

[O(W3) mainly] propagate across all the structure. Thus, the number, kind and strength of hydrogen bonds formed by  $[\text{Co}(1)(\text{en})_3]^{3+}$  differs from that formed by  $[\text{Co}(2)(\text{en})_3]^{3+}$ . A common feature for both is that iodide anions are bonded to  $-\text{NH}(\text{ob})$  groups, in agreement with the steric criterion of Raymond, Corfield & Ibers (1968) developed by Spinat, Whuler & Brouty (1979). On the other hand, it can be assumed that the presence of four base sites in the planar oxalate anions makes possible the stabilization of  $\Delta\delta\delta\delta$  or  $\Delta\lambda\lambda\lambda$  configurations instead of other configurations, such as  $\Delta\lambda\lambda\lambda$  or  $\Delta\delta\delta\delta$ , which are usually stabilized when an extensive hydrogen-bonding network exists (Haque, Caughlan & Emerson, 1970; Duesler & Raymond, 1971; Cramer & Huneke, 1978).

The structure reported here provides a nice example of how packing factors can lead to unexpected results, hydrogen bonding lying behind the observed asymmetry.

The authors wish to thank the CAICYT (grant No. 2930/83) and the CSIC for financial support.

#### References

- ANGELICI, R. J. (1977). *Synthesis and Technique in Inorganic Chemistry*, 2nd ed., ex. 8. W. B. Saunders.
- BELTRÁN-PORTER, A. & MARTÍNEZ-TAMAYO, E. (1984). *Synth. React. Inorg. Met.-Org. Chem.* **14**, 703–716.
- BELTRÁN-PORTER, A., MARTÍNEZ-TAMAYO, E. & CATURLA, F. (1984). *Thermochim. Acta*, **75**, 303–311.
- BURZLAFF, J., BÖHME, V. & GOMM, M. (1977). *DISTAN*. Univ. of Erlangen, Federal Republic of Germany.
- CRAMER, R. E. & HUNEKE, J. T. (1978). *Inorg. Chem.* **17**, 365–374.
- DUESLER, E. N. & RAYMOND, K. N. (1971). *Inorg. Chem.* **10**, 1486–1492.
- HAQUE, M., CAUGHLAN, C. N. & EMERSON, K. (1970). *Inorg. Chem.* **9**, 2421–2424.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV, pp. 99, 149. Birmingham: Kynoch Press. (Present distributor D. Reidel, Dordrecht.)
- IUPAC (1970). *Inorg. Chem.* **9**, 1–5.
- KEPERT, D. L. (1972). *Inorg. Chem.* **11**, 1561–1563.
- KEPERT, D. L. (1977). *Prog. Inorg. Chem.* **23**, 1–65.
- MAIN, P., GERMAIN, G. & WOOLFSON, M. M. (1984). *MULTAN11/84. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univs. of York, England, and Louvain, Belgium.
- MOTHERWELL, W. D. S. & CLEGG, W. (1978). *PLUTO78*. Program for plotting molecular and crystal structures. Univ. of Cambridge, England.
- RAYMOND, K. N., CORFIELD, P. W. R. & IBERS, J. A. (1968). *Inorg. Chem.* **7**, 842–844.
- ROBERTS, P. & SHELDRIK, G. M. (1975). *XANADU*. Program for crystallographic calculations. Univ. of Cambridge, England.
- SHELDRIK, G. M. (1976). *SHELX76*. Program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.
- SHOEMAKER, C. B. & SHOEMAKER, D. P. (1980). *Acta Cryst.* **B36**, 2855–2856.
- SPINAT, P., BROUTY, C. & WHULER, A. (1980). *Acta Cryst.* **B36**, 544–551.
- SPINAT, P., WHULER, A. & BROUTY, C. (1979). *Acta Cryst.* **B35**, 2914–2922.

*Acta Cryst.* (1988). **C44**, 421–424

## Structure de l'Uranophane Alpha, $\text{Ca}(\text{UO}_2)_2(\text{SiO}_3\text{OH})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

PAR DARIA GINDEROW

Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie associé au CNRS, Université P. et M. Curie, 4 Place Jussieu, 75252 Paris CEDEX 05, France

(Reçu le 16 juillet 1987, accepté le 17 novembre 1987)

**Abstract.**  $M_r = 856$ , monoclinic,  $P2_1$ ,  $a = 15.909$  (6),  $b = 7.002$  (3),  $c = 6.665$  (3) Å,  $\beta = 97.27$  (4)°,  $V = 736$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $D_x = 3.78$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.7107$  Å,  $\mu = 21.0$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 760$ ,  $T = 295$  K,  $R(F) = 0.030$  for 4422 reflexions. Uranophane alpha has five water molecules rather than the four previously announced. The structure has  $P2_1/a$  pseudosymmetry for 16 atoms and  $P2_1$  symmetry for the Ca atom and the water molecules. The localization of H atoms leads to the conclusion that the charges of the compound are balanced by  $(\text{OH})^-$  in  $(\text{SiO}_3\text{OH})$  tetrahedra and not by oxonium  $(\text{H}_3\text{O})^+$ . So the formula is  $\text{Ca}(\text{UO}_2)_2(\text{SiO}_3\text{OH})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ .

**Introduction.** L'échantillon d'uranophane alpha utilisé provient des Bois Noirs du Puy-de-Dôme. La formule chimique  $\text{CaO} \cdot 2\text{UO}_3 \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  est celle d'un composé ayant deux formes cristallines différentes connues, l'uranophane alpha et l'uranophane beta.

La structure de l'uranophane alpha avait été étudiée d'abord par Smith, Gruner & Lipscomb (1957) ensuite par Stohl & Smith (1981). Ces auteurs faute d'avoir localisé les atomes d'hydrogène ont suggéré la possibilité d'une présence d'ions oxonium  $(\text{H}_3\text{O})^+$  pour balancer les charges, la formule proposée était  $\text{Ca}(\text{H}_3\text{O})_2(\text{UO}_2)_2(\text{SiO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . La formule que nous avons obtenue après avoir localisé les atomes d'hydrogène est

Ca(UO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(SiO<sub>3</sub>OH)<sub>2</sub>·5H<sub>2</sub>O. Elle est identique à la formule proposée par Viswanathan & Harneit (1986) pour l'uranophane beta.

**Partie expérimentale.** Cristal de dimensions 0,12 × 0,46 × 0,18 mm. Paramètres cristallins obtenus sur diffractomètre Philips PW 1100 (anticathode au Mo) avec 25 réflexions  $9 < \theta < 15^\circ$ . Mesure des intensités par 'flying stepscan', angle de balayage de  $1,40^\circ$ , vitesse de scanning de 0,015 s par pas de  $3/100^\circ \theta$ , domaine d'exploration de  $2\theta \leq 90^\circ$  ( $-31 \leq h \leq 31$ ,  $0 \leq k \leq 13$ ,  $0 \leq l \leq 13$ ). Réflexions de référence  $\bar{2}23$ ,  $\bar{8}11$ ,  $\bar{2}2\bar{3}$  mesurées toutes les heures avec des variations respectives d'intensité 0,3, 0,2, 0,3%. Corrections de Lorentz-polarisation et correction d'absorption par la méthode analytique de de Meulenaer & Tompa (1965). Transmission comprise entre 0,044 et 0,164.

Sur 5322 réflexions indépendantes, 4422 réflexions ont été retenues avec  $F_o \geq F_o(\max.)/19,6$  et  $(\sin \theta)/\lambda \geq 0,099 \text{ \AA}^{-1}$ . La position de l'atome d'uranium U(1) a été déterminée par la fonction de Patterson tridimensionnelle dans le groupe  $P2_1$ . Ensuite, en raison des interactions dues à la pseudosymétrie, les coordonnées ont été transposées dans le groupe  $P2_1/a$ , les autres atomes ont été positionnés par des synthèses de Fourier successives. Les coordonnées atomiques publiées précédemment (Stohl & Smith, 1981) ne correspondent pas à l'interprétation de la fonction de Patterson que nous avons obtenue. De plus, dans la formule, il y a cinq molécules d'eau et non quatre.

Affinement des  $F_{obs}$  et des coefficients de température par moindres carrés et en matrice complète à l'aide d'une version modifiée de ORFLS (Busing, Martin & Levy, 1962). Les facteurs de diffusion atomique sont ceux des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974) pour les cations en tenant compte de la contribution de la dispersion anormale. Pour l'anion O<sup>2-</sup>, les valeurs des facteurs de diffusion atomique sont ceux de Tokonami (1965) et pour l'hydrogène, ceux de Stewart, Davidson & Simpson (1965).

La pseudosymétrie  $P2_1/a$  est confirmée par les réflexions  $h0l$  qui sont beaucoup plus faibles pour  $h$  impair que pour  $h$  pair.

Avec des facteurs d'agitation thermique anisotrope dans la symétrie  $P2_1/a$  sans l'atome de Ca et les cinq molécules d'eau  $R = 0,070$  ( $wR = 0,094$  avec  $w = 1$ ). En fixant les atomes affinés puis en affinant les atomes restants dans la symétrie  $P2_1$ ,  $R = 0,030$ . Des sections de série différence permettent de déterminer les positions des atomes d'H. En fin d'affinement, en fixant les facteurs d'agitation thermique isotrope des atomes d'H à une valeur de  $4 \text{ \AA}^2$ ,  $R = 0,030$  ( $wR = 0,038$ ) pour les 4422 réflexions retenues,  $S = 5,8$  avec 54 paramètres,  $(\Delta/\sigma)_{\max} = 0,005$ ,  $\Delta\rho = -2,16$  et  $5,74 \text{ e \AA}^{-3}$  au voisinage de l'uranium.

Programmes utilisés: pour l'affinement, une modification du Busing *et al.* (1962); pour les dessins,

Tableau 1. Coordonnées atomiques ( $\times 10^4$ ;  $\times 10^3$  pour H) et coefficients d'agitation thermique ( $\text{\AA}^2$ ) avec leurs écarts types

$$B_{eq} = \frac{4}{3} \sum_i \sum_j \beta_{ij} a_i \cdot a_j$$

	x	y	z	$B_{eq}$ ou B
U(1)	56,8 (3)	7821,7 (5)	1340 (1)	0,58 (01)
U(2)	-5056,8 (3)	-7822 (1)	-1340 (1)	0,58 (01)
Si(1)	329 (2)	2796 (6)	3405 (5)	0,8 (1)
Si(2)	-5329 (2)	-2796 (6)	-3405 (5)	0,8 (1)
O(1)	1193 (7)	8004 (18)	1393 (17)	1,5 (3)
O(2)	-6193 (7)	-8004 (18)	-1393 (17)	1,5 (3)
O(3)	-1076 (6)	7612 (18)	1240 (16)	1,4 (3)
O(4)	-3924 (6)	-7612 (18)	-1240 (16)	1,4 (3)
O(5)	198 (7)	4592 (13)	1873 (14)	1,1 (3)
O(6)	-5198 (7)	-4592 (13)	-1873 (14)	1,1 (3)
O(7)	48 (8)	1064 (14)	1837 (14)	1,2 (3)
O(8)	-5048 (8)	-1064 (14)	-1837 (14)	1,2 (3)
O(9)	-213 (6)	2865 (17)	5271 (12)	1,2 (2)
O(10)	-4787 (6)	-2865 (17)	-5271 (12)	1,2 (2)
O(11)	1338 (7)	2691 (22)	4274 (18)	1,8 (4)
O(12)	-6338 (7)	-2691 (22)	-4274 (18)	1,8 (4)
OW(1)	8190 (8)	3723 (22)	3634 (23)	3,1 (5)
OW(2)	7438 (9)	145 (18)	2052 (31)	3,4 (6)
OW(3)	6869 (7)	6329 (30)	5493 (17)	3,4 (6)
OW(4)	7431 (7)	5180 (20)	9517 (16)	2,2 (4)
OW(5)	7615 (17)	299 (54)	7653 (41)	11,3 (20)
Ca	7682 (1)	6837 (3)	2767 (3)	1,3 (1)
H(1)	173	344	391	4,0
H(2)	656	343	437	4,0
H(11)	875	316	383	4,0
H(12)	770	316	303	4,0
H(21)	266	477	969	4,0
H(22)	680	86	242	4,0
H(31)	367	184	445	4,0
H(32)	293	93	312	4,0
H(41)	797	468	891	4,0
H(42)	694	430	943	4,0
H(51)	816	109	820	4,0
H(52)	711	117	695	4,0

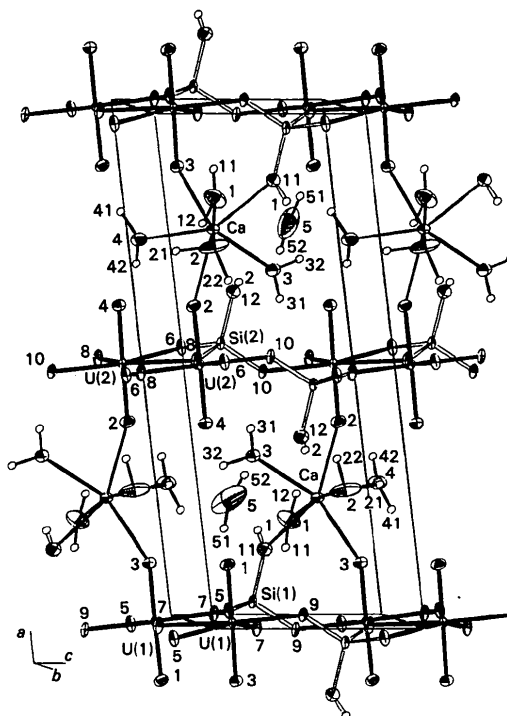


Fig. 1. Numérotation des atomes. Les ellipsoïdes de vibration thermique des atomes non hydrogène ont une probabilité de 50%. Les atomes d'hydrogène sont représentés par des sphères de rayon arbitraire.

ORTEPII (Johnson, 1976). Ordinateur: MATRA 570/CX

**Discussion.** Le Tableau 1 fournit les positions atomiques et les facteurs de température équivalente des atomes numérotés selon la Fig. 1.\*

La structure est constituée de couches de silicate d'uranyle reliées entre elles par des polyèdres  $[\text{CaO}_2]$

\* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des distances interatomiques entre oxygènes, des équations de plans moyens et des valeurs des liaisons électrostatiques avec leurs sommes autour des anions ont été déposés au dépôt d'archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 44545: 35 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.

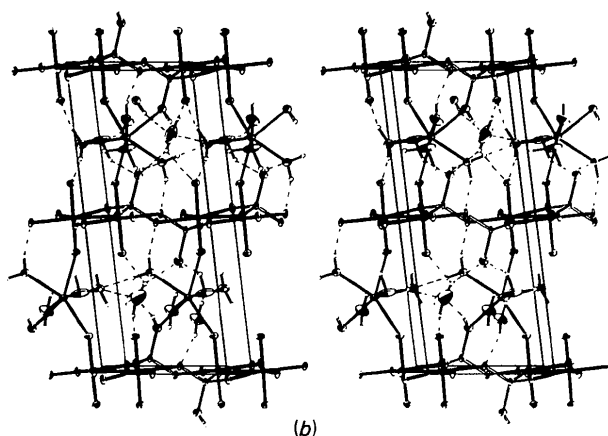
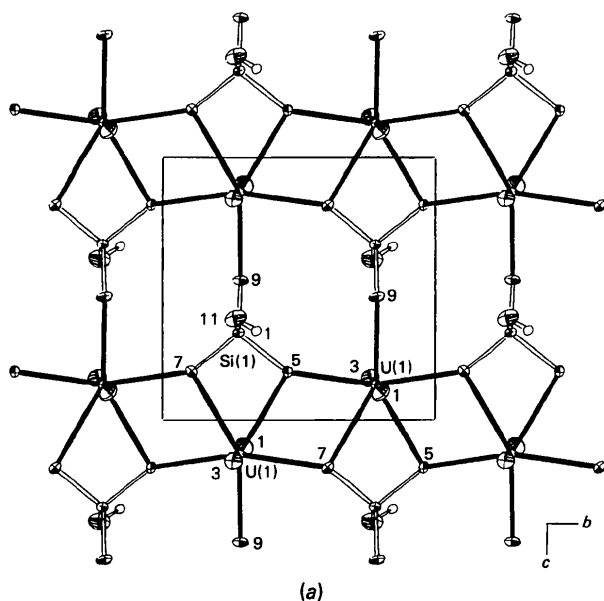


Fig. 2. (a) Projection (0kl) d'une couche de silicate d'uranyle. (b) Représentation stéréoscopique de l'uranophane alpha. Vue suivant **b**, **c** étant l'axe horizontal et **a** l'axe vertical. Les liaisons hydrogène sont représentées par des traits interrompus.

Tableau 2. Valeurs des distances interatomiques (Å) et des angles ( $^{\circ}$ ); pour les liaisons hydrogènes, H' et A' sont les seconds H et A de la même molécule d'eau, avec les écarts types pour les valeurs calculées entre atomes lourds

Environnement des ions $\text{U}^{6+}$			
U(1)-O(3)	1,801 (10)	U(2)-O(4)	1,801 (10)
U(1)-O(1)	1,808 (11)	U(2)-O(2)	1,808 (11)
U(1)-O(9)	2,241 (8)	U(2)-O(10)	2,241 (8)
U(1)-O(7)	2,294 (10)	U(2)-O(8)	2,294 (10)
U(1)-O(5)	2,296 (9)	U(2)-O(6)	2,296 (9)
U(1)-O(7 <sup>H</sup> )	2,437 (10)	U(2)-O(8 <sup>H</sup> )	2,437 (10)
U(1)-O(5 <sup>H</sup> )	2,463 (9)	U(2)-O(6 <sup>H</sup> )	2,463 (9)
Moyenne	2,346	Moyenne	2,346

Environnement des ions $\text{Si}^{4+}$			
Si(1)-O(9)	1,601 (10)	Si(2)-O(10)	1,601 (10)
Si(1)-O(5)	1,617 (10)	Si(2)-O(6)	1,617 (10)
Si(1)-O(7)	1,626 (10)	Si(2)-O(8)	1,626 (10)
Si(1)-O(11)	1,638 (12)	Si(2)-O(12)	1,638 (12)
Moyenne	1,621	Moyenne	1,621

Environnement des ions $\text{Ca}^{2+}$			
Ca-O(11)	2,371 (15)	Ca-O(11)	2,429 (11)
Ca-O(2)	2,387 (13)	Ca-O(2)	2,432 (10)
Ca-O(3)	2,387 (12)	Ca-O(4)	2,445 (11)
Ca-O(3)	2,396 (11)	Moyenne	2,407

Liaisons hydrogène							
$D-H \cdots A$	$D \cdots A$	$D-H$	$\angle HDH'$	$H \cdots A$	$\angle DHA$	$\angle ADA'$	
O(11)-H(1) $\cdots$ OW(5)	2,881 (34)	0,87		2,04	163		
O(12)-H(2) $\cdots$ OW(3)	3,020 (25)	0,86		2,20	160		
OW(1)-H(11) $\cdots$ O(9)	2,702 (17)	0,97	127	1,81	151	106.1 (6)	
OW(1)-H(12) $\cdots$ OW(2)	2,916 (21)	0,92		2,23	131		
OW(2)-H(21) $\cdots$ OW(5)	2,982 (34)	1,18	107	1,91	148	129.0 (9)	
OW(2)-H(22) $\cdots$ O(12)	2,865 (20)	1,19		1,82	144		
OW(3)-H(31) $\cdots$ O(10)	2,678 (16)	0,93	105	1,80	155	115.1 (6)	
OW(3)-H(32) $\cdots$ OW(4)	2,835 (16)	0,98		1,86	179		
OW(4)-H(41) $\cdots$ O(1)	2,796 (16)	1,05	116	1,81	155	100.4 (5)	
OW(4)-H(42) $\cdots$ O(4)	2,906 (17)	0,99		1,93	168		
OW(5)-H(51) $\cdots$ O(1)	2,699 (35)	1,05	113	1,69	158	103.0 (10)	99.8 (10)
OW(5)-H(52) $\cdots$ O(12)	3,165 (32)			2,18	152		
OW(5)-H(52) $\cdots$ O(4)	3,022 (32)	1,07		2,32	122	59.5 (7)	

Transformation des coordonnées: (ii)  $-x, \frac{1}{2} + y, -z$ .

(OH)(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]. Dans les grandes cavités délimitées par ces polyèdres se trouve une molécule d'eau libre [OW(5)]. Les couches de silicate d'uranyle représentées par la Fig. 2(a) présentent la même allure générale que celle publiée par Stohl & Smith (1981); elles sont parallèles au plan (100) et liées entre elles par le plan de glissement placé en  $y$  0,25 et 0,75 de la pseudosymétrie. Elles sont composées de chaînes formées de dipyramides pentagonales [UO<sub>7</sub>] et de tétraèdres de silicium [SiO<sub>3</sub>OH] qui sont reliées entre elles par l'atome d'oxygène O(9).

Les dipyramides pentagonales mettent deux arêtes en commun; elles partagent une arête avec un tétraèdre de silicium et trois sommets avec trois autres tétraèdres de silicium. Les deux groupements hydroxyles ne sont pas équivalents: O(11) est commun à Si(1) et à Ca, il est lié à OW(5) par une liaison hydrogène, tandis que O(12) est lié avec Si(2) et à trois molécules d'eau dont OW(5) par des liaisons hydrogène.

Il y a un clivage parfait parallèlement au plan (100).

#### Environnement des ions $\text{U}^{6+}$ et $\text{Si}^{4+}$

Les distances correspondantes à celles qui ont été publiées par Stohl & Smith (1981), à la précision près pour les ions d'uranium et de silicium (Tableau 2). Les

liaisons uranyles sont plus courtes avec une distance moyenne de 1,80 (1) Å, elles sont pratiquement linéaires [178,8 (5)°]. Les écarts aux plans moyens passant par les cinq atomes d'oxygène et U(1) ou U(2) sont de -0,061 (11) à 0,074 (12) Å. Ca et OW(5) se trouvent respectivement à -3,947 (2) et 3,490 (27) Å du plan moyen passant par U(1), alors qu'ils sont à -4,050 (2) et 4,258 (27) Å de celui qui passe par U(2). La molécule d'eau libre équilibre donc la structure par rapport à la couche de silicate d'uranyle puisqu'elle se trouve approximativement à la même distance que Ca de ces plans.

#### Environnement des ions Ca<sup>2+</sup>

L'environnement des ions Ca se présente comme une dipyramide pentagonale déformée. Le calcul du plan moyen passant par les atomes d'oxygène O(11), O(3), OW(3), O(2) et OW(4) montre que c'est autour de la liaison Ca-O(11) ou Ca-OH que les autres atomes du polyèdre s'organisent.

#### Liaisons hydrogène

Les liaisons hydrogène (Fig. 2b) renforcent les liaisons entre les couches de silicate d'uranyle, le calcium et l'eau [OW(5)]. Une des deux liaisons donneurs de OW(5) est bifurquée vers O(12) et O(4). Les angles O-H...O sont compris entre 122 et 179°. Les distances O...O varient de 2,70 (4) à 3,17 Å (Tableau 2); ces valeurs extrêmes relient OW(5) au reste de la structure et pourraient expliquer la très forte agitation thermique de 11,3 Å<sup>2</sup> de cette molécule libre contre 3,0 Å<sup>2</sup> en moyenne pour les quatre autres molécules d'eau qui sont liées à l'atome de calcium (Tableau 1). Les valeurs trouvées sont conformes aux valeurs répertoriées par Schuster, Zundel & Sandorfy

(1976). La somme des valences électrostatiques afférentes à chaque atome d'oxygène a été calculée selon la formule de Brown & Wu (1976) pour les atomes lourds et selon celle de Brown (1976) pour les liaisons hydrogène; elle reste voisine de deux à l'intérieur des limites généralement acceptées, la valeur moyenne étant égale à 2,05.

En conclusion, cette étude a pu définir que c'est le groupement (OH)<sup>-</sup> qui équilibre les charges et de ce fait, elle montre aussi que les composés uranophane alpha et beta ont une formule identique.

L'auteur remercie Dr F. Cesbron de lui avoir proposé cette étude.

#### Références

- BROWN, I. D. (1976). *Acta Cryst.* **A32**, 24-31.  
 BROWN, I. D. & WU, K. K. (1976). *Acta Cryst.* **B32**, 1957-1959.  
 BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS*. Rapport ORNL-TM-305. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.  
*International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV. Birmingham: Kynoch Press. (Distributeur actuel D. Reidel, Dordrecht.)  
 JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEPII*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, EU.  
 MEULENAER, J. DE & TOMPA, H. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 1014-1018.  
 SCHUSTER, P., ZUNDEL, G. & SANDORFY, C. (1976). *The Hydrogen Bond*, p. 406. New York: North-Holland.  
 SMITH, D. K., GRUNER, J. W. & LIPSCOMB, W. N. (1957). *Am. Mineral.* **42**, 594-618.  
 STEWART, R. F., DAVIDSON, E. R. & SIMPSON, W. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 3175-3187.  
 STOHL, F. V. & SMITH, D. K. (1981). *Am. Mineral.* **66**, 610-625.  
 TOKONAMI, M. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 486.  
 VISWANATHAN, K. & HARNEIT, O. (1986). *Am. Mineral.* **71**, 1489-1493.

*Acta Cryst.* (1988). **C44**, 424-427

## Structure du Sulfure d'Etain et d'Indium, In<sub>14</sub>Sn<sub>5</sub>S<sub>26</sub>

PAR A. LIKFORMAN, S. JAULMES ET M. GUITTARD

Laboratoire de Chimie Minérale Structurale associé au CNRS, UA 200 (Laboratoire de Physique),  
 Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques Paris-Luxembourg, 4, Avenue de l'Observatoire,  
 75270 Paris CEDEX 06, France

(Reçu le 14 octobre 1987, accepté le 26 novembre 1987)

**Abstract.** In<sub>14</sub>Sn<sub>5</sub>S<sub>26</sub>,  $M_r = 3034.6$ , monoclinic,  $B2/m$ ,  $a = 37.917$  (4),  $b = 13.758$  (3),  $c = 3.8433$  (6) Å,  $\gamma = 91.20$  (1)°,  $V = 2004$  (2) Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $D_m = 4.98$ ,  $D_x = 5.03$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$  Å,  $\mu = 12.17$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 2704$ ,  $T = 293$  K, final  $R = 0.0456$  for 2434 independent reflections. In<sup>3+</sup> atoms

have deformed octahedral environments with In-S distances 2.49-2.90 Å. Seven octahedra form a ribbon parallel to the (xOz) plane. These ribbons associate to form a stepped layer. Sn<sup>2+</sup> atoms lie inside dicapped trigonal prisms of S atoms with Sn-S distances 2.81-3.37 Å.

0108-2701/88/030424-04\$03.00

© 1988 International Union of Crystallography