

## SHORT COMMUNICATIONS

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible.

*Acta Cryst.* (1987). **B43**, 111

**Structures cristallines à 415 K (phase II) et 295 K (phase III) de  $KFeF_4$ . Errata.** Par JACQUES LAPASSET, PHILIPPE SCIAU, JACQUES MORET et NICOLE GROS, *Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie,\* Université des Sciences et Techniques du Languedoc, Place E. Bataillon, 34060 Montpellier CEDEX, France*

(Reçu le 11 juillet 1986; accepté le 21 juillet 1986)

## Abstract

Owing to a typing error,  $c = 13.33 \text{ \AA}$  was used instead of  $12.33 \text{ \AA}$  in the bond-length and bond-angle calculations for phase III in the paper by Lapasset, Sciau, Moret & Gros [*Acta Cryst.* (1986), **B42**, 258–262]. The corrected data are given.

La dernière partie de la *Discussion, Géométrie des octaèdres*, doit être modifiée comme suit:

Les octaèdres  $FeF_6$  paraissent réguliers et peu déformés (Tableau 2); leur géométrie est presque identique dans les deux phases étudiées. On observe des distances moyennes Fe–F terminaux nettement plus courtes ( $1,876 \text{ \AA}$ ) que les distances Fe–F liés ( $1,967 \text{ \AA}$ ). Ces valeurs sont semblables à celles obtenues dans  $NH_4FeF_4$  (Leblanc, Ferey, De Pape & Teillet, 1985) où les distances correspondantes moyennes sont  $1,867$  et  $1,956 \text{ \AA}$ .

## Références

- LAPASSET, J., SCIAU, P., MORET, J. & GROS, N. (1986). *Acta Cryst.* **B42**, 258–262.  
LEBLANC, M., FERREY, G., DE PAPE, R. & TEILLET, J. (1985). *Acta Cryst.* **C41**, 657–660.

\* Laboratoire associé au CNRS, LA 233.

Tableau 2. Longueurs ( $\text{\AA}$ ) et angles ( $^\circ$ ) de liaisons

Phase III			
Fe–F(1 <sup>i</sup> )	1,954 (4)	K(2)–F(31 <sup>vii</sup> )	2,646 (4)
Fe–F(1 <sup>ii</sup> )	1,981 (4)	K(2)–F(31 <sup>viii</sup> )	2,704 (3)
Fe–F(21)	1,968 (3)	K(2)–F(32 <sup>v</sup> )	2,694 (4)
Fe–F(22 <sup>iii</sup> )	1,970 (3)	F(1)–F(22 <sup>ix</sup> )	2,794 (4)
Fe–F(31)	1,877 (3)	F(1)–F(22 <sup>x</sup> )	2,764 (5)
Fe–F(32 <sup>iiii</sup> )	1,874 (3)	F(1)–F(21 <sup>y</sup> )	2,798 (5)
K(1)–F(1)	3,226 (5)	F(1)–F(21 <sup>z</sup> )	2,776 (4)
K(1)–F(21 <sup>y</sup> )	3,905 (6)	F(1)–F(31 <sup>z</sup> )	2,717 (5)
K(1)–F(21 <sup>z</sup> )	2,953 (6)	F(1)–F(31 <sup>y</sup> )	2,704 (5)
K(1)–F(22 <sup>vi</sup> )	3,840 (6)	F(1)–F(32 <sup>vi</sup> )	2,700 (5)
K(1)–F(31 <sup>y</sup> )	2,718 (4)	F(1)–F(32 <sup>ix</sup> )	2,750 (5)
K(1)–F(32 <sup>vii</sup> )	2,676 (4)	F(21)–F(31)	2,750 (4)
K(1)–F(32 <sup>viii</sup> )	2,731 (3)	F(21)–F(32 <sup>iii</sup> )	2,680 (4)
K(2)–F(1 <sup>viii</sup> )	3,604 (5)	F(22)–F(31 <sup>viii</sup> )	2,696 (4)
K(2)–F(21 <sup>vii</sup> )	3,716 (5)	F(22)–F(32)	2,749 (4)
K(2)–F(22)	2,902 (6)	F(31)–F(32 <sup>ix</sup> )	3,234 (5)
K(2)–F(22 <sup>y</sup> )	3,720 (6)		
Fe <sup>i</sup> –F(1)–Fe <sup>v</sup>	166,0 (1)	F(1 <sup>i</sup> )–Fe–F(31)	90,3 (2)
Fe–F(21)–Fe <sup>xi</sup>	151,5 (2)	F(1 <sup>ii</sup> )–Fe–F(31)	89,0 (2)
Fe <sup>iiii</sup> –F(22)–Fe <sup>xi</sup>	152,3 (2)	F(1 <sup>iii</sup> )–Fe–F(32 <sup>iii</sup> )	91,0 (2)
F(1 <sup>i</sup> )–Fe–F(1 <sup>ii</sup> )	179,21 (3)	F(1 <sup>i</sup> )–Fe–F(32 <sup>iii</sup> )	89,7 (2)
F(31)–Fe–F(32 <sup>iii</sup> )	179,8 (1)	F(21)–Fe–F(22 <sup>iii</sup> )	179,6 (2)
F(1 <sup>i</sup> )–Fe–F(21)	90,1 (1)	F(21)–Fe–F(31)	91,3 (2)
F(1 <sup>ii</sup> )–Fe–F(21)	90,3 (1)	F(21)–Fe–F(32 <sup>iii</sup> )	88,4 (2)
F(1 <sup>i</sup> )–Fe–F(22 <sup>iii</sup> )	89,6 (1)	F(22 <sup>iii</sup> )–Fe–F(31)	89,0 (2)
F(1 <sup>ii</sup> )–Fe–F(22 <sup>iii</sup> )	90,0 (1)	F(22 <sup>iii</sup> )–Fe–F(32 <sup>iii</sup> )	91,3 (2)
Codes de symétrie: (i) $-x, -y, 1-z$ ; (ii) $x, \frac{1}{2}-y, z-\frac{1}{2}$ ; (iii) $x-1, y, z$ ; (iv) $x, y, z+1$ ; (v) $x, \frac{1}{2}-y, z+\frac{1}{2}$ ; (vi) $1-x, -y, 1-z$ ; (vii) $x-1, y, 1+z$ ; (viii) $1+x, y, z$ ; (ix) $x-1, \frac{1}{2}-y, z+\frac{1}{2}$ ; (x) $x-\frac{1}{2}, -y, 1-z$ ; (xi) $\frac{1}{2}-x, y, z$ ; (xii) $1-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z$ ; (xiii) $-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z$ ; (xiv) $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, z-\frac{1}{2}$ ; (xv) $x, y, z-1$ ; (xvi) $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, z-\frac{1}{2}$ .			

*Acta Cryst.* (1987). **B43**, 111–112

**Bond-length–bond-strength correlation between N–O and C–N of pyridine N-oxides.** By KLAUS EICHHORN, *Fachrichtung Kristallographie, Universität des Saarlandes, D-6600 Saarbrücken 11, Federal Republic of Germany*

(Received 19 September 1984; accepted 21 August 1986)

## Abstract

An empirical correlation is established between N–O and C–N bond lengths of pyridine 1-oxides involved in both hydrogen bonding and metal complexes, leading to a decrease of N–O  $\pi$ -bond order from 35% in the free N-oxide to about 14% in its metal complexes.

Pyridine 1-oxide (PyO) is known to form hydrogen-bonded adducts with strong acids (HA), normally 1:1 adducts  $PyO \cdot HA$ , sometimes also 2:1 adducts  $(PyO \cdots H \cdots OPy)^+ A^-$  (Hadzi, 1962). Hydrogen bonding has a pronounced effect on both the N–O and C–N bonds of the N-oxide. Seventy-