

space group as the present case and the shortest Cu...S distance is 3.34 (2) Å.

The PF<sub>6</sub><sup>-</sup> ion has regular octahedral geometry with an average P—F distance of 1.55 (2) Å. Uniformly large  $U_{eq}$  parameters for the F atoms (Table 1) and the presence of large residual peaks (up to 0.70 e Å<sup>-3</sup>) in their vicinity indicated possible minor anion disorder. An alternative orientation for the PF<sub>6</sub><sup>-</sup> ion was not readily apparent and no attempt was made to model disorder.

Financial assistance from the Foundation for Research Development and the University of Cape Town is gratefully acknowledged.

*Acta Cryst.* (1991). **C47**, 29–32

### *cis*-Dichloro[(*N,N*-diéthylthiocarbamoyl)-6 désoxy-6 (di-*O*-isopropylidène)-1,2:3,4 α-D-galactopyrannose]platine(II)–Acétone

PAR R. JULIEN, G. RONCO ET C. LEMAY

Laboratoire de Chimie Bioorganique et Bioinorganique, UFR de Pharmacie, 3 Place Dewailly, 80000 Amiens CEDEX, France

ET P. KHODADAD ET N. RODIER

Laboratoire de Chimie Minérale, Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques, 5 Rue J.-B. Clément, 92296 Châtenay-Malabry CEDEX, France

(Reçu le 2 février 1990, accepté le 27 juin 1990)

**Abstract.** [PtCl<sub>2</sub>(C<sub>17</sub>H<sub>29</sub>NO<sub>5</sub>S<sub>2</sub>)]·C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O,  $M_r = 715.6$ , orthorhombic,  $P2_12_12_1$ ,  $a = 10.594$  (2),  $b = 14.099$  (2),  $c = 18.433$  (3) Å,  $V = 2753$  (1) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $D_x = 1.73$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.7107$  Å,  $\mu = 5.52$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 1416$ ,  $T = 295$  (1) K,  $R = 0.034$  for 2576 independent observed reflections. The Pt atom displays square-planar coordination. It is linked to two Cl and two S atoms. Apart from the terminal C atoms of the *N,N*-diethyl substituents, the dichloro(*N,N*-diéthylthiocarbamoyl)platinum group is approximately planar. One of the two five-membered rings is in an envelope form and the other is intermediate between an envelope and a half-chair form. The pyranosyl ring has a skew-boat conformation. In the dithiocarbamoyl group, the shortest C—S and C—N distances, 1.69 (1) and 1.28 (1) Å, respectively, are due to a delocalized orbital. All other bond lengths agree with values published for similar compounds.

**Introduction.** La résolution de la structure cristalline du *cis*-dichloro[(*N,N*-diéthylthiocarbamoyl)-6

#### References

- BROWN, K. L. (1979). *Cryst. Struct. Commun.* **8**, 157–160.  
 COUCOUVANIS, D. (1979). *Prog. Inorg. Chem.* **26**, 301–469.  
 EINSTEIN, F. W. B. & FIELD, J. S. (1974). *Acta Cryst.* **B30**, 2928–2930.  
 Enraf–Nonius (1979). *Structure Determination Package*. Enraf–Nonius, Delft, The Netherlands.  
 GOLDING, R. M., HARRIS, C. M., JESSOP, K. J. & TENNANT, W. C. (1972). *Aust. J. Chem.* **25**, 2567–2576.  
 KOCH, K. R. & SACTH, C. (1989). Unpublished results.  
 MOTHERWELL, W. D. S. (1989). *PLUTO*. A program for plotting molecular and crystal structures. Univ. of Cambridge, England.  
 NARDELLI, M. (1983). *Comput. Chem.* **7**, 95–98.  
 SHELDRIK, G. M. (1976). *SHELX76*. Program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.  
 WIJNHOFEN, J. G., VAN DEN HARK, TH. E. M. & BEURSKENS, P. T. (1972). *J. Cryst. Mol. Struct.* **2**, 189–196.

désoxy-6 (di-*O*-isopropylidène)-1,2:3,4 α-D-galactopyrannose]platine(II)–acétone a été entreprise dans le cadre de la synthèse et de l'étude des composés de coordination du platine(II). Le produit utilisé a été préparé à la température ambiante par addition, à l'abri de la lumière, d'une solution aqueuse de K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> à une solution éthanolique de désoxy-6 (*N,N*-diéthylthiocarbamoyl)-6 (di-*O*-isopropylidène)-1,2:3,4 α-D-galactopyrannose. Les deux réactifs sont pris en quantités équimoléculaires. Au bout de quelques jours, il se forme un précipité qui est mis en solution dans le chloroforme. On déshydrate par addition de Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, évapore à sec et sépare le complexe en le dissolvant dans l'acétone. Des cristaux ont été obtenus par évaporation lente de la solution acétonique.

**Partie expérimentale.** Cristal parallélépipédique : 0,15 × 0,22 × 0,32 mm. Dimensions de la maille déterminées sur monocrystal avec 25 réflexions telles que 7,29 ≤  $\theta$  ≤ 15,47°. Diffractomètre Enraf–Nonius CAD-4. Balayage  $\theta/2\theta$  d'amplitude  $s(^{\circ}) = 0,85 +$

0,35tg $\theta$ .  $0,039 \leq (\sin\theta)/\lambda \leq 0,660 \text{ \AA}^{-1}$ .  $0 \leq h \leq 13$ ,  $0 \leq k \leq 18$ ,  $0 \leq l \leq 24$ . Réflexions de contrôle de l'intensité:  $\bar{4}1\bar{4}$ ,  $\bar{3}5\bar{3}$  et  $\bar{6}00$ . Diminution de  $I$  au cours des mesures: 5,8%. Corrections de décroissance. 3706 réflexions indépendantes mesurées, 1130 inobservées [ $I < 3\sigma(I)$ ]. *MULTAN*11/82 (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982) et série de Fourier des  $\Delta F$ . H liés à C(1), C(2), C(3), C(4), C(17), C(25) et C(27): positions calculées; autres H: non localisés. Affinement basé sur les  $F$ , programme à matrice entière. Facteurs de diffusion des *International Tables for X-ray Crystallography* (1974, Tome IV, pp. 99, 149). Paramètres affinés:  $x$ ,  $y$ ,  $z$  et  $\beta_{ij}$  de Pt, Cl, S, O, N et C à l'exception des paramètres de position des atomes de carbone et d'oxygène de la molécule d'acétone. Les longueurs trouvées initialement pour les liaisons C—C et C—O de cette dernière sont voisines respectivement de 1,67 et de 1,36 Å. Elles indiquent que les atomes entre lesquels elles s'établissent sont présents sur plusieurs positions en désordre statistique. Les essais de répartition de C(29), C(30), C(31) et O(32) sur plusieurs sites voisins ont conduit à des résultats incohérents et ont été abandonnés. Finalement, la position trouvée pour l'atome central C(30), ainsi que les directions des trois liaisons qui en sont issues ont été conservées et les distances correspondantes C—C et C—O fixées respectivement à 1,54 et à 1,22 Å. Corrections d'absorption empirique: programme *DIFABS* (Walker & Stuart, 1983); valeurs maximale et minimale du coefficient de correction: 1,290 et 0,759.  $R = 0,034$ ,  $wR = 0,041$ ,  $w = 1/\sigma^2(F)$ ,  $S = 1,36$ ,  $(\Delta/\sigma)_{\max} = 0,01$ ,  $|\Delta\rho|_{\max} = 1,0(1) \text{ e \AA}^{-3}$ . Programme de calcul du système *SDP* (B. A. Frenz & Associates Inc., 1982). Figs. 1 & 2: *ORTEP*II (Johnson, 1976). Angles de torsion: *ORFFE* (Busing, Martin & Levy, 1964). Ordinateur DEC PDP11/44.

Lorsqu'on remplace les coordonnées  $x$ ,  $y$  et  $z$  de chacun des atomes respectivement par  $1-x$ ,  $1-y$  et

$1-z$ , le facteur  $R$  devient égal à 0,054. La configuration représentée par la Fig. 1 peut donc être considérée comme la configuration absolue de la molécule étudiée.

**Discussion.** La Fig 1 représente la molécule de *cis*-dichloro[*N,N*-diéthylthiocarbamoyl]-6 désoxy-6 (di-*O*-isopropylidène)-1,2:3,4  $\alpha$ -D-galactopyrannose]-platine(II) et la Fig. 2 le contenu de la maille. Les numéros utilisés pour désigner les atomes de la molécule organométallique sont indiqués sur la Fig. 1. Ceux qui ont été attribués aux atomes de carbone et d'oxygène de la molécule d'acétone vont de 29 à 32. Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rapportés dans le Tableau 1, les longueurs et les angles des liaisons dans le Tableau 2.\*

Les atomes du groupement dichloro[*N,N*-diéthylthiocarbamoyl]platine(II) sont, à l'exception de C(26) et de C(28), approximativement coplanaires. Leurs distances au plan moyen correspondant ne dépassent pas 0,06 (1) Å. Les deux liaisons Pt—Cl [2,309 (3) et 2,321 (3) Å] sont comparables à leurs homologues dans d'autres dérivés du platine(II). Ainsi, dans le tétrachloroplatinate(II) de bis-(diéthylène-triammonium) (Britten & Lock, 1979), celles-ci mesurent 2,306 (1) et 2,293 (1) Å. Il en est de même pour les liaisons Pt—S. Les distances C(17)—S(18) [1,81(1)] et C(23)—S(18) [1,80 (1) Å] sont pratiquement égales à la longueur moyenne calculée par

\* Les listes des facteurs de structure, des facteurs d'agitation thermique anisotrope, des distances des atomes aux plans moyens, des angles de torsion, des distances C—H, des distances interatomique intermoléculaires et des paramètres des atomes d'hydrogène ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 53342: 23 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

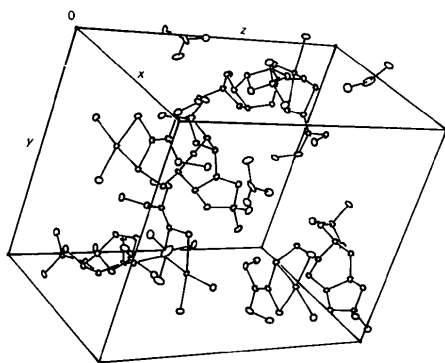


Fig. 1. Dessin de la molécule organométallique et numéros attribués à ses atomes.

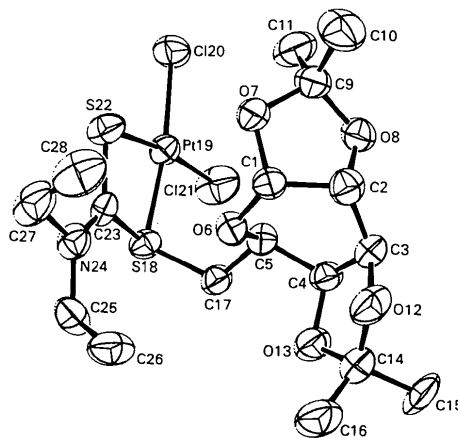


Fig. 2. Vue de la maille en perspective.

Tableau 1. Coordonnées atomiques relatives, facteurs de température isotropes équivalents et écarts-type

$$B_{\text{eq}} = (4/3)[a^2\beta_{11} + b^2\beta_{22} + c^2\beta_{33} + (abc\cos\gamma)\beta_{12} + (accos\beta)\beta_{13} + (bccos\alpha)\beta_{23}].$$

	x	y	z	$B_{\text{eq}}(\text{Å}^2)$
C(1)	0,915 (1)	0,7765 (6)	0,8171 (5)	3,6 (2)
C(2)	0,952 (1)	0,7100 (7)	0,8780 (5)	4,0 (2)
C(3)	0,880 (1)	0,6198 (7)	0,8822 (5)	4,0 (2)
C(4)	0,856 (1)	0,5718 (7)	0,8092 (6)	3,6 (2)
C(5)	0,8959 (9)	0,6350 (5)	0,7448 (5)	3,2 (2)
O(6)	0,8539 (7)	0,7318 (4)	0,7576 (3)	3,5 (1)
O(7)	1,0339 (7)	0,8132 (4)	0,7932 (4)	4,1 (1)
O(8)	1,0804 (7)	0,6874 (4)	0,8634 (4)	4,2 (1)
C(9)	1,135 (1)	0,7698 (7)	0,8332 (6)	4,4 (2)
C(10)	1,180 (1)	0,8388 (8)	0,8925 (7)	6,6 (3)
C(11)	1,238 (1)	0,7408 (8)	0,7797 (7)	5,8 (3)
O(12)	0,7563 (8)	0,6418 (5)	0,9085 (4)	5,3 (2)
O(13)	0,7215 (7)	0,5582 (5)	0,8063 (4)	4,8 (2)
C(14)	0,671 (1)	0,5748 (8)	0,8785 (6)	5,0 (3)
C(15)	0,669 (1)	0,4819 (8)	0,9213 (6)	6,0 (3)
C(16)	0,540 (1)	0,618 (1)	0,8702 (8)	6,5 (3)
C(17)	0,829 (1)	0,6009 (7)	0,6769 (5)	3,9 (2)
S(18)	0,8750 (2)	0,6532 (2)	0,5911 (1)	3,61 (4)
Pt(19)	1,08490 (4)	0,66606 (3)	0,58577 (2)	3,575 (6)
Cl(20)	1,2966 (3)	0,7018 (2)	0,5741 (2)	5,07 (6)
Cl(21)	1,1179 (3)	0,5038 (2)	0,5763 (2)	7,07 (8)
S(22)	1,0183 (3)	0,8183 (2)	0,5962 (2)	4,56 (6)
C(23)	0,868 (1)	0,7796 (7)	0,6031 (5)	3,7 (2)
N(24)	0,7654 (8)	0,8277 (6)	0,6092 (4)	4,0 (2)
C(25)	0,638 (1)	0,7828 (9)	0,6080 (6)	5,1 (3)
C(26)	0,568 (1)	0,7924 (9)	0,6835 (6)	5,7 (3)
C(27)	0,773 (1)	0,9325 (8)	0,6153 (8)	6,7 (3)
C(28)	0,809 (1)	0,9662 (8)	0,6903 (8)	6,5 (3)
C(29)*	0,478	0,509	0,681	7,5 (3)
C(30)*	0,487	0,479	0,600	14,1 (5)
C(31)*	0,428	0,383	0,578	11,5 (5)
O(32)*	0,566	0,516	0,561	7,8 (2)

\* Les atomes signalés par un astérisque appartiennent à la molécule d'acétone. Leurs coordonnées n'ont pas été affinées.

Allen, Kennard, Watson, Brammer, Orpen & Taylor (1987) pour les liaisons simples C—S [1,809 (25) Å]. Les longueurs de S(22)—C(23) [1,69 (1)] et de C(23)—N(24) [1,28 (1) Å] s'expliquent par l'existence, le long de S(22)—C(23)—N(24), d'une orbitale délocalisée dans laquelle interviennent les doublets non partagés de S(22) et de N(24). C(23) et N(24) présentent l'hybridation  $sp^2$ . En outre, des doubles liaisons C—S, dont les longueurs appartiennent à l'intervalle 1,600 (6)—1,630 (9) Å, ont été décrites, d'une part par Shirrell & Williams (1973), d'autre part par Arjunan, Ramamurthy & Venkatesan (1984). Elles font apparaître S(22)—C(23) comme intermédiaire entre une liaison simple et une liaison double. De même, compte tenu des incertitudes, C(23)—N(24) reste comparable à la longueur des liaisons C—N rencontrées dans les composés pyridiniques [1,337 (12) Å] (Allen *et al.*, 1987).

Dans le groupement désoxy-6 (di-*O*-isopropylidène)-1,2:3,4  $\alpha$ -D-galactopyrannose, les distances C—O vont de 1,41 (1) à 1,45 (1) Å [moyenne: 1,430 (4) Å] et les distances C—C de 1,49 (2) à 1,54 (2) Å [moyenne: 1,524 (5) Å]. Aucune de ces distances ne présente de différence très significative avec son homologue respective dans le dichloro-6,6 désoxy-6 (di-*O*-isopropylidène)-1,2:3,4 (C-5-S)-

Tableau 2. Longueurs des liaisons (Å), angle valenciels (°) et écarts-type

C(1)—C(2)	1,52 (1)	C(14)—C(15)	1,53 (2)
C(1)—O(6)	1,42 (1)	C(14)—C(16)	1,53 (2)
C(1)—O(7)	1,43 (1)	C(17)—S(18)	1,81 (1)
C(2)—C(3)	1,49 (2)	S(18)—Pt(19)	2,233 (2)
C(2)—O(8)	1,42 (1)	S(18)—C(23)	1,80 (1)
C(3)—C(4)	1,52 (1)	Pt(19)—Cl(20)	2,309 (3)
C(3)—O(12)	1,43 (1)	Pt(19)—Cl(21)	2,321 (3)
C(4)—C(5)	1,54 (1)	Pt(19)—S(22)	2,268 (2)
C(4)—O(13)	1,44 (1)	S(22)—C(23)	1,69 (1)
C(5)—O(6)	1,45 (1)	C(23)—N(24)	1,28 (1)
C(5)—C(17)	1,52 (1)	N(24)—C(25)	1,49 (2)
O(7)—C(9)	1,43 (1)	N(24)—C(27)	1,48 (1)
O(8)—C(9)	1,41 (1)	C(25)—C(26)	1,58 (2)
C(9)—C(10)	1,54 (2)	C(27)—C(28)	1,51 (2)
C(9)—C(11)	1,53 (2)	C(29)—C(30)	1,54*
O(12)—C(14)	1,42 (1)	C(30)—C(31)	1,54*
O(13)—C(14)	1,45 (1)	C(30)—O(32)	1,22*
C(2)—C(1)—O(6)	114,6 (7)	O(12)—C(14)—C(15)	112,5 (9)
C(2)—C(1)—O(7)	102,8 (8)	O(12)—C(14)—C(16)	110,6 (9)
O(6)—C(1)—O(7)	108,9 (7)	O(13)—C(14)—C(15)	109,9 (9)
C(1)—C(2)—C(3)	115,5 (9)	O(13)—C(14)—C(16)	107,8 (9)
C(1)—C(2)—O(8)	104,3 (8)	C(15)—C(14)—C(16)	112 (1)
C(3)—C(2)—O(8)	108,2 (8)	C(5)—C(17)—S(18)	117,8 (7)
C(2)—C(3)—C(4)	114,6 (8)	C(17)—S(18)—Pt(19)	109,8 (4)
C(2)—C(3)—O(12)	107,8 (8)	C(17)—S(18)—C(23)	106,5 (4)
C(4)—C(3)—O(12)	104,5 (8)	Pt(19)—S(18)—C(23)	88,2 (4)
C(3)—C(4)—C(5)	112,3 (8)	S(18)—Pt(19)—Cl(20)	171,52 (9)
C(3)—C(4)—O(13)	104,5 (8)	S(18)—Pt(19)—Cl(21)	94,2 (1)
C(5)—C(4)—O(13)	108,5 (8)	S(18)—Pt(19)—S(22)	76,30 (9)
C(4)—C(5)—O(6)	109,5 (7)	Cl(20)—Pt(19)—Cl(21)	93,6 (1)
C(4)—C(5)—C(17)	109,0 (7)	Cl(20)—Pt(19)—S(22)	95,9 (1)
O(6)—C(5)—C(17)	106,8 (7)	Cl(21)—Pt(19)—S(22)	170,5 (1)
C(1)—O(6)—C(5)	113,7 (7)	Pt(19)—S(22)—C(23)	89,7 (3)
C(1)—O(7)—C(9)	110,1 (7)	S(18)—C(23)—S(22)	105,6 (6)
C(2)—O(8)—C(9)	106,3 (7)	S(18)—C(23)—N(24)	124,9 (8)
O(7)—C(9)—O(8)	104,4 (8)	S(22)—C(23)—N(24)	129,3 (8)
O(7)—C(9)—C(10)	109,1 (9)	C(23)—N(24)—C(25)	122,6 (9)
O(7)—C(9)—C(11)	108,4 (9)	C(23)—N(24)—C(27)	119,3 (9)
O(8)—C(9)—C(10)	111,5 (9)	C(25)—N(24)—C(27)	118,0 (9)
O(8)—C(9)—C(11)	109,0 (8)	N(24)—C(25)—C(26)	111,8 (9)
C(10)—C(9)—C(11)	114 (1)	N(24)—C(27)—C(28)	113 (1)
C(3)—O(12)—C(14)	107,6 (8)	C(29)—C(30)—C(31)	117,9*
C(4)—O(13)—C(14)	107,9 (8)	C(29)—C(30)—O(32)	119,7*
O(12)—C(14)—O(13)	103,5 (9)	C(31)—C(30)—O(32)	119,3*

C-méthylène-5,6  $\alpha$ -D-galactopyrannose (Aubry, Protas, Duchaussoy, Di Cesare & Gross, 1981). Les angles valenciels ayant pour sommet un atome de carbone sont compris entre 102,8 (8) et 114,6 (8)° lorsqu'ils sont intracycliques [moyenne: 108 (2)°] et, si l'on exclut C(5)—C(17)—S(18), 106,3 (7) et 112,5 (9)° lorsqu'ils sont extracycliques [moyenne: 109,0 (4)°]. Les angles C—O—C vont de 106,3 (7) à 113,7 (7)° et admettent pour valeur moyenne 109 (1)°.

Les angles de torsion endocycliques sont du même ordre que les angles qui leur correspondent respectivement dans le composé étudié par Aubry *et al.* (1981). Toutefois, lorsqu'ils appartiennent au cycle C, leurs valeurs sont de signes opposés à celles de leurs homologues.

Dans le cycle A, la symétrie dominante, au sens de Duax & Norton (1975), est la symétrie par rapport à un plan passant par O(8). L'écart à la symétrie idéale s'exprime par  $\Delta C_s^8 = 3,1^\circ$ . C(1), C(2), O(7) et C(9) sont coplanaires car le paramètre  $\chi^2$ , relatif au plan moyen  $P(A)$  calculé avec les mêmes atomes, est égal à 9. L'atome O(8) se trouve à 0,479 (6) Å de  $P(A)$ . A possède donc la forme enveloppe.

Le cycle pyranique est du type 'bateau croisé'. En effet, C(2) et C(5) sont situés du même côté du plan moyen  $P(B)$  défini par C(1), C(3), C(4) et O(6). Le premier en est éloigné de 0,40 (1) Å, le second de 0,62 (1) Å. En outre, les diagonales du quadrilatère C(1)C(3)C(4)O(6) se trouvent de part et d'autre de  $P(B)$  et les distances à ce plan des atomes qu'elles joignent sont de 0,11 (1) ou de 0,120 (7) Å, c'est-à-dire pratiquement égales. Les valeurs de  $\Delta C_s$  relatives à deux plans passant, l'un par C(2), l'autre par le milieu de C(3)—C(4), sont respectivement de 29,5 et de 29,7°. Elles traduisent l'écart entre la conformation observée et la conformation bateau idéale.

Dans le cycle  $C$ , les symétries dominantes sont la symétrie par rapport à un plan passant par C(14) ( $\Delta C_s^{14} = 11,4^\circ$ ), ou par O(12) ( $\Delta C_s^{12} = 16,2^\circ$ ), et la symétrie par rapport à un axe binaire issu de C(4) ( $\Delta C_2^4 = 3,4^\circ$ ). C(3), C(4), O(12) et O(13) sont situés approximativement dans un même plan ( $\chi^2 = 92$ ). La distance de C(14) au plan moyen  $P(C)$  défini par ces quatre atomes est de 0,47 (1) Å. Ainsi, la forme de  $C$  peut être considérée comme intermédiaire entre la forme enveloppe et la forme demi-chaise.

*Acta Cryst.* (1991). **C47**, 32–35

## Structure of Tetraquaahexadecakis(2-pyridinecarboxylato)tetraneodymiumdibarium 11·6-Hydrate

BY P. STARYNOWICZ

*Institute of Chemistry, The University, 14 F. Joliot-Curie Str., 50-383 Wroclaw, Poland*

(Received 7 August 1989; accepted 11 June 1990)

**Abstract.** [Ba<sub>2</sub>Nd<sub>4</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NO<sub>2</sub>)<sub>16</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>].11·6H<sub>2</sub>O,  $M_r = 3086.3$ , monoclinic,  $P2_1/n$ ,  $a = 15.495$  (7),  $b = 20.296$  (12),  $c = 19.309$  (11) Å,  $\beta = 110.75$  (3)°,  $V = 5679$  (6) Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $D_m = 1.81$ ,  $D_x = 1.805$  (2) Mg m<sup>-3</sup>,  $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.71069$  Å,  $\mu = 2.61$  mm<sup>-1</sup>,  $F(000) = 3032$ ,  $T = 300$  (1) K, final  $R = 0.039$  for 6227 reflections. The title compound is a centrosymmetric aggregate, with four Nd and two Ba cations. There are two modes of Nd coordination. Each Nd ion is surrounded by four N atoms and either by five carboxylic O atoms or by one water and four carboxylic O atoms. The environment of the Ba cation consists of one water and eight carboxylic O atoms.

**Introduction.** This work is part of our study of the structures and properties of complexes with lanthanide–nitrogen bonds.

**Experimental.** The title compound was prepared by adding 2-pyridinecarboxylic ( $\alpha$ -picolinic) acid to a warm aqueous suspension of Ba(OH)<sub>2</sub> and freshly precipitated neodymium carbonate. After two days parallelepiped pink-violet crystals were formed. A specimen 0.3 × 0.3 × 0.25 mm was cut from a larger crystal.  $D_m$  by flotation in C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>Br<sub>2</sub>/CHCl<sub>3</sub>. Oscillation and Weissenberg photographs showed that the crystals belong to the monoclinic system, space group  $P2_1/n$ . Syntex  $P2_1$  diffractometer, Mo  $K\alpha$  radiation for lattice parameters (15 reflections,  $21 < 2\theta < 26^\circ$ ), variable  $\omega/2\theta$  scan,  $4 < 2\theta < 50^\circ$ , two standards every 50 reflections, slight decay (10% every *ca* 180 h of exposure) was detected, mean relative e.s.d. of the control reflections (after correcting for the decay) 2.5%, 7045 intensities measured, of which 6227 were unique with  $I \geq 3\sigma(I)$ ,  $R_{\text{int}} = 0.016$ , index range  $h$  0→18,  $k$  0→24,  $l$  -22→22, no

### Références

- ALLEN, F. H., KENNARD, O., WATSON, D. G., BRAMMER, L., ORPEN, A. G. & TAYLOR, R. (1987). *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, pp. S1–S19.
- ARJUNAN, P., RAMAMURTHY, V. & VENKATESAN, K. (1984). *Acta Cryst.* **C40**, 556–558.
- AUBRY, A., PROTAS, J., DUCHAUSSOY, P., DI CESAREE, P. & GROSS, B. (1981). *Acta Cryst.* **B37**, 1477–1480.
- B. A. FRENZ & ASSOCIATES INC. (1982). *Structure Determination Package*. College Station, Texas, E.-U.
- BRITTEN, J. & LOCK, C. J. L. (1979). *Acta Cryst.* **B35**, 3065–3067.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1964). *ORFFE*. Rapport ORNL-TM-306. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, E.-U.
- DUAX, W. L. & NORTON, D. A. (1975). *Atlas of Steroid Structure*, Tome 1. New York: IFI/Plenum.
- JOHNSON, C. K. (1976). *ORTEPII*. Rapport ORNL-5138. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, E.-U.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1982). *MULTAN11/82. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univ. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- SHIRRELL, C. D. & WILLIAMS, D. E. (1973). *Acta Cryst.* **B29**, 2128–2133.
- WALKER, N. & STUART, D. (1983). *Acta Cryst.* **A39**, 159–166.