

Acta Cryst. (1962). **15**, 1310

Résonance magnétique nucléaire de $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (Trona). Par MAURICE VAN MEERSSCHE, JEAN MARIE DEREPE* et PEDRO W. LOBO (h)†, *Laboratoire de Chimie Physique, Université de Louvain, 39 rue des Moutons, Louvain, Belgique*

(Reçu le 17 juillet 1962)

La structure du Trona a été déterminée par diffraction de Rayons X par Brown (1949). Les cristaux sont monocliniques, de groupe spatial $C2/c$. La maille contient quatre molécules et a pour paramètres:

$$a = 20,41, b = 3,49, c = 10,31 \text{ \AA}; \beta = 106^\circ 20'.$$

La position des protons n'a pas été déterminée par diffraction des Rayons X, cependant la molécule d'eau est située entre deux ions CO_3^{--} de telle façon qu'il est logique d'admettre l'existence de deux liaisons hydrogène de longueurs 2,72 et 2,77 Å.

La structure du Trona a été précisée par diffraction de neutrons (Bacon & Curry, 1956). Cette étude effectuée en deux dimensions a confirmé la position des atomes lourds et déterminé les coordonnées x et z des atomes d'hydrogène. Les positions des atomes d'hydrogène sont données au Tableau 1.

Tableau 1. Positions des atomes d'hydrogène

	x/a	y/b	z/c
H_1	0.192	—	0.259
H_2	0.240	—	0.137

La distance moyenne O-H a été évaluée à $1,01 \pm 0,03$ Å

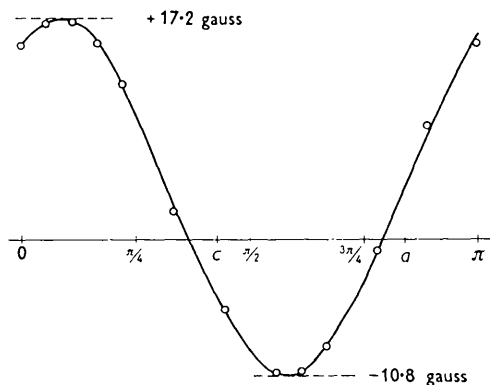


Fig. 1. Courbe de Pake pour une rotation autour de l'axe [010].

* Aspirant au Fonds National Belge de la Recherche Scientifique.

† Boursier de l'Université Nationale de Tucumán. (Rep. Arg).

par Bacon & Curry (1956), en faisant l'hypothèse que les atomes d'hydrogène sont dans le plan formé par l'oxygène de la molécule d'eau et les oxygènes liés par des ponts d'hydrogène.

Les spectres de résonance magnétique nucléaire du proton interprétés par la méthode de Pake (1948) ont permis de déterminer l'orientation et la longueur du vecteur proton-proton (cfr. Fig. 1).

La rotation d'un monocristal autour de l'axe [010] donne pour le vecteur $p-p$ une longueur de 1,58 Å et une inclinaison de 22° par rapport au plan (010). L'angle entre l'axe [100] et la projection du vecteur $p-p$ sur le plan (010) vaut 44° . D'autre part la fréquence de vibration longitudinale du groupement O-H dans l'infrarouge (3500 cm.^{-1}) correspond à une distance O-H de 0,986 Å d'après la relation de Pimentel & McClellan (1960). En admettant que la bissectrice de l'angle au sommet de la molécule d'eau coïncide avec la bissectrice de l'angle $\text{Oco}_3\text{-OH}_2\text{-Oco}_3$, comme on l'admet généralement (Van Meerssche, Dereppe & Lobo, 1961), on détermine les coordonnées des atomes d'hydrogène (Tableau 2).

Tableau 2. Coordonnées des atomes d'hydrogène

	x/a	y/b	z/c
H_1	0.192	0.576	0.259
H_2	0.240	0.221	0.137

Les coordonnées x et z trouvées par R.M.N. coïncident avec celles obtenues par diffraction de neutrons. L'angle au sommet de la molécule d'eau est de 106° . Comme l'angle entre l'oxygène de la molécule d'eau et les oxygènes liés vaut 114° , l'écart par rapport à la linéarité des liaisons hydrogène est de 4° .

Nous remercions le Dr. P. Tarte qui a pris le spectre infrarouge et le Dr. G. E. Bacon qui nous a fourni le monocristal de Trona.

Bibliographie

- BACON, G. E. & CURRY, N. A. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 82.
 BROWN, C. J. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 167.
 PAKE, G. E. (1948). *J. Chem. Phys.* **16**, 327.
 PIMENTEL, G. C. & McCLELLAN, A. L. (1960). *The Hydrogen Bond*. New York: Freeman.
 VAN MEERSSCHE, M., DEREPE, J. M. & LOBO(h), P. W. *Bull. Soc. Chim. Franç.*, p. 2217.

Acta Cryst. (1962). **15**, 1310

The crystal structure of chlorite. I. A monoclinic polymorph. A correction. By H. STEINFINK, *Shell Development Comp., Houston, Texas, U.S.A.*

In the paper by Steinfink (1958) the following errors occurred. The $R(0kl)$ on p. 193 should read 0.0868. In Fig. 2 the z coordinate of OH_4 should be -0.435 and of O_4 -0.235 .

Reference

- STEINFINK, H. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 191.