

## References

- BROWN, I. D. & SHANNON, R. D. (1973). *Acta Cryst.* A29, 266–282.
- BURZLAFF, H. (1967). *Neues Jb. Miner. Mh.* pp. 157–169.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS*. Report ORNL-TM-305. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- CLARK, J. R. & APPLEMAN, D. E. (1964). *Science*, 145, 1295–1296.
- HAMILTON, W. C. (1959). *Acta Cryst.* 12, 609–610.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.
- MENCHETTI, S., SABELLI, C. & TROSTI-FERRONI, R. (1982). *Acta Cryst.* B38, 2987–2991.
- NARDELLI, M. (1965). Private communication.
- NORTH, A. C. T., PHILLIPS, D. C. & MATHEWS, F. S. (1968). *Acta Cryst.* A24, 351–359.
- PALACHE, C., BERMAN, H. & FRONDEL, C. (1951). *Dana's System of Mineralogy*, Vol. II, pp. 343–344. New York: John Wiley.
- RUMANOVA, I. M., KURBANOV, KH.M. & BELOV, N. V. (1966). *Sov. Phys. Crystallogr.* 10, 513–522.
- XRAY system (1972). Tech. Rep. TR-192. Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland.

*Acta Cryst.* (1982). B38, 3075–3078

## Structure du caténa-Diaqua- $\mu$ -(hexaméthylènetétramine-*N,N'*)-dinitratocadmium(II)

PAR B. VIOSSAT

Laboratoire de Chimie Minérale, UER de Médecine et de Pharmacie, 34 rue du Jardin des Plantes, 86034 Poitiers CEDEX, France

ET P. KHODADAD ET N. RODIER

Laboratoire de Chimie Minérale, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, rue J.-B. Clément, 92290 Châtenay-Malabry, France

(Reçu le 27 novembre 1981, accepté le 16 juin 1982)

**Abstract.**  $[\text{Cd}(\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4)(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NO}_3)_2]$ ,  $\text{C}_6\text{H}_{16}\text{CdN}_6\text{O}_8$ , monoclinic, space group  $B2/b$ ,  $a = 8.833$  (3),  $b = 12.931$  (5),  $c = 12.097$  (3) Å,  $\gamma = 109.18$  (5)°,  $Z = 4$ ,  $D_x = 2.10$ ,  $D_m = 2.05$  (5)  $\text{Mg m}^{-3}$ . The structure was solved by the heavy-atom method and refined by the full-matrix least-squares technique.  $R = 0.020$  and  $R_w = 0.025$  for 1359 independent reflexions. The structure is made up of  $\cdots\text{Cd}[(\text{NO}_3)_2, (\text{H}_2\text{O})_2] - \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 - \text{Cd}[(\text{NO}_3)_2, (\text{H}_2\text{O})_2] - \cdots$  chains which zig-zag along planes  $z = \pm \frac{1}{4}$  and are cross-linked by hydrogen bonds. The Cd atom is surrounded by two O atoms of water molecules, two O atoms of  $\text{NO}_3^-$  groups and two N atoms of hexamethylenetetramine molecules. Each  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4$  molecule makes use of two N lone pairs and links two Cd atoms. The nitrate ligand is unidentate; it occupies two positions in statistical disorder.

**Introduction.** La présence, dans la molécule d'hexaméthylènetétramine, de quatre atomes d'azote susceptibles de se coordonner en fait potentiellement un ligand tétradentate et permet de prévoir des structures mono-, bi- et tridimensionnelles. Jusqu'ici, ces composés ont été étudiés essentiellement par spectroscopie infra-rouge. On connaît très peu de structures cristallines dans lesquelles l'hexaméthylènetétramine joue le rôle de

ligand. Récemment, Pickardt (1981) a décrit très brièvement deux composés du cuivre(II) et un du mercure(II). On peut y ajouter les structures de  $2\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 3\text{CdI}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  (Mak, 1981) et de  $\text{AgNO}_3 \cdot \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4$  (Michelet, Viossat, Khodadad & Rodier, 1981).

L'étude, par diffraction X, de  $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  a été entreprise dans le cadre de l'étude des composés de coordination de l'hexaméthylènetétramine poursuivie par l'un d'entre nous. Elle a eu pour objectif de préciser l'environnement de l'atome de cadmium et pour perspective la mise en évidence d'une organisation différente de celle rencontrée dans  $\text{AgNO}_3 \cdot \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4$ .

Les spectres de Weissenberg, réalisés avec le rayonnement  $\text{Cu K}\alpha$ , montrent un réseau de symétrie monoclinique. Les extinctions systématiques sont celles des groupes spatiaux  $Bb$  et  $B2/b$ . Le test mis au point par Jerphagnon (1972), dans lequel on compare l'action du rayonnement émis par un laser à néodyme sur la poudre du produit étudié et sur la poudre de quartz, n'a pas permis de choisir entre les deux groupes. L'expérience, réalisée au Centre National d'Etudes des Télécommunications à Bagneux, montre que la poudre de  $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  donne un signal dont l'intensité est de l'ordre de deux millièmes de l'intensité

du signal émis par la poudre de quartz. Si ce résultat n'est pas dû à une impureté, il exprime un léger écart à la centrosymétrie. Néanmoins, seul l'affinement dans le groupe *B2/b* a permis d'obtenir pour les longueurs et les angles des liaisons des valeurs comparables à celles rapportées dans la littérature pour leurs homologues.

Les conditions dans lesquelles les mesures d'intensité ont été effectuées sont indiquées dans le Tableau 1. Les dimensions de la maille ont été déterminées à l'aide du diffractomètre automatique utilisé pour mesurer les intensités. Pour le rayonnement Mo *K*α, le coefficient d'absorption du produit étudié est égal à 1,72 mm<sup>-1</sup>. Les corrections d'absorption ont été effectuées par la méthode de de Meulenaer & Tompa (1965).

Les positions des atomes de cadmium ont été déduites de la fonction de Patterson tridimensionnelle. Le calcul de la densité électronique a ensuite permis de localiser les atomes d'oxygène, d'azote et de carbone et celui de la série de Fourier des différences (*F<sub>o</sub>* - *F<sub>c</sub>*) les atomes d'hydrogène de la molécule d'eau. Les coordonnées des atomes d'hydrogène de la molécule organique ont été déterminées avec le programme *FINDH* (Raymond, Corfield & Ibers, 1968). L'affinement a été réalisé avec le programme à matrice complète de Busing (1971). Les facteurs de diffusion utilisés pour calculer les facteurs de structure sont ceux que donnent les *International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Ils ont été corrigés de la partie réelle et de la partie imaginaire de la diffusion anormale. Le facteur d'agitation thermique isotrope associé à chaque atome d'hydrogène a été pris égal au facteur de température équivalent de l'atome auquel il est lié augmenté de 1 Å<sup>2</sup>. Distances et angles ont été calculés avec le programme *ORFFE* (Busing, Martin & Levy, 1964). L'extinction secondaire, supposée isotrope, a été traitée par la méthode de Becker & Coppens (1975).

Le groupement nitrate est présent en désordre statistique sur deux sites qui ont en commun l'atome d'oxygène O(1). L'atome d'azote et les deux autres atomes d'oxygène peuvent occuper, soit les positions N(1a), O(2a) et O(3a) (site *A*), soit les positions N(1b),

Tableau 1. *Mesure de l'intensité des réflexions*

Rayonnement Mo *K*α isolé par un monochromateur.  
Dimensions approximatives du cristal utilisé: 0,15 × 0,22 × 0,25 mm.  
Domaine des mesures: 0 ≤ θ ≤ 28°; -11 ≤ h ≤ 11; 0 ≤ k ≤ 16; 0 ≤ l ≤ 15.  
Balayage θ/2θ d'amplitude s(°) = 0,55 + tg θ.  
Nombre de réflexions mesurées: 1560.  
Nombre de réflexions conservées pour l'affinement [*I* > 2σ(*I*): 1359.  
Indices des réflexions de contrôle des intensités: 234, 008 et 513.  
Ecart-type relatif moyen sur les facteurs de structure correspondant à ces réflexions: 7 × 10<sup>-3</sup>.  
Coefficient d'absorption du cristal pour le rayonnement Mo *K*α: 1,72 mm<sup>-1</sup>.

O(2b) et O(3b) (site *B*). L'affinement des taux d'occupation des deux sites a donné des valeurs inégales mais relativement voisines de 0,50. C'est cette valeur qui a été adoptée lors des derniers affinements. La raison de ce choix sera précisée plus loin.

Les coordonnées atomiques sont rassemblées dans le Tableau 2, les principales distances interatomiques dans le Tableau 3 et les angles des liaisons dans le Tableau 4. La numérotation atomique est indiquée sur les Figs. 1 et 2. Les valeurs finales des facteurs  $R = \frac{\sum |F_o - |F_c||}{\sum F_o}$  et  $R_w = \frac{[\sum w(F_o - |F_c|)^2 / \sum wF_o^2]^{1/2}}{\sum wF_o^2}$  dans lequel  $w = 1/\sigma^2(F)$ , sont respectivement de 0,020 et de 0,025.\*

**Discussion.** La Fig. 1 représente la projection de la structure sur la face (100) et la Fig. 2, obtenue avec le

\* Les listes des facteurs de structure, des paramètres thermiques anisotropes et des distances C-H et O-H ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 38006: 11 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 2. *Coordonnées atomiques relatives, facteurs de température équivalents et écarts types*

Pour les atomes autres que les atomes d'hydrogène

$$B_{eq} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j a_i \cdot a_j \beta_{ij}$$

	x	y	z	<i>B<sub>eq</sub></i> ou <i>B<sub>iso</sub></i> (Å <sup>2</sup> )
Cd	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1,64 (1)
O(1)	0,4613 (2)	0,4318 (2)	0,2536 (1)	3,1 (1)
O(2a)	0,6576 (7)	0,3885 (6)	0,1897 (4)	4,0 (4)
O(2b)	0,632 (1)	0,3994 (7)	0,1410 (6)	6,0 (5)
O(3a)	0,5509 (5)	0,4871 (4)	0,0918 (3)	3,8 (3)
O(3b)	0,5958 (8)	0,5504 (5)	0,1415 (6)	7,7 (5)
O(4)	0,3056 (2)	0,6045 (1)	0,0939 (1)	2,5 (1)
N(1a)	0,5564 (4)	0,4356 (3)	0,1778 (3)	2,0 (1)
N(1b)	0,5678 (5)	0,4621 (4)	0,1756 (4)	2,9 (1)
N(2)	-0,1070 (2)	0,2895 (1)	0,0011 (1)	1,7 (1)
N(3)	0,1000 (2)	0,3418 (1)	0,1446 (1)	1,47 (8)
C(1)	-0,0081 (2)	0,3783 (2)	0,0713 (2)	1,7 (1)
C(2)	0,2037 (2)	0,3001 (2)	0,0725 (2)	1,8 (1)
C(3)	0	$\frac{1}{2}$	-0,0684 (2)	2,1 (2)
C(4)	0	$\frac{1}{2}$	0,2137 (3)	1,6 (1)
H(C1)	0,061 (4)	0,439 (3)	0,025 (3)	2,7
H'(C1)	-0,071 (4)	0,411 (3)	0,115 (3)	2,7
H(C2)	0,275 (4)	0,273 (3)	0,120 (3)	2,8
H'(C2)	0,263 (4)	0,361 (3)	0,027 (3)	2,8
H(C3)	-0,063 (4)	0,192 (2)	-0,118 (3)	3,1
H(C4)	-0,068 (5)	0,276 (3)	0,261 (2)	2,6
H(O4)	0,341 (4)	0,591 (3)	0,049 (3)	3,4
H'(O4)	0,257 (4)	0,639 (3)	0,078 (3)	3,4

Tableau 3. *Distances interatomiques (Å) et écarts types*

Cd-O(1)	2,311 (3)	N(1a)-O(2a)	1,244 (9)	N(2)-C(2')	1,471 (2)
Cd-O(4)	2,278 (2)	N(1b)-O(2b)	1,21 (1)	N(2)-C(3)	1,475 (2)
Cd-N(3)	2,404 (2)	N(1a)-O(3a)	1,244 (6)	N(3)-C(1)	1,488 (3)
O(1)-N(1a)	1,233 (4)	N(1b)-O(3b)	1,162 (8)	N(3)-C(2)	1,488 (3)
O(1)-N(1b)	1,299 (4)	N(2)-C(1)	1,464 (2)	N(3)-C(4)	1,483 (2)

Tableau 4. Angles des liaisons (°) et écarts types

O(1)–Cd–O(4)	101,44 (7)	Cd–N(3)–C(2)	112,7 (1)
O(1)–Cd–N(3)	88,51 (7)	Cd–N(3)–C(4)	113,6 (1)
O(4)–Cd–N(3)	90,99 (6)	C(1)–N(3)–C(2)	107,5 (2)
Cd–O(1)–N(1a)	126,6 (2)	C(1)–N(3)–C(4)	108,3 (1)
Cd–O(1)–N(1b)	117,9 (3)	C(2)–N(3)–C(4)	108,4 (1)
O(1)–N(1a)–O(2a)	119,0 (4)	N(2)–C(1)–N(3)	112,1 (2)
O(1)–N(1b)–O(2b)	120,2 (5)	C(1)–N(2)–C(3)	108,4 (1)
O(1)–N(1a)–O(3a)	119,8 (4)	C(1)–N(2)–C(2 <sup>1</sup> )	108,6 (2)
O(1)–N(1b)–O(3b)	116,9 (6)	C(3)–N(2)–C(2 <sup>1</sup> )	109,5 (2)
O(2a)–N(1a)–O(3a)	121,2 (4)	N(2)–C(3)–N(2)	110,6 (2)
O(2b)–N(1b)–O(3b)	122,9 (6)	N(3)–C(2)–N(2 <sup>1</sup> )	111,2 (2)
Cd–N(3)–C(1)	106,1 (1)	N(3)–C(4)–N(3 <sup>1</sup> )	111,4 (2)

Code de symétrie

(i) $-x, \frac{1}{2} - y, z$	(ii) $\frac{1}{2} - x, 1 - y, \frac{1}{2} - z$
(iii) $\frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} + z$	(iv) $\frac{1}{2} - x, 1 - y, \frac{1}{2} - z$
(v) $1 + x, y, z$	(vi) $1 - x, \frac{1}{2} - y, z$
(vii) $1 - x, 1 - y, -z$	(viii) $-x, 1 - y, -z$
(ix) $x, \frac{1}{2} + y, -z$	(x) $-\frac{1}{2} + x, y, -\frac{1}{2} + z$
(xi) $-1 + x, y, z$	(xii) $x, -\frac{1}{2} + y, -z$

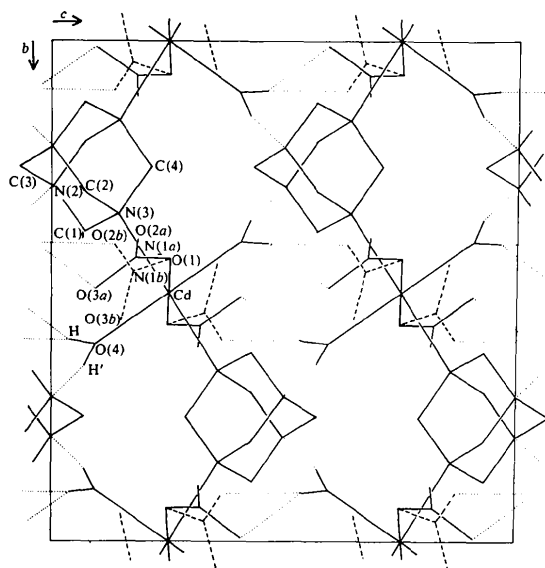


Fig. 1. Projection de la structure sur la face (100). Seules les liaisons hydrogène O–H...O et O–H...N ont été représentées.

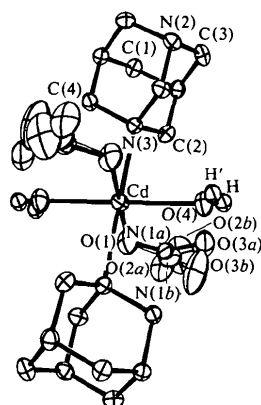


Fig. 2. Environnement de l'atome de cadmium.

programme ORTEP (Johnson, 1965), l'environnement de l'atome de cadmium. La Fig. 1 montre que le composé étudié est formé de chaînes  $\dots \text{Cd}[(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NO}_3)_2] - \text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4 - \text{Cd}[(\text{H}_2\text{O})_2(\text{NO}_3)_2] - \dots$  qui se développent le long des plans  $z = \pm \frac{1}{2}$ . L'atome de cadmium est centre de symétrie et présente la coordination 6. Il est lié à deux atomes d'azote et à quatre atomes d'oxygène qui forment un octaèdre irrégulier (Tableaux 3 et 4). Les atomes d'azote appartiennent chacun à une molécule d'hexaméthylènetétramine, deux atomes d'oxygène à des molécules d'eau et les deux autres à des groupements nitrate (Fig. 2). Les longueurs des liaisons Cd–O(4) et Cd–O(4<sup>ii</sup>) [2,278 (2) Å], entre l'atome de cadmium et les atomes d'oxygène des deux molécules d'eau, sont tout à fait comparables à celles de leurs homologues dans Cd(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O [2,26 (2) et 2,32 (2) Å] (Matković, Ribar, Zelenko & Peterson, 1966). Les distances Cd–O(1) et Cd–O(1<sup>ii</sup>) [2,311 (3) Å], dans lesquelles O(1) et O(1<sup>ii</sup>) sont les atomes d'oxygène de deux groupements nitrate, sont difficiles à comparer aux données de la littérature car, dans les composés de coordination du cadmium, lorsque le groupement nitrate est présent, il est toujours ligand bidentate. C'est le cas, par exemple, dans le dinitrate de di- $\mu$ -adéninium-di- $\mu$ -aqua-tétrakis(nitrato-O,O')dicadmium(II) (Wei & Jacobson, 1981), dans l'aquadinitratobis(quinoléine)cadmium(II) (Cameron, Taylor & Nuttall, 1973) et dans le tétraaquadinitratocadmium(II) déjà cité. Les longueurs des liaisons Cd–O, unissant l'atome métallique aux groupements nitrate, vont de 2,343 à 2,622 Å dans le premier de ces composés et de 2,393 à 2,559 Å dans le second. Les distances Cd–N(3) et Cd–N(3<sup>ii</sup>), où N(3) et N(3<sup>ii</sup>) appartiennent à des molécules d'hexaméthylènetétramine, sont voisines de la valeur trouvée par Wei & Jacobson dans le composé précédemment cité, soit 2,413 (7) Å.

Le fait que NO<sub>3</sub><sup>-</sup> soit ligand unidentate paraît dû à l'encombrement des molécules d'hexaméthylènetétramine autour de l'atome de cadmium car, dans Cd(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O, les groupements nitrate sont unis à l'atome métallique par deux atomes d'oxygène. La présence de NO<sub>3</sub><sup>-</sup> sur deux sites peut s'expliquer par la distance très courte [2,457 (9) Å] qui sépare O(3a) et O(3a<sup>vii</sup>). En effet, selon Bondi (1964), la somme des rayons de van der Waals de deux atomes d'oxygène est de l'ordre de 3,00 Å. Les positions O(3a) et O(3a<sup>vii</sup>), qui se déduisent l'une de l'autre par symétrie par rapport à un centre, ne peuvent être occupées simultanément. C'est la raison pour laquelle les taux d'occupation des deux sites ont été pris égaux à 0,50. Ainsi, lorsque A et B<sup>vii</sup> sont occupées, A<sup>vii</sup> et B sont vides et inversement, ce qui explique le léger écart à la centrosymétrie révélé par le test de Jerphagnon.

Dans le site A, les trois liaisons N–O ont pratiquement la même longueur et les angles O–N–O diffèrent de 120° d'une quantité au plus égale à l'incertitude.

Dans le site *B*, les distances N—O vont de 1,162 (8) à 1,299 (4) Å et les angles O—N—O de 116,9 (6) à 122,9 (6)°. Dans le premier cas, la géométrie du groupement NO<sub>3</sub><sup>-</sup> est sensiblement la même que dans le (diazaz-1,4 cycloheptane)dinitratocuvivre(II) hémihydrate et dans le second, elle est comparable à celle de son homologue dans K[Au(NO<sub>3</sub>)<sub>4</sub>] (Addison, Logan, Wallwork & Garner, 1971). NO<sub>3</sub><sup>-</sup> est donc plus symétrique dans le site *A* que dans le site *B*. Parallèlement, on observe que les facteurs de température équivalents de N(1*a*), O(2*a*) et O(3*a*) sont sensiblement inférieurs à ceux de leurs homologues respectifs N(1*b*), O(2*b*) et O(3*b*). La distance N(1*a*)N(1*b*) des deux positions occupées alternativement par l'atome d'azote est de 0,324 (4) Å.

Dans la molécule organique, les liaisons C—N ont pour longueurs extrêmes 1,464 et 1,488 Å et leur longueur moyenne est égale à 1,478 Å. Les angles N—C—N sont compris entre 110,6 et 112,1° (moyenne: 111,4°) et les angles C—N—C entre 107,5 et 109,5° (moyenne: 108,4°). Dans la structure de l'hexaméthylènetétramine (Becka & Cruickshank, 1963), la moyenne des distances C—N est égale à 1,478 Å, celle des angles N—C—N à 113,3° et celle des angles C—N—C à 107,5°.

Les chaînes ...Cd[(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>4</sub>-Cd-[(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]-... sont unies les unes aux autres par les liaisons hydrogène O(4)—H(O4)...O(2*b*<sup>vii</sup>), O(4)—H(O4)...O(3*a*<sup>vii</sup>) et O(4)—H'(O4)...N(2*viii*) (Fig. 1). Ces liaisons s'établissent entre la molécule d'eau et un atome d'oxygène du groupement nitrate ou un atome d'azote de l'hexaméthylènetétramine. Il semble que l'on puisse aussi admettre l'existence de plusieurs liaisons hydrogène du type C—H...O (Tableau 5). Les atomes C(1), C(2) et C(4), qui interviennent dans ces liaisons, sont tous voisins de N(3) (Fig. 1) dont la fixation sur l'atome de cadmium doit provoquer des déplacements d'électrons dans le sens C → N et, par suite, la polarisation des liaisons C—H dans le sens C<sup>(δ-)</sup>—H<sup>(δ+)</sup>. Seules sont indiquées dans le Tableau 5, les interactions C—H...O pour

Tableau 5. *Liaisons hydrogène*

A—H...B	A—B (Å)	A—H...B (°)
O(4)—H(O4)...O(2 <i>b</i> <sup>vii</sup> )	2,896 (7)	146 (5)
O(4)—H(O4)...O(3 <i>a</i> <sup>vii</sup> )	3,006 (5)	170 (4)
O(4)—H'(O4)...N(2 <i>viii</i> )	2,802 (3)	166 (4)
C(1)—H'(C1)...O(1 <sup>ii</sup> )	3,163 (3)	125 (2)
C(1)—H'(C1)...O(2 <i>a</i> <sup>xi</sup> )	3,323 (7)	145 (2)
C(1)—H'(C1)...O(2 <i>b</i> <sup>xii</sup> )	3,39 (1)	140 (3)
C(1)—H(C1)...O(4)	3,314 (3)	126 (2)
C(2)—H(C2)...O(2 <i>a</i> <sup>vi</sup> )	3,379 (8)	147 (2)
C(2)—H(C2)...O(2 <i>b</i> <sup>vi</sup> )	3,45 (1)	140 (2)
C(2)—H'(C2)...O(3 <i>a</i> )	3,230 (5)	119 (2)
C(2)—H'(C2)...O(3 <i>b</i> <sup>vii</sup> )	3,363 (7)	155 (3)
C(4)—H(C4)...O(3 <i>b</i> <sup>ii</sup> )	3,445 (8)	144 (3)

Tableau 6. *Distances interatomiques (Å) entre les chaînes...Cd[(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>4</sub>-...*

O(1)—C(3 <sup>iii</sup> )	3,286 (3)	O(2 <i>b</i> )-N(2 <sup>v</sup> )	3,51 (1)
O(1)—N(2 <sup>iii</sup> )	3,459 (2)	O(2 <i>b</i> )-N(1 <i>b</i> <sup>iv</sup> )	3,470 (8)
O(1)—O(2 <i>a</i> <sup>iv</sup> )	3,473 (6)	O(3 <i>a</i> )-C(2 <sup>vii</sup> )	3,506 (5)
O(2 <i>a</i> )-N(1 <i>a</i> <sup>iv</sup> )	3,216 (7)	O(3 <i>a</i> )-N(1 <i>a</i> <sup>vii</sup> )	3,624 (6)
O(2 <i>a</i> )-O(2 <i>a</i> <sup>iv</sup> )	3,16 (1)	O(4)-C(1 <sup>viii</sup> )	3,365 (3)
O(2 <i>a</i> )-O(4 <sup>vii</sup> )	3,442 (6)	O(4)-C(2 <sup>ix</sup> )	3,570 (3)
O(2 <i>a</i> )-C(3 <sup>iii</sup> )	3,471 (6)	O(4)-N(1 <i>a</i> <sup>vii</sup> )	3,600 (4)
O(2 <i>a</i> )-N(2 <sup>v</sup> )	3,593 (7)	O(4)-N(1 <i>b</i> <sup>vii</sup> )	3,638 (5)
O(2 <i>a</i> )-O(3 <i>a</i> <sup>iv</sup> )	3,670 (7)	C(1)-C(1 <sup>viii</sup> )	3,549 (4)
O(2 <i>b</i> )-O(3 <i>b</i> <sup>iv</sup> )	3,48 (1)		

lesquelles la distance C—O est inférieure à 3,500 Å. Les distances interatomiques entre les chaînes ...Cd-[(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>N<sub>4</sub>-Cd[(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]-... , non citées à propos des liaisons hydrogène, sont rassemblées dans le Tableau 6; elles ont été calculées jusqu'à 3,700 Å.

Nous remercions Mme Chavignon et M Le Person du Centre National d'Etudes des Télécommunications pour l'aide qu'ils nous ont apportée lors de la détermination du groupe spatial.

## Références

- ADDISON, C. C., LOGAN, N., WALLWORK, S. C. & GARNER, C. D. (1971). *Q. Rev. Chem. Soc.* **25**, 289–323.
- BECKA, L. N. & CRUICKSHANK, D. W. J. (1963). *Proc. R. Soc. London Ser. A*, **273**, 435–454.
- BECKER, P. & COPPENS, P. (1975). *Acta Cryst.* **A31**, 417–425.
- BONDI, A. (1964). *J. Phys. Chem.* **68**, 441–451.
- BUSING, W. R. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 683–684.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1964). *ORFFE*. Report ORNL-TM-306. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- CAMERON, A. F., TAYLOR, D. W. & NUTTALL, R. H. (1973). *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* pp. 2130–2134.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV, p. 72. Birmingham: Kynoch Press.
- JERPHAGNON, J. (1972). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **95**, 262–267.
- JOHNSON, C. K. (1965). *ORTEP*. Report ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- MAK, T. C. W. (1981). *Acta Cryst.* **A37**, C225.
- MATKOVIĆ, B., RIBAR, B., ZELENKO, B. & PETERSON, S. W. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 719–725.
- MEULENAER, J. DE & TOMPA, H. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 1014–1018.
- MICHELET, A., VIOSSAT, B., KHODADAD, P. & RODIER, N. (1981). *Acta Cryst.* **B37**, 2171–2175.
- PICKARDT, J. (1981). *Acta Cryst.* **A37**, C228.
- RAYMOND, K. N., CORFIELD, P. W. R. & IBERS, J. A. (1968). *Inorg. Chem.* **7**, 1362–1373.
- WEI, C. H. & JACOBSON, K. B. (1981). *Inorg. Chem.* **20**, 356–363.