion glycinium et l'ion ammonium; trois liaisons pour l'atome O(3) et deux liaisons pour l'atome O(4):



Par ailleurs:

– pour les atomes O(1), O(3) et O(4) qui participent tous à des liaisons simples $\text{O} \cdots \text{H}-\text{N}$, la longueur de la liaison $\text{S}-\text{O}$ est d'autant plus grande que l'atome d'oxygène participe à plus de liaisons hydrogène:

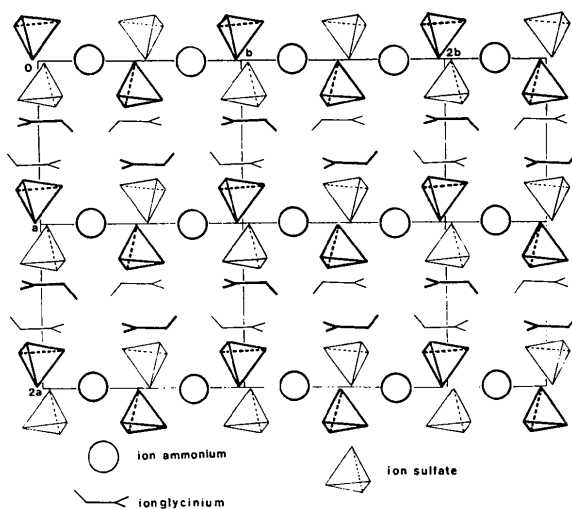


Fig. 1. Projection sur le plan ab .

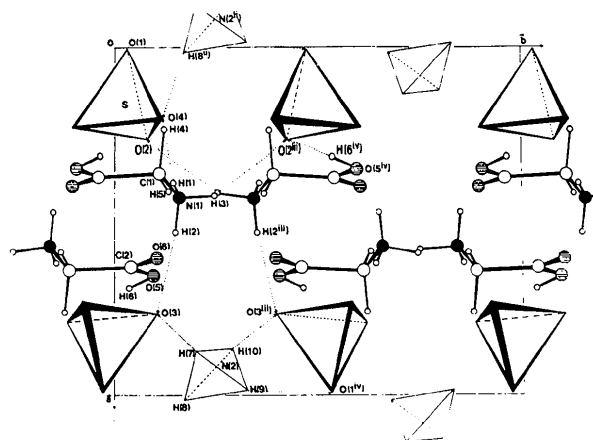


Fig. 2. Projection sur le plan ab . Mise en évidence des liaisons hydrogène.

* La liste des facteurs de structure a été déposée au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 30532: 7 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

S—O(1)=1,456 Å	1 liaison	O···H—N
S—O(4)=1,457 Å	2 liaisons	O···H—N
S—O(3)=1,481 Å	3 liaisons	O···H—N

 Tableau 2. $\text{NH}_4\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOHSO}_4$ — Distances et angles interatomiques

Ion sulfate

Distances (Å)	Angles (°)
S—O(1)=1,456 (5)	O(1)—S—O(2)=109,9 (3)
S—O(2)=1,495 (5)	O(1)—S—O(3)=110,5 (3)
S—O(3)=1,481 (5)	O(1)—S—O(4)=110,8 (3)
S—O(4)=1,457 (5)	O(2)—S—O(3)=107,3 (3)
S—O moyen=1,472	O(2)—S—O(4)=108,4 (3)
	O(3)—S—O(4)=110,1 (3)
	O—S—O moyen=109,5

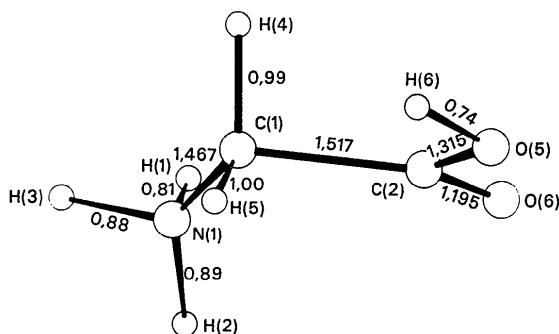
Ion ammonium

N(2)—H(7)=0,89 (6)	H(7)—N(2)—H(8)=95 (7)
N(2)—H(8)=1,09 (11)	H(7)—N(2)—H(9)=120 (8)
N(2)—H(9)=0,93 (12)	H(7)—N(2)—H(10)=110 (8)
N(2)—H(10)=0,84 (11)	H(8)—N(2)—H(9)=108 (10)
N(2)—H moyen=0,92	H(8)—N(2)—H(10)=129 (10)
	H(9)—N(2)—H(10)=97 (11)
	H—N—H moyen=110,0

Ion glycinium

N(1)—H(1)=0,81 (8)	H(1)—N(1)—H(2)=97 (8)
N(1)—H(2)=0,89 (10)	H(1)—N(1)—H(3)=96 (7)
N(1)—H(3)=0,88 (9)	H(2)—N(1)—H(3)=105 (8)
	C(1)—N(1)—H(1)=115 (5)
	C(1)—N(1)—H(2)=120 (6)
	C(1)—N(1)—H(3)=120 (6)
	Angle moyen=109,0
C(1)—H(4)=0,99 (10)	N(1)—C(1)—H(4)=118 (5)
C(1)—H(5)=1,00 (8)	N(1)—C(1)—H(5)=114 (4)
N(1)—C(1)=1,467 (11)	N(1)—C(1)—C(2)=111,7 (6)
C(1)—C(2)=1,517 (9)	H(4)—C(1)—H(5)=106 (7)
	H(4)—C(1)—C(2)=98 (5)
	H(5)—C(1)—C(2)=107 (4)
	Angle moyen=109
C(2)—O(5)=1,315 (9)	C(1)—C(2)—O(5)=115,1 (6)
C(2)—O(6)=1,195 (8)	C(1)—C(2)—O(6)=122,7 (7)
O(5)—H(6)=0,74 (7)	O(5)—C(2)—O(6)=122,3 (6)
	Angle moyen=120,0

— pour l'atome O(2), l'allongement de la liaison S—O est vraisemblablement dû à la présence d'une liaison de type $\text{O} \cdots \text{H}-\text{O} [\text{O}(2) \cdots \text{H}(6)-\text{O}(5)]$ plus forte qu'une liaison $\text{O} \cdots \text{H}-\text{N} [\text{O}(4) \cdots \text{H}(1)-\text{N}(1)]$.


 Fig. 3. Ion glycinium: $\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOH}^+$.

Alors que l'environnement de l'oxygène O(3) est approximativement tétraédrique [atome S, deux atomes H(7) et H(10) de l'ion ammonium et un atome H(2) de l'ion glycinium], ceux de O(2) et O(4) sont triangulaires plans [un atome S et deux atomes H(3) et H(6) de l'ion glycinium, pour l'atome O(2); un atome S, un atome H(1) de l'ion glycinium et un atome H(8) de l'ion ammonium, pour l'atome O(4)].

L'oxygène O(1) ne fait intervenir qu'une seule liaison hydrogène avec l'atome H(9) et son environnement n'est cependant pas linéaire puisque l'angle $\text{S}-\text{O}(1) \cdots \text{H}(9)$ vaut 104° . Dans ce cas, il semble donc que l'atome d'oxygène conserve une hybridation proche de sp^3 .

L'ion ammonium

Le Tableau 2 donne les distances et les angles de liaisons rencontrés dans l'ion ammonium. Chacun des atomes d'hydrogène participe à une liaison hydrogène simple avec un atome d'oxygène de quatre tétraèdres SO_4 différents entourant l'ammonium.

Une déformation assez importante de la symétrie tétraédrique apparaît alors pour l'ion NH_4^+ .

L'ion glycinium

Les longueurs et les angles de liaisons sont rassemblés dans le Tableau 2.

Les longueurs C—N et C—C, respectivement de 1,467 Å et 1,517 Å, sont en bon accord avec les résultats de la bibliographie (Itoh & Mitsui, 1973; Kay & Kleinberg, 1973) et avec les valeurs relevées pour des liaisons simples C—N et C—C (1,471 Å et 1,54 Å respectivement).

De même, les angles de liaisons autour des atomes N(1) et C(1) [en particulier $\text{N}(1)-\text{C}(1)-\text{C}(2)=111,7^\circ$] ne diffèrent pas beaucoup de l'angle tétraédrique.

Il apparaît donc que les atomes N(1) et C(1) sont bien en hybridation sp^3 .

Les distances C—O du groupe carboxylique [$\text{C}(2)-\text{O}(5)=1,315$ Å et $\text{C}(2)-\text{O}(6)=1,195$ Å], conduisent à penser qu'un atome d'hydrogène est attaché à l'oxygène O(5), conduisant à l'existence dans NGS de l'ion glycinium ($\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOH}^+$) qui est représenté sur la Fig. 3. L'équation du plan contenant les deux atomes de carbone et les deux atomes d'oxygène est:

$$0,9705x - 0,055y + 0,2344z - 3,1073 = 0$$

où x , y et z sont les coordonnées atomiques.

 Tableau 3. $\text{NH}_4\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOHSO}_4$ — Distances des atomes non hydrogénés de la molécule glycine au plan moyen contenant le groupe C—CO₂

Atomes	Distances
N(1)	0,370 Å
C(1)	0,001
C(2)	0,003
O(5)	0,001
O(6)	0,001

Tableau 4. $\text{NH}_4\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOHSO}_4$: *Liaisons hydrogène*Les positions équivalentes à la position générale x, y, z sont définies par:

	i	1-x	-y	1-z	
	ii	x-1	y	z	
	iii	x	$\frac{1}{2}-y$	$\frac{1}{2}+z$	
	iv	1-x	$\frac{1}{2}+y$	$\frac{1}{2}-z$	
X-H...Y	X-H (Å)	H...Y (Å)	X...Y (Å)	X-H...Y (°)	
N(1)—H(1)...O(4)	0,81 (8)	2,04 (7)	2,782 (9)	153 (6)	
N(1)—H(2)...O(3)	0,89 (10)	2,12 (10)	2,894 (8)	144 (9)	
N(1)—H(3)...O(2 ⁱⁱⁱ)	0,88 (9)	2,08 (9)	2,875 (8)	148 (8)	
O(5 ^{iv})—H(6 ^{iv})...O(2 ⁱⁱⁱ)	0,74 (7)	1,92 (7)	2,606 (7)	156 (8)	
N(2)—H(7)...O(3)	0,89 (6)	2,00 (6)	2,884 (9)	173 (5)	
N(2 ⁱⁱ)—H(8 ⁱⁱ)...O(4)	1,09 (11)	1,84 (11)	2,850 (8)	152 (9)	
N(2)—H(9)...O(1 ^{iv})	0,93 (13)	2,18 (13)	2,964 (9)	142 (10)	
N(2)—H(10)...O(3 ⁱⁱⁱ)	0,84 (11)	2,17 (11)	2,884 (9)	160 (10)	

H(4) et H(5) ne donnent pas de liaisons hydrogène.

Le Tableau 3 donne les écarts de l'atome d'azote au plan contenant les quatre autres atomes. Dans notre cas, la distance au plan moyen de l'atome d'azote est de 0,370 Å, longueur nettement supérieure aux écarts-types observés sur les longueurs de liaisons et indiquant alors que l'ion glycinium n'est pas plan. Le fait que la glycine soit plane ou non plane n'indique pas nécessairement l'existence de l'ion glycinium ($\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$)⁺ ou du zwitterion $\text{NH}_3^+\text{CH}_2\text{COO}^-$ comme le suggèrent Hoshino, Okaya & Pepinsky (1959). L'écart de l'atome d'azote au plan moyen formé par les deux carbones et les deux oxygènes semble dépendre du système des liaisons hydrogène et de l'environnement structural comme l'indiquaient Sato (1968), Warkusz & Łukaszewicz (1973) et non du caractère ionique de la molécule. En accord avec ces auteurs, des liaisons carboxyliques paraissent, par contre, caractéristiques de l'existence de l'une ou l'autre forme de la molécule glycine.

Le système de liaisons hydrogène

Le Tableau 4 donne la valeur des distances et des angles interatomiques des liaisons hydrogène existant dans cette structure. Il s'établit des liaisons hydrogènes simples entre les groupements NH_4 , puis NH_3 de l'ion glycinium d'une part, les oxygènes des tétraèdres sulfate d'autre part. Une seule liaison hydrogène O(5)—H(6)...O(2) entre le groupement carboxylique et un oxygène de groupe sulfate est de type moyennement

forte. Aucune liaison hydrogène n'intervient sur la partie CH_2 de l'ion glycinium.

Chaque fois que deux ou trois groupes glycine sont présents dans un même matériau (nitrate de diglycine, sulfate et fluorobéryllate de triglycine par exemple), deux ensembles glycine sont reliés entre eux par une liaison hydrogène forte; dans notre cas, les ions glycinium sont indépendants les uns des autres. L'étude structurale par diffraction neutronique permettra de mieux positionner les atomes d'hydrogène et d'approfondir la discussion sur le système de liaisons hydrogène.

Références

- CRUICKSHANK, D. W. J. (1965). *Computing Methods in Crystallography*, édité par J. S. ROLLETT, p. 114. New York: Pergamon Press.
- DOYLE, P. A. & TURNER, P. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 390-397.
- HOSHINO, S., OKAYA, Y. & PEPINSKY, R. (1959). *Phys. Rev.* **115**, 323.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1965). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
- ITO, K. & MITSUI, T. (1973). *Ferroelectrics*, **5**, 235-251.
- KAY, M. I. & KLEINBERG, R. (1973). *Ferroelectrics*, **5**, 45-52.
- SATO, S. (1968). *J. Phys. Soc. Japan*, **25**, 185.
- VILMINOT, S. & COT, L. (1973). *C. R. Acad. Sci. Paris, Sér. C*, **277**, 1355-1358.
- WARKUSZ, F. & ŁUKASZEWICZ, K. (1973). *Bull. Acad. Pol. Sci.* **21**, 275.