d'après l'écartement maximum du doublet qui correspond au groupe $W(1)$, $r=1{,}58$ Å pour la distance intramoléculaire, soit la même valeur que dans le gypse.

$$2\alpha=3\mu r^{-3}=10{,}70 \text{ gauss} \pm 0{,}05,$$
$$\mu=1{,}407.10^{-23} \text{ erg . gauss}^{-1},$$
$$r=1{,}58 \text{ Å} \pm 0{,}02.$$

Comparison avec les résultats de l'absorption infra-rouge

Nous avons étudié par absorption infra-rouge des échantillons préparés à partir de solutions saturées de $La_2Mg_3(NO_3)_{12}.24H_2O$ et de $La_2Mg_3(NO_3)_{12}.24D_2O$ (Deleplanque, Kahane & Serra, 1966). Les maxima d'absorption notés sur le spectre réalisé vers $-190°C$ se situent entre 3,620 et 3,220 cm^{-1}, et montrent que les longueurs O–H···O des ponts hydrogène se situent entre 2,7 et 3,0 Å, ce qui est en accord avec les hypothèses faites par Zalkin, Forrester & Templeton.

Conclusion

La possibilité de placer les atomes d'hydrogène dans la maille d'un cristal par la diffraction des rayons X est souvent contestée, surtout dans des structures d'une certaine complexité.

Nous avons pu utiliser la résonance magnétique nucléaire pour tester la valeur du raffinement d'une structure de nitrate double hydraté d'après Zalkin, Forrester & Templeton. La RMN ne pouvait pas, dans un cas aussi complexe, permettre la détermination directe de la position des atomes d'hydrogène. On a pu montrer qu'en symétrie triclinique le nombre maximum de sites d'atomes d'hydrogène dont on peut obtenir la position à partir des spectres de RMN est de 6 (Touillaux, 1964). Ce nombre tombe à 1 en symétrie rhomboédrique. Or, dans la structure étudiée, le nombre de sites hydrogène est de 8.

Par contre, il était possible de vérifier ou d'infirmer l'orientation des molécules d'eau proposée par Zalkin, Forrester & Templeton. Aussi bien la RMN que l'absorption infra-rouge nous ont donné des résultats en accord avec la diffraction des rayons X, compte tenu de la marge d'erreur inhérente à cette technique pour la position des atomes d'hydrogène.

Du point de vue de la théorie de la liaison hydrogène, il apparaît donc que ce cristal présente un intérêt particulier lié à l'existence de plusieurs sortes de liaisons hydrogène: liaisons rectilignes, liaisons curvilignes et liaisons bifurquées donnant aux atomes d'hydrogène une coordination 3. Au fur et à mesure que les informations expérimentales s'accumulent, il se confirme que la liaison rectiligne considérée comme normale serait plutôt l'exception que la règle (Baur, 1965).

Nous avons pu, grâce à la RMN, apporter une précision concernant la distance des atomes d'hydrogène dans une même molécule d'eau. La structure déterminée par la diffraction des rayons X donnait la valeur $\Gamma=1{,}1 \pm 0{,}4$ Å. Nous avons obtenu $\Gamma=1{,}58 \pm 0{,}02$ Å. Ceci confirme que dans les hydrates, la molécule d'eau ne subit que de très légères déformations.

Nous remercions tout particulièrement Monsieur le Professeur Soutif, Directeur du Laboratoire de Physique Générale de la Faculté des Sciences de Grenoble, qui nous a donné les moyens de réaliser ce travail. L'un de nous (A. Serra) a obtenu un détachement temporaire pour travailler dans ce Laboratoire.

M. A. Kahane, Maître de Conférences, a pris en charge l'étude de l'absorption infra-rouge et son interprétation.

Références

ATOJI, M. & RUNDLE, R. E. (1958). *J. Chem. Phys.* **29**, 1306.
BAUR, W. H. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 909.
DELEPLANQUE, M., KAHANE, A. & SERRA, A. (1966). *C.R. Acad. Sci. Paris*, **262**, 52.
PAKE, G. E. (1948). *J. Chem. Phys.* **16**, 327.
PEDERSEN, B. & HOLCOMB, D. F. (1963). *J. Chem. Phys.* **38**, 61.
TOUILLAUX, R. (1964). Thèse de doctorat, Univ. C. de Louvain.
ZALKIN, A., FORRESTER, J. D. & TEMPLETON, D. H. (1963). *J. Chem. Phys.* **39**, 2881.

Acta Cryst. (1966). **21**, 681

The Crystal Structure of Strontium Permanganate Trihydrate

BY A. FERRARI, A. BRAIBANTI, G. BIGLIARDI AND A. M. MANOTTI LANFREDI
Istituto di Chimica Generale, Università di Parma, Italy

(*Received* 21 *March* 1966)

The crystals of strontium permanganate trihydrate, $Sr(MnO_4)_2.3H_2O$, are cubic, space group $P2_13$, with $a=9{\cdot}611 \pm 0{\cdot}006$ Å. The structure has been solved by three-dimensional methods.

The structure consists of anions, MnO_4^-, cations Sr^{2+}, and water molecules. MnO_4^- groups have nearly tetrahedral symmetry (Mn–O, $1{\cdot}605 \pm 0{\cdot}014$ Å). The Sr^{2+} cations are surrounded by seven oxygen atoms belonging to MnO_4^- anions and by three water molecules. ($Sr–O_{av}$, 2·68 Å). The resulting coordination polyhedron, apart from one more atom in front of a basal face, is similar to that in $SrCl_2.6H_2O$ and in $Sr(VO_3)_2.4H_2O$ in which ninefold coordination has been found.

Introduction

Strontium ion, Sr^{2+}, presents unusual coordination numbers. For example, in the structure of $SrCl_2.6H_2O$ (Wells, 1962) and of $Sr(VO_3)_2.4H_2O$ (Sedlacek & Dornberger-Schiff, 1965) the coordination number is nine. The crystal structure of strontium permanganate tri-

hydrate, $Sr(MnO_4)_2.3H_2O$, has been determined, in order to make one more contribution to the knowledge of the crystal chemistry of strontium.

Experimental

Crystals of strontium permanganate trihydrate have been prepared by Ferrari & Biagini Cingi (1966) by mixing aqueous solutions of silver permanganate and strontium chloride; silver chloride was filtered off and the solution was evaporated in a desiccator. The dark violet crystals obtained are very hygroscopic.

Under the polarizing microscope no observation could be made because of the dark color of the crystals. One crystal was sealed into a glass capillary tube. For the determination of the crystal symmetry and of the unit-cell constants, Weissenberg and precession photographs were taken with the same setting of the crystal (rotation axis [001]; Cu $K\alpha$ radiation: $\lambda = 1{\cdot}5418$ Å). From the symmetry of the photographs and from the systematic absences, the crystals can be assigned to the monometric space group $P2_13$ (no. 198, T^4). The unit-cell constant is $a = 9{\cdot}611 \pm 0{\cdot}006$ Å. Four formula units, $Sr(MnO_4)_2.3H_2O$, are contained in the unit cell. The observed density, $D_m = 2{\cdot}78$ g.cm^{-3} is in satisfactory agreement with the calculated density, $D_x = 2{\cdot}84$ g.cm^{-3}.

For the determination of the structure, reflexions $hk0$, $hk1$, $hk2$, $hk3$, $hk4$, $hk5$, $hk6$ and $hk7$ were taken, with Cu $K\alpha$ radiation, by the photographic method.

The intensities were measured by a microphotometer. Absorption corrections as for cylindrical specimens were applied (Bond, 1959) ($\mu R = 4{\cdot}39$ for Cu radiation).

Determination of the structure

From the Patterson function $P(UVW)$, trial sets of vectors Sr–Sr, Sr–Mn(1) and Sr–Mn(2) were obtained. The set was chosen which gave the best reliability index ($R = 0{\cdot}3$). As a further check of this choice, $\varrho_0(xyz)$

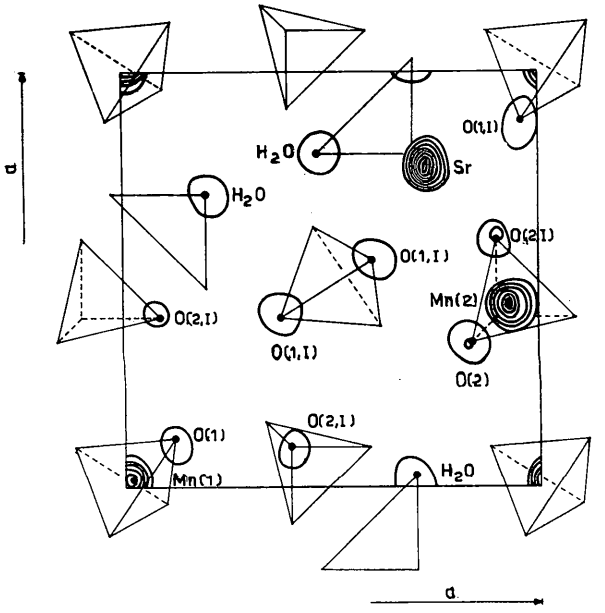

Fig. 1. Strontium permanganate trihydrate. Electron density function

$$\left|\varrho_0(xyz)\right|_{z=0}^{z=\frac{1}{4}},$$

projected on (001). Tetrahedra indicate MnO_4^- groups; triangles indicate three water molecules crystallographically related by ternary axis.

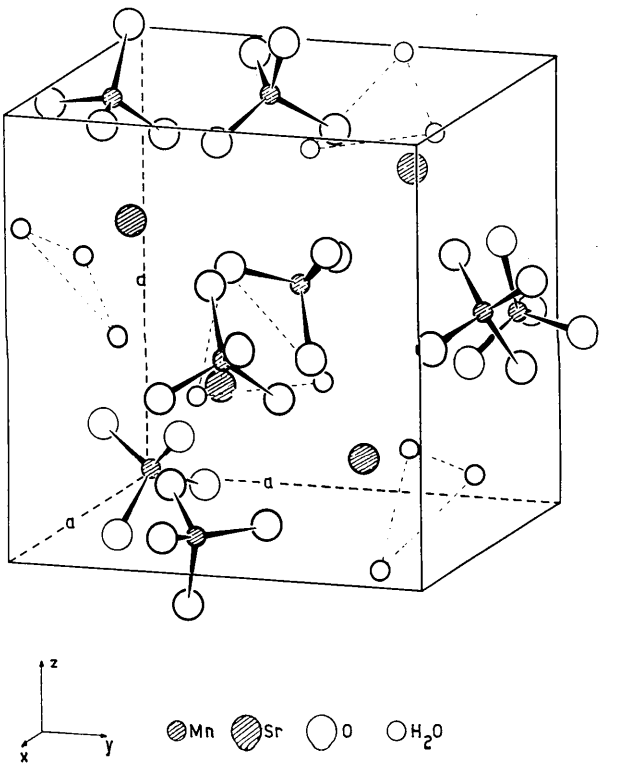

Fig. 2. Clinographic projection of the structure.

Table 1. *Final atomic coordinates* $\times 10^4$ (*with e.s.d.'s*)

	n	Cryst. point	x/a	y/a	z/a	B	ϱ_o	ϱ_c
Sr	4	(*a*)	2715(4)	2715(4)	2715(4)	2·4 Å	88·2	92·5
Mn(1)	4	(*a*)	0138(7)	0138(7)	0138(7)	2·7	48·2	51·4
Mn(2)	4	(*a*)	5724(7)	5724(7)	5724(7)	2·7	50·0	51·3
O(1)	4	(*a*)	1113(33)	1113(33)	1113(33)	3·9	11·0	11·3
O(2)	4	(*a*)	6698(59)	6698(59)	6698(59)	4·4	9·2	9·8
O(1,I)	12	(*b*)	1174(36)	6027(40)	5371(42)	3·3	10·6	11·2
O(2,I)	12	(*b*)	0958(32)	8957(39)	5883(28)	3·9	11·6	12·4
H_2O	12	(*b*)	1922(34)	4654(37)	8053(43)	3·7	10·6	11·1

Table 2. *Observed and calculated structure factors*

Reflexions marked by an asterisk were not recorded.

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
2	0	0	428	463
4	0	0	549	650
6	0	0	667	751
8	0	0	233	209
10	0	0	198	178
12	0	0	101	97
1	1	0	376	300
2	1	0	544	695
3	1	0	1054	1449
4	1	0	712	820
5	1	0	351	422
6	1	0	442	531
7	1	0	—	12
8	1	0	544	633
9	1	0	—	31
10	1	0	244	214
11	1	0	—	2
12	1	0	249	301
0	2	0	503	463
1	2	0	467	526
2	2	0	1527	2267
3	2	0	188	234
4	2	0	595	713
5	2	0	346	409
6	2	0	381	406
7	2	0	269	303
8	2	0	153	115
9	2	0	361	357
10	2	0	290	264
11	2	0	142	135
12	2	0	117	126
1	3	0	366	463
2	3	0	—	3
3	3	0	—	46
4	3	0	753	987
5	3	0	683	992
6	3	0	407	491
7	3	0	—	51
8	3	0	285	298
9	3	0	203	161
10	3	0	488	501
11	3	0	186	92
12	3	0	—	*97
0	4	0	717	650
1	4	0	743	724
2	4	0	494	664
3	4	0	147	176
4	4	0	1023	1405
5	4	0	—	37
6	4	0	183	199
7	4	0	708	767
8	4	0	330	396
9	4	0	—	24
10	4	0	—	21
11	4	0	112	106
1	5	0	885	776
2	5	0	361	397
3	5	0	361	434
4	5	0	224	217
5	5	0	203	239
6	5	0	274	311
7	5	0	397	430
8	5	0	407	446
9	5	0	239	237
10	5	0	157	117
11	5	0	162	163
0	6	0	942	751
1	6	0	290	196
2	6	0	524	438
3	6	0	219	211
4	6	0	228	220
5	6	0	508	638
6	6	0	717	897
7	6	0	153	112
8	6	0	126	78
9	6	0	299	248
10	6	0	117	92
1	7	0	595	434
2	7	0	—	9
3	7	0	906	787
4	7	0	259	137
5	7	0	219	144
6	7	0	305	284
7	7	0	147	93
8	7	0	126	95
9	7	0	285	245
10	7	0	203	196
0	8	0	300	209
1	8	0	244	148
2	8	0	198	100
3	8	0	687	538
4	8	0	503	384
5	8	0	269	174
6	8	0	173	107
7	8	0	300	229
8	8	0	361	306
9	8	0	224	223

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
1	0	1	667	[illegible]
2	0	1	183	120
3	0	1	330	254
4	0	1	224	157
5	0	1	376	304
6	0	1	153	73
7	0	1	233	190
8	0	1	71	98
0	1	1	664	531
1	1	1	320	223
2	1	1	611	608
3	1	1	315	272
4	1	1	515	576
5	1	1	382	435
6	1	1	296	352
7	1	1	162	119
8	1	1	128	131
9	1	1	233	229
10	1	1	119	75
0	2	1	—	12
1	2	1	1084	954
2	2	1	357	252
3	2	1	482	372
4	2	1	362	387
5	2	1	291	240
6	2	1	357	337
7	2	1	172	138
8	2	1	296	297
9	2	1	109	63
10	2	1	153	140
0	3	1	783	633
1	3	1	819	110
2	3	1	568	429
3	3	1	214	167
4	3	1	506	460
5	3	1	200	89
6	3	1	372	288
7	3	1	209	212
8	3	1	114	88
9	3	1	114	122
—	9	1	—	31
1	9	1	506	357
2	9	1	—	48
3	9	1	238	188
4	9	1	391	297
5	9	1	277	190
6	9	1	320	302
7	9	1	128	72
8	9	1	257	235
0	10	1	306	214
1	10	1	—	37
2	10	1	459	380
3	10	1	233	130
4	10	1	391	307
5	10	1	—	35
6	10	1	186	161
7	10	1	—	52
0	11	1	—	2
1	11	1	—	20
2	11	1	119	65
3	11	1	191	137
4	11	1	177	178
5	11	1	133	120
0	12	1	306	301
1	12	1	85	84
2	12	1	214	236
3	12	1	—	*36
1	0	2	701	695
2	0	2	1547	2267
3	0	2	—	5
4	0	2	574	664
5	0	2	355	397
6	0	2	403	438
7	0	2	—	9
8	0	2	145	100
9	0	2	194	120
10	0	2	248	246
11	0	2	170	146
12	0	2	92	107
0	4	1	1084	820
1	4	1	563	539
2	4	1	606	808
3	4	1	554	662
4	4	1	267	448
5	4	1	406	535
6	4	1	214	256
7	4	1	439	477
8	4	1	204	207
9	4	1	301	297
10	4	1	181	145
11	4	1	214	239
0	5	1	515	422
1	5	1	1094	931
2	5	1	463	511
3	5	1	630	863
4	5	1	353	458
5	5	1	243	281
6	5	1	248	290

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
7	5	1	238	262
8	5	1	500	232
9	5	1	196	161
10	5	1	172	185
11	5	1	143	142
0	6	1	664	531
1	6	1	320	223
2	6	1	611	608
3	6	1	315	272
4	6	1	515	576
5	6	1	382	435
6	6	1	296	352
7	6	1	162	119
8	6	1	128	131
9	6	1	233	229
10	6	1	119	75
0	7	1	—	12
1	7	1	1084	954
2	7	1	357	252
3	7	1	482	372
4	7	1	362	387
5	7	1	291	240
6	7	1	357	337
7	7	1	172	138
8	7	1	296	297
9	7	1	109	63
10	7	1	153	140
0	8	1	783	633
1	8	1	819	110
2	8	1	568	429
3	8	1	214	167
4	8	1	506	460
5	8	1	200	89
6	8	1	372	288
7	8	1	209	212
8	8	1	114	88
9	8	1	114	122
0	9	1	—	31
1	9	1	506	357
2	9	1	—	48
3	9	1	238	188
4	9	1	391	297
5	9	1	277	190
6	9	1	320	302
7	9	1	128	72
8	9	1	257	235
0	10	1	306	214
1	10	1	—	37
2	10	1	459	380
3	10	1	233	130
4	10	1	391	307
5	10	1	—	35
6	10	1	186	161
7	10	1	—	52
0	11	1	—	2
1	11	1	—	20
2	11	1	119	65
3	11	1	191	137
4	11	1	177	178
5	11	1	133	120
0	12	1	306	301
1	12	1	85	84
2	12	1	214	236
3	12	1	—	*36
0	8	2	175	115
1	8	2	467	343
2	8	2	584	631
3	8	2	350	292
4	8	2	194	117
5	8	2	447	362
6	8	2	355	329
7	8	2	248	218
8	8	2	131	133
9	8	2	189	221
0	9	2	471	357
1	9	2	471	386
2	9	2	253	173
3	9	2	486	400
4	9	2	189	106
5	9	2	311	251
6	9	2	243	207
7	9	2	116	118
8	9	2	58	35
0	10	2	370	264
1	10	2	287	219
2	10	2	160	72
3	10	2	360	286
4	10	2	199	111
5	10	2	141	132
6	10	2	126	98
7	10	2	—	*83
0	11	2	194	135

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
4	2	2	822	1156
5	2	2	145	140
6	2	2	365	382
7	2	2	355	376
8	2	2	418	431
9	2	2	184	173
10	2	2	87	78
11	2	2	121	93
12	2	2	67	76
0	3	2	311	234
1	3	2	304	301
2	3	2	585	665
3	3	2	468	554
4	3	2	145	199
5	3	2	370	486
6	3	2	370	489
7	3	2	393	463
8	3	2	452	539
9	3	2	194	169
10	3	2	189	168
11	3	2	180	178
0	4	2	876	713
1	4	2	388	400
2	4	2	838	1156
3	4	2	136	94
4	4	2	253	269
5	4	2	360	458
6	4	2	608	756
7	4	2	248	303
8	4	2	165	150
9	4	2	898	314
10	4	2	121	133
11	4	2	136	150
0	5	2	530	409
1	5	2	657	547
2	5	2	209	140
3	5	2	408	507
4	5	2	272	349
5	5	2	253	316
6	5	2	306	345
7	5	2	288	258
8	5	2	189	186
9	5	2	238	262
10	5	2	321	339
11	5	2	116	116
0	6	2	545	406
1	6	2	219	150
2	6	2	467	382
3	6	2	297	265
4	6	2	662	802
5	6	2	267	334
6	6	2	141	133
7	6	2	302	337
8	6	2	282	309
9	6	2	175	150
10	6	2	131	119
0	7	2	393	303
1	7	2	706	564
2	7	2	520	376
3	7	2	413	308
4	7	2	326	299
5	7	2	311	325
6	7	2	243	247
7	7	2	311	303
8	7	2	287	245
9	7	2	116	70
10	7	2	—	*84
0	8	2	175	115
1	8	2	467	343
2	8	2	584	631
3	8	2	350	292
4	8	2	194	117
5	8	2	447	362
6	8	2	355	329
7	8	2	248	218
8	8	2	131	133
9	8	2	189	221
0	9	2	471	357
1	9	2	471	386
2	9	2	253	173
3	9	2	486	400
4	9	2	189	106
5	9	2	311	251
6	9	2	243	207
7	9	2	116	118
8	9	2	58	35
0	10	2	370	264
1	10	2	287	219
2	10	2	160	72
3	10	2	360	286
4	10	2	199	111
5	10	2	141	132
6	10	2	126	98
7	10	2	—	*83
0	11	2	194	135

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
1	11	2	413	319
2	11	2	155	93
3	11	2	336	292
4	11	2	136	137
5	11	2	106	136
0	12	2	145	126
1	12	2	189	179
2	12	2	92	76
1	0	3	1250	1449
2	0	3	263	234
3	0	3	—	46
4	0	3	189	176
5	0	3	402	434
6	0	3	184	211
7	0	3	643	787
8	0	3	454	538
9	0	3	245	254
10	0	3	—	15
11	0	3	189	212
12	0	3	—	*190
0	1	3	523	463
1	1	3	1068	1127
2	1	3	170	301
3	1	3	1078	1227
4	1	3	606	662
5	1	3	685	663
6	1	3	194	272
7	1	3	346	372
8	1	3	176	167
9	1	3	129	182
10	1	3	162	130
11	1	3	125	137
12	1	3	—	*36
0	2	3	—	5
1	2	3	384	347
2	2	3	657	665
3	2	3	495	554
4	2	3	152	94
5	2	3	444	507
6	2	3	268	269
7	2	3	268	306
8	2	3	226	292
9	2	3	351	400
10	2	3	259	286
11	2	3	263	292
1	3	3	277	46
2	3	3	1139	1227
3	3	3	495	554
4	3	3	625	772
5	3	3	218	245
6	3	3	421	452
7	3	3	319	367
8	3	3	417	493
9	3	3	143	112
10	3	3	235	235
11	3	3	115	107
12	3	3	176	205
0	4	3	1161	987
1	4	3	398	344
2	4	3	203	199
3	4	3	213	245
4	4	3	430	491
5	4	3	454	579
6	4	3	319	405
7	4	3	184	197
8	4	3	268	291
9	4	3	305	316
10	4	3	92	87
11	4	3	143	184
0	5	3	749	592
1	5	3	911	834
2	5	3	449	426
3	5	3	402	452
4	5	3	199	269
5	5	3	523	708
6	5	3	166	157
7	5	3	218	193
8	5	3	305	363
9	5	3	97	117
10	5	3	64	68
11	5	3	—	*111
0	6	3	579	491
1	6	3	449	373
2	6	3	555	489
3	6	3	365	367
4	6	3	380	460
5	6	3	143	101
6	6	3	181	235
7	6	3	398	477
8	6	3	162	180
9	6	3	78	92
10	6	3	125	126
0	7	3	—	51
1	7	3	421	320
2	7	3	471	463

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
3	7	3	508	493
4	7	3	513	475
5	7	3	226	220
6	7	3	181	179
7	7	3	235	175
8	7	3	208	151
9	7	3	83	73
0	8	3	380	258
1	8	3	361	247
2	8	3	601	539
3	8	3	213	112
4	8	3	393	334
5	8	3	268	275
6	8	3	166	138
7	8	3	139	71
8	8	3	157	160
9	8	3	—	178
0	9	3	222	161
1	9	3	343	200
2	9	3	263	169
3	9	3	314	235
4	9	3	208	153
5	9	3	171	124
6	9	3	314	263
7	9	3	69	97
8	9	3	—	*221
0	10	3	601	501
1	10	3	139	128
2	10	3	120	168
3	10	3	120	107
4	10	3	226	193
5	10	3	125	86
6	10	3	254	285
0	11	3	120	92
1	11	3	184	152
2	11	3	203	178
3	11	3	235	205
4	11	3	129	110
5	11	3	—	*119
0	12	3	—	*97
1	12	3	—	*126
1	0	4	914	820
2	0	4	755	713
3	0	4	864	987
4	0	4	1144	1405
5	0	4	244	217
6	0	4	244	220
7	0	4	158	137
8	0	4	362	384
9	0	4	126	157
10	0	4	—	2
11	0	4	148	154
0	1	4	873	724
1	1	4	633	539
2	1	4	388	400
3	1	4	325	344
4	1	4	366	448
5	1	4	398	458
6	1	4	515	576
7	1	4	298	387
8	1	4	371	460
9	1	4	262	297
10	1	4	285	307
11	1	4	140	178
0	2	4	805	664
1	2	4	841	808
2	2	4	1017	1156
3	2	4	212	199
4	2	4	285	269
5	2	4	298	349
6	2	4	673	802
7	2	4	275	299
8	2	4	113	117
9	2	4	103	106
10	2	4	145	111
11	2	4	113	137
0	3	4	266	176
1	3	4	692	662
2	3	4	158	94
3	3	4	221	245
4	3	4	452	491
5	3	4	199	269
6	3	4	357	460
7	3	4	388	475
8	3	4	308	334
9	3	4	113	153
10	3	4	145	193
11	3	4	103	110
0	4	4	1525	1405
1	4	4	480	448
2	4	4	285	269
3	4	4	430	491
4	4	4	706	912

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
5	4	4	343	453
6	4	4	135	105
7	4	4	148	156
8	4	4	252	274
9	4	4	125	119
10	4	4	158	162
11	4	4	—	135
0	5	4	—	37
1	5	4	506	535
2	5	4	475	458
3	5	4	497	579
4	5	4	366	453
5	5	4	212	222
6	5	4	131	170
7	5	4	140	127
8	5	4	212	238
9	5	4	181	191
10	5	4	136	143
0	6	4	258	159
1	6	4	357	256
2	6	4	791	756
3	6	4	407	405
4	6	4	162	105
5	6	4	262	254
6	6	4	221	259
7	6	4	136	213
8	6	4	171	178
9	6	4	253	262
10	6	4	103	116
0	7	4	963	767
1	7	4	579	477
2	7	4	330	303
3	7	4	240	197
4	7	4	207	166
5	7	4	353	359
6	7	4	266	270
7	7	4	126	82
8	7	4	108	109
9	7	4	140	161
0	8	4	457	356
1	8	4	253	207
2	8	4	185	150
3	8	4	343	291
4	8	4	353	274
5	8	4	244	244
6	8	4	176	146
7	8	4	312	289
8	8	4	158	161
0	9	4	—	24
1	9	4	371	297
2	9	4	357	314
3	9	4	371	316
4	9	4	126	119
5	9	4	148	146
6	9	4	94	65
7	9	4	240	250
0	10	4	—	21
1	10	4	140	145
2	10	4	203	133
3	10	4	126	87
4	10	4	185	162
5	10	4	221	219
6	10	4	103	117
0	11	4	126	.06
1	11	4	240	239
2	11	4	153	150
3	11	4	162	184
4	11	4	—	*135
1	0	5	484	422
2	0	5	466	409
3	0	5	580	592
4	0	5	—	37
5	0	5	237	239
6	0	5	544	638
7	0	5	155	144
8	0	5	169	174
9	0	5	274	304
10	0	5	177	179
11	0	5	182	258
0	1	5	868	776
1	1	5	1005	931
2	1	5	608	547
3	1	5	749	834
4	1	5	457	535
5	1	5	274	281
6	1	5	406	435
7	1	5	228	240
8	1	5	109	89
9	1	5	196	190
10	1	5	82	35
11	1	5	82	120
0	2	5	516	397
1	2	5	539	511

Table 2 (*cont.*)

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
2	2	5	196	140
3	2	5	406	426
4	2	5	406	458
5	2	5	279	316
6	2	5	301	334
7	2	5	279	325
8	2	5	352	362
9	2	5	223	251
10	2	5	100	132
11	2	5	73	136
0	3	5	603	434
1	3	5	822	863
2	3	5	484	507
3	3	5	420	452
4	3	5	471	579
5	3	5	566	708
6	3	5	141	101
7	3	5	206	220
8	3	5	214	275
9	3	5	118	124
10	3	5	91	86
11	3	5	—	•119
0	4	5	347	217
1	4	5	512	458
2	4	5	301	349
3	4	5	187	269
4	4	5	342	453
5	4	5	201	222
6	4	5	233	254
7	4	5	296	359
8	4	5	192	244
9	4	5	87	146
10	4	5	187	219
0	5	5	338	239
1	5	5	333	281
2	5	5	333	316
3	5	5	576	708
4	5	5	201	222
5	5	5	255	275
6	5	5	265	332
7	5	5	311	410
8	5	5	114	81
9	5	5	164	145
10	5	5	187	231

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
0	6	5	384	311
1	6	5	347	290
2	6	5	365	345
3	6	5	196	157
4	6	5	150	170
5	6	5	260	332
6	6	5	242	294
7	6	5	155	109
8	6	5	228	212
9	6	5	242	268
0	7	5	489	430
1	7	5	342	262
2	7	5	360	258
3	7	5	237	193
4	7	5	160	127
5	7	5	379	410
6	7	5	182	179
7	7	5	201	163
8	7	5	233	239
9	7	5	—	•197
0	8	5	507	446
1	8	5	296	232
2	8	5	206	186
3	8	5	401	363
4	8	5	274	238
5	8	5	123	81
6	8	5	201	190
7	8	5	246	241
8	8	5	—	• 95
0	9	5	279	237
1	9	5	228	161
2	9	5	274	262
3	9	5	114	117
4	9	5	233	191
5	9	5	182	145
6	9	5	136	142
7	9	5	—	•195
0	10	5	141	117
1	10	5	187	185
2	10	5	338	339
3	10	5	95	68
4	10	5	146	143

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
5	10	5	192	231
0	11	5	141	163
1	11	5	123	142
2	11	5	109	116
3	11	5	—	•111
1	0	6	625	531
2	0	6	487	406
3	0	6	472	491
4	0	6	201	159
5	0	6	295	311
6	0	6	747	897
7	0	6	270	284
8	0	6	113	107
9	0	6	83	73
10	0	6	113	95
0	1	6	276	196
1	1	6	305	223
2	1	6	201	150
3	1	6	374	373
4	1	6	260	256
5	1	6	383	290
6	1	6	285	352
7	1	6	295	337
8	1	6	290	288
9	1	6	245	302
10	1	6	143	161
0	2	6	609	438
1	2	6	699	608
2	2	6	438	382
3	2	6	433	489
4	2	6	625	756
5	2	6	290	345
6	2	6	157	133
7	2	6	216	247
8	2	6	285	329
9	2	6	196	207
10	2	6	88	98
0	3	6	270	211
1	3	6	276	272
2	3	6	310	265

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
3	3	6	334	367
4	3	6	295	405
5	3	6	172	157
6	3	6	216	235
7	3	6	152	179
8	3	6	132	138
9	3	6	245	263
10	3	6	207	285
0	4	6	339	220
1	4	6	615	576
2	4	6	894	802
3	4	6	369	460
4	4	6	127	105
5	4	6	157	170
6	4	6	207	259
7	4	6	231	270
8	4	6	138	146
9	4	6	79	65
10	4	6	93	117
0	5	6	713	638
1	5	6	447	435
2	5	6	378	334
3	5	6	143	101
4	5	6	231	254
5	5	6	245	332
6	5	6	212	294
7	5	6	177	179
8	5	6	167	190
9	5	6	113	142
0	6	6	939	897
1	6	6	388	352
2	6	6	132	133
3	6	6	270	235
4	6	6	231	259
5	6	6	245	294
6	6	6	157	159
7	6	6	143	148
8	6	6	162	184
9	6	6	58	94
0	7	6	132	112
1	7	6	172	119
2	7	6	378	337

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
3	7	6	506	477
4	7	6	221	213
5	7	6	162	109
6	7	6	167	148
7	7	6	212	214
8	7	6	113	144
0	8	6	138	78
1	8	6	191	131
2	8	6	344	309
3	8	6	177	180
4	8	6	177	178
5	8	6	231	212
6	8	6	162	184
7	8	6	44	75
0	9	6	241	248
1	9	6	236	229
2	9	6	162	150
3	9	6	113	92
4	9	6	236	262
5	9	6	231	268
6	9	6	63	94
0	10	6	108	92
1	10	6	88	75
2	10	6	103	119
3	10	6	108	126
4	10	6	108	116
1	0	7	—	12
2	0	7	277	303
3	0	7	—	51
4	0	7	768	767
5	0	7	480	430
6	0	7	171	112
7	0	7	128	93
8	0	7	235	229
9	0	7	208	190
10	0	7	181	211
0	1	7	309	434
1	1	7	656	954
2	1	7	528	564
3	1	7	336	320

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
4	1	7	485	477
5	1	7	287	262
6	1	7	143	119
7	1	7	181	138
8	1	7	224	212
9	1	7	101	72
10	1	7	—	52
0	2	7	—	9
1	2	7	203	252
2	2	7	405	376
3	2	7	474	463
4	2	7	315	303
5	2	7	336	258
6	2	7	368	337
7	2	7	309	303
8	2	7	229	218
9	2	7	117	118
10	2	7	133	183
0	3	7	554	787
1	3	7	362	372
2	3	7	341	308
3	3	7	485	493
4	3	7	229	197
5	3	7	261	193
6	3	7	453	477
7	3	7	192	175
8	3	7	133	71
9	3	7	101	97
0	4	7	165	137
1	4	7	368	387
2	4	7	320	299
3	4	7	496	475
4	4	7	197	166
5	4	7	171	127
6	4	7	208	213
7	4	7	123	82
8	4	7	298	289
9	4	7	229	250
0	5	7	235	144
1	5	7	255	240
2	5	7	358	325
3	5	7	287	220

h	k	l	$10F_o$	$10F_c$
4	5	7	362	359
5	5	7	395	410
6	5	7	208	109
7	5	7	208	163
8	5	7	250	241
9	5	7	—	•195
0	6	7	240	284
1	6	7	293	337
2	6	7	250	247
3	6	7	208	179
4	6	7	293	270
5	6	7	186	179
6	6	7	186	148
7	6	7	224	214
8	6	7	69	75
0	7	7	138	93
1	7	7	165	138
2	7	7	304	303
3	7	7	203	175
4	7	7	143	82
5	7	7	197	163
6	7	7	218	214
7	7	7	250	322
0	8	7	128	95
1	8	7	186	297
2	8	7	197	245
3	8	7	181	151
4	8	7	123	109
5	8	7	197	239
6	8	7	101	144
0	9	7	149	245
1	9	7	91	63
2	9	7	91	70
3	9	7	69	73
4	9	7	112	161
5	9	7	—	•197
0	10	7	91	196
1	10	7	74	140
2	10	7	53	84

Table 3. *Main interatomic distances and angles* (*with e.d.s.'s*)

Anion MnO_4^-

Mn(1)–O(1)	1·623 ± 0·033 Å	$O(1)_I$–$Mn(1)_I$–O(1,I)	108·9 ± 1·8°
$Mn(1)_I$–O(1,I)	1·600 ± 0·037	$O(1,I)_{III}$–$Mn(1)_I$–O(1,I)	110·1 ± 1·9
Mn(2)–O(2)	1·621 ± 0·058	$O(2)_{II}$–$Mn(2)_{II}$–O(2,I)	111·6 ± 2·6
$Mn(2)_{II}$–O(2,I)	1·591 ± 0·029	$O(2,I)_{IV}$–$Mn(2)_{II}$–O(2,I)	107·3 ± 1·7
$Mn–O_{av}$	1·605 ± 0·014	$O–Mn–O_{av}$	109·2 ± 1·5

Coordination around Sr

$Sr–H_2O_V$	2·573 ± 0·036 Å	$O(1,I)_V$–Sr–$O(1,I)_{III}$	120·0 ± 1·1°
$Sr–H_2O_{III}$	2·573 ± 0·036	$O(2,I)_V$–Sr–$O(2,I)_{III}$	101·6 ± 0·9
$Sr–H_2O_{VI}$	2·573 ± 0·036	$O(2,I)_V$–Sr–$O(1,I)_V$	63·1 ± 1·1
$Sr–O(1,I)_V$	2·771 ± 0·040	H_2O_V–Sr–H_2O_{III}	74·1 ± 1·2
$Sr–O(1,I)_{III}$	2·771 ± 0·040	H_2O_V–Sr–$O(1,I)_{III}$	71·1 ± 1·1
$Sr–O(1,I)_{VI}$	2·771 ± 0·040	H_2O_V–Sr–$O(2,I)_{III}$	72·5 ± 1·1
$Sr–O(2,I)_V$	2·703 ± 0·033	O(1)–Sr–$O(1,I)_V$	90·3 ± 1·1
$Sr–O(2,I)_{III}$	2·703 ± 0·033	H_2O_V–Sr–$O(1,I)_V$	67·8 ± 1·2
$Sr–O(2,I)_{VI}$	2·703 ± 0·033	O(1)–Sr–$O(2,I)_V$	63·5 ± 1·0
Sr–O(1)	2·667 ± 0·032	H_2O_V–Sr–$O(2,I)_{VI}$	131·4 ± 1·1
$Sr–O_{av}$	2·677 ± 0·074	O(1)–Sr–H_2O_{III}	135·9 ± 1·1
		$O(2,I)_V$–Sr–$O(1,I)_{VI}$	64·0 ± 1·1

Coordination around H_2O

H_2O–O(1,I)	2·984 ± 0·052 Å	$H_2O–O(2,I)_X$	3·026 ± 0·049 Å
$H_2O–O(1,I)_{VII}$	3·112 ± 0·055	$H_2O–O(2)_{XI}$	3·144 ± 0·065
$H_2O–O(1,I)_{VIII}$	2·956 ± 0·054	$H_2O–O(1,I)_{XII}$	3·361 ± 0·056
$H_2O–O(2,I)_{IX}$	3·099 ± 0·051		

Asymmetric units

No label	x	y	z				
I	$\bar{x}$	$\frac{1}{2}+y$	$\frac{1}{2}-z$	VII	$1-z$	$\frac{1}{2}+x$	$\frac{3}{2}-y$
II	$x-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}-y$	$1-z$	VIII	$\frac{1}{2}-x$	$1-y$	$\frac{1}{2}+z$
III	$z-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x$	$1-y$	IX	$z-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x$	$2-y$
IV	$1-y$	$\frac{1}{2}+z$	$\frac{1}{2}-x$	X	$\bar{x}$	$y-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}-z$
V	$\frac{1}{2}-x$	$1-y$	$z-\frac{1}{2}$	XI	$1-z$	$x-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}-y$
VI	$1-y$	$z-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}-x$	XII	$\frac{1}{2}-y$	$1-z$	$\frac{1}{2}+x$

functions have been calculated with the use of phases corresponding to the various sets of vectors. The set chosen was the only one which gave reasonably good values of the electron density at the atomic peaks. The final $\varrho_0(xyz)$ is drawn in Fig. 1. The structure has been refined by differential syntheses. Isotropic temperature factors were refined by Nardelli, Fava & Giraldi's method (1963), by graphical comparison of observed and calculated electron densities at the peaks. Final $R_{hkl}=0{\cdot}16$ (observed reflexions). The final atomic coordinates are quoted in Table 1; observed and calculated structure factors are compared in Table 2. The main interatomic distances are reported in Table 3.

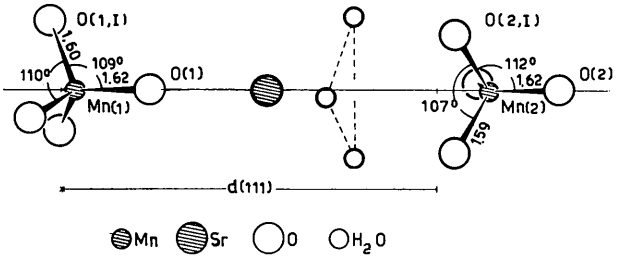

Fig. 3. Arrangement of atoms along the ternary axis.

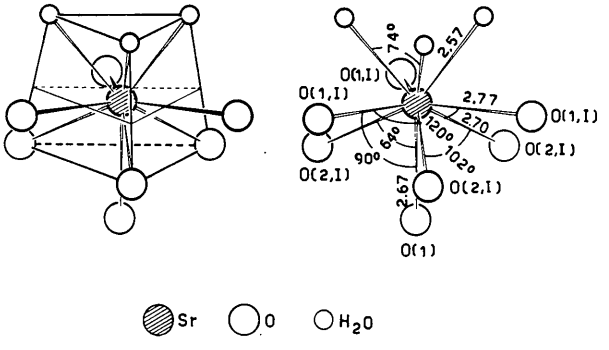

Fig. 4. Coordination around strontium.

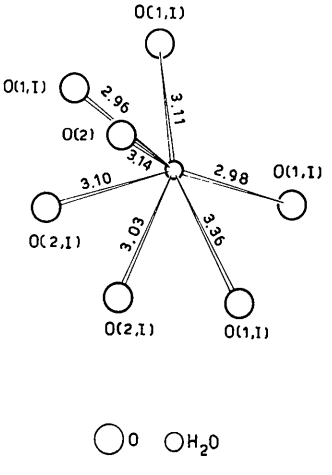

Fig. 5. Coordination around water.

Discussion of the structure

The structure (Fig. 2) is formed by tetrahedral anions MnO_4^-, cations Sr^{2+} and water molecules. The arrangement of the atoms along the ternary axis is shown in Fig. 3.

The MnO_4^- groups have nearly tetrahedral symmetry as expected and as shown by the equivalence of the distances: Mn(1)–O(1) = 1·62, Mn(1)–O(1,I) = 1·60, Mn(2)–O(2) = 1·62 and Mn(2)–O(2,I) = 1·59 Å (mean value: Mn–O = 1·605 ± 0·014). These distances are comparable with that (Mn–O = 1·586 Å) found in MnO_3F by Javan & Engelbrecht (1954) by microwave spectra and with that (Mn–O = 1·59 Å) found by X-ray diffraction in $AgMnO_4$ by Sasvari (1938) and in $KMnO_4$ by Mooney (1931).

The Sr^{2+} cations are surrounded (Fig. 4) by three water molecules and by seven oxygen atoms belonging to MnO_4^- anions. The resulting coordination number is ten instead of nine as found in $SrCl_2.6H_2O$ (Wells, 1962) and in $Sr(VO_4)_2.4H_2O$ (Sedlacek & Dornberger-Schiff, 1965). The coordination polyhedron is substantially the same as for ninefold coordination, except one more coordinating atom along a line passing through the centre of one basal face. The distances between strontium and surrounding oxygen atoms are Sr–O(1,I) = 2·77 Å, Sr–O(2,I) = 2·70 Å, Sr–OH_2 = 2·57 Å, Sr–O(1) = 2·67 Å with Sr–O_{av} = 2·68 Å, equivalent to Sr–O_{av} = 2·67 Å (ranging from 2·54 to 2·74 Å) found by Sedlacek & Dornberger-Schiff (1965) in $Sr(VO_4)_2.4H_2O$ for ninefold coordination. For eightfold coordination, the distance Sr–O_{av} = 2·62 Å is reported in *International Tables for X-ray Crystallography* (1962).

Each water molecule is surrounded by seven oxygen atoms (Fig. 5) at distances a little longer than that (2·75 Å) expected for hydrogen bonds (Wallwork, 1962) between OH_n and O^-.

It is a pleasure to thank Prof. L. Cavalca for facilities on the Olivetti Elea 6001/S computer of the Centro Calcolo, University of Parma. The Consiglio Nazionale Ricerche, Rome, is kindly thanked for the financial aid which has made the present research possible.

References

BOND, W. L. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 375.
FERRARI, A. & BIAGINI CINGI, M. (1966). *Gazz. chim. ital.* **96**, 427.
International Tables for X-ray Crystallography (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
JAVAN, R. & ENGELBRECHT, A. (1954). *Phys. Rev.* **96**, 649.
MOONEY, R. C. L. (1931). *Phys. Rev.* **37**, 1306.
NARDELLI, M., FAVA, G. & GIRALDI, G. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 343.
SASVARI, K. (1938). *Z. Kristallogr.* **99**, 9.
SEDLACEK, P. & DORNBERGER-SCHIFF, K. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 407.
WALLWORK, S. C. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 758.
WELLS, A. F. (1962). *Structural Inorganic Chemistry*, 3rd ed. p. 591. Oxford: Clarendon Press.