

(Schlueter & Jacobson, 1968), and a slightly larger Cl–P–Cl angle. The angles subtended at sulphur by pairs of bonds would seem to depend on the electron density in those bonds. Thus, for example, the O(1)–S(1)–N(1) and O(2)–S(2)–N(3) angles are equal within experimental error and are significantly larger than the O(1)–S(1)–N(2) and O(2)–S(2)–N(2) angles, reflecting the greater double-bond character of the S(1)–N(1) and S(2)–N(3) compared with the S–N(2) bonds.

Molecular arrangement

The molecular packing projected along **b** is shown in Fig. 3. The way in which the molecules are arranged parallel to **c** is identical with the arrangement found parallel to $[\bar{1}01]$ in (I; X=Cl). Indeed the repeat distances at $20\text{--}25^\circ\text{C}$ along $[001]$ in (I; X=F) and along $[\bar{1}01]$ in (I; X=Cl) are 14.25 and 14.42 Å respectively. The short non-bonded contact (3.09 Å) observed in (I; X=Cl) between one of the phosphorus-bonded chlorine atoms and oxygen is also present in (I; X=F) [$\text{Cl}(2)\cdots\text{O}(2')$; 3.08 Å]. As suggested in the case of (I; X=Cl) (van de Grampel & Vos, 1969), this interaction is probably responsible for the deviation from molecular *m* symmetry. The second short contact in (I; X=Cl) between sulphur-bonded chlorine and oxygen is not replaced by a short $\text{F}\cdots\text{O}$ non-bonded contact. The shorter of the remaining intermolecular contacts, all greater than the sum of the van der Waals radii (Pauling, 1960), are marked on Fig. 3.

The authors thank Professor Aafje Vos for her interest in this work, Dr H. H. Baalman for making the compound, and the University of Leicester Computing Centre for the use of its facilities.

Acta Cryst. (1974). **B30**, 2798

Structure Cristalline du *trans*- $\text{Fe}(\text{CO})_3[\text{P}(\text{OCH}_3)_3]_2$

PAR DARIA GINDEROW

Laboratoire de Chimie Appliquée de l'Etat Solide, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris,
11 rue Pierre et Marie Curie, 75005 Paris, France

(Reçu le 17 mai 1974, accepté le 10 juillet 1974)

trans- $\text{Fe}(\text{CO})_3[\text{P}(\text{OCH}_3)_3]_2$ crystallizes in space group $C2/c$, with cell constants $a=11.964$, $b=11.208$, $c=13.406$ Å, $\beta=108.80^\circ$ and $Z=4$. The structure was solved by the heavy-atom method. Refinement was carried out by the full-matrix least-squares procedure, with 1193 observed reflexions; the final *R* value is 4.4%. The molecule has a twofold axis collinear with the iron atom and one carbonyl group. The ligand $\text{P}(\text{OCH}_3)_3$ has internal asymmetry.

Introduction

Le composé *trans*- $\text{Fe}(\text{CO})_3[\text{P}(\text{OCH}_3)_3]_2$ fait partie de la série des dérivés de métal carbonyle étudiés par Reck-

References

- BAALMANN, H. H. & VAN DE GRAMPPEL, J. C. (1973a). *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **92**, 716–722.
 BAALMANN, H. H. & VAN DE GRAMPPEL, J. C. (1973b). *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **92**, 1237–1239.
 BAALMANN, H. H., VELVIS, H. P. & VAN DE GRAMPPEL, J. C. (1972). *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **91**, 935–941.
 BOLHUIS, F. VAN (1971). *J. Appl. Cryst.* **4**, 236.
 BULLEN, G. J. (1971). *J. Chem. Soc. (A)*, pp. 1450–1453.
 CROMER, D. T. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 17–23.
 CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 104–109.
 GRAMPPEL, J. C. VAN DE & VOS, A. (1963). *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **82**, 246–247.
 GRAMPPEL, J. C. VAN DE & VOS, A. (1969). *Acta Cryst.* **B25**, 651–656.
 HAASE, J., OBERHAMMER, H., ZEIL, W., GLEMSE, O. & MEWS, R. (1970). *Z. Naturforsch.* **25A**, 153–155.
 HEIDER, W., KLINGEBIEL, U., LIN, T. P. & GLEMSE, O. (1974). *Chem. Ber.* **107**, 592–597.
 KLINGEBIEL, U., LIN, T. P., BUSS, B. & GLEMSE, O. (1973). *Chem. Ber.* **106**, 2969–2974.
 KREBS, B. & POHL, S. (1973). *Chem. Ber.* **106**, 1069–1075.
 KREBS, B., POHL, S. & GLEMSE, O. (1972). *Chem. Commun.* p. 548.
 MANI, N. V., AHMED, F. R. & BARNES, W. H. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 693–698.
 MANI, N. V., AHMED, F. R. & BARNES, W. H. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 375–382.
 MANI, N. V. & WAGNER, A. J. (1971). *Acta Cryst.* **B27**, 51–58.
 OBERHAMMER, H. (1973). Private communication.
 PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd ed. Ithaca: Cornell Univ. Press.
 PAWLEY, G. S. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 1204–1208.
 SCHLUETER, A. W. & JACOBSON, R. A. (1968). *J. Chem. Soc. (A)*, pp. 2317–2325.

ziegel & Bigorgne (1965), puis par Bigorgne, Poilblanc & Pankowski (1970). Ces auteurs ont remarqué pour certains composés des 'anomalies' dans le spectre infrarouge telles que:

1 – la présence d'une bande A_1 pour les trois CO, normalement interdite si la symétrie moléculaire est D_{3h} ;

2 – le dédoublement de la bande E de ces mêmes vibreurs CO. Ces 'anomalies' ont été interprétées comme résultant d'une asymétrie interne de chaque ligand. Dans notre cas, le ligand est $P(OCH_3)_3$, les trois liaisons P–O ne seraient pas équivalentes ce qui favoriserait une action préférentielle d'attraction ou de répulsion, du ligand sur l'un des trois CO.

Nous avons entrepris l'étude cristallographique du *trans*- $Fe(CO)_3[P(OCH_3)_3]_2$ pour vérifier l'hypothèse selon laquelle il y aurait une asymétrie interne de chaque ligand.

Partie expérimentale

Les cristaux se présentent sous la forme de parallélépipèdes transparents, ils ont été préparés au laboratoire de Chimie de Coordination de l'Ecole Nationale Supérieure de Paris.

Le groupe spatial et les dimensions de la maille ont été déterminés par enregistrement en chambre de Weissenberg. Les valeurs des paramètres de la maille et les intensités des réflexions ont été mesurées au laboratoire de recherche Philips à Eindhoven sur le diffractomètre à 4 cercles PW 1100. Sur 2037 réflexions indépendantes, correspondant à un angle de Bragg inférieur à 28° avec la radiation du molybdène, 1193 réflexions répondant au critère $I > 2\sigma(I)$ ont été utilisées pour la détermination et l'affinement de la structure avec:

$$\sigma(I) = [I_M + F_1 + F_2 + (0,01 I)^2]^{1/2},$$

I_M : intensité mesurée

F_1 et F_2 : valeur des fonds

I : intensité nette: $I = I_M - F_1 - F_2$

0,01 paramètre traduisant les incertitudes autres que celles dues à la statistique de comptage.

Les intensités diffractées ont été corrigées des facteurs de Lorentz et de polarisation. Les effets de l'absorption ont été négligés. Les données cristallographiques sont les suivantes: $C_9H_{18}O_9P_2Fe$, $M = 388,03$, monoclinique $C2/c$, $a = 11,964$ (4), $b = 11,208$ (4), $c = 13,406$ (5) Å, $\beta = 108,80$ (4) $^\circ$; $V = 1701,7$ Å³, $Z = 4$, $D_m = 1,50$, $D_c = 1,52$ g cm⁻³, $\mu = 11,36$ cm⁻¹ pour $\lambda(Mo K\alpha)$.

Détermination de la structure et affinement

La structure a été résolue en utilisant les techniques de la méthode de l'atome lourd. L'étude de la fonction de Patterson tridimensionnelle a permis de localiser l'atome de fer et un groupement carbonyle, ceux-ci sont en position spéciale sur les axes d'ordre deux de la maille. Les positions des autres atomes ont été déterminées par des synthèses de Fourier successives.

L'affinement des coordonnées atomiques et des coefficients de température a été réalisé par la méthode des moindres carrés (matrice complète). Pour tous les atomes avec des facteurs d'agitation thermique isotrope, le facteur R est égal à 0,114 ($R = \sum |\Delta F| / \sum |F_o|$). L'affinement de la structure a été poursuivi avec des facteurs d'agitation thermique anisotrope, le facteur R devient 0,058.

Tableau 1. Coordonnées et paramètres d'agitation thermique ($\times 10^5$) des atomes non hydrogène avec leurs déviations standards

$$T = \exp\left(-\sum_{ij} \beta_{ij} h_i h_j\right)$$

	x	y	z	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Fe	0	25635 (8)	25000 (0)	600 (7)	709 (8)	524 (6)	0	300 (5)	0
P	10720 (8)	25375 (11)	14802 (7)	672 (9)	788 (10)	549 (8)	26 (9)	319 (7)	34 (8)
O(1)	0	-414 (42)	25000 (0)	2213 (76)	789 (47)	1456 (53)	0	1164 (53)	0
O(2)	18233 (29)	38933 (33)	40790 (26)	1010 (35)	1843 (49)	825 (28)	-417 (33)	238 (26)	-332 (30)
O(3)	23950 (23)	21570 (25)	20639 (21)	685 (23)	1372 (34)	731 (22)	185 (23)	401 (20)	201 (21)
O(4)	11547 (25)	37046 (26)	8371 (22)	1203 (33)	919 (29)	745 (23)	0 (25)	498 (23)	145 (21)
O(5)	7495 (27)	16226 (26)	5194 (23)	938 (29)	1170 (32)	764 (23)	-87 (26)	416 (23)	-257 (23)
C(1)	0	9892 (63)	25000 (0)	1110 (69)	959 (68)	782 (52)	0	657 (51)	0
C(2)	11083 (40)	33625 (41)	34518 (36)	782 (41)	1124 (48)	648 (34)	-34 (37)	367 (31)	33 (33)
C(3)	32594 (55)	21163 (84)	15099 (58)	831 (49)	2136 (106)	1061 (54)	287 (58)	631 (45)	277 (63)
C(4)	14588 (94)	48364 (60)	13559 (68)	2135 (107)	887 (59)	1141 (66)	-376 (62)	809 (74)	-46 (48)
C(5)	-3998 (56)	16004 (72)	-2322 (55)	1153 (63)	1492 (81)	912 (52)	-213 (58)	289 (46)	-483 (53)

Coordonnées ($\times 10^4$) et facteur d'agitation thermique isotrope des atomes d'hydrogène

	x	y	z	B (Å ²)
H(31)	3992 (48)	1977 (46)	2044 (40)	9,05 (1,66)
H(32)	3314 (61)	2914 (61)	1247 (61)	15,50 (2,87)
H(33)	3067 (51)	1440 (49)	1059 (50)	10,99 (2,39)
H(41)	2127 (62)	4629 (65)	1950 (54)	14,77 (3,22)
H(42)	1477 (53)	5336 (56)	918 (48)	10,87 (2,19)
H(43)	900 (59)	5088 (62)	1512 (55)	12,47 (2,85)
H(51)	-460 (45)	1049 (48)	-678 (42)	8,66 (1,72)
H(52)	-574 (51)	2409 (58)	-410 (47)	11,07 (2,30)
H(53)	-936 (52)	1449 (53)	106 (47)	10,51 (2,02)

Tous les atomes d'hydrogène ont été localisés sur série de densité électronique différence. En fin d'affinement, les coordonnées et les facteurs d'agitation thermique isotrope des atomes d'hydrogène ont été affinés. Nous avons introduit un schéma de pondération de la forme: $w = 1 + 0,124|F_o|$.

Dans ces conditions, la valeur finale du facteur R est de 0,044 (0,091 pour les 2037 réflexions indépendantes) et le facteur R pondéré, de la forme $R_w = (\sum w|\Delta F|^2 / \sum wF_o^2)^{1/2}$ est également de 0,044.

Les facteurs de diffusion atomique ont été pris dans les tableaux publiés par Doyle & Turner (1968), sauf pour les atomes d'hydrogène dont les valeurs sont celles données par Stewart, Davidson & Simpson (1965).

Les coordonnées atomiques et les paramètres thermiques sont rassemblés dans le Tableau 1.*

Description et discussion de la structure

La Fig. 1 représente une vue en perspective de la molécule. Celle-ci possède un axe de symétrie binaire passant par Fe-C(1)-O(1) (Fig. 2); de ce fait les deux ligands P(OCH₃)₃ sont identiques et ont une configuration *trans* l'un par rapport à l'autre.

Environnement du fer

Le polyèdre de coordination de l'atome de fer est une bipyramide trigonale régulière (Fig. 2), comme pour le composé Os(CO)₃[P(C₆H₅)₃]₂ (Stalick & Ibers, 1969).

Tableau 2. Valeurs des distances interatomiques (Å) et des angles (°) liés à l'atome de fer avec leurs déviations standards

Fe—P	2,155 (1)	C(1)—Fe—P	89,2 (1)
Fe—C(1)	1,764 (7)	C(2)—Fe—P	90,2 (2)
Fe—C(2)	1,760 (5)	C(1)—Fe—C(2)	120,6 (2)
C(1)—O(1)	1,155 (9)	C(2)—Fe—C(2')	119,8 (2)
C(2)—O(2)	1,153 (6)	Fe—C(1)—O(1)	180,0 (0)
		Fe—C(2)—O(2)	179,1 (4)

Le Tableau 2 donne les valeurs des distances et des angles liés à l'atome de fer.

Les liaisons C—O ont une longueur égale à la valeur donnée par Sutton (1965) 1,155 (9) et 1,153 (6) Å pour 1,14 (1) Å.

La liaison Fe—C de 1,764 (7) et 1,760 (5) Å est plus courte que dans Fe(CO)₅ où elle est égale à 1,84 (3) Å (Sutton, 1965).

Les liaisons de l'atome de fer avec les groupements CO sont en ligne droite et dans un même plan (P₁, Tableau 4). Les deux liaisons Fe—P forment avec la

* La liste des facteurs de structure a été déposée à la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 30570, 15 pp.). Des copies peuvent être obtenues en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

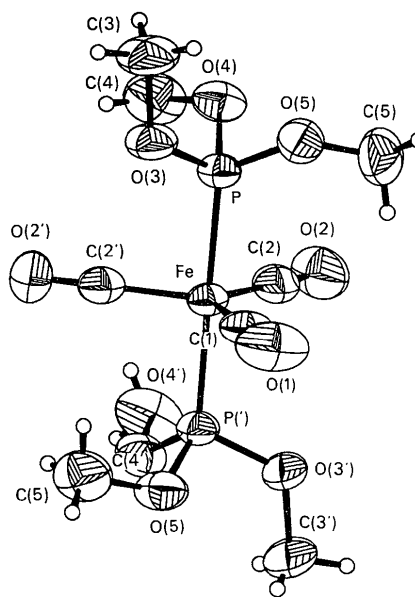


Fig. 1. Molécule *trans*-Fe(CO)₃[P(OCH₃)₃]₂.

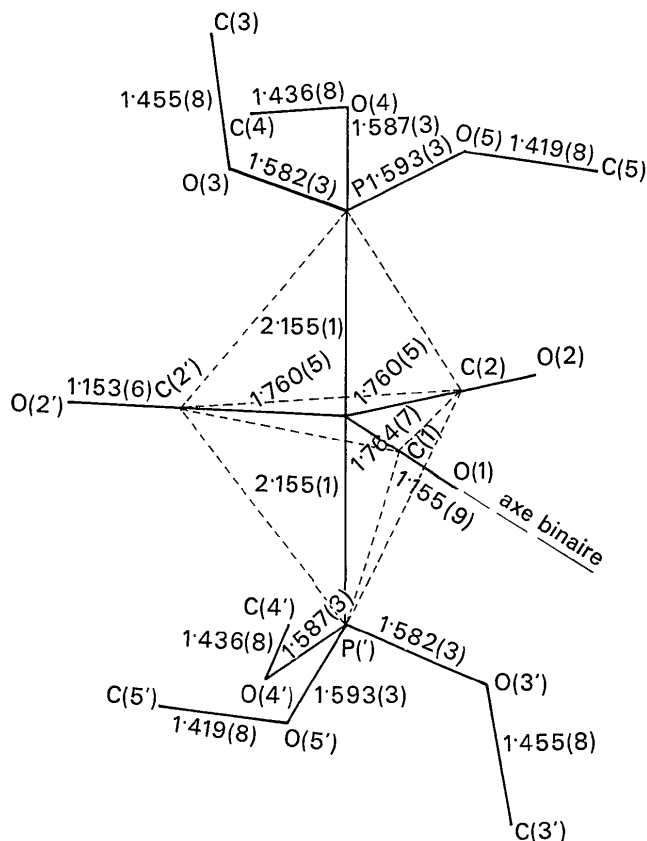


Fig. 2. Représentation schématique de la molécule avec les distances interatomiques.

liaison Fe-C(1)-O(1) un plan P_2 passant par l'axe binaire et perpendiculaire au plan P_1 des trois carbonyles (Fig. 3).

Le ligand $P(OCH_3)_3$

Les valeurs des distances et des angles liés au ligand $P(OCH_3)_3$ se trouvent dans le Tableau 3.

Les différentes distances ne présentent pas d'écarts significatifs entre-elles.

Les liaisons P-O ont des valeurs qui sont dans les limites de celles données par Sutton (1965) pour d'autres composés phosphorés. Les liaisons O-C ont une longueur conforme à la valeur donnée par Sutton (1965) 1,43 (1) Å pour des liaisons O-C simples.

Les angles de valence présentent des écarts significatifs, tels O(3)-P-O(4), O(3)-P-O(5) et O(4)-P-O(5)

Tableau 3. Valeurs des distances interatomiques (Å) et des angles (°) liés au ligand $P(OCH_3)_3$

P—O(3)	1,582 (3)	O(3)—P—O(4)	105,3 (2)
P—O(4)	1,587 (3)	O(3)—P—O(5)	99,8 (2)
P—O(5)	1,593 (3)	O(4)—P—O(5)	97,6 (2)
O(3)—C(3)	1,455 (8)	Fe—P—O(3)	113,27 (7)
O(4)—C(4)	1,436 (8)	Fe—P—O(4)	119,17 (7)
O(5)—C(5)	1,419 (8)	Fe—P—O(5)	118,87 (7)
C(3)—H(31)	0,95 (6)	P—O(3)—C(3)	121,2 (2)
C(3)—H(32)	0,97 (7)	P—O(4)—C(4)	121,0 (2)
C(3)—H(33)	0,95 (6)	P—O(5)—C(5)	120,8 (2)
C(4)—H(41)	0,96 (7)	O(3)—C(3)—H(31)	105 (1)
C(4)—H(42)	0,82 (6)	O(3)—C(3)—H(32)	106 (1)
C(4)—H(43)	0,81 (8)	O(3)—C(3)—H(33)	107 (1)
C(5)—H(51)	0,85 (5)	O(4)—C(4)—H(41)	102 (1)
C(5)—H(52)	0,94 (7)	O(4)—C(4)—H(42)	109 (1)
C(5)—H(53)	0,91 (6)	O(4)—C(4)—H(43)	109 (1)
		O(5)—C(5)—H(51)	111 (1)
		O(5)—C(5)—H(52)	104 (1)
		O(5)—C(5)—H(53)	109 (1)

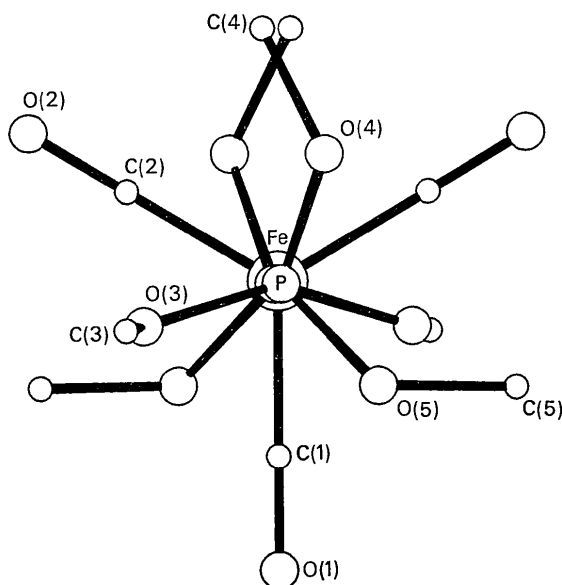


Fig. 3. Projection de la molécule $trans\text{-Fe}(\text{CO})_3[\text{P}(\text{OCH}_3)_2]$ suivant la liaison P-Fe-P'.

Tableau 4. Plans moyens

(a) Les équations sont de la forme $lx + my + nz - p = 0$; système d'axes orthonormés avec x parallèle à \mathbf{a} et z parallèle à \mathbf{c}^* .

Plan	l	m	n	p
1 Fe, C(1), O(1), C(2), O(2), C(2'), O(2')	0,7998	0,0000	-0,6003	-2,7684
2 Fe, P, C(1), O(1)	-0,6006	0,0000	-0,7996	-1,8882

(b) Distances aux plans moyens (Å)

	P_1	P_2
Fe	0,000 (0)	0,000 (0)
C(1)	0,000 (0)	0,000 (0)
O(1)	0,000 (0)	0,000 (0)
C(2)	0,007 (5)	-1,515 (5)
O(2)	-0,004 (4)	-2,503 (3)
C(2')	0,004 (5)	
O(2')	-0,007 (4)	
P	2,155 (1)	0,000 (1)
O(3)	2,775 (3)	-1,391 (3)
O(4)	2,946 (3)	0,426 (3)
O(5)	2,910 (3)	0,957 (3)
C(3)	4,215 (7)	-1,594 (7)
C(4)	2,663 (11)	-0,184 (10)
C(5)	2,643 (7)	2,351 (7)

respectivement de 105,3 (2), 99,8 (2) et 97,6 (2)°. La première valeur est différente des deux autres, ce qui se remarque aussi sur la projection de Newman le long de la liaison Fe-P (Fig. 4). Quant aux angles Fe-P-O(3), Fe-P-O(4) et Fe-P-O(5) de 113,27 (7), 119,17 (7) et 118,87 (7)°, la plus faible valeur angulaire égale à 113,27° est en accord avec une distance entre l'atome de fer et de O(3) de 3,174 (3) Å; plus courte que celle entre Fe...O(4) et Fe...O(5), toutes les deux de 3,240 (3) Å. C'est-à-dire que l'atome O(3) est plus proche du plan des trois carbonyles [2,775 (3) Å, Tableau 4] que O(4) et O(5) qui sont approximativement à égale distance de ce plan [2,946 (3) et 2,910 (3) Å]. Parmi les distances des atomes au plan moyen P_1 (plan des trois carbonyles), nous remarquons aussi que l'atome C(3) est plus éloigné de ce plan que C(4) et C(5), 4,215 (7) contre 2,663 (11) et 2,643 (7) Å.

Cohésion cristalline

La cohésion cristalline est essentiellement assurée par des forces de van der Waals (Tableau 5). La Fig. 5 représente la projection des molécules dans le cristal selon l'axe b .

Conclusion

L'asymétrie interne du ligand $P(\text{OCH}_3)_3$ déjà prévue par les spectres infrarouge est vérifiée par diffraction des rayons X et attribuée à la liaison P-O(3)-C(3). La liaison P-O(3) est plus proche du plan des carbonyles (P_1 , Tableau 4) que les liaisons P-O(4) et P-O(5); tandis que la liaison O(3)-C(3) s'en éloigne par rapport aux liaisons O(4)-C(4) et O(5)-C(5) qui s'en approchent légèrement.

Les principaux programmes utilisés pour les calculs ont été les suivants, pour l'affinement, une modification de ORFLS de Busing, Martin & Levy (1962); pour les calculs de distances et de plans moyens, la

Tableau 5. Distances intermoléculaires entre des atomes de la molécule (*x, y, z*) et ceux correspondants aux transformations de coordonnées indiquées

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

	<i>d</i> (Å)	<i>R</i> ₁ + <i>R</i> ₂
O(1)···H(51 ^I)	2,901 (54)	2,6
O(2)···H(33 ^{IV})	2,866 (55)	2,6
O(2)···C(3 ^{IV})	3,692 (10)	3,4
O(2)···H(42 ^{II})	2,767 (63)	2,6
O(2)···C(4 ^{II})	3,520 (10)	3,4
O(2)···H(53 ^V)	2,617 (64)	2,6
O(2)···C(5 ^V)	3,197 (8)	3,4
O(3)···C(4 ^{IV})	3,356 (8)	3,4
O(4)···H(33 ^{III})	2,981 (64)	2,6
O(4)···C(3 ^{III})	3,558 (8)	3,4
O(5)···H(32 ^{III})	2,974 (78)	2,6
O(5)···C(3 ^{III})	3,589 (8)	3,4
C(3)···C(3 ^{III})	3,961 (11)	4,0
C(3)···H(43 ^{IV})	3,389 (70)	3,2
C(3)···C(4 ^{IV})	3,769 (12)	4,0
C(4)···H(52 ^I)	3,376 (65)	3,2
C(5)···H(32 ^{III})	3,251 (78)	3,2
C(5)···C(3 ^{III})	3,793 (10)	4,0
C(5)···H(51 ^I)	3,249 (55)	3,2
C(5)···C(5 ^I)	3,713 (11)	4,0

Transformations de coordonnées:

i	- <i>x</i>	- <i>y</i>	- <i>z</i>
ii	<i>x</i>	- <i>y</i>	$\frac{1}{2}+z$
iii	$\frac{1}{2}-x$	$\frac{1}{2}-y$	- <i>z</i>
iv	$\frac{1}{2}-x$	$\frac{1}{2}+y$	$\frac{1}{2}-z$
v	$\frac{1}{2}+x$	$\frac{1}{2}-y$	$\frac{1}{2}+z$

série des programmes NRC (Ahmed, Hall, Pippy & Huber, 1966); pour les dessins, ORTEP (Johnson, 1965).

L'auteur remercie le Dr M. Pankowski de lui avoir fourni les cristaux et le Dr E. Keulen auquel il est redevable des mesures sur le diffractomètre PW 1100.

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.
- BIGORGNE, M., POILBLANC, R. & PANKOWSKI, M. (1970). *Spectrochim. Acta*, A26, 1217-1224.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS, a Fortran Crystallographic Least-Squares Program*. Report ORNL-TM-305, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- DOYLE, P. A. & TURNER, P. S. (1968). *Acta Cryst.* A24, 390-397.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-TM-3794, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- RECKZIEGEL, A. & BIGORGNE, M. (1965). *J. Organometal. Chem.* 3, 341-354.

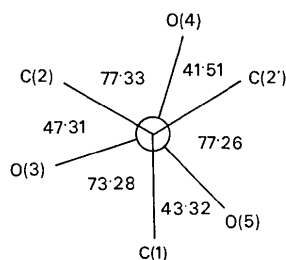


Fig. 4. Projection de Newman le long de la liaison Fe-P.

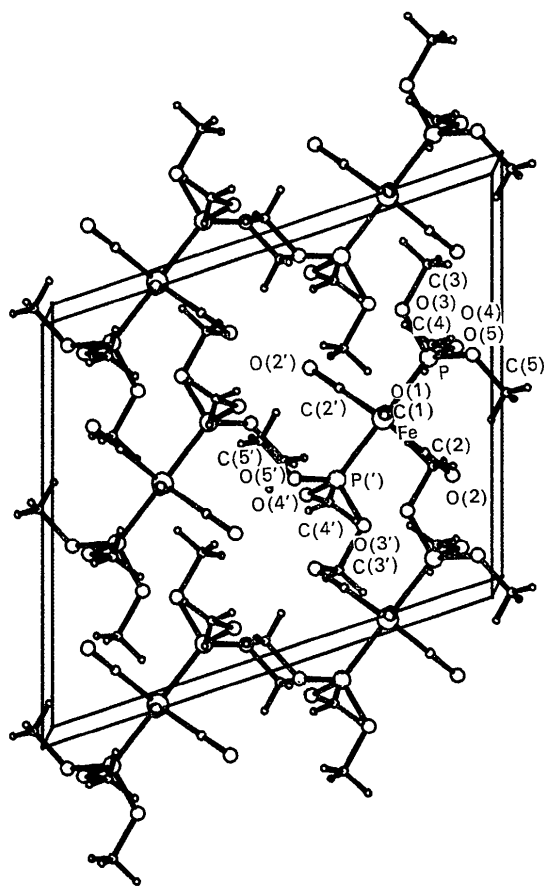


Fig. 5. Maille cristalline du *trans*-Fe(CO)₃[P(OCH₃)₃]₂, projection vue suivant *b*, *c* étant l'axe horizontal et *a* l'axe vertical.

- STALICK, J. K. & IBERS, J. A. (1969). *Inorg. Chem.* 8, 419-423.
- STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* 42, 3175-3187.
- SUTTON, L. E. (1965). *Tables of Interatomic Distances and Configuration in Molecules and Ions*, Supplement. London: The Chemical Society.