

single H atom between two alternative acceptors, or (ii), if the alternative acceptors are close enough together, a bifurcated hydrogen bond.

#### References

- AKHTAR, M. N. & SMITH, A. J. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 1361–1366.
- BAGNALL, K. W. (1972). *The Actinide Elements*, pp. 164–166. Amsterdam: Elsevier.
- BERZELIUS, J. J. (1829). *Poggendorf's Ann.* **16**, 385–415.
- BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 180–182.
- CLEVE, P.-T. (1874). *Bull. Soc. Chim. Fr.* **21**, 115–123.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.
- MOLODKIN, A. K. & ARUTYUNYAN, E. G. (1965). *Russ. J. Inorg. Chem.* **10**, 189–195.
- MUETTERTIES, E. L. & WRIGHT, C. M. (1967). *Q. Rev. (London)*, **21**, 109–194.
- ROOF, R. B. (1959). *Phys. Rev.* **113**, 820–825.
- ROOF, R. B. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 934–940.
- ZEBROSKI, E. L., ALTER, H. W. & HEUMANN, F. K. (1951). *J. Am. Chem. Soc.* **73**, 5646–5650.

*Acta Cryst.* (1983). **C39**, 415–418

## Mo<sub>6</sub>Br<sub>6</sub>S<sub>3</sub>: Nouveau Composé Bidimensionnel à Clusters Octaédriques Mo<sub>6</sub>

PAR C. PERRIN, M. POTEL ET M. SERGENT

Université de Rennes–Beaulieu, Laboratoire de Chimie Minérale B, Laboratoire Associé au CNRS n° 254, avenue du Général Leclerc, 35042 Rennes CEDEX, France

(Reçu le 30 mars 1982, accepté le 25 novembre 1982)

**Abstract.**  $M_r = 1151.3$ , orthorhombic,  $Cmcm$ ,  $a = 17.250$  (7),  $b = 6.600$  (4),  $c = 11.929$  (7) Å,  $Z = 4$ ,  $V = 1358$  Å<sup>3</sup>,  $D_m = 5.51$ ,  $D_x = 5.63$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$  Å,  $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 24.34$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 2040$ . The structure has been solved by direct methods and refined by least squares to  $R = 0.062$  ( $R_w = 0.052$ ) for 423 independent reflections. The structure can be described as a layer structure of [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>] units. Along **c**, these units are bonded by their apices to build up chains. Along **b**, these chains are linked by Mo–S bonds. Along **a**, the cohesion is made only by contacts between Br atoms, leading to a two-dimensional character for this compound.

**Introduction.** La chimie du molybdène de degré II se caractérise principalement par la présence de composés comportant des motifs [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>] ( $L = \text{halogène ou chalcogène}$ ) à clusters octaédriques Mo<sub>6</sub> (Kepert, 1972). Récemment, nous avons isolé de nouveaux chalcologénures du Mo<sup>II</sup>: Mo<sub>6</sub>X<sub>10</sub>Y ( $X = \text{Cl, Br, I}$ ;  $Y = \text{S, Se, Te}$ ) dans lesquels les motifs [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>] sont reliés entre eux par six atomes d'halogène en pont (Perrin, Sergent & Prigent, 1973; Perrin, Sergent, Le Traon & Le Traon, 1978), et Mo<sub>6</sub>S<sub>6</sub>X<sub>2</sub> ( $X = \text{Br, I}$ ) où les motifs [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>] sont directement reliés entre eux (Sergent, Fischer, Decroux, Perrin & Chevrel, 1977; Perrin, Chevrel, Sergent & Fischer, 1979).

Nous décrivons ici un nouveau thiobromure du molybdène(II) présentant un type d'empilement original des motifs [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>].

**Partie expérimentale.** Mo<sub>6</sub>Br<sub>6</sub>S<sub>3</sub> a été préparé à partir d'un mélange de 3MoBr<sub>2</sub> + 3Mo + 3S comprimé, puis chauffé en tube de silice scellé sous vide à une température de 1473 K pendant 24 h, suivi d'un ou deux recuits. Des monocristaux en forme de plaquettes noires brillantes croissent par recuit prolongé à 1523 K.

L'étude cristallographique préliminaire effectuée sur chambre photographique de Weissenberg et de précession conduit aux groupes spatiaux possibles  $Cmcm$ ,  $Cmc2_1$ ,  $C2cm$ . Les paramètres de maille ont été affinés sur poudre selon la méthode des moindres carrés en utilisant le silicium comme étalon interne. L'enregistrement des intensités diffractées par un monocristal a été effectué à l'aide d'un diffractomètre automatique CAD-4 Nonius. Dimensions du cristal utilisé: 0,01 × 0,028 × 0,17 mm; radiation: Mo  $K\alpha$ ; monochromateur: lame de graphite; distance cristal–détecteur: 173 mm;  $\theta \leq 30^\circ$ ; balayage:  $\omega - 2\theta$ ; amplitude de balayage:  $(1,20 + 0,35 \text{ tg } \theta)^\circ$ ; ouverture:  $(2 + 0,50 \text{ tg } \theta)$  mm; nombre de réflexions non nulles indépendantes: 493. Les intensités mesurées, exploitées par le programme MAXE (Le Marouille, 1972) sont corrigées du facteur de Lorentz–polarisation.

Des corrections d'absorption ont été effectuées en utilisant la méthode analytique décrite par de Meulenaer & Tompa (1965); les faces latérales du cristal en forme de parallépipède rectangle s'indexent selon les plans (100) et (010) et les faces extrêmes selon (001). Le facteur de transmission varie de 0,51 à 0,78 avec une valeur moyenne de 0,70. Seules les 423

réflexions répondant au critère  $I > \sigma(I)$  sont conservées pour la résolution structurale.

La structure a été résolue dans le groupe *Cmcm* par la méthode directe, à l'aide du programme *MULTAN* (Germain, Main & Woolfson, 1971). La solution présentant la meilleure figure de mérite nous a permis de placer tous les atomes: un Mo et un Br en position 16(*h*), un Mo et un S en position 8(*f*), un Br en position 8(*g*) et un S en position 4(*c*). L'affinement par moindres carrés et matrice totale (Prewitt, 1966) des coordonnées de positions atomiques et des facteurs de température isotropes, puis anisotropes, converge vers les valeurs  $R = 0,062$  et  $R_w = 0,052$ . Le facteur de pondération  $w$  est calculé à partir de la statistique de comptage (McCandlish, Stout & Andrews, 1975). Les facteurs de diffusion atomique sont calculés à partir de la formulation de Vand, Eiland & Pepinsky (1957) tabulée par Moore (1963) et corrigés de la dispersion anormale (*International Tables for X-ray Crystallography*, 1974).

Un calcul d'une série de Fourier 'différence' tridimensionnelle effectué au stade final de l'affinement ne laisse pas apparaître de pics supérieurs à  $1 \text{ e } \text{Å}^{-3}$ . Des tests d'affinement d'une éventuelle occupation statistique ont montré que le brome et le soufre sont effectivement ordonnés.

Des essais d'affinement dans les groupes spatiaux *C2cm* et *Cmc2<sub>1</sub>* font apparaître de nombreuses corrélations entre les positions atomiques, ce qui nous a conduit à rejeter ces groupes d'espace.

**Discussion.** Les coordonnées atomiques et les facteurs de température anisotropes sont rassemblés dans le Tableau 1, les distances interatomiques et les angles de valence dans le Tableau 2.\*

La structure de Mo<sub>6</sub>Br<sub>6</sub>S<sub>3</sub> est constituée de motifs [Mo<sub>6</sub>S<sub>4</sub>Br<sub>4</sub>] (Fig. 1) analogues aux motifs [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>] bien connus dans la chimie du molybdène(II). L'originalité de cette structure provient de l'apparition d'un nouveau type d'empilement des motifs [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>]: deux sommets opposés de chaque motif sont chacun mis en commun avec un motif voisin, ce qui conduit à des chaînes de motifs se développant selon *c* (Fig. 2). Selon *b*, ces différentes chaînes sont reliées entre elles par des liaisons Mo—S intermotif analogues à celles que l'on trouve dans Mo<sub>6</sub>S<sub>6</sub>Br<sub>2</sub> (Perrin *et al.*, 1979), ce qui conduit à des feuillets parallèles au plan *bc*. Entre ces feuillets, n'existent que de faibles interactions entre atomes de brome, ce qui confère à ce composé un caractère bidimensionnel remarquable.

\* Les listes des facteurs de structure et des paramètres thermiques anisotropes, ainsi que la figure de la projection de la structure sur le plan (010), ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 38265: 6 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.

**Motif** [Mo<sub>6</sub>S<sub>4</sub>Br<sub>4</sub>]. Le motif [Mo<sub>6</sub>S<sub>4</sub>Br<sub>4</sub>] est représenté sur la Fig. 1. La disposition des ligandes soufre et brome sur le pseudo-cube S<sub>4</sub>Br<sub>4</sub> est ordonnée: les quatre atomes de soufre sont situés sur deux arêtes opposées de ce cube, les atomes de brome occupant les autres sommets.

Chaque atome de molybdène se trouve en site pyramidal, légèrement au-dessus d'une face du cube S<sub>4</sub>Br<sub>4</sub>, à une distance de celle-ci de 0,10 Å dans le cas de Mo(1), et de 0,018 Å pour Mo(2) (Fig. 3). On obtient ainsi un cluster Mo<sub>6</sub> de symétrie *C<sub>2h</sub>*, avec des distances Mo—Mo comprises entre 2,63 et 2,68 Å. Ces distances sont intermédiaires entre celles que l'on observe, d'une part dans les composés dérivés de Mo<sub>6</sub>S<sub>8</sub> (Chevrel, Sergent & Prigent, 1974), d'autre part dans Mo<sub>6</sub>Br<sub>12</sub>·2H<sub>2</sub>O (2,63 et 2,64 Å) (Guggenberger & Sleight, 1969).

Tableau 1. Paramètres atomiques et facteurs d'agitation thermique isotropes équivalents (Å<sup>2</sup>)

Les écarts types sont indiqués entre parenthèses.

$$B_{\text{eq}} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j B_{ij} \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j$$

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>B</i> <sub>eq</sub> (Å <sup>2</sup> )
Mo(1) 16( <i>h</i> )	0,9227 (2)	0,9147 (3)	0,1020 (2)	0,65
Mo(2) 8( <i>f</i> )	0	0,7428 (7)	0,9375 (3)	0,63
Br(1) 16( <i>h</i> )	0,8490 (2)	0,7458 (6)	0,9360 (3)	1,49
Br(2) 8( <i>g</i> )	0,8171 (3)	0,7936 (7)	$\frac{1}{4}$	1,29
S(1) 4( <i>c</i> )	0	0,9109 (25)	$\frac{1}{4}$	0,85
S(2) 8( <i>f</i> )	0	0,3830 (16)	0,6289 (8)	1,05

Tableau 2. Distances interatomiques (Å) et angles de valence (°) avec leurs écarts types

(a) Distances et angles intramotif

Cluster Mo <sub>6</sub>			
Mo(1)—Mo(1 <sup>h</sup> )	2,682 (3)	Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(1)—Mo(2 <sup>h</sup> )	60,24 (14)
Mo(1)—Mo(1 <sup>hh</sup> )	2,668 (4)	Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(2 <sup>h</sup> )	58,92 (13)
Mo(2)—Mo(1)	2,666 (4)	Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(2 <sup>h</sup> )—Mo(1)	60,83 (13)
Mo(2)—Mo(1 <sup>h</sup> )	2,630 (4)	Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(2 <sup>h</sup> )—Mo(1 <sup>h</sup> )	60,03 (15)
Mo(1)—Mo(1 <sup>hh</sup> )	3,783 (3)	Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(2 <sup>h</sup> )	59,98 (14)
Mo(2)—Mo(2 <sup>h</sup> )	3,708 (6)	Mo(1 <sup>h</sup> )—Mo(2 <sup>h</sup> )—Mo(1 <sup>h</sup> )	60,94 (13)
		Mo(1)—Mo(1 <sup>hh</sup> )—Mo(2 <sup>h</sup> )	59,53 (14)

Cube S<sub>4</sub>Br<sub>4</sub>

Br(1)—Br(1 <sup>h</sup> )	3,687 (5)	S(2)—Mo(1 <sup>h</sup> )—S(1 <sup>h</sup> )	89,19 (22)
S(2)—S(1)	3,434 (18)	S(2)—Mo(1 <sup>h</sup> )—Br(1)	91,29 (21)
S(2)—Br(1)	3,578 (7)	Br(1 <sup>h</sup> )—Mo(1 <sup>h</sup> )—S(1 <sup>h</sup> )	89,26 (16)
S(1)—Br(1)	3,591 (6)	Br(1 <sup>h</sup> )—Mo(1 <sup>h</sup> )—Br(1)	89,88 (14)
Mo(1)—S(1)	2,494 (8)	S(1)—Mo(2 <sup>h</sup> )—Br(1)	89,46 (17)
Mo(1)—S(2 <sup>h</sup> )	2,396 (8)	Br(1)—Mo(2 <sup>h</sup> )—S(2)	90,51 (21)
Mo(1)—Br(1 <sup>h</sup> )	2,604 (4)		
Mo(1)—Br(1)	2,616 (4)		
Mo(2)—S(1)	2,496 (8)		
Mo(2)—S(2)	2,431 (10)		
Mo(2)—Br(1)	2,605 (3)		

(b) Distances et angles intermotif

Mo—Mo intercluster			
selon la direction <i>a</i> :	Mo—Mo	> 6	
selon la direction <i>b</i> :	Mo(2)—Mo(2 <sup>h</sup> )	3,536 (6)	
selon la direction <i>c</i> :	Mo(1)—Mo(1 <sup>h</sup> )	3,530 (3)	
	Mo(2)—Mo(2 <sup>h</sup> )	4,472	
Br(2)—Mo(1)	2,659 (4)	Mo(1)—Br(2)—Mo(1 <sup>h</sup> )	83,20
Mo(2)—S(2 <sup>h</sup> )	2,503 (11)	Br(1)—Br(1 <sup>h</sup> )	3,742 (4)
S(2)—S(2 <sup>h</sup> )	2,888 (11)	Br(2)—Br(1 <sup>h</sup> )	3,634 (5)

Code de symétrie: (i)  $x, \bar{y}, z$ ; (i')  $x, \bar{y}, \bar{z}$  (translaté selon *y*); (ii)  $\bar{x}, \bar{y}, z$ ; (iii)  $\bar{x}, y, z$ ; (iv)  $x, y, \frac{1}{2} - z$ ; (v)  $\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z$ .

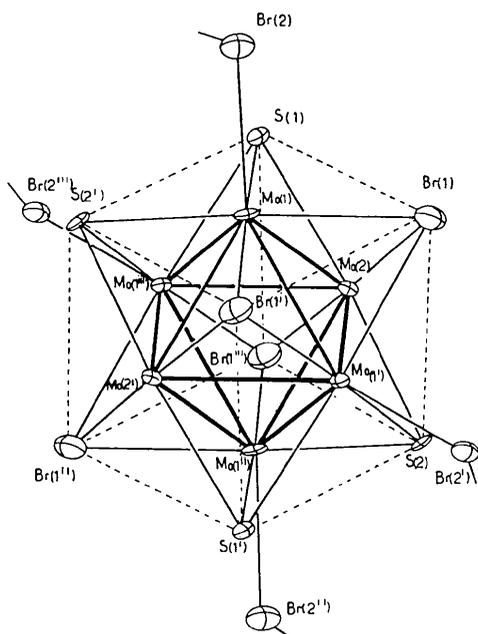


Fig. 1. Motif  $[\text{Mo}_6\text{S}_{2/2}\text{S}_2\text{Br}_4]\text{Br}_{4/2}$  dans la structure de  $\text{Mo}_6\text{Br}_6\text{S}_3$ .

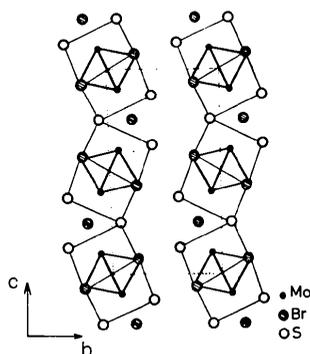


Fig. 2. Projection de la structure de  $\text{Mo}_6\text{Br}_6\text{S}_3$  sur le plan (100) (motifs centrés en  $x = 0$ ). Seuls l'octaèdre  $\text{Mo}_6$  et le cube  $\text{S}_4\text{Br}_4$  ont été schématisés.

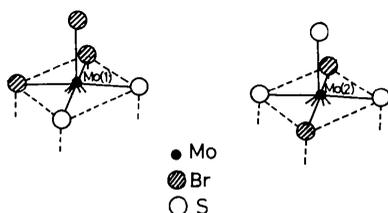


Fig. 3. Environnement du molybdène dans  $\text{Mo}_6\text{Br}_6\text{S}_3$ .

**Enchaînement des motifs parallèlement à c (Fig. 2).** Les deux atomes de soufre S(1) situés sur l'une des grandes diagonales du cube  $\text{S}_4\text{Br}_4$  sont communs à deux motifs. Chacun de ces atomes de soufre S(1) coiffe deux triangles de molybdène appartenant à deux clusters  $\text{Mo}_6$  distincts. Cette disposition du soufre en site

prismatique trigonal déformé de molybdène est tout à fait originale dans les composés à cluster octaédrique de molybdène. On la retrouve cependant dans des sulfures à structure type  $\text{NiAs}$  ou  $\text{Hf}_2\text{S}$  par exemple (Franzen, 1978). Ceci entraîne parallèlement à  $c$  l'apparition de deux distances Mo—Mo intercluster relativement courtes (3,530 Å) et d'une troisième distance Mo—Mo intercluster de 4,472 Å.

Dans cette même direction, les deux atomes de soufre S(2) appartenant à deux motifs successifs sont distants de 2,888 Å. Cette distance est intermédiaire entre la longueur des liaisons S—S covalentes ( $\sim 2,03$  Å) et celle d'un contact ionique entre deux atomes de soufre ( $\sim 3,40$  Å). On peut donc admettre, soit un résidu de liaison covalente entre ces atomes de soufre, soit une contrainte due à l'empilement des motifs.

Chaque motif  $[\text{Mo}_6\text{S}_4\text{Br}_4]$  est en outre relié à ses deux voisins par l'intermédiaire de quatre atomes de brome Br(2) en pont. Ces quatre ponts brome se développent de façon unidirectionnelle selon  $c$  avec un angle Mo—Br—Mo =  $83,20^\circ$ , contrairement à ce que l'on observe pour les autres composés du molybdène(II), tels que  $\text{MoBr}_2$  (Schäfer, Von Schnering, Tillack, Kuhnen, Wohrle & Baumann, 1967) où les quatre ponts brome se développent dans deux directions de l'espace.

On obtient ainsi des chaînes de motifs se développant parallèlement à  $c$ , et pouvant s'écrire  $([\text{Mo}_6\text{S}_{2/2}\text{S}_2\text{Br}_4]\text{Br}_{4/2})^\infty$ .

**Liaison des motifs selon b (Fig. 2).** Selon  $b$ , le basculement des motifs conduit à la formation de liaisons Mo—S intermotif (2,503 Å) et à de courtes distances Mo—Mo intercluster (3,536 Å). La disposition relative des clusters selon cette direction est identique à celle que l'on rencontre dans les thiohalogénures  $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{X}_2$  (Perrin *et al.*, 1979) et dans les chalcogénures  $\text{M}_x\text{Mo}_6\text{Y}_8$  (Chevrel, 1974) où ce même type de liaison apparaît dans les trois directions de l'espace (Fig. 4). Ces liaisons interchaînes conduisent à la formation de feuillets de développement parallèlement au plan  $bc$  et à l'intérieur desquels existent de courtes distances Mo—Mo intercluster ( $\sim 3,53$  Å).

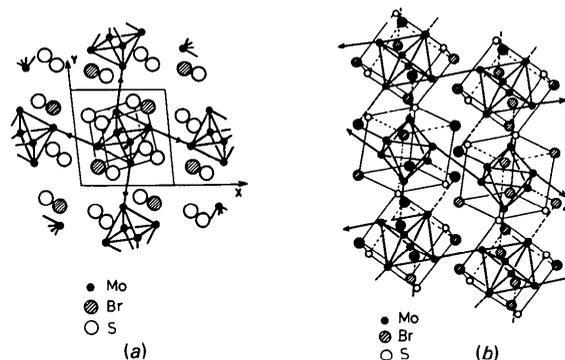


Fig. 4. Comparaison des structures de (a)  $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{Br}_2$  et (b)  $\text{Mo}_6\text{Br}_6\text{S}_3$ .

*Cohésion de la structure selon a.* La projection de la structure sur le plan (010) montre que, selon *a*, la cohésion du cristal n'est assurée que par des interactions entre deux plans de brome successifs situés à la limite des feuillettes; les distances entre les atomes de brome les plus proches sont de 3,634 et 3,742 Å. Ces valeurs inférieures aux contacts de van der Waals du brome (~3,90 Å) se rapprochent des distances Br—Br analogues observées dans d'autres composés (Guggenberger & Sleight, 1969). Selon cette même direction, les distances Mo—Mo intercluster sont supérieures à 6 Å.

Le thiobromure Mo<sub>6</sub>Br<sub>6</sub>S<sub>3</sub> est un nouveau composé du degré II du molybdène. Il constitue le premier exemple de condensation des motifs [Mo<sub>6</sub>L<sub>8</sub>] par l'intermédiaire de deux sommets opposés du cube L<sub>8</sub>. De plus, ce composé présente un caractère bidimensionnel d'un type original dans la chimie des composés à motifs [M<sub>6</sub>L<sub>8</sub>]. En effet, parmi ceux-ci, les seuls à présenter des structures en couches sont les halogénures M<sub>6</sub>X<sub>12</sub> (M = Mo, W; X = Cl, Br, I) (Schäfer *et al.*, 1967) et le chalcogénure Re<sub>6</sub>Se<sub>8</sub>Cl<sub>2</sub> récemment isolé au laboratoire (Perrin & Sergent, 1980; Leduc, Perrin & Sergent, 1983), dans lesquels des couches de motifs [M<sub>6</sub>L<sub>8</sub>] sont également insérées entre des couches d'halogène pour former des feuillettes. Dans les halogénures M<sub>6</sub>X<sub>12</sub>, les feuillettes ([M<sub>6</sub>X<sub>8</sub>]X<sub>4/2</sub>X<sub>2</sub>)<sup>∞</sup> sont imbriqués les uns dans les autres, tandis que dans le chalcogénure Re<sub>6</sub>Se<sub>8</sub>Cl<sub>2</sub> les atomes de chlore de deux feuillettes successifs se situent dans un même plan conduisant ainsi à l'alternance de couches planes de chlore et de motifs [Re<sub>6</sub>Se<sub>8</sub>]. Dans Mo<sub>6</sub>Br<sub>6</sub>S<sub>3</sub>, les atomes de brome situés à la limite de deux feuillettes successifs se trouvent dans deux plans distincts et les feuillettes sont ainsi éloignés les uns des autres.

Des structures en couches un peu analogues à celle de Mo<sub>6</sub>Br<sub>6</sub>S<sub>3</sub> ont été observées avec certains halogénures de terres rares, en particulier ZrCl (Adolphson & Corbett, 1976). Cependant, ces derniers ne comportent plus de clusters M<sub>6</sub> car les octaèdres métalliques sont liés selon leurs arêtes pour conduire à des plans d'atomes métalliques séparés les uns des autres par des plans d'atomes d'halogène.

L'étude structurale du thiobromure Mo<sub>6</sub>Br<sub>6</sub>S<sub>3</sub> que nous avons présentée ici sera complétée par l'étude des propriétés physiques actuellement en cours et dont les premiers résultats ont montré le comportement semi-conducteur de ce composé.

Ce travail a bénéficié du soutien de la Direction des Recherches et Etudes Techniques, contrat DRET n° 80-651.

#### Références

- ADOLPHSON, D. G. & CORBETT, J. D. (1976). *Inorg. Chem.* **15**, 1820-1823.  
 CHEVREL, R. (1974). Thèse d'Etat, Rennes.  
 CHEVREL, R., SERGENT, M. & PRIGENT, J. (1974). *Mater. Res. Bull.* **9**, 1487-1498.  
 FRANZEN, H. F. (1978). *Prog. Solid State Chem.* **12**, 1-39.  
 GERMAIN, G., MAIN, P. & WOOLFSON, M. M. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 368-376.  
 GUGGENBERGER, L. J. & SLEIGHT, A. W. (1969). *Inorg. Chem.* **8**, 2041-2049.  
*International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV. Birmingham: Kynoch Press.  
 KEPERT, D. L. (1972). *The Early Transition Metals*. London, New York: Academic Press.  
 LEDUC, L., PERRIN, A. & SERGENT, M. (1983). A paraître.  
 LE MAROUILLE, J. Y. (1972). Thèse 3ème cycle, Rennes.  
 McCANDLISH, L. E., STOUT, G. H. & ANDREWS, L. C. (1975). *Acta Cryst.* **A31**, 245-249.  
 MEULENAER, J. DE & TOMPA, H. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 1014-1018.  
 MOORE, F. H. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 1169-1175.  
 PERRIN, A. & SERGENT, M. (1980). *Bull. Soc. Chim. Fr.* (11-12), pp. 66-67.  
 PERRIN, C., CHEVREL, R., SERGENT, M. & FISCHER, Ø. (1979). *Mater. Res. Bull.* **14**, 1505-1515.  
 PERRIN, C., SERGENT, M. & PRIGENT, J. (1973). *C.R. Acad. Sci. Sér. C*, **277**, 465-468.  
 PERRIN, C., SERGENT, M., LE TRAON, F. & LE TRAON, A. (1978). *J. Solid State Chem.* **25**, 197-204.  
 PREWITT, C. T. (1966). *SFLS-5. A Fortran IV Full-Matrix Crystallographic Least-Squares Program*.  
 SCHÄFER, H., VON SCHNERING, H. G., TILLACK, J., KUHNEN, F., WOHRLE, H. & BAUMANN, H. (1967). *Z. Anorg. Allg. Chem.* **353**, 281-310.  
 SERGENT, M., FISCHER, Ø., DECROUX, M., PERRIN, C. & CHEVREL, R. (1977). *J. Solid State Chem.* **22**, 87-92.  
 VAND, V., EILAND, P. F. & PEPINSKY, R. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 303-311.

*Acta Cryst.* (1983). **C39**, 418-420

## Structure de l'Hydroxynitrate de Cadmium, Cd(OH)(NO<sub>3</sub>)

PAR ANA-MARIA RODRIGUEZ ROLDAN, MICHÈLE LOUËR, JEAN-PAUL AUFFREDIC ET DANIEL LOUËR

Laboratoire de Cristallogénie (LA au CNRS n°254), Université de Rennes I, avenue du Général Leclerc, 35042 Rennes CEDEX, France

(Reçu le 29 mars 1982, accepté le 25 novembre 1982)

**Abstract.** *M<sub>r</sub>* = 191.4, orthorhombic, *P*2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>, *a* = 324.2 (6) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *D<sub>x</sub>* = 3.921 Mg m<sup>-3</sup>, *F*(000) = 3.891 (3), *b* = 7.407 (4), *c* = 11.249 (6) Å, *V* = 352, λ(Mo Kα) = 0.71069 Å. The structure has been