

volve the hydrogen atoms of the TPAS⁺. The three short N...H contacts of 2.54, 2.58 and 2.61 Å are close to the value of 2.6–2.7 Å expected for van der Waals contact. The F...H distance of 2.56 Å is the sum of the van der Waals radii. The shortest contacts between the heavier atoms are F(34)...C(9) (3.32 Å) and N(36)...C(8) (3.28 Å), both of which are van der Waals contacts.

References

- BEKOE, D. A. & TRUEBLOOD, K. N. (1960). *Z. Kristallogr.* **113**, 1.
 BUGG, C. & SASS, R. L. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 591.
 CARPENTER, W. (1965). Private communication.
 COX, E. G., CRUICKSHANK, D. W. J. & SMITH, J. A. S. (1958). *Proc. Roy. Soc. A*, **247**, 1.
 CRUICKSHANK, D. W. J. & ROBERTSON, A. P. (1953). *Acta Cryst.* **6**, 698.
 CRUICKSHANK, D. W. J. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 747, 754.
 CRUICKSHANK, D. W. J. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 896.
 CULLEN, W. R. & TROTTER, J. (1963). *Canad. J. Chem.* **41**, 2983.
 DESIDERATO, R. & SASS, R. L. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 1.
 HEDBERG, K., HUGHES, E. W. & WASER, J. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 369.
 HOERNI, J. A. & IBERS, J. A. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 744.
International Tables for X-ray Crystallography (1962). Vol. III. p. 211. Birmingham: Kynoch Press.
 KARLE, I. J., KARLE, J., OWEN, T. B. & HOARD, J. L. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 345.
 LONG, R. E., SPARKS, R. A. & TRUEBLOOD, K. N. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 932.
 MCWEENY, R. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 513.
 MOONEY, R. C. L. (1940). *J. Amer. Chem. Soc.* **62**, 2995.
 PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd ed. p. 260. Ithaca: Cornell Univ. Press.
 STOICHEFF, B. P. (1954). *Canad. J. Phys.* **32**, 339.
 SUTTON, L. E. (1958). *Tables of Interatomic Distances and Configuration in Molecules and Ions*. Special Publication No. 11. London: The Chemical Society.
 ZASLOW, B. & RUNDLE, R. E. (1957). *J. Phys. Chem.* **61**, 490.

Acta Cryst. (1966). **20**, 482

Étude par Diffraction de Rayons X de Complexes d'Halogénures Alcalins et de Molécules Organiques. IV. Structure de NaBr.2CH₃CONH₂*

PAR PAUL PIRET†, LUC RODRIQUE‡, YVES GOBILLON‡ ET MAURICE VAN MEERSSCHE
Laboratoire de Chimie physique, Université de Louvain, Belgique

(Reçu le 29 juin 1965)

The structure of NaBr.2CH₃CONH₂ has been determined by a three-dimensional X-ray analysis. Space group *P2₁/c*, *Z*=4; *a*=9.11, *b*=6.49, *c*=17.72 Å, *β*=115.4°. Each sodium atom is octahedrally coordinated (2Br and 4O) and the structure consists of infinite chains of octahedra having one face in common. There are N-H...Br bonds between the chains. Distances Na-Br: 2.99 and 3.12. Mean distances: Na-O=2.35, N(H)-Br=3.50, C-O=1.22, C-N=1.31, C-C=1.50.

Le complexe NaBr.2CH₃CONH₂ a été préparé par la méthode décrite par Titherley (1901): on dissout le bromure de sodium et l'acétamide dans l'éthanol anhydre et on refroidit la solution dans un exsiccateur au chlorure de calcium sous vide. Les cristaux se présentent sous forme d'aiguilles incolores très hygroscopiques (point de fusion: 145°C). Pour l'étude aux rayons X, nous les avons enfermés dans des tubes en verre de Lindemann.

Paramètres de la maille

Les dimensions de la maille-unité ont été mesurées sur des diagrammes de rotation (autour des axes *a* et *b*) et de Weissenberg. Le spectre d'un fil d'argent a servi

d'étalon (*a*=4,086 Å). Le groupe spatial est *P2₁/c*, correspondant aux absences systématiques *h0l* pour *l*≠2*n* et *0k0* pour *k*≠2*n*. Les paramètres valent:

$$\begin{aligned} a &= 9,11 \pm 0,01 \text{ \AA} \\ b &= 6,49 \pm 0,01 \\ c &= 17,72 \pm 0,03 \\ \beta &= 115,4^\circ \pm 0,2^\circ \end{aligned}$$

Les résultats publiés précédemment (Gobillon & Piret, 1962) étaient basés sur une valeur légèrement erronée pour le paramètre *a* de l'argent. Il y a quatre 'molécules' de complexe par maille. La densité calculée, vérifiée expérimentalement, vaut 1,55.

Intensité des rayons diffractés

Les spectres de diffraction ont été obtenus à l'aide d'une caméra de Weissenberg, munie d'un dispositif intégrateur. La radiation incidente était Cu K α (λ =1,5418 Å). Les réflexions *hkl* ont été enregistrées par

* Partie III: Structure de NaI.3CH₃OH (Piret & Mesureur, 1965).

† Chercheur Qualifié du Fonds National Belge de la Recherche Scientifique.

‡ Titulaires d'une bourse de spécialisation de l'IRSIA.

la technique des films superposés pour k variant de 0 à 5 (environ 1730 réflexions). L'intensité de chaque réflexion a été mesurée par comparaison visuelle à une échelle de noircissement. Elle a été corrigée par les facteurs de Lorentz et de polarisation. L'absorption était négligeable (cristal quasicylindrique de 0,2 mm de diamètre). Une détermination approchée de la constante moyenne de température ($B=3,31 \text{ \AA}^2$) et de l'échelle absolue a été effectuée par la méthode de Wilson (1942).

Détermination de la structure

Le calcul d'une fonction de Patterson ponctualisée (en divisant les intensités par le carré du produit du facteur atomique du brome par le facteur de température moyen) a permis de déterminer les coordonnées du brome et du sodium ($R=35\%$). Des synthèses de Fourier normales et 'de différences' ont fourni les coordonnées de tous les atomes, hydrogènes exceptés ($R=24\%$).

L'affinement des paramètres de structure a été effectué par la méthode des moindres carrés. Un facteur de température isotrope est attribué à chaque atome. La fonction minimisée est

$$r = \sum w(|F_o| - |F_c|)^2$$

avec F_o : facteur observé, F_c : facteur calculé. Les résultats sont comparés grâce à la fonction

$$R = \sum ||F_o| - |F_c|| / \sum |F_o|.$$

Les facteurs de forme atomique utilisés sont ceux de la Table 3.3.1A des *International Tables for X-ray Crystallography* (1962) pour C, N, O, Na^+ et Br^- .

Dans un premier programme, tous les paramètres sont affinés séparément (programme pour Wegematic 1000, de J. De Kerf, Gevaert, Mortsel, Belgique). Les poids statistiques w sont calculés par la méthode de Hughes telle qu'elle est détaillée par Lavine & Rollett (1956). La fonction R commence par diminuer jusqu'à $R=0,167$, mais augmente ensuite; les facteurs de température tendent à devenir de plus en plus grand, par suite du fait que l'on néglige la corrélation entre facteurs d'échelle et de température. Les résultats peuvent être légèrement améliorés en employant un facteur d'amortissement ($R=0,158$).

Dans le programme de G. S. D. King (IBM 1620 L.S. refinement programme ERA 302, European Research Associates, Bruxelles 18), il est tenu compte de cette corrélation et de celle entre coordonnées d'un même atome. Le schéma de pondération est celui décrit par Cruickshank, Pilling, Bujosa, Lovell & Truter (1961). L'évolution de R (calculé à partir de tous les facteurs de structure du Tableau 2) est la suivante:

1er tour	0,148
2	0,136
3	0,134
4	0,133
5	0,133.

L'affinement est alors arrêté, toutes les corrections aux paramètres étant inférieures au cinquième des écarts-type. Ceux-ci sont calculés, au cours du même programme, à partir des matrices inverses.

Le Tableau 1 donne les coordonnées finales avec les écarts-type en dix-millièmes des paramètres a , b , c , ainsi que les constantes de température avec leurs écarts-type (Å^2). Le Tableau 2 rassemble les facteurs observés et calculés; pour les réflexions dont l'intensité est inférieure au minimum observable, on a pris $F_o = \frac{1}{2}F_o$ (minimum).

Description de la structure

La Fig. 1 donne un schéma de la structure. L'origine de la maille a été déplacée de $c/4$ de façon à se trouver sur l'axe binaire hélicoïdal. Les ions sodium se situent à peu près sur cet axe. Ils sont entourés octaédriquement par 4 atomes d'oxygène et 2 ions brome. Chacun de ces six atomes est lié à deux cations. Il se forme ainsi des colonnes, dont l'axe est b , par mise en commun de faces des octaèdres. Des ponts hydrogène $\text{N-H} \cdots \text{Br}$ se forment à l'intérieur et entre les colonnes. La forme allongée des cristaux suivant $[010]$ est ainsi expliquée, les liaisons dans cette direction étant plus fortes que dans les autres.

Le Tableau 3 rassemble les distances et angles principaux avec leurs écarts-type. Me représente l'atome de carbone du groupe méthyle et C celui du groupe CO. On peut identifier les atomes grâce à la Fig. 2, projection de la structure sur (010) , dans laquelle les coordonnées y sont données en Å .

Tableau 1. Coordonnées atomiques avec écarts-type (dix-millièmes des paramètres a , b , c).
Constantes de température B avec écarts-type (Å^2)

	x	y	z	B
Br	1794.6 ± 1.5	1323.3 ± 2.2	1696.3 ± 0.7	3.86 ± 0.03
Na	-0022 ± 6	3668 ± 7	2477 ± 3	3.60 ± 0.10
O(1)	2070 ± 13	6124 ± 15	3105 ± 6	4.06 ± 0.18
C(1)	3506 ± 17	6029 ± 22	3275 ± 8	3.54 ± 0.21
N(1)	4230 ± 17	7451 ± 23	3038 ± 9	5.39 ± 0.28
Me(1)	4517 ± 24	4202 ± 33	3737 ± 12	5.79 ± 0.36
O(2)	1025 ± 12	1194 ± 14	3548 ± 6	3.89 ± 0.18
C(2)	1476 ± 19	1286 ± 22	4312 ± 10	4.18 ± 0.27
N(2)	1140 ± 19	2857 ± 30	4681 ± 10	6.28 ± 0.32
Me(2)	2367 ± 30	-0411 ± 40	4897 ± 15	7.73 ± 0.49

Tableau 2. Facteurs de structure observés et calculés
 Pour les réflexions marquées N (intensité inférieure au minimum observable) on a pris $F_0 = \frac{1}{2}F_0$ (minimum).

H		K		L		10FO		10FC	
01	01	01	01	01	01	01	01	01	01
02	02	02	02	02	02	02	02	02	02
03	03	03	03	03	03	03	03	03	03
04	04	04	04	04	04	04	04	04	04
05	05	05	05	05	05	05	05	05	05
06	06	06	06	06	06	06	06	06	06
07	07	07	07	07	07	07	07	07	07
08	08	08	08	08	08	08	08	08	08
09	09	09	09	09	09	09	09	09	09
10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
11	11	11	11	11	11	11	11	11	11
12	12	12	12	12	12	12	12	12	12
13	13	13	13	13	13	13	13	13	13
14	14	14	14	14	14	14	14	14	14
15	15	15	15	15	15	15	15	15	15
16	16	16	16	16	16	16	16	16	16
17	17	17	17	17	17	17	17	17	17
18	18	18	18	18	18	18	18	18	18
19	19	19	19	19	19	19	19	19	19
20	20	20	20	20	20	20	20	20	20
21	21	21	21	21	21	21	21	21	21
22	22	22	22	22	22	22	22	22	22
23	23	23	23	23	23	23	23	23	23
24	24	24	24	24	24	24	24	24	24
25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
26	26	26	26	26	26	26	26	26	26
27	27	27	27	27	27	27	27	27	27
28	28	28	28	28	28	28	28	28	28
29	29	29	29	29	29	29	29	29	29
30	30	30	30	30	30	30	30	30	30
31	31	31	31	31	31	31	31	31	31
32	32	32	32	32	32	32	32	32	32
33	33	33	33	33	33	33	33	33	33
34	34	34	34	34	34	34	34	34	34
35	35	35	35	35	35	35	35	35	35
36	36	36	36	36	36	36	36	36	36
37	37	37	37	37	37	37	37	37	37
38	38	38	38	38	38	38	38	38	38
39	39	39	39	39	39	39	39	39	39
40	40	40	40	40	40	40	40	40	40
41	41	41	41	41	41	41	41	41	41
42	42	42	42	42	42	42	42	42	42
43	43	43	43	43	43	43	43	43	43
44	44	44	44	44	44	44	44	44	44
45	45	45	45	45	45	45	45	45	45
46	46	46	46	46	46	46	46	46	46
47	47	47	47	47	47	47	47	47	47
48	48	48	48	48	48	48	48	48	48
49	49	49	49	49	49	49	49	49	49
50	50	50	50	50	50	50	50	50	50
51	51	51	51	51	51	51	51	51	51
52	52	52	52	52	52	52	52	52	52
53	53	53	53	53	53	53	53	53	53
54	54	54	54	54	54	54	54	54	54
55	55	55	55	55	55	55	55	55	55
56	56	56	56	56	56	56	56	56	56
57	57	57	57	57	57	57	57	57	57
58	58	58	58	58	58	58	58	58	58
59	59	59	59	59	59	59	59	59	59
60	60	60	60	60	60	60	60	60	60
61	61	61	61	61	61	61	61	61	61
62	62	62	62	62	62	62	62	62	62
63	63	63	63	63	63	63	63	63	63
64	64	64	64	64	64	64	64	64	64
65	65	65	65	65	65	65	65	65	65
66	66	66	66	66	66	66	66	66	66
67	67	67	67	67	67	67	67	67	67
68	68	68	68	68	68	68	68	68	68
69	69	69	69	69	69	69	69	69	69
70	70	70	70	70	70	70	70	70	70
71	71	71	71	71	71	71	71	71	71
72	72	72	72	72	72	72	72	72	72
73	73	73	73	73	73	73	73	73	73
74	74	74	74	74	74	74	74	74	74
75	75	75	75	75	75	75	75	75	75
76	76	76	76	76	76	76	76	76	76
77	77	77	77	77	77	77	77	77	77
78	78	78	78	78	78	78	78	78	78
79	79	79	79	79	79	79	79	79	79
80	80	80	80	80	80	80	80	80	80
81	81	81	81	81	81	81	81	81	81
82	82	82	82	82	82	82	82	82	82
83	83	83	83	83	83	83	83	83	83
84	84	84	84	84	84	84	84	84	84
85	85	85	85	85	85	85	85	85	85
86	86	86	86	86	86	86	86	86	86
87	87	87	87	87	87	87	87	87	87
88	88	88	88	88	88	88	88	88	88
89	89	89	89	89	89	89	89	89	89
90	90	90	90	90	90	90	90	90	90
91	91	91	91	91	91	91	91	91	91
92	92	92	92	92	92	92	92	92	92
93	93	93	93	93	93	93	93	93	93
94	94	94	94	94	94	94	94	94	94
95	95	95	95	95	95	95	95	95	95
96	96	96	96	96	96	96	96	96	96
97	97	97	97	97	97	97	97	97	97
98	98	98	98	98	98	98	98	98	98
99	99	99	99	99	99	99	99	99	99
100	100	100	100	100	100	100	100	100	100

déterminés pour l'acétamide à l'état gazeux (Kimura & Aoki, 1953) et à l'état cristallin trigonal (Senti & Harker, 1940) ou orthorhombique (Hamilton, 1965) (voir tableau des valeurs avec écarts-type dans l'article de Hamilton). La structure de l'acétamide n'est donc guère perturbée par la formation du complexe.

Entourage du sodium

Le sodium est entouré par 4 atomes d'oxygène à peu près coplanaires et par deux ions brome. Il se forme ainsi un octaèdre assez peu régulier. La principale déformation est un étirement de l'octaèdre suivant y : les 3 atomes de coordonnée y semblable (Fig. 2) sont plus proches (O-O: 3,07; Br-O: 3,64 et 3,69 Å) que ceux de y différent (O-O: 3,60; Br-O > 3,92 Å). Ceci est dû à l'action des ions sodium qui tendent à rapprocher les atomes des plans situés entre eux. Les distances Na-O (moyenne: 2,35 Å) sont normales (*cf.* Tableau 4). Par contre la différence entre les distances Na-Br (2,989 et $3,123 \pm 0,005$ Å) est étonnante, l'entourage des deux atomes de brome étant le même. La distance Na-Br vaut 2,98 Å dans Na-Br (*International Tables for X-ray Crystallography*, 1962), 2,97 Å dans NaBr · 2H₂O (Culot, Piret & Van Meerssche, 1962;

Haaf & Carpenter, 1964). En absence de répulsion entre anions, Pauling (1960) calcule une distance Na-Br de 2,90 Å. Il semble bien cependant que ce ne soit pas un facteur stérique qui fixe la distance expérimentale aux alentours immédiats de 2,98 Å. La répétition de cette valeur pour des entourages divers du sodium indique qu'elle est liée plus fondamentalement à la liaison sodium-brome. Dans le composé que nous étudions ici, ce sont probablement des facteurs stériques qui empêchent la formation de deux liaisons de longueurs égales à environ 2,98 Å, mais il est remarquable qu'au lieu d'obtenir deux distances d'environ 3,05 Å, l'une d'elles reste proche de 2,98 Å.

Entourage du brome

Le brome est lié à deux ions sodium et à quatre atomes d'hydrogène provenant des groupes NH₂. Toutes les distances Br-CH₃ sont supérieures à la somme des rayons de van der Waals; il n'y a donc pas d'interaction importante entre brome et hydrogène méthylique. Les distances Br-N (moyenne: 3,50 Å) correspondent bien à celles qu'on peut prévoir pour des liaisons hydrogène N-H...Br⁻: la somme des 'rayons hydrogène' proposés par Wallwork (1962) vaut

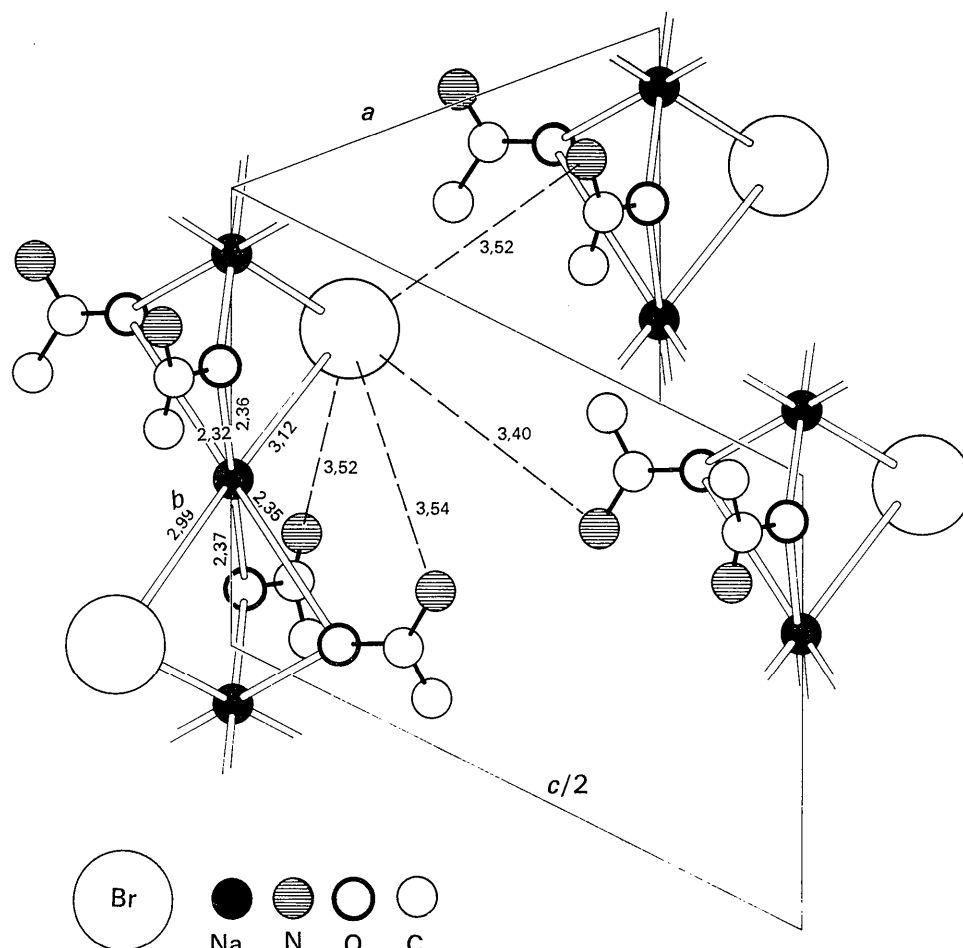


Fig. 1. Schéma de la structure de NaBr · 2CH₃CONH₂. Origine de la maille prise sur 2₁. Distances principales en Å.

Tableau 3. Distances (Å) et angles (°) avec les écarts-type

Me = C de CH₃. Notations identiques à celles de la Fig. 2

O(1)-C(1)	1·211 ± 0·018	O(2)-C(2)	1·236 ± 0·019
C(1)-N(1)	1·304 ± 0·021	C(2)-N(2)	1·316 ± 0·024
C(1)-Me(1)	1·509 ± 0·026	C(2)-Me(2)	1·491 ± 0·031
Na-O(1)	2·364 ± 0·012	Na-O(1')	2·370 ± 0·012
Na-O(2)	2·352 ± 0·011	Na-O(2')	2·323 ± 0·011
Na-Br	2·989 ± 0·005	Na-Br'	3·123 ± 0·005
Br'-N(1')	3·516 ± 0·015	Br'-N(2)	3·544 ± 0·018
Br'-N(1'')	3·522 ± 0·015	Br'-N(2'')	3·400 ± 0·018
Br-O(1)	3·932 ± 0·011	Br'-O(1')	4·112 ± 0·011
Br-O(2')	3·978 ± 0·010	Br'-O(2)	4·140 ± 0·010
Br-O(2)	3·639 ± 0·010	Br-O(1')	3·688 ± 0·011
O(1)-O(2)	3·521 ± 0·015	O(1')-O(2')	3·604 ± 0·015
O(1)-O(2')	3·073 ± 0·015		
Na-Na'	3·245 ± 0·010		
Me(1)-C(1)-N(1)	117·1 ± 1·5	Me(2)-C(2)-N(2)	113·6 ± 1·7
N(1)-C(1)-O(1)	121·7 ± 1·4	N(2)-C(2)-O(2)	122·9 ± 1·6
O(1)-C(1)-Me(1)	121·2 ± 1·4	O(2)-C(2)-Me(2)	123·5 ± 1·7
O(1)-Na-O(2)	96·6 ± 0·4	O(1')-Na-O(2')	100·3 ± 0·4
O(1)-Na-O(2')	81·9 ± 0·4	O(1')-Na-O(2)	81·2 ± 0·4
Br-Na-O(1)	93·8 ± 0·3	Br'-Na-O(1)	83·2 ± 0·3
Br-Na-O(1')	86·1 ± 0·3	Br'-Na-O(1')	96·9 ± 0·3
Br-Na-O(2)	85·0 ± 0·3	Br'-Na-O(2)	96·3 ± 0·3
Br-Na-O(2')	96·2 ± 0·3	Br'-Na-O(2')	82·4 ± 0·3
O(1')-O(2')-O(1)	89·9 ± 0·4	O(1')-O(2)-O(1)	91·5 ± 0·4
O(2')-O(1)-O(2)	90·1 ± 0·4	O(2)-O(1')-O(2')	88·5 ± 0·4
Br'-N(1')-C(1')	117·6 ± 1·0	Br'-N(1'')-C(1'')	116·3 ± 1·0
Br'-N(2)-C(2)	114·6 ± 1·2	Br'-N(2'')-C(2'')	132·0 ± 1·2
Na-O(1)-C(1)	130·5 ± 1·0	Na-O(1')-C(1')	134·9 ± 1·0
Na-O(2)-C(2)	132·8 ± 1·0	Na-O(2')-C(2')	133·6 ± 1·0
Na-O(1)-Na'	86·5 ± 0·4	Na-O(2')-Na'	87·9 ± 0·4

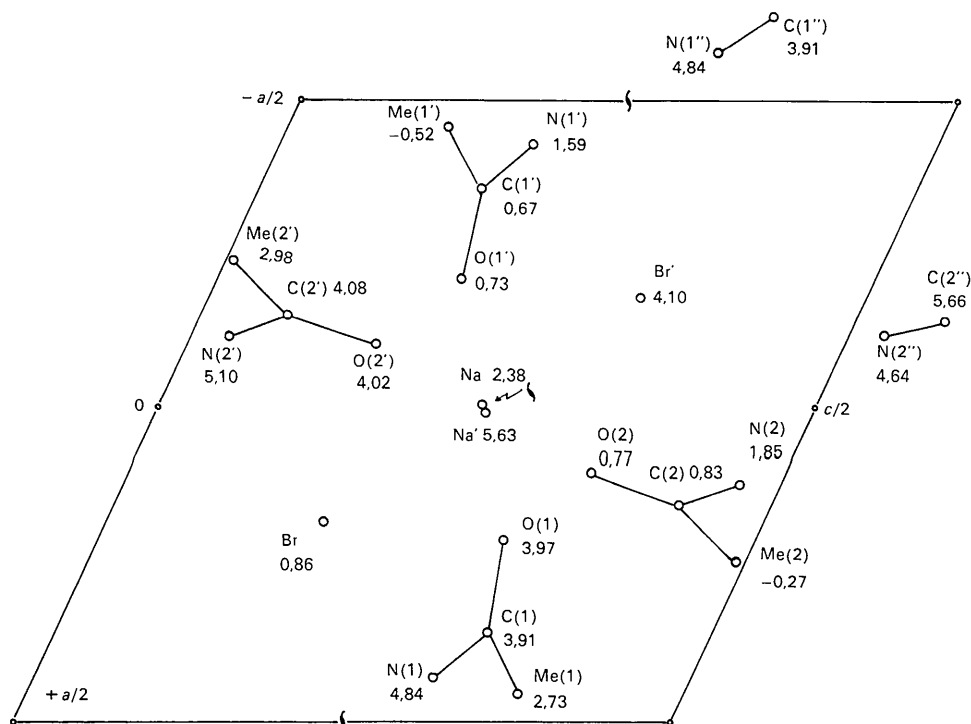


Fig. 2. Projection de la structure sur (010). Coordonnées y en Å.

Tableau 4. *Classement structural de quelques complexes de sels sodiques (voir texte). Distances Na-O (Å)*

Composé	Coordinance Na	Partage	Dimensions	Distances Na-O	Référence
NaOH . H ₂ O	4(3OH+1OH ₂)	1 ar. + 1 s(2×) + 2s*	2	2.30-2.35-2.39-2.40	(1)
NaCl . urée . H ₂ O	6(2Cl+2O+2OH ₂)	2 faces opposées	1	2.26-2.28-2.31-2.42	(2)
NaBr . 2acétamide	6(2Br+4O)	- -	1	2.32-2.35-2.36-2.37	(3)
NaBr . 2H ₂ O	6(2Br+4O)	3 arêtes non adj.	2	2.37-2.40-2.42-2.48	(4), (5)
NaCN . 2H ₂ O	6(2CN+4O)	- - -	2	2.34-2.37-2.42-2.43	(6)
NaI . 2cystéylglycine	4O	2 arêtes gauches	1	2.16-2.23	(7)
NaI . 3méthanol	6O	2 faces opposées	1	2.47	(8)
NaI . 3acétone	6O	- -	1	2.46	(9)
NaI . 3diméthylformamide	6O	- -	1	2.40	(10)
NaOH . 4H ₂ O	5OH ₂	1 arête	0	2.36(2x)-2.38(2x)-2.39	(11)

Références: (1) Wunderlich (1957); (2) Palm & MacGillavry (1963); (3) Ce travail; (4) Culot, Piret & Van Meerssche (1962); (5) Haaf & Carpenter (1964); (6) LeBihan (1958); (7) Dyer (1951); (8) Piret & Mesureur (1965); (9) Piret, Gobillon & Van Meerssche (1963); (10) Gobillon, Piret & Van Meerssche (1962); (11) Beurskens & Jeffrey (1964).

* s = sommet.

3,53 Å. Trois des angles BrNC (Tableau 3) sont compatibles avec un pont d'hydrogène quasi linéaire: moyenne 116°, à comparer à l'angle HNC qui vaut 112° dans CH₃NH₂ et 119° dans OC(NH₂)₂ (*Tables of Interatomic Distances*, Supplement, 1965). Le quatrième angle, qui correspond à la distance Br-N la plus courte (3,40 Å), est plus grand (132°).

Type de structure

Les principales caractéristiques de structure de NaBr . 2CH₃CONH₂ sont:

(a) Nature du polyèdre de coordination formé autour du cation:

octaèdre (2Br+4O).

(b) Mode de contact entre ces polyèdres:

partage de deux faces opposées.

(c) Nombre de dimensions dans lesquelles se propagent les liaisons primaires (cation-anion et cation-atome électrodonneur):

1 dimension.

On peut noter également la nature des liaisons secondaires les plus importantes assurant la cohésion dans les dimensions complémentaires:

liaisons hydrogène N-H...Br⁻.

Ce mode de description, variante de celles de Pauling (1960) et de Wells (1950), peut s'appliquer à beaucoup de composés au moins partiellement ioniques. Il est particulièrement valable dans le cas de complexes de formule générale MX_n . pD . p'D' . . . , où M est un cation, X, un anion, D et D', des molécules neutres. A titre d'exemple nous avons rassemblé au Tableau 4 les caractéristiques structurales de complexes NaX . pD . p'D'. On remarquera qu'elles sont suffisantes pour reconstruire les structures dans leurs grandes lignes et mettent en évidence d'intéressantes relations.

Nous tenons à exprimer notre reconnaissance à MM. G.S.D. King et J. De Kerf pour l'aide précieuse qu'ils

nous ont apportée lors de l'affinement de la structure. Nous remercions également le F.N.R.S. et l'I.R.S.I.A. pour les mandats accordés à plusieurs d'entre nous ainsi que le Fonds de la Recherche Scientifique Fondamentale Collective pour le soutien financier dont a bénéficié cette recherche.

Références

- BEURSKENS, G. & JEFFREY, G. A. (1964). *J. Chem. Phys.* **41**, 924.
- CRUICKSHANK, D. W. J., PILLING, D. E., BUJOSA, A., LOVELL, F. M. & TRUTER, M. R. (1961). Dans *Computing Methods and the Phase Problem in X-ray Crystal Analysis*, p. 45. Oxford: Pergamon Press.
- CULOT, J. P., PIRET, P. & VAN MEERSSCHE, M. (1962). *Bull. Soc. Franç. Minér. Crist.* **85**, 282.
- DYER, H. B. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 42.
- GOBILLON, Y. & PIRET, P. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1186.
- GOBILLON, Y., PIRET, P. & VAN MEERSSCHE, M. (1962). *Bull. Soc. Chim. France*, p. 551.
- HAAF, W. R. & CARPENTER, G. B. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 730.
- HAMILTON, W. C. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 866.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
- KIMURA, M. & AOKI, M. (1953). *Bull. Chem. Soc. Japan*, **26**, 429.
- LAVINE, L. R. & ROLLETT, J. S. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 269.
- LE BIHAN, M. T. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 770.
- PALM, J. H. & MACGILLAVRY, C. H. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 963.
- PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*. Ithaca: Cornell Univ. Press.
- PIRET, P. & MESUREUR, C. (1965). *J. Chim. Phys.* **62**, 287.
- PIRET, P., GOBILLON, Y. & VAN MEERSSCHE, M. (1963). *Bull. Soc. Chim. France*, p. 205.
- SENTI, F. & HARKER, D. (1940). *J. Amer. Chem. Soc.* **62**, 2008.
- Tables of Interatomic Distances and Configuration in Molecules and Ions*, Supplement 1956-1959 (1965). London: The Chemical Society.
- TITHERLEY, A. W. (1901). *J. Chem. Soc.* **79**, 413.
- WALLWORK, S. C. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 758.
- WELLS, A. F. (1950). *Structural Inorganic Chemistry*. Oxford Univ. Press.
- WILSON, A. J. C. (1942). *Nature, Lond.* **150**, 152.
- WUNDERLICH, J. A. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 462.