

has a common edge. The distance between the two Bi atoms within such a double polyhedron is 4,28 Å; the shortest of the others is 4,64 Å. The corresponding Bi and Nd polyphosphates are not isomorphous but the anion chains are related (Hong, 1974).

Both in $\text{BiH}(\text{PO}_3)_4$ and in $\text{Bi}(\text{PO}_3)_3$ the anion chains contain large jolts. The reason for this may be that in this way it is possible to give the cation enough oxygen contacts in spite of the high (P:Bi) ratios of four and three respectively.

We wish to thank Dr Tschudinowa, Dr Fichtner and Mrs Schrauber for their kind support.

References

- ALBRAND, K.-R., ATTIG, R., FENNER, J., JESER, J. P. & MOOTZ, D. (1974). *Mater. Res. Bull.* **9**, 129–140.
 GRIMMER, A. R. & TSCHUDINOWA, N. N. (1972). *Z. Chem.* **12**, 149–150.
 HONG, H. Y.-P. (1974). *Acta Cryst.* **B30**, 468–474.
 JOST, K.-H. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 1539–1544.
 PALKINA, K. & JOST, K.-H. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 2281–2285.
 TSCHUDINOWA, N. N. & JOST, K.-H. (1973). *Z. anorg. allgem. Chem.* **400**, 185–188.
 TSCHUDINOWA, N. N., LAWROW, A. W. & TANANAJEW, I. W. (1972). *Izv. Akad. Nauk SSSR Neorg. Mater.* **8**, 1971–1976.

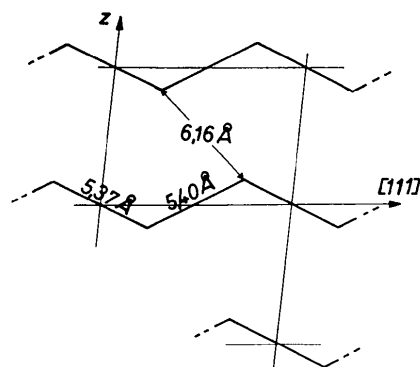


Fig. 5. Shortest Bi-Bi contacts.

Acta Cryst. (1975). **B31**, 2290

Structure Cristalline de la Δ^9 -10 Méthyl-17 α Nor-19 Progestérone

PAR C. COURSEILLE, B. BUSETTA, G. PRÉCIGOUX ET M. HOSPITAL

Laboratoire de Cristallographie et de Physique Cristalline associé au CNRS, Université de Bordeaux I,
351 cours de la Libération, 33405-Talence, France

(Reçu le 5 mars 1975, accepté le 21 mars 1975)

$\text{C}_{21}\text{H}_{28}\text{O}_2$, orthorhombic, $P2_12_12_1$, $Z=8$, $a=30.966$ (8), $b=8.053$ (3), $c=14.070$ (4) Å. The conformations of the two independent molecules are identical. Cohesion of the crystal is achieved by van der Waals forces only.

Dans le but d'étudier l'influence de l'adjonction d'une double liaison en 9–10 sur la géométrie des cycles A et B des dérivés du nor-19 androstène, nous avons déjà présenté la structure de la Δ^9 -10 méthyl-21 norprogestérone (Busetta, Comberton, Courseille & Hospital, 1974). Le présent article est consacré à l'étude du dérivé non méthylé.

Les cristaux de Δ^9 -10 méthyl-17 α nor-19 progestérone ont été obtenus par évaporation d'une solution dans l'alcool éthylique; les différentes mesures expérimentales ont été effectuées sur un diffractomètre automatique Siemens. 2974 réflexions indépendantes ont été mesurées dont 2437 observées.

La structure a été déterminée par méthodes directes (multisolution). Tous les atomes d'hydrogène ont été localisés à partir de sections différences. Les coordonnées atomiques et les paramètres d'agitation thermique

sont réportés sur le Tableau 1. Le facteur R final est égal à 0,061.*

Discussion

Généralement, quand un cristal est formé de plusieurs molécules indépendantes, celles-ci présentent des conformations relativement différentes, du fait qu'elles ne se trouvent pas dans le même environnement et notamment qu'elles contractent des liaisons hydrogène d'énergie et de directions différentes. Les interactions du type van der Waals, beaucoup plus

* La liste des facteurs de structure a été déposée au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 31005: 31 pp., 1 microfiche). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

faibles et non localisées, influent relativement peu sur la conformation moléculaire; les déformations les plus importantes se rencontrent donc au voisinage des liaisons hydrogène, c'est-à-dire dans le cas des hormones stéroïdes au niveau des cycles *A* et *D*.

Dans une structure cristalline ne présentant pas de liaison hydrogène, les molécules observées ne devraient

pratiquement pas être déformées par rapport à la molécule théorique isolée. Par la suite, si deux molécules indépendantes se trouvent dans l'unité asymétrique, elles devraient être presque identiques. C'est effectivement ce que l'on observe dans le cas de Δ^9 -10 nor-19 progesterone.

Nous avons reporté sur la Fig. 1 les distances et angles

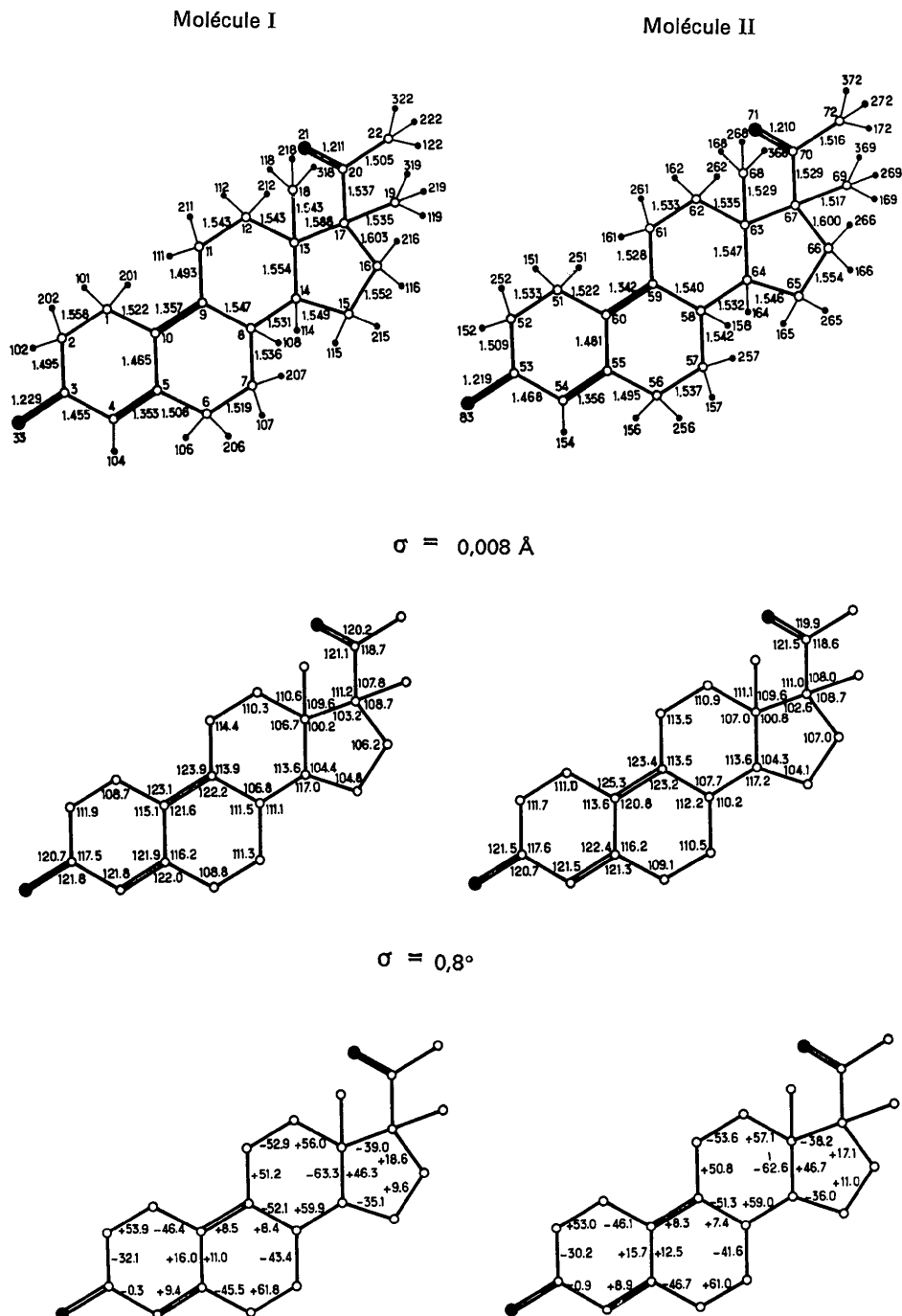


Fig. 1. Distances (Å) et angles (°) interatomiques, et angles dièdres (°).

Tableau 1. Paramètres atomiques

Toutes les valeurs, sauf les B, sont × 10⁴.

| | x | y | z | β ₁₁ | β ₂₂ | β ₃₃ | β ₁₂ | β ₁₃ | β ₂₃ |
|-------|----------|-----------|-----------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| C(1) | 4539 (2) | -4511 (7) | -12 (4) | 10 (1) | 148 (11) | 82 (5) | -2 (5) | 8 (3) | 24 (13) |
| C(2) | 4815 (2) | -3765 (8) | 803 (4) | 9 (1) | 183 (12) | 80 (4) | -9 (5) | -1 (3) | -14 (13) |
| C(3) | 4850 (2) | -4924 (7) | 1631 (4) | 10 (1) | 195 (12) | 60 (4) | 18 (6) | 3 (3) | -99 (13) |
| C(4) | 4484 (2) | -6006 (7) | 1822 (4) | 14 (1) | 152 (11) | 44 (3) | 16 (5) | 2 (3) | -27 (11) |
| C(5) | 4123 (2) | -5970 (6) | 1281 (4) | 12 (1) | 106 (9) | 48 (3) | 11 (5) | 8 (3) | -9 (10) |
| C(6) | 3721 (2) | -6911 (7) | 1553 (4) | 14 (1) | 148 (11) | 45 (3) | -9 (5) | 4 (3) | 28 (11) |
| C(7) | 3332 (2) | -5787 (7) | 1411 (4) | 12 (1) | 171 (12) | 47 (3) | -18 (5) | 7 (3) | 36 (11) |
| C(8) | 3284 (2) | -5269 (7) | 365 (4) | 10 (1) | 158 (11) | 47 (3) | -13 (5) | 4 (3) | 14 (11) |
| C(9) | 3724 (2) | -4789 (6) | -74 (3) | 11 (1) | 111 (9) | 40 (3) | -2 (5) | 9 (2) | 6 (10) |
| C(10) | 4103 (2) | -5033 (6) | 391 (3) | 9 (1) | 120 (9) | 41 (3) | -0 (4) | 5 (2) | -8 (10) |
| C(11) | 3692 (2) | -4099 (7) | -1057 (4) | 10 (1) | 171 (11) | 44 (3) | 0 (5) | 8 (3) | 18 (11) |
| C(12) | 3363 (2) | -2668 (7) | -1167 (3) | 10 (1) | 178 (11) | 37 (3) | -7 (5) | 1 (2) | -1 (11) |
| C(13) | 2918 (2) | -3198 (7) | -778 (3) | 8 (1) | 155 (10) | 43 (3) | -10 (4) | 3 (2) | -14 (11) |
| C(14) | 2990 (1) | -3752 (7) | 267 (3) | 8 (1) | 162 (10) | 42 (3) | -15 (5) | 4 (2) | -8 (11) |
| C(15) | 2529 (2) | -3898 (8) | 683 (4) | 9 (1) | 266 (15) | 63 (4) | -6 (6) | 9 (3) | 17 (14) |
| C(16) | 2269 (2) | -2486 (8) | 196 (4) | 12 (1) | 239 (14) | 65 (4) | -4 (6) | 2 (3) | -11 (14) |
| C(17) | 2574 (2) | -1764 (8) | -626 (4) | 9 (1) | 192 (12) | 56 (4) | -4 (5) | 4 (3) | -10 (12) |
| C(18) | 2720 (2) | -4580 (7) | -1402 (4) | 15 (1) | 192 (13) | 51 (4) | -17 (6) | -4 (3) | -22 (13) |
| C(19) | 2766 (2) | -104 (7) | -290 (4) | 13 (1) | 178 (12) | 70 (4) | 7 (6) | -8 (3) | -56 (14) |
| C(20) | 2317 (2) | -1429 (8) | -1541 (4) | 12 (1) | 177 (12) | 68 (4) | 15 (6) | -7 (3) | -23 (13) |
| O(21) | 1942 (1) | -1833 (5) | -1610 (3) | 11 (0) | 277 (10) | 89 (3) | -5 (4) | -21 (2) | -19 (11) |
| C(22) | 2539 (2) | -556 (9) | -2350 (4) | 15 (1) | 328 (19) | 63 (4) | 10 (7) | -5 (3) | 56 (16) |
| O(33) | 5169 (1) | -4897 (6) | 2151 (3) | 13 (1) | 322 (11) | 63 (3) | 9 (4) | -3 (2) | -105 (10) |
| C(51) | 5675 (2) | -4613 (7) | 5384 (4) | 10 (1) | 180 (12) | 51 (4) | 12 (5) | 1 (3) | 33 (12) |
| C(52) | 5960 (2) | -3633 (7) | 6076 (4) | 12 (1) | 143 (10) | 60 (4) | 6 (5) | -2 (3) | 39 (12) |
| C(53) | 5991 (2) | -4477 (7) | 7031 (4) | 13 (1) | 158 (11) | 64 (4) | 31 (5) | -7 (3) | -36 (12) |
| C(54) | 5620 (2) | -5468 (7) | 7345 (4) | 14 (1) | 136 (11) | 51 (4) | 13 (5) | -9 (3) | 12 (11) |
| C(55) | 5259 (2) | -5606 (6) | 6807 (4) | 13 (1) | 114 (9) | 42 (3) | 18 (5) | 4 (3) | 10 (10) |
| C(56) | 4865 (2) | -6466 (7) | 7173 (4) | 14 (1) | 164 (11) | 53 (4) | -4 (6) | 7 (3) | 62 (12) |
| C(57) | 4464 (2) | -5422 (7) | 6927 (4) | 11 (1) | 176 (12) | 44 (3) | -3 (5) | 9 (3) | 56 (11) |
| C(58) | 4420 (2) | -5231 (7) | 5843 (3) | 10 (1) | 141 (10) | 39 (3) | -7 (5) | 6 (2) | 25 (10) |
| C(59) | 4857 (2) | -4905 (6) | 5358 (3) | 11 (1) | 119 (9) | 35 (3) | 9 (5) | 10 (2) | 8 (10) |
| C(60) | 5236 (2) | -4980 (6) | 5819 (3) | 11 (1) | 114 (9) | 31 (3) | 6 (4) | 2 (2) | 18 (9) |
| C(61) | 4818 (2) | -4491 (7) | 4302 (4) | 11 (1) | 167 (11) | 40 (3) | 18 (5) | 3 (3) | 16 (10) |
| C(62) | 4491 (2) | -3112 (7) | 4091 (3) | 9 (1) | 162 (11) | 39 (3) | 4 (5) | 3 (2) | 20 (11) |
| C(63) | 4049 (1) | -3517 (6) | 4529 (3) | 9 (1) | 107 (9) | 42 (3) | -2 (4) | -1 (2) | -10 (10) |
| C(64) | 4122 (1) | -3769 (7) | 5608 (3) | 8 (1) | 142 (10) | 38 (3) | 1 (4) | 11 (2) | 11 (10) |
| C(65) | 3662 (2) | -3803 (8) | 6032 (4) | 11 (1) | 226 (14) | 66 (4) | 3 (6) | 17 (3) | 21 (14) |
| C(66) | 3408 (2) | -2522 (8) | 5425 (4) | 12 (1) | 210 (13) | 73 (4) | -1 (6) | 7 (3) | 15 (14) |
| C(67) | 3707 (2) | -2055 (7) | 4537 (4) | 8 (1) | 148 (10) | 56 (4) | 2 (5) | 3 (3) | 3 (11) |
| C(68) | 3851 (2) | -5056 (7) | 4066 (4) | 13 (1) | 174 (11) | 55 (4) | -11 (5) | -3 (3) | -18 (12) |
| C(69) | 3903 (2) | -353 (7) | 4706 (4) | 13 (1) | 126 (10) | 75 (4) | 11 (5) | 2 (3) | -17 (12) |
| C(70) | 3456 (2) | -1995 (7) | 3602 (4) | 10 (1) | 135 (11) | 87 (5) | 10 (5) | -11 (3) | -0 (13) |
| O(71) | 3084 (1) | -2444 (6) | 3555 (3) | 12 (1) | 260 (10) | 116 (4) | -12 (4) | -25 (2) | 68 (11) |
| C(72) | 3686 (2) | -1388 (8) | 2717 (4) | 18 (1) | 202 (13) | 65 (4) | 18 (7) | -10 (3) | 24 (14) |
| O(83) | 6301 (1) | -4265 (6) | 7552 (3) | 15 (1) | 292 (11) | 81 (3) | 6 (5) | -18 (2) | -27 (10) |

| | x | y | z | B | | x | y | z | B |
|--------|-----------|------------|------------|-----|--------|-----------|------------|------------|-----|
| H(101) | 4498 (13) | -3606 (63) | -498 (31) | 5,8 | H(118) | 2728 (13) | -4139 (56) | -1973 (29) | 4,6 |
| H(201) | 4622 (13) | -5677 (58) | -183 (30) | 5,3 | H(218) | 2488 (15) | -4822 (67) | -854 (32) | 6,2 |
| H(102) | 4681 (14) | -2649 (59) | 992 (30) | 5,5 | H(318) | 2893 (14) | -5602 (59) | -1389 (31) | 5,9 |
| H(202) | 5108 (13) | -3525 (59) | 531 (29) | 5,0 | H(119) | 2762 (14) | 887 (60) | -690 (32) | 6,0 |
| H(104) | 4502 (13) | -6777 (63) | 2385 (31) | 5,6 | H(319) | 2997 (14) | -60 (58) | 146 (31) | 5,9 |
| H(106) | 3726 (13) | -8031 (58) | 1151 (28) | 4,8 | H(122) | 2529 (15) | -1422 (66) | -2837 (32) | 6,6 |
| H(206) | 3805 (14) | -7161 (57) | 2219 (29) | 5,1 | H(322) | 2834 (14) | -457 (59) | -2125 (31) | 5,7 |
| H(107) | 3080 (14) | -6504 (59) | 1521 (29) | 5,3 | H(151) | 5632 (13) | -3915 (57) | 4801 (29) | 4,4 |
| H(207) | 3319 (14) | -4699 (58) | 1942 (30) | 5,4 | H(251) | 5818 (14) | -5680 (60) | 5215 (32) | 5,6 |
| H(108) | 3144 (14) | -6202 (59) | 2 (29) | 5,5 | H(152) | 5852 (13) | -2325 (55) | 6156 (29) | 4,6 |
| H(111) | 3955 (13) | -3517 (59) | -1278 (29) | 5,0 | H(252) | 6261 (13) | -3503 (63) | 5806 (29) | 5,6 |
| H(211) | 3581 (13) | -5039 (58) | -1454 (29) | 4,8 | H(154) | 5641 (14) | -6016 (42) | 7986 (31) | 5,5 |
| H(112) | 3460 (13) | -1905 (61) | -742 (30) | 5,1 | H(156) | 4805 (14) | -7439 (58) | 6867 (29) | 5,0 |
| H(212) | 3303 (13) | -2748 (58) | -1877 (30) | 5,3 | H(256) | 4872 (14) | -6629 (61) | 7884 (29) | 5,5 |
| H(114) | 3135 (14) | -2721 (55) | 522 (29) | 4,9 | H(157) | 4153 (14) | -6089 (60) | 7148 (30) | 5,6 |
| H(115) | 2430 (13) | -5109 (61) | 387 (30) | 5,0 | H(257) | 4485 (13) | -4289 (59) | 7234 (31) | 5,2 |
| H(215) | 2520 (13) | -3774 (60) | 1380 (30) | 5,2 | H(158) | 4293 (13) | -6290 (60) | 5581 (30) | 5,1 |
| H(116) | 2139 (13) | -3358 (60) | -161 (30) | 5,6 | H(161) | 5104 (13) | -4185 (58) | 3999 (31) | 5,2 |
| H(216) | 2257 (13) | -1593 (62) | 726 (30) | 5,4 | H(261) | 4732 (13) | -5566 (58) | 4069 (31) | 5,0 |

Tableau I (suite)

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------------|-----|
| H(162) | 4499 (13) | -3001 (58) | 3286 (29) | 4,8 |
| H(262) | 4618 (13) | -2027 (59) | 4435 (29) | 5,1 |
| H(164) | 4253 (14) | -2796 (63) | 5445 (32) | 6,7 |
| H(165) | 3655 (14) | -3550 (61) | 6712 (29) | 5,6 |
| H(265) | 3553 (13) | -5138 (58) | 5823 (30) | 5,3 |
| H(166) | 3460 (13) | -1460 (63) | 5970 (30) | 5,7 |
| H(266) | 3246 (14) | -3188 (58) | 5026 (30) | 5,5 |
| H(168) | 3569 (13) | -5087 (59) | 4256 (29) | 5,2 |
| H(268) | 4000 (14) | -6111 (60) | 4281 (30) | 5,9 |
| H(368) | 3856 (14) | -4963 (56) | 3377 (29) | 4,9 |
| H(169) | 4102 (14) | -452 (60) | 5262 (32) | 6,1 |
| H(269) | 4084 (13) | 176 (55) | 4099 (30) | 5,1 |
| H(369) | 3694 (14) | 371 (58) | 4957 (30) | 5,4 |
| H(172) | 3650 (14) | -222 (60) | 2682 (30) | 5,4 |
| H(272) | 3560 (14) | -1923 (63) | 2131 (30) | 5,9 |
| H(372) | 3996 (14) | -1648 (62) | 2752 (30) | 6,3 |
| H(222) | 2509 (14) | 489 (58) | -2757 (31) | 5,8 |
| H(219) | 2490 (14) | -727 (57) | -109 (31) | 6,1 |

de valence ainsi que les angles dièdres des deux molécules indépendantes. Nous y avons ajouté les angles dièdres de la molécule de Δ^9 -10 méthyl-21 norprogestérone (Busetta *et al.*, 1974) pour laquelle nous avons donné un signe erroné aux angles du cycle *A*.

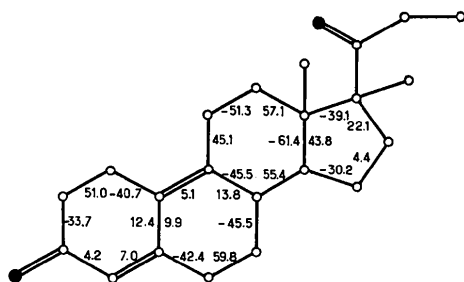


Fig. 2. Angles dièdres ($^{\circ}$) de la Δ^9 -10 méthyl-21 norprogestérone.

Si nous comparons les valeurs des angles dièdres, qui sont les plus sensibles à l'influence du champ cristallin, nous voyons que les valeurs obtenues pour les deux molécules de Δ^9 -10 méthyl-17 α nor-19 progestérone sont pratiquement identiques: l'écart moyen est égal à $0,9^{\circ}$ et l'écart maximum à $1,9^{\circ}$ sur le dièdre C(2)-C(3). Ainsi, malgré la présence de quelques contacts de van der Waals à caractère répulsif, les molécules de stéroïdes obtenues en l'absence de liaison hydrogène semblent peu déformées.

La conformation des molécules de Δ^9 -10 méthyl-17 α nor-19 progestérone est également assez proche de celle du dérivé méthylé en 21, la seule différence notable est la fermeture de l'angle de valence C(9)-C(8)-C(14) ($106,8$ et $107,7^{\circ}$ au lieu de $110,1^{\circ}$).

Les molécules que nous obtenons ici sont également sensiblement moins aplaties que la Δ^9 -10 méthyl-21 norprogestérone. Les angles dièdres des cycles *A*, *C* et *D* sont plus ouverts: $+1,5^{\circ}$ pour le cycle *A*, $+3,5^{\circ}$ pour le cycle *C* et $1,8^{\circ}$ pour le cycle *D* (voir Fig. 2).

Les paramètres de Altona, Geise & Romers (1968) utilisés pour décrire le cycle *D* sont: $\varphi_m = 46,5^{\circ}$, $\Delta = 10,3^{\circ}$ pour la molécule I; $\varphi_m = 46,8^{\circ}$, $\Delta = 6,6^{\circ}$ pour la molécule II.

Le cycle *D* des molécules de Δ^9 -10 méthyl-17 α nor-19 progestérone sont donc proches de la forme $\frac{1}{2}$ chaise ($\Delta = 0^{\circ}$). Ceci contredit l'explication que nous avons donnée précédemment pour la valeur élevée ($\Delta = +22^{\circ}$) observée dans le cas de la Δ^9 -10 méthyl-21 norprogestérone (Busetta, Comberton, Courseille & Hospital, 1974). Il semble donc que l'adjonction d'un méthyl supplémentaire à la chaîne située en position 17 β soit le responsable de l'évolution du cycle *D* vers la forme β enveloppe théorique par rapport à ce que l'on observe généralement dans le cas d'une fonction ol 17 β .

La cohésion cristalline est réalisée uniquement par

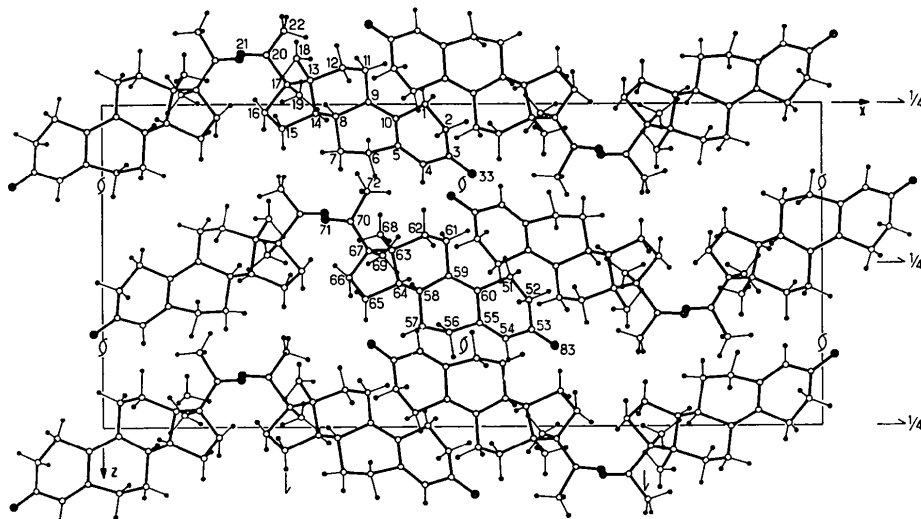


Fig. 3. Projection de la structure suivant l'axe *b*.

un ensemble de forces de van der Waals à caractère attractif. Cependant, contrairement à la structure du dérivé méthylé, on observe ici un certain nombre de contacts à caractère répulsif entre les cycles *A* et *C* de molécules non homologues: O(33)···C(62) 3,29; C(3)···C(62) 3,43; C(53)···C(12) 3,47 Å.

La projection de la structure cristalline suivant l'axe *b* est représentée sur la Fig. 3.

Les auteurs remercient M. Bucourt de la Société Roussel Uclaf qui leur a soumis le problème.

Références

- ALTONA, C., GEISE, H. J. & ROMERS, C. (1968). *Tetrahedron*, **24**, 13-32.
 Busetta, B., Comberton, G., Courseille, C. & Hospital, M. (1974). *Acta Cryst.* **B30**, 2759-2761.

Acta Cryst. (1975). **B31**, 2294

Contributions to the Chemistry of Mo and W.

XIV.* The Mo-O Bond Length/Bond Order Relationship. A Systematical Treatment†

BY F. A. SCHRÖDER

Gmelin-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, 6000 Frankfurt/M. 90, Varrentrappstr. 40/42, Germany (BRD)

(Received 25 March 1974; accepted 28 February 1975)

M-O and O-M-O bond-distance values have been collated from all the relevant crystal structure determinations reported so far. The values could be separated into groups which gave characteristic distances on averaging. Based upon four fundamental coordination polyhedra all 'types' of Mo-O distances could be classified. After four points of definition were established the bond distance/bond order correlation equation $d_{\text{Mo-O}} = 1.874 - 0.60 \log \text{BO}_{\text{Mo-O}}$ was obtained. For all known, totally O-coordinated polyhedra the sums of the bond orders were calculated, permitting a differentiation between the several differently distorted coordination octahedra of Mo in collective structures, as in *e.g.* Mo₄O₁₁.

Introduction

Cotton & Wing (1965*a*) have proposed a correlation diagram between the length of a Mo-O bond and the corresponding bond order. This was done on the assumption that the degenerate *4d*-orbital levels are split in an octahedral field of ligands to leave the three *t_{2g}* orbitals for π bonding. This led to further assumptions. Where only one terminal O atom (O_{*t*}) is bonded to a Mo atom this bond was given a bond order of 3, corresponding to one σ bond plus two π bonds. In those compounds in which two *cis* Mo-O_{*t*} bonds occur, each bond was given a bond order of 2.5 (one σ and $\frac{3}{2}\pi$ bonds). In the compounds of the type MoO₃.dien (dien = diethylenetriamine) (Cotton & Elder, 1964) where three Mo-O_{*t*} occur, each bond was given a bond order of 2 (one σ and one π bond). The same bond order was attributed to each Mo-O bond in the MoO₄²⁻ complex ion. These arrangements are shown in Fig. 1. The Mo-O distances which were attributed to these bond orders were 1.65, 1.69 (and 1.70), 1.736 (and 1.77) Å, respectively. A bond order of 1 was attributed by these authors to a distance of 2.08 Å, which was deduced from the Mo-O distance of coordinated oxalato

groups in the compounds K₂{[MoO₂(C₂O₄)H₂O]₂O} and Ba{[MoO(C₂O₄)H₂O]₂O₂}·3H₂O.

Later (Le Carpentier, Mitschler & Weiss, 1972), it was concluded that a distance of 1.917(7) Å should correspond to 'a bond order close to one' *i.e.* a pure Mo-O (σ) single bond.

A further consideration by Perloff (1970) achieved no progress in the understanding of the Mo-O bond distance/bond order relationship. The recent general treatment by Brown & Shannon (1973), which gives an excellent review of earlier papers on this problem, does not include the case Mo-O but only the related system V-O.

We have been investigating (Schröder, 1973) the results of all crystal structure determinations of adequate accuracy of compounds containing Mo-O bonds. With few exceptions, all these compounds contain Mo in the oxidation state +6, +5 or, formally, states between the two. From these data, characteristic values of bond distances can be derived, which give the first consistent picture of the structural aspects of Mo-O bonding.

Results

- (I) *Derivation of characteristic distances*
 (A) *Terminal Mo-O bonds*

Cotton & Wing (1965*a*) showed from structural data that Mo-O_{*t*} bonds, having Mo in different oxidation states, can be 'scaled' upon one another. They found

* Part XIII: *Z. Naturforsch.* (1973). **28b**, 216.

† Extended part of the Habilitationsschrift of F. Schröder, Lehrstuhl I für Anorganische Chemie der Universität, Freiburg i. Br., June 1973.