

## Structure de la Méthyl-3 $\alpha$ *trans*-Hydrindanone-4 Semicarbazone

PAR S. JEANNIN, Y. JEANNIN ET J. MARTIN-FRÈRE

Laboratoire de Chimie des Métaux de Transition (Laboratoire associé au CNRS n° 608), Université Pierre et Marie Curie, 4 place Jussieu, 75230 Paris CEDEX 05, France

(Reçu le 20 juillet 1977, accepté le 23 septembre 1977)

The crystal structure of the isomer of 3-methyl-4-hydrindanone which has the lowest retention time on a PVC silicon SE 30 column has been solved by X-ray diffraction (as its semicarbazone derivative). It crystallizes in space group  $P2_1/c$ . Lattice constants are  $a = 12.045 \pm 0.005$ ,  $b = 6.97 \pm 0.01$ ,  $c = 14.124 \pm 0.008$  Å,  $\beta = 104.58 \pm 0.04^\circ$ . 1559 independent reflexions, excluding zero reflexions, were collected at room temperature on an automatic CAD-3 Enraf–Nonius diffractometer. The final conventional  $R$  is 0.049. The atomic positions unambiguously show the relative configuration to be *trans*.

### Introduction

Dana, Lo Cicero & Weisbuch (1977) ont étudié la configuration relative des hydrindanones-4 dont le squelette constitue les cycles  $C$  et  $D$  des stéroïdes (Fig. 1). La présence des trois centres asymétriques  $C(3)$ ,  $C(3a)$  et  $C(7a)$  implique l'existence de quatre isomères géométriques dédoublables en inverses optiques (Fig. 2). Le terme *cis* ou *trans* est relatif à la jonction des deux cycles. En outre, si  $\beta$  désigne la face du système bicyclique comportant le groupe angulaire  $R$  en position  $7a$ , on indique par  $\alpha$  ou  $\beta$  l'orientation du méthyle en position 3.

La méthode de préparation utilisée fait intervenir essentiellement l'hydrogénation catalytique des  $\Delta^{3(3a)}$ -hydrindénones-4 en présence de différents métaux (Weisbuch, 1966), éventuellement suivie d'une équilibration en milieu basique ou par voie thermique. Dans le cas où  $R = H$  (Fig. 1), trois isomères ont été obtenus, et purifiés par chromatographie en phase vapeur sur colonne de silicone SE 30. Leur étude par RMN et spectrographie de masse a été entreprise et les auteurs

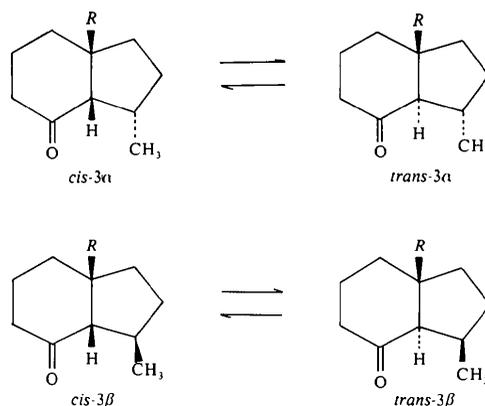


Fig. 2. Représentation des quatre isomères géométriques des méthyl-3 hydrindanones-4.

ont pu de la sorte proposer une structure pour chacun d'entre eux. Ainsi la configuration relative *trans*-3 $\alpha$  a-t-elle été attribuée à l'isomère dont le temps de rétention est le plus faible. Afin de confirmer cette attribution,

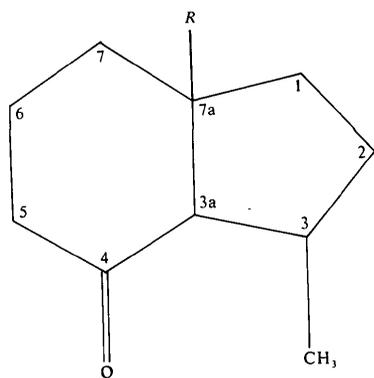


Fig. 1. Formule développée des méthyl-3 hydrindanones-4.

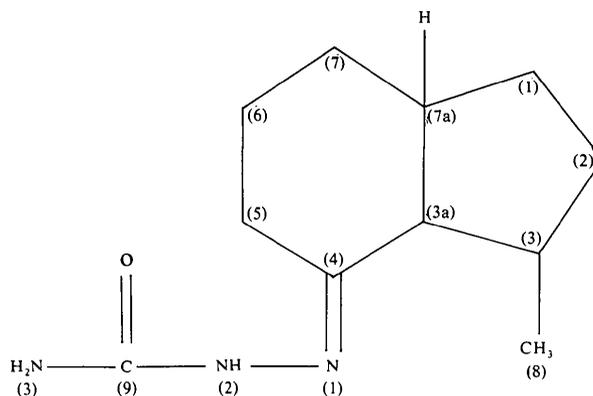


Fig. 3. Formule développée de la semicarbazone étudiée.

nous avons résolu la structure de ce même isomère par diffraction des rayons X. En réalité, le composé étant liquide à la température ordinaire, c'est-à-dire inutilisable pour une étude cristallographique, il a été nécessaire de rechercher un dérivé cristallisable. Après plusieurs essais, Lo Cicero (1977) a opté pour la semicarbazone obtenue sous forme de monocristaux par recristallisation dans l'éthanol; son point de fusion est compris entre 182 et 185°C et sa formule est schématisée sur la Fig. 3.

### Partie expérimentale

Le composé est incolore et stable à l'air. Le cristal choisi pour l'étude aux rayons X était un parallélépipède monté sur la tête goniométrique suivant l'axe  $0k0$ .

Une étude préliminaire par les méthodes de précession et de Laue, en utilisant la raie  $K\alpha$  du molybdène, a montré que la maille a une symétrie monoclinique, avec le groupe spatial  $P2_1/c$ . La masse volumique, mesurée par la méthode de flottation dans une solution aqueuse de sulfate de cadmium, est égale à 1,18 g cm<sup>-3</sup>. Les paramètres de la maille ont été déterminés par moindres carrés à partir des 12 plans de réglage du cristal sur le diffractomètre. Les résultats obtenus sont:  $a = 12,045$  (5),  $b = 6,97$  (1),  $c = 14,124$  (8) Å,  $\beta = 104,58$  (4)°; groupe spatial  $P2_1/c$ , volume de la maille:  $1147 \pm 3$  Å<sup>3</sup>, masse volumique mesurée: 1,18 g cm<sup>-3</sup>,  $Z = 4$  (masse volumique calculée: 1,20 g cm<sup>-3</sup>).

Le cristal a été monté sur un diffractomètre automatique Enraf-Nonius CAD-3 utilisant la radiation  $K\alpha$  du cuivre filtrée au nickel. Les intensités ont été mesurées à l'aide d'un compteur à scintillation associé à un analyseur réglé sur l'énergie de la raie  $K\alpha$  de telle sorte que 90% de l'intensité diffractée soit prise en compte. Des filtres d'atténuation ont été utilisés pour éviter les pertes de comptage. Dans le cas des taches de faible intensité, plusieurs cycles successifs de comptage ont été effectués de manière à obtenir une intensité intégrée aussi voisine que possible de 3000 impulsions par seconde; le nombre maximal de cycles a été limité à trois.

Les distances cristal-tube et cristal-compteur étaient respectivement égales à 235 et 87 mm. L'enregistrement des intensités a été réalisé suivant le mode de balayage  $\theta-2\theta$ , à une vitesse de  $\frac{1}{8}$  degré par seconde; la variation de l'angle  $\theta$  au cours du balayage était d'environ 1,20° et tenait compte de la dispersion  $K\alpha_1-K\alpha_2$ .

Le fond continu a été mesuré en position fixe, pour chaque réflexion, avant et après le balayage, pendant un temps  $t'$  tel que le temps de balayage  $t$  était égal à  $2t'$ .

2026 réflexions indépendantes, correspondant à un angle  $\theta$  de Bragg inférieur à 67°, ont été enregistrées à

la température ordinaire. Les deux réflexions  $\bar{7},0,14$  et  $13,0,0$  ont été choisies comme étalons; l'intensité de l'une ou l'autre de ces réflexions prises alternativement a été mesurée toutes les 41 réflexions.

Une déviation standard  $\sigma$  a été calculée pour chaque réflexion:  $\sigma = \sqrt{[(RI + RBG)/NC]}$ , avec RI = intensité intégrée, RBG = intensité du fond continu correspondant, NC = nombre de cycles de comptage.

Les 467 taches dont l'intensité intégrée était inférieure à  $3\sigma$  n'ont pas été prises en considération.

Les intensités ont été corrigées du facteur de polarisation de Lorentz. Le coefficient d'absorption linéaire  $\mu$  étant faible, égal à 6,3 cm<sup>-1</sup>, et le cristal petit, aucune correction d'absorption n'a été appliquée.

L'affinement de la structure a été mené par la méthode des moindres carrés, en minimisant le facteur  $R = [\sum_i w_i |F_o - k|F_c||^2 / \sum_i w_i |F_o|^2]^{1/2}$ , où  $w$  est égal à  $1/\sigma^2$  et  $k$  est le facteur d'échelle. Les facteurs atomiques de diffusion sont ceux publiés par Cromer & Waber (1965). L'utilisation du programme *MULTAN* (Germain, Main & Woolfson, 1971) a permis de localiser 13 des 15 atomes de carbone et d'azote. Un affinement de leurs positions a conduit à  $R = 0,30$ .

Tableau 1. Coordonnées atomiques

L'écart standard est indiqué entre parenthèses.

	x	y	z
C(4)	0,7192 (2)	-0,6077 (4)	0,9652 (2)
C(5)	0,7191 (3)	-0,5998 (5)	0,0726 (2)
H1(C5)	0,805 (4)	-0,636 (6)	0,112 (3)
H2(C5)	0,673 (3)	-0,705 (6)	0,091 (2)
C(6)	0,6862 (3)	-0,3974 (6)	0,0972 (3)
H1(C6)	0,682 (3)	-0,386 (6)	0,164 (3)
H2(C6)	0,606 (4)	-0,368 (6)	0,067 (3)
C(7)	0,7634 (3)	-0,2446 (5)	0,0727 (2)
H1(C7)	0,849 (3)	-0,276 (6)	0,114 (3)
H2(C7)	0,742 (3)	-0,112 (6)	0,089 (3)
C(7a)	0,7664 (3)	-0,2621 (4)	0,9657 (2)
H(C7a)	0,681 (3)	-0,247 (5)	0,923 (3)
C(3a)	0,8000 (2)	-0,4645 (4)	0,9414 (2)
H(C3a)	0,881 (3)	-0,497 (5)	0,987 (2)
C(1)	0,8503 (4)	-0,1358 (5)	0,9308 (3)
H1(C1)	0,924 (4)	-0,112 (6)	0,987 (3)
H2(C1)	0,825 (4)	-0,002 (6)	0,913 (3)
C(2)	0,8840 (3)	-0,2514 (6)	0,8491 (3)
H1(C2)	0,973 (4)	-0,293 (6)	0,875 (3)
H2(C2)	0,872 (3)	-0,185 (6)	0,795 (3)
C(3)	0,8171 (2)	-0,4416 (4)	0,8381 (2)
H(C3)	0,731 (3)	-0,423 (5)	0,790 (2)
C(8)	0,8786 (4)	-0,6057 (6)	0,8041 (3)
H1(C8)	0,903 (3)	-0,577 (6)	0,746 (3)
H2(C8)	0,831 (4)	-0,730 (7)	0,793 (3)
H3(C8)	0,954 (4)	-0,639 (6)	0,853 (3)
C(9)	0,5153 (2)	-0,9540 (4)	0,8527 (2)
N(1)	0,6563 (2)	-0,7096 (3)	0,8981 (1)
N(2)	0,5815 (2)	-0,8404 (3)	0,9229 (2)
H(N2)	0,583 (3)	-0,867 (5)	0,976 (3)
N(3)	0,5202 (2)	-0,9238 (4)	0,7598 (2)
H1(N3)	0,471 (3)	0,008 (5)	0,718 (2)
H2(N3)	0,560 (3)	-0,826 (5)	0,748 (3)
O	0,4541 (2)	-0,0785 (3)	0,8754 (1)

Une série de Fourier a fait apparaître les deux derniers carbones C(1) et C(2). L'affinement des positions de l'ensemble de ces 15 atomes a donné à  $R$  la valeur 0,15. A ce stade de l'affinement, l'introduction des facteurs de température anisotropes a conduit à  $R = 0,11$ .

Les positions des atomes d'hydrogène ont été calculées toutes les fois que cela était possible, c'est-à-dire pour tous les hydrogènes de la molécule à l'exception de ceux portés par C(8), N(2) et N(3).

Ces positions ont été introduites dans l'affinement en imposant aux atomes d'hydrogène les mêmes facteurs de vibration thermique que ceux des atomes auxquels ils sont liés. Le facteur  $R$  est descendu à 0,086.

Une série de Fourier différence a permis de localiser les six derniers atomes d'hydrogène; leurs coordonnées, introduites dans l'affinement, ont conduit à  $R = 0,070$ . L'introduction du paramètre d'extinction secondaire dans l'affinement a fait décroître  $R$  jusqu'à 0,066; cette décroissance est significative au niveau 0,005 du test de Hamilton (1965).

En ce qui concerne la pondération des facteurs de structure, trois essais ont été réalisés; le premier utilisait la méthode de la parabole de Cruickshank (1965), le deuxième adoptait un facteur de pondération où  $\sigma =$

$\sqrt{\{(RI + RGB) + (RI - RGB)^2 \times 0,01\}/NC}$  et le troisième fixait le poids à 1 pour toutes les réflexions. Le meilleur affinement a été obtenu dans le troisième cas.

A ce stade de l'affinement, les intensités ont été corrigées pour tenir compte des anomalies observées dans quatre étroits domaines de la courbe de variation de l'intensité des étalons; les facteurs de structure ont été recalculés, conduisant à  $R = 0,054$ .

Enfin, 15 taches pour lesquelles  $|F_c - F_o|$  était supérieur à  $2\sqrt{F_c}$ , avec  $|F_c| > 14$ , ont été rejetées:  $R = 0,049$ .

Les résultats obtenus sont les suivants:  $R$  non-pondéré: 0,049,  $R$  pondéré: 0,048,  $F(000)$ : 2956, coefficient d'extinction secondaire  $g = 0,517 \times 10^{-5}$ .

Les paramètres atomiques sont consignés dans le Tableau 1, et le Tableau 2 présente les distances interatomiques et les angles de liaison. Sur le Tableau 3 figurent les axes des ellipsoïdes de vibration thermique.\*

\* Les listes des facteurs de structure et des facteurs d'agitation thermique anisotrope ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 33051: 9 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.

Tableau 2. Distances interatomiques (Å) et principaux angles de liaison (°)

C(1)–C(2)	1,544 (5)	C(2)–H1(C2)	1,08 (4)	C(7a)–C(1)–C(2)	105,25 (28)
C(2)–C(3)	1,539 (5)	C(2)–H2(C2)	0,88 (4)	C(1)–C(2)–C(3)	107,21 (26)
C(3)–C(3a)	1,533 (4)	C(3)–H(C3)	1,09 (3)	C(2)–C(3)–C(3a)	100,70 (23)
C(3a)–C(7a)	1,531 (4)	C(3a)–H(C3a)	1,05 (3)	C(2)–C(3)–C(8)	113,61 (28)
C(7a)–C(1)	1,514 (4)	C(7a)–H(C7a)	1,06 (3)	C(8)–C(3)–C(3a)	114,77 (27)
C(3a)–C(4)	1,491 (4)	C(5)–H1(C5)	1,08 (4)	C(3)–C(3a)–C(7a)	102,97 (22)
C(4)–C(5)	1,519 (4)	C(5)–H2(C5)	1,00 (4)	C(3a)–C(7a)–C(1)	103,12 (26)
C(5)–C(6)	1,529 (6)	C(6)–H1(C6)	0,97 (4)	C(3a)–C(7a)–C(7)	111,69 (25)
C(6)–C(7)	1,510 (5)	C(6)–H2(C6)	0,97 (4)	C(7a)–C(7)–C(6)	109,88 (27)
C(3)–C(8)	1,504 (5)	C(7)–H1(C7)	1,08 (4)	C(7)–C(6)–C(5)	112,87 (29)
C(4)–N(1)	1,270 (3)	C(7)–H2(C7)	1,00 (4)	C(6)–C(5)–C(4)	109,04 (28)
N(1)–N(2)	1,388 (3)	C(8)–H1(C8)	0,96 (4)	C(5)–C(4)–C(3a)	111,39 (23)
N(2)–C(9)	1,359 (3)	C(8)–H2(C8)	1,03 (5)	C(5)–C(4)–N(1)	128,04 (24)
C(9)–N(3)	1,346 (3)	C(8)–H3(C8)	1,02 (4)	C(3a)–C(4)–N(1)	120,43 (22)
C(9)–O	1,232 (3)	N(2)–H(N2)	0,76 (3)		
C(1)–H1(C1)	1,05 (4)	N(3)–H1(N3)	0,93 (4)		
C(1)–H2(C1)	0,99 (4)	N(3)–H2(N3)	0,87 (4)		

Tableau 3. Axes des ellipsoïdes de vibration thermique (Å)

C(4)	0,176 ± 0,004	C(3a)	0,173 ± 0,004	N(1)	0,167 ± 0,004
	0,189 ± 0,005		0,180 ± 0,003		0,189 ± 0,004
	0,206 ± 0,004		0,204 ± 0,004		0,201 ± 0,003
C(5)	0,173 ± 0,004	C(3)	0,175 ± 0,004	N(2)	0,165 ± 0,004
	0,190 ± 0,004		0,202 ± 0,004		0,183 ± 0,004
	0,317 ± 0,004		0,238 ± 0,004		0,242 ± 0,003
C(6)	0,183 ± 0,004	C(2)	0,176 ± 0,005	C(9)	0,177 ± 0,004
	0,222 ± 0,005		0,256 ± 0,004		0,188 ± 0,004
	0,339 ± 0,005		0,303 ± 0,005		0,198 ± 0,003
C(7)	0,187 ± 0,005	C(1)	0,181 ± 0,005	O	0,170 ± 0,003
	0,239 ± 0,004		0,266 ± 0,004		0,200 ± 0,003
	0,281 ± 0,004		0,317 ± 0,005		0,260 ± 0,003
C(7a)	0,189 ± 0,004	C(8)	0,196 ± 0,005	N(3)	0,174 ± 0,003
	0,222 ± 0,004		0,286 ± 0,005		0,187 ± 0,004
	0,225 ± 0,004		0,294 ± 0,005		0,266 ± 0,003

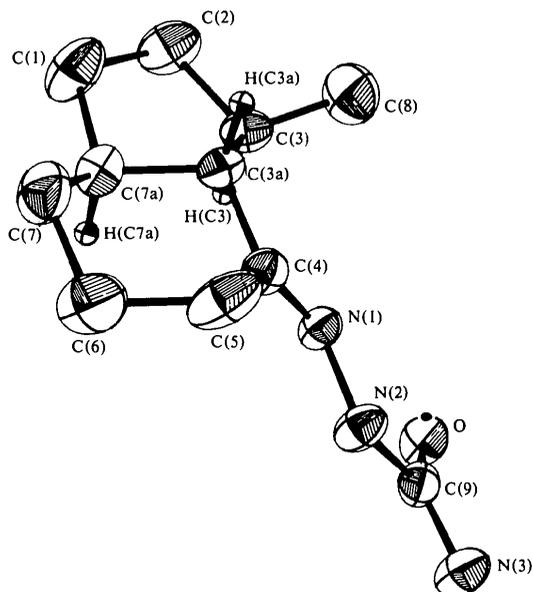


Fig. 4. Tracé ORTEP de l'unité asymétrique. Seuls sont représentés les atomes d'hydrogène utiles à la discussion.

Un tracé ORTEP (Johnson, 1965) de la molécule a été effectué avec des ellipsoïdes de vibration thermique correspondant à une probabilité de 50% (Fig. 4).

#### Discussion des résultats

Deux points méritent d'être discutés. D'une part, et c'était là le but essentiellement recherché, il convient de vérifier si le composé possède une structure *trans*-3 $\alpha$ .

D'autre part, il est intéressant de comparer les longueurs et les angles de liaison, ainsi que la forme et la torsion des cycles, avec les résultats obtenus pour des composés analogues.

(1) Le dessin de la molécule est représenté sur la Fig. 4. Tous les atomes d'hydrogène n'y figurent pas, mais seulement H(C3a), H(C7a) et H(C3) qui sont utiles à la discussion. Il apparaît clairement sur ce dessin que H(C3a) est en position *trans*, sur la jonction C(7a)—C(3a), par rapport à H(C7a). Quant au groupement méthyle, il est orienté en  $\alpha$ , c'est-à-dire du côté opposé à la face  $\beta$ .

D'un point de vue plus quantitatif, les équations des plans moyens du cycle à six carbones puis de l'ensemble des deux cycles ont été déterminées, et les distances des différents atomes à ces deux plans ont été calculées (Tableau 4). On voit que les distances de H(C7a) et H(C3a) au premier plan sont respectivement égales à +1,32 et -1,24 Å, et les distances de H(C7a), H(C3a) et C(8) au deuxième plan sont de +1,38, -1,25 et -0,46 Å. Dans les limites de l'erreur expérimentale, ces résultats confirment que H(C7a) et H(C3a) sont en

Tableau 4. Distances (Å) de quelques atomes aux plans moyens intéressants de la molécule

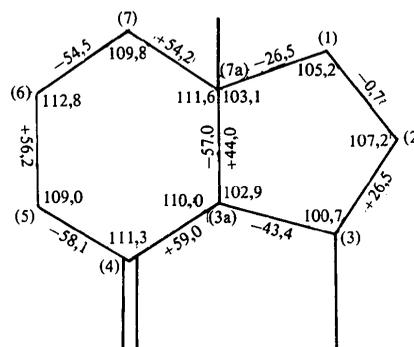
Plan moyen du cycle à six carbones		Plan moyen du cycle à cinq carbones		Plan moyen des deux cycles	
C(4)	+0,27	C(1)	-0,08	H(C3a)	-1,25
C(5)	-0,27	C(2)	-0,06	H(C7a)	+1,38
C(6)	+0,18	C(3)	+0,25	C(8)	-0,46
C(7)	-0,23	C(3a)	-0,29	H(C3)	+1,30
C(7a)	+0,27	C(7a)	+0,20		
C(3a)	-0,19	C(8)	-0,36		
H(C3a)	-1,24	H(C3a)	-1,34		
H(C7a)	+1,32	H(C7a)	+1,24		

position *trans* et que le groupement CH<sub>3</sub> [carbone C(8)] est du même côté que H(C3a), c'est-à-dire du côté  $\alpha$ .

Le composé accuse bien une structure *trans*- $\alpha$ .

(2) Le cycle à six carbones adopte une forme chaise légèrement déformée. Sur la Fig. 5, les angles de torsion des différents dièdres sont indiqués suivant la notation adoptée par Bucourt (1964). L'angle moyen de torsion intracyclique est égal à 56,5°. Ce résultat est voisin de celui qu'ont trouvé Rossi & Ungaretti (1975) pour le bromo-1 acétoxy-5 *trans*-hydrindanone-4 où l'angle moyen de torsion est de 57,3 et 55,8° pour les deux molécules étudiées.

En ce qui concerne les longueurs de liaison C—C dans ce cycle, leur valeur moyenne est 1,52 ± 0,01 Å pour cinq d'entr'elles, avec une valeur un peu plus faible, égale à 1,49 Å, pour la liaison C(3a)—C(4) où C(4) porte le groupe semicarbazone. Ce léger raccourcissement est aussi observé par Rossi & Ungaretti (1975) ainsi que par Neuman & Yordy (1974) pour le bromo-5 $\alpha$  diméthyl-8 $\beta$ ,9 $\alpha$  hydrindandione-1,4 entre le carbone C(4) portant la fonction cétone et le carbone C(3a). Notons que Yordy



observe en outre un très net allongement de C(7a)–C(3a) (1,61 Å) dû aux tensions provoquées dans le cycle par la présence du brome en C(5).

(3) Dans le cycle à cinq carbones, les angles de torsion ont aussi été calculés (Fig. 5). Leurs valeurs sont en accord avec une forme 'enveloppe' presque idéale (Bucourt, 1964).

Notons enfin qu'il existe une torsion très nette au niveau de la jonction des deux cycles, ainsi que le montrent les angles de liaison calculés (Fig. 5), différents des angles théoriques attendus.

En conclusion, notre étude structurale par diffraction des rayons X établit définitivement la configuration relative isomère *trans*-3 $\alpha$  de la méthylhydrindanone-4 étudiée sous la forme de sa semicarbazone.

Nous remercions M G. Dana, Mme B. Lo Cicero et Mme F. Weisbuch de nous avoir proposé ce travail et fourni les cristaux.

#### Références

- BUCOURT, R. (1964). *Bull. Soc. Chim. Fr.* pp. 2080–2092.  
 CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 104–109.  
 CRUICKSHANK, D. W. J. (1965). *Computing Methods in Crystallography*, edited by J. S. ROLLETT, p. 114. Oxford: Pergamon Press.  
 DANA, G., LO CICERO, B. & WEISBUCH, F. (1977). *Tetrahedron*. A paraître.  
 GERMAIN, G., MAIN, P. & WOOLFSON, M. M. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 368–376.  
 HAMILTON, W. C. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 502–510.  
 JOHNSON, C. K. (1965). Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.  
 LO CICERO, B. (1977). Thèse 3ème Cycle, Paris.  
 NEUMAN, M. A. & YORDY, J. D. (1974). *J. Cryst. Mol. Struct.* **4**, 121–127.  
 ROSSI, G. & UNGARETTI, L. (1975). *Cryst. Struct. Commun.* **4**, 683–686.  
 WEISBUCH, F. (1966). *C. R. Acad. Sci. Sér. C*, **263**, 1234–1236.

*Acta Cryst.* (1978). **B34**, 620–624

## Etude Structurale du Bromure de Tétraméthyltétrathiofulvalène, (TMTTF)<sub>2</sub>Br

PAR J. L. GALIGNÉ

Laboratoire de Minéralogie–Cristallographie, Groupe de Dynamique des Phases Condensées LA233, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, place Eugène Bataillon, 34060 Montpellier CEDEX, France

B. LIAUTARD, S. PEYTAVIN ET G. BRUN

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

ET J. M. FABRE, E. TORREILLES ET L. GIRAL

Laboratoire de Chimie Structural Organique, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, place Eugène Bataillon, 34060 Montpellier CEDEX, France

(Reçu le 18 juillet 1977, accepté le 21 septembre 1977)

The organic conductor (TMTTF)<sub>2</sub>Br crystallizes in the triclinic system, space group *P*1, with crystal data:  $a = 7.034$  (2),  $b = 7.358$  (3),  $c = 12.622$  (6) Å,  $\alpha = 90.09$  (3),  $\beta = 93.12$  (3),  $\gamma = 109.07$  (4)°,  $V = 616.4$  (9) Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ ,  $\rho = 1.59$  g cm<sup>-3</sup>. Intensities of 2240 reflections were collected on an automated diffractometer, and 1189 of these were used for the structure determination. The structure was solved by Patterson and Fourier methods and refined by least-squares calculations to a final *R* value of 0.041. The TMTTF units are nearly perpendicular to **a** and repeat by a pseudotranslation of 3.52 Å along **a**. The bromide ions are distributed along lines parallel to **a** with a translation of 7.034 Å.

Dans le cadre de l'étude des composés organiques conducteurs, nous avons déjà signalé (Brun, Peytavin, Liautard, Maurin, Torreilles, Fabre & Giral, 1977; Strzelecka, Giral, Fabre, Torreilles & Brun, 1977)

l'existence d'une nouvelle série de conducteurs organiques anisotropes de formule générale: (TMTTF)<sub>2</sub>X<sup>-</sup> (TMTTF = tétraméthyltétrathiofulvalène) avec X<sup>-</sup> = Br<sup>-</sup>, BF<sub>4</sub><sup>-</sup>, ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>, PF<sub>6</sub><sup>-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, SCN<sup>-</sup>.