

The authors express their thanks to Professor G. A. Jeffrey for his interest in this work. This research was carried out under Contract No. 12-14-100-5777(73) with the U.S. Department of Agriculture.

References

- BARROW, G. M. (1961). *Physical Chemistry*, p.302. New York: McGraw-Hill.
- BELITSKUS, D. & JEFFREY, G. A. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 458.
- BERGHUIS, J., HAANAPPÉL, IJ. M., POTTERS, M., LOOPSTRA, B. O., MACGILLAVRY, C. H. & VEENENDAAL, A. L. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 478.
- BUERGER, M. J. (1959). *Vector Space*, p. 62. New York: John Wiley.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). ORFLS, A Fortran Crystallographic Least Squares Program. Oak Ridge National Laboratory, Report ORNL-TM-305.
- COULSON, C. A. (1952). *Valence*. London: Oxford Univ. Press.
- CATICHA-ELLIS, S. & ABRAHAMS, S. C. (1965). Private communication.
- HUNT, R. H., LEACOCK, R. A., PETERS, C. W. & HECHT, K. T. (1965). *J. Chem. Phys.* **42**, 1931.
- JACKSON, R. H. (1962). *J. Chem. Soc.* p. 4585.
- JEFFREY, G. A., McMULLAN, R. K. & SAX, M. (1964). *J. Amer. Chem. Soc.* **86**, 949.
- MCWEENEY, R. (1951). *Acta Cryst.* **4**, 513.
- MULLIKEN, R. S., RIEKE, C. A., ORLOFF, D. & ORLOFF, H. (1949). *J. Chem. Phys.* **17**, 1248.
- PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd ed. p. 98. Ithaca: Cornell Univ. Press.
- PEDERSEN, B. F. & PEDERSEN, B. (1963). *Acta Cryst.* **16**, A75.
- PENNEY, W. G. & SUTHERLAND, G. B. B. M. (1934). *Trans. Faraday Soc.* **3**, (2), 898.
- ROLLETT, J. S. & SPARKS, R. A. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 273.
- SAX, M., BEURSKENS, P. & CHU, S. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 252.
- SHIONO, R. (1963). Technical Report No. 42, Univ. of Pittsburgh Computation and Data Processing Center.

Acta Cryst. (1967), **22**, 289

Structure des Deux Formes Cristallines de l'Acide Azélaïque, COOH[CH₂]₇COOH

PAR JACQUES HOUSTY ET MICHEL HOSPITAL

Laboratoire de Cristallographie, Faculté des Sciences de Bordeaux, Talence, France

(Reçu le 4 juillet 1966)

The structure of the two polymorphic modifications of azelaic acid has been determinated by least-squares refinement on three-dimensional data. Bond lengths and angles are calculated and discussed. A study of the bond distances and angles indicated that the two carboxylic groups of the same molecule are very different.

Les diacides aliphatiques saturés à chaîne normale et à nombre impair d'atomes de carbone présentent un dimorphisme avec un point de transition situé entre 70 et 90°C (Caspari, 1928-1929; Dupré La Tour, 1932). On obtient des plaquettes de la forme β par évaporation lente à température ordinaire d'une solution d'acide azélaïque dans l'acétone. Par clivage on peut avoir des prismes allongés suivant la direction [010]. Nous avons employé la technique de Bridgman pour cristalliser, à partir du produit fondu, de fines aiguilles cylindriques de forme α , allongées suivant [001]. On a pu facilement réaliser tous les clichés de diffraction de cette forme, sa stabilité étant suffisante à température ordinaire.

Données cristallographiques

Maille et groupe spatial

Tous les clichés ont été réalisés avec la radiation $K\alpha$ du cuivre. Nous avons rapporté dans le Tableau 1 les données cristallographiques caractéristiques des deux formes:

Tableau 1. Données cristallographiques des deux formes de l'acide azélaïque

	Forme α	Forme β
Maille	$a = 5,67 \pm 0,01 \text{ \AA}$ $b = 9,61 \pm 0,02$ $c = 27,39 \pm 0,05$ $\beta = 136^\circ 50'$	$a = 22,75 \pm 0,02 \text{ \AA}$ $b = 4,78 \pm 0,01$ $c = 9,83 \pm 0,02$ $\beta = 111^\circ 50'$
Densité mesurée calculée	$1,235 \text{ g.cm}^{-3}$ $1,255$	$1,245 \text{ g.cm}^{-3}$ $1,260$
Z	4	4
Groupe spatial	$P2_1/c$	$C2/c$

Mesure des intensités

Pour la forme α , les intensités des taches de diffraction sont obtenues directement par comptage à l'aide d'un diffractomètre automatique à monocristal.

Pour la forme β , nous avons employé une méthode de comparaison visuelle des taches de diffraction obtenues sur un rétigraphe avec les taches d'une échelle d'intensité.

Affinement des structures

Les deux structures ont été déterminées par analyse des projections principales de la fonction de Patterson (Housty & Hospital, 1964).

Nous avons appliqué la méthode des moindres carrés sur ordinateur IBM 1620 pour réaliser l'affinement de ces structures. La faible capacité de cet ordinateur nous a obligé à opérer par stades successifs: nous indiquons ici l'ordre dans lequel nous avons effectué les diverses parties de cet affinement:

- (i) Affinement portant sur les positions des atomes de carbone et d'oxygène et permettant de déterminer une valeur moyenne du coefficient d'agitation thermique.

- (ii) L'affinement sur les positions se poursuit mais on détermine le coefficient d'agitation isotrope propre à chaque atome.
- (iii) Une fonction différence $T.F.(F_o - F_c)$ montrant un défaut important d'agitation thermique anisotrope au niveau des atomes d'oxygène, nous prescrivons à l'ordinateur un affinement sur les paramètres définissant l'anisotropie d'agitation de ces atomes. A ce stade de l'affinement le facteur d'accord R est égal à 0,15 pour la forme α , et à 0,12 pour la forme β .
- (iv) Les contributions électroniques des atomes d'hydrogène représentent 16% de la contribution totale et les densités électroniques de ces atomes sont nettement visibles sur les fonctions différences. Nous introduisons les contributions des atomes

Tableau 1. *Positions atomiques et écart type*

Forme α	x/a	y/b	z/c
C(1)	$0,4610 \pm 0,0015$	$0,0749 \pm 0,0008$	$0,0598 \pm 0,0003$
C(2)	$0,4401 \pm 0,0014$	$0,1479 \pm 0,0009$	$0,1051 \pm 0,0002$
C(3)	$0,5424 \pm 0,0014$	$0,0571 \pm 0,0008$	$0,1639 \pm 0,0003$
C(4)	$0,5418 \pm 0,0014$	$0,1433 \pm 0,0010$	$0,2107 \pm 0,0002$
C(5)	$0,5725 \pm 0,0013$	$0,0555 \pm 0,0008$	$0,2615 \pm 0,0003$
C(6)	$0,5723 \pm 0,0012$	$0,1456 \pm 0,0006$	$0,3070 \pm 0,0003$
C(7)	$0,5705 \pm 0,0013$	$0,0638 \pm 0,0006$	$0,3542 \pm 0,0003$
C(8)	$0,5833 \pm 0,0012$	$0,1513 \pm 0,0008$	$0,4007 \pm 0,0002$
C(9)	$0,5595 \pm 0,0019$	$0,0844 \pm 0,0008$	$0,4456 \pm 0,0003$
O(1)	$0,2372 \pm 0,0013$	$0,1013 \pm 0,0009$	$-0,0056 \pm 0,0002$
O(2)	$0,6999 \pm 0,0013$	$-0,0107 \pm 0,0008$	$0,0875 \pm 0,0002$
O(3)	$0,5026 \pm 0,0012$	$-0,0405 \pm 0,0008$	$0,4409 \pm 0,0002$
O(4)	$0,5822 \pm 0,0012$	$0,1657 \pm 0,0009$	$0,4857 \pm 0,0002$
H(21)	0,570	0,220	0,120
H(22)	0,180	0,170	0,075
H(31)	0,770	0,020	0,190
H(32)	0,370	-0,010	0,150
H(41)	0,690	0,210	0,230
H(42)	0,370	0,170	0,190
H(51)	0,770	0,005	0,280
H(52)	0,370	0,005	0,240
H(61)	0,770	0,210	0,335
H(62)	0,370	0,190	0,275
H(71)	0,780	0,000	0,380
H(72)	0,430	0,010	0,335
H(81)	0,780	0,210	0,430
H(82)	0,410	0,190	0,370
H(acide)	0,570	0,120	0,510
Forme β			
C(1)	$0,1920 \pm 0,0003$	$-0,1082 \pm 0,0012$	$0,0898 \pm 0,0007$
C(2)	$0,1481 \pm 0,0003$	$0,0201 \pm 0,0015$	$0,1559 \pm 0,0007$
C(3)	$0,0980 \pm 0,0002$	$-0,1727 \pm 0,0015$	$0,1747 \pm 0,0006$
C(4)	$0,0494 \pm 0,0003$	$-0,0085 \pm 0,0015$	$0,2169 \pm 0,0007$
C(5)	$0,0000 \pm 0,0000$	$-0,1807 \pm 0,0020$	$0,2500 \pm 0,0006$
O(1)	$0,1806 \pm 0,0002$	$-0,3277 \pm 0,0010$	$0,0192 \pm 0,0004$
O(2)	$0,2428 \pm 0,0002$	$0,0377 \pm 0,0010$	$0,1082 \pm 0,0005$
H(21)	0,175	0,080	0,250
H(22)	0,125	0,140	0,085
H(31)	0,125	-0,260	0,260
H(32)	0,075	-0,230	0,065
H(41)	0,075	0,080	0,310
H(42)	0,030	0,080	0,150
H(51)	0,025	-0,250	0,330
H(acide)	0,275	-0,010	0,115

d'hydrogène dans les calculs en les plaçant de façon à respecter la valence tétraédrique du carbone et en donnant à la liaison C—H une longueur de 1 Å. Nous affectons tous les atomes d'hydrogène d'un coefficient d'agitation thermique fixe et isotrope ($B=2,5 \text{ \AA}^2$).

- (v) Les atomes d'hydrogène étant correctement localisés on applique un coefficient d'agitation thermique anisotrope aux atomes de carbone. Nous terminons l'affinement en s'assurant que les positions des atomes restent stables après cette correction d'agitation thermique.

Les valeurs finales du facteur d'accord sont les suivantes:

$$R=0,096 \text{ pour les } 1150 \text{ taches de la forme } \alpha$$

$$R=0,097 \text{ pour les } 470 \text{ taches de la forme } \beta.$$

Résultats et discussion

Les différents Tableaux donnent les valeurs des paramètres de positions et d'agitation thermique ainsi que les distances et les angles interatomiques.

Tableau 2. Longueurs de liaisons

Forme α

C(1)—C(2)	$1,502 \pm 0,013 \text{ \AA}$	C(2)—H(21)	1,00 Å
C(2)—C(3)	$1,525 \pm 0,012$	C(2)—H(22)	0,90
C(3)—C(4)	$1,527 \pm 0,013$	C(3)—H(31)	1,00
C(4)—C(5)	$1,523 \pm 0,011$	C(3)—H(32)	0,95
C(5)—C(6)	$1,517 \pm 0,012$	C(4)—H(41)	0,90
C(6)—C(7)	$1,518 \pm 0,012$	C(4)—H(42)	0,80
C(7)—C(8)	$1,499 \pm 0,013$	C(5)—H(51)	0,95
C(8)—C(9)	$1,509 \pm 0,013$	C(6)—H(52)	0,95
		C(6)—H(61)	1,00
C(1)—O(1)	$1,253 \pm 0,012$	C(6)—H(62)	0,90
C(1)—O(1)	$1,266 \pm 0,013$	C(7)—H(71)	1,00
C(9)—O(3)	$1,192 \pm 0,013$	C(7)—H(72)	0,80
C(9)—O(4)	$1,283 \pm 0,013$	C(8)—H(81)	0,95
		C(8)—H(82)	0,80

$$\text{O}(1)—\text{O}(2') \quad 2,653 \pm 0,014 \text{ \AA}$$

$$\text{O}(3)—\text{O}(4') \quad 2,679 \pm 0,015$$

$$\text{O}(4)—\text{H}(4) \quad 0,90$$

Forme β

C(1)—C(2)	$1,509 \pm 0,011 \text{ \AA}$	C(2)—H(21)	0,95 Å
C(2)—C(3)	$1,529 \pm 0,009$	C(2)—H(22)	0,90
C(3)—C(4)	$1,533 \pm 0,012$	C(3)—H(31)	0,95
C(4)—C(5)	$1,522 \pm 0,012$	C(3)—H(32)	0,95
		C(4)—H(41)	1,00
C(1)—O(1)	$1,231 \pm 0,011$	C(4)—H(42)	0,85
C(1)—O(2)	$1,303 \pm 0,011$	C(5)—H(51)	0,90

$$\text{O}(1)—\text{O}(2') \quad 2,679 \pm 0,012 \text{ \AA}$$

$$\text{O}(2)—\text{H}(2) \quad 0,90$$

Tableau 3. Angles de liaisons

Forme α

C(1)—C(2)—C(3)	114	O(1)—C(1)—O(2)	121°
C(2)—C(3)—C(4)	110	O(1)—C(1)—C(2)	119
C(3)—C(4)—C(5)	113	O(2)—C(1)—C(2)	120 30'
C(4)—C(5)—C(6)	111 30'		
C(5)—C(6)—C(7)	114	O(3)—C(9)—O(4)	123
C(6)—C(7)—C(8)	113	O(3)—C(9)—C(8)	123 30
C(7)—C(8)—C(9)	116 30	O(4)—C(9)—C(8)	113 30

Table 3 (suite)

C(1)—C(2)—H(21)	106	C(5)—C(6)—H(61)	110
H(21)—C(2)—C(3)	111	H(61)—C(6)—C(7)	112
C(3)—C(2)—H(22)	96	C(7)—C(6)—H(62)	106
H(22)—C(2)—C(1)	113	H(62)—C(6)—C(5)	102
H(22)—C(2)—H(21)	116	H(61)—C(6)—H(61)	113
C(2)—C(3)—H(31)	105	C(6)—C(7)—H(71)	102
H(31)—C(3)—C(4)	112	H(71)—C(7)—C(8)	113
C(4)—C(3)—H(32)	97	C(8)—C(7)—H(72)	112
H(32)—C(3)—C(2)	114	H(72)—C(7)—C(6)	113
H(32)—C(3)—H(31)	118	H(72)—C(7)—H(71)	101
C(3)—C(4)—H(41)	112	C(7)—C(8)—H(81)	109
H(41)—C(4)—C(5)	114	H(81)—C(8)—C(9)	112
C(5)—C(4)—H(42)	98	C(9)—C(8)—H(82)	110
H(41)—C(4)—C(3)	109	H(82)—C(8)—C(7)	95
H(41)—C(4)—H(41)	109	H(82)—C(8)—H(81)	114
C(4)—C(5)—H(51)	97	O(4)—H(4)—O(3)''	172
H(51)—C(5)—C(6)	122		
C(6)—C(5)—H(52)	93		
H(52)—C(5)—C(4)	116		
H(52)—C(5)—H(51)	118		

Forme β

C(1)—C(2)—C(3)	116° 30'	C(3)—C(4)—H(41)	106°
C(2)—C(3)—C(4)	111 30	C(3)—C(4)—H(42)	103
C(3)—C(4)—C(5)	116	H(41)—C(4)—H(42)	122
C(4)—C(5)—C(5')	113 30	H(41)—C(4)—C(5)	109
C(2)—C(1)—O(1)	121 30	H(42)—C(4)—C(5)	117
C(2)—C(1)—O(2)	114 30	C(4)—C(5)—H(51)	99
O(1)—C(1)—O(2)	123 30	C(4)—C(5)—H(52)	104
C(1)—C(2)—H(21)	101	H(51)—C(5)—H(52)	136
C(1)—C(2)—H(22)	102	O(2)—H—O(1)'	160
H(21)—C(2)—H(22)	122		
H(21)—C(2)—C(3)	110		
H(22)—C(2)—C(3)	103		
C(2)—C(3)—H(31)	98		
C(2)—C(3)—H(32)	98		
H(31)—C(3)—H(32)	132		
H(31)—C(3)—C(4)	107		
H(32)—C(3)—C(4)	107		

Tableau 4. Paramètres d'agitation thermique

Forme α

	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{13}
C(1)	0,1144	0,0166	0,0029	0,0292
C(2)	0,1026	0,0181	0,0023	0,0221
C(3)	0,1484	0,0098	0,0037	0,0418
C(4)	0,1574	0,0154	0,0045	0,0465
C(5)	0,1482	0,0100	0,0045	0,0453
C(6)	0,1390	0,0119	0,0044	0,0435
C(7)	0,1007	0,0125	0,0046	0,0350
C(8)	0,1245	0,0121	0,0043	0,0398
C(9)	0,0867	0,0157	0,0033	0,0269
O(1)	0,1076	0,0141	0,0026	0,0256
O(2)	0,0835	0,0108	0,0043	0,0300
O(3)	0,0737	0,0157	0,0030	0,0188
O(4)	0,0609	0,0116	0,0029	0,0211

Forme β

C(1)	0,0018	0,0289	0,0135	0,0062
C(2)	0,0021	0,0448	0,0152	0,0081
C(3)	0,0017	0,0480	0,0128	0,0061
C(4)	0,0020	0,0395	0,0152	0,0066
C(5)	0,0019	0,0406	0,0169	0,0078
O(1)	0,0024	0,0425	0,0177	0,0092
O(2)	0,0022	0,0449	0,0196	0,0088

Tableau 5. Acide azélaïque α : Facteurs de structure observés et calculés

<i>h k l</i>	<i>F_o</i>																					
01 03 08 08	207.5	-106.11	01 07 03	1.59	-0.16	-0.01	01 05 05	5.86	-5.11	-0.02	06 06 08	7.12	-9.57	-02 06 11	14.33	-15.81	-04 01 15	1.68	-2.03	03 03 20	2.32	1.24
01 03 08 08	41.56	-50.34	01 07 03	1.51	-0.16	-0.01	01 05 05	2.12	-1.78	-0.02	06 06 08	16.11	-11.38	-02 06 11	14.56	-15.75	-03 03 15	2.63	1.15	03 03 20	1.07	1.07
01 03 08 08	3.79	-13.13	01 08 02	2.04	-1.42	-0.01	01 05 05	15.83	-15.79	-0.02	06 06 08	2.01	-1.76	-01 06 11	1.92	-3.20	01 05 15	1.71	-1.64	03 03 20	15.45	-11.11
01 03 08 08	15.65	-16.13	01 08 02	2.04	-1.42	-0.01	01 05 05	1.41	-1.68	-0.02	06 06 08	6.45	-8.47	-04 07 11	9.18	-10.57	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	8.61	-7.51
01 03 08 08	25.44	-14.20	01 08 02	4.91	-7.06	-0.02	01 05 05	8.85	-8.95	-0.02	06 06 08	4.67	-5.12	-01 07 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	8.61	-7.51
01 03 08 08	3.65	-5.16	01 08 02	1.16	-1.47	-0.01	01 05 05	1.16	-1.47	-0.02	06 06 08	1.45	-1.76	-01 07 11	2.26	-5.25	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	11.24	-11.24
02 03 08 08	86.09	-82.18	-03 03 02	4.41	-3.76	-0.01	01 05 05	12.49	-11.86	-0.02	06 06 08	3.20	-1.11	-03 07 11	1.11	-10.57	02 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	8.61	-7.51
02 03 08 08	43.02	-11.58	-03 03 02	5.18	-3.95	-0.01	01 05 05	15.55	-14.29	-0.02	06 06 08	6.61	-8.47	-01 07 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	8.61	-7.51
02 03 08 08	3.94	-1.05	-03 03 02	2.04	-3.02	-0.01	01 05 05	6.38	-5.25	-0.02	06 06 08	1.45	-1.76	-01 07 11	5.63	-8.78	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	5.65	-5.65
02 03 08 08	2.43	-0.37	-03 03 02	1.61	-1.37	-0.01	01 05 05	1.61	-1.37	-0.02	06 06 08	1.45	-1.76	-01 07 11	2.26	-5.25	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	5.65	-5.65
02 03 08 08	19.35	-18.41	-04 01 03	5.20	-5.64	-0.01	01 05 05	20.75	-19.12	-0.02	06 06 08	10.14	-18.02	-02 06 11	14.33	-15.81	-04 01 15	1.68	-2.03	03 03 20	2.32	1.24
02 03 08 08	16.08	-21.11	-04 01 03	5.20	-5.64	-0.01	01 05 05	24.57	-22.71	-0.02	06 06 08	3.92	-3.55	-01 07 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	10.88	-12.03	-04 01 03	5.20	-5.64	-0.01	01 05 05	4.57	-4.69	-0.02	06 06 08	10.49	-18.99	-04 08 11	1.11	-10.37	02 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	12.61	-13.16	-04 01 03	36.75	-31.55	-0.01	01 05 05	36.75	-31.55	-0.02	06 06 08	3.08	-3.50	-01 07 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	5.65	-6.50	-03 01 03	1.46	-1.85	-0.01	01 05 05	9.76	-7.58	-0.02	06 06 08	0.83	-7.71	-01 07 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	4.59	-1.01	-04 02 03	1.98	-0.91	-0.01	01 05 05	20.19	-12.07	-0.02	06 06 08	13.79	-1.81	-01 08 11	1.11	-10.37	02 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.92	-0.89	-04 02 03	1.77	-1.65	-0.01	01 05 05	1.29	-1.35	-0.02	06 06 08	9.04	-6.89	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.30	-0.30	-04 02 03	4.52	-5.28	-0.01	01 05 05	9.76	-7.58	-0.02	06 06 08	9.13	-8.65	-01 08 11	1.11	-10.37	02 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.57	-0.26	-04 02 03	6.63	-5.61	-0.01	01 05 05	1.04	-1.35	-0.02	06 06 08	1.07	-5.50	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	3.17	-0.75	-04 02 03	1.32	-1.09	-0.01	01 05 05	16.13	-15.13	-0.02	06 06 08	1.14	-1.31	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.64	-2.51	-04 02 03	1.95	-2.18	-0.01	01 05 05	8.85	-7.43	-0.02	06 06 08	1.45	-1.76	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	12.47	-12.04	-02 03 03	1.67	-1.47	-0.01	01 05 05	9.43	-1.37	-0.02	06 06 08	6.59	-5.62	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	11.71	-12.11	-02 03 03	2.07	-1.67	-0.01	01 05 05	21.07	-1.02	-0.02	06 06 08	12.58	-11.44	-03 07 11	1.11	-10.37	02 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	3.37	-1.10	-02 03 03	2.25	-1.62	-0.01	01 05 05	2.43	-2.14	-0.02	06 06 08	21.24	-13.17	-03 07 11	1.21	-10.20	02 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.89	-0.42	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	2.23	-1.35	-0.02	06 06 08	10.07	-5.50	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.45	-1.68	-02 03 03	1.74	-1.62	-0.01	01 05 05	7.05	-7.27	-0.02	06 06 08	9.53	-5.30	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.25	-1.25	-02 03 03	4.53	-5.61	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	6.17	-7.27	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.14	-1.14	-02 03 03	4.53	-5.61	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	1.04	-1.04	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.94	-0.94	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.84	-0.84	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.74	-0.74	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.64	-0.64	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.54	-0.54	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.44	-0.44	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.34	-0.34	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.24	-0.24	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.14	-0.14	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.04	-0.04	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	-0.06	-0.06	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.06	-0.06	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.16	-0.16	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.26	-0.26	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.36	-0.36	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.46	-0.46	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.56	-0.56	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-12.06
02 03 08 08	0.66	-0.66	-02 03 03	1.98	-1.49	-0.01	01 05 05	1.02	-10.05	-0.02	06 06 08	1.02	-10.05	-01 08 11	1.93	-2.03	03 03 15	1.78	-1.72	03 03 20	12.03	-1

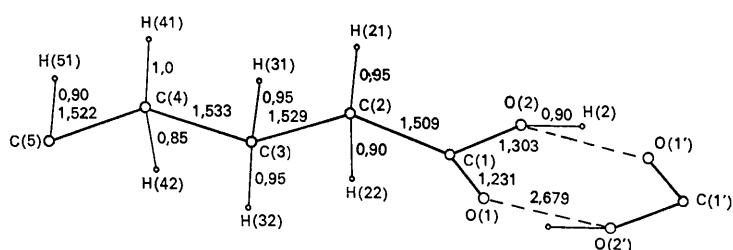
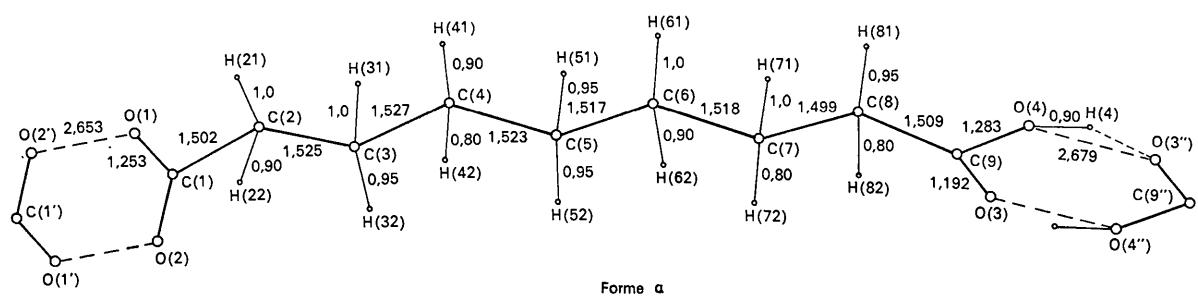


Fig. 1. Longueurs de liaisons dans les molécules d'acide azélaïque α et β .

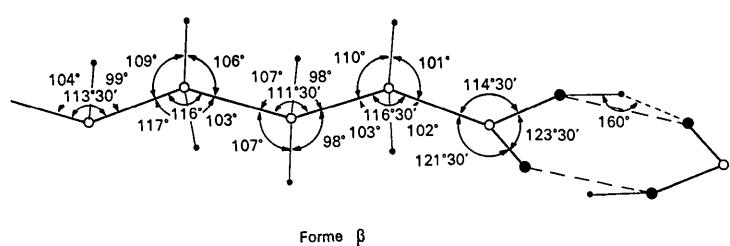
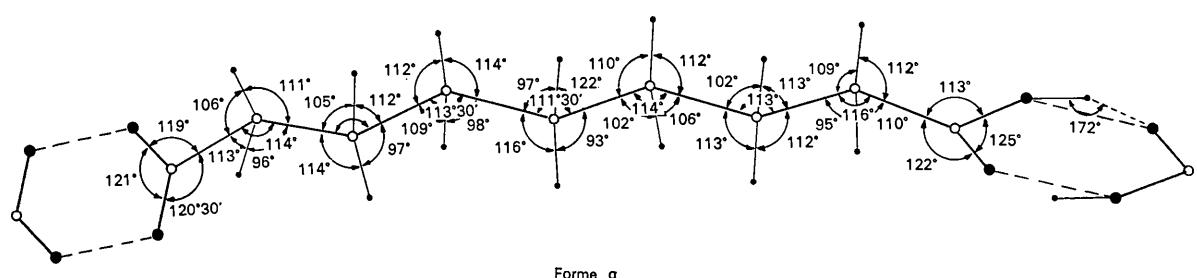


Fig. 2. Angles dans les molécules d'acide azélaïque α et β .

Angles et liaisons entre CH₂

Les liaisons C-C sont en moyenne plus courtes que celles admises autrefois (Figs. 1 et 2). Ces résultats sont en bon accord avec ceux trouvés récemment pour des produits présentant une chaîne saturée: palmitate de potassium (Dumbleton & Lomer, 1965), acide bromo-3-octadécanedioïque (Abrahamson & Harding, 1966), diamides (Hospital & Housty, 1966). Il faut toutefois distinguer la dernière liaison C-C, unissant un carbone *sp*² et un carbone *sp*³, qui est notablement plus courte.

Les angles C-C-C sont en moyenne supérieures à l'angle tétraédrique, on notera la valeur élevée du dernier angle C-C-C qui précède le groupement carboxylique.

On trouve en effet:

C(1)-C(2)-C(3)=114° et C(7)-C(8)-C(9)=116°30' pour la forme α et C(1)-C(2)-C(3)=116°30' pour la forme β . Cette particularité se retrouve dans les chaînes de diacides et de diamides étudiés au laboratoire.

La précision est moins grande sur la position des hydrogènes aussi nous ne retiendrons qu'une valeur moyenne pour la liaison C-H de 0,9±0,1 Å.

Liaisons hydrogène

Dans les deux formes, les liaisons hydrogène ont une longueur classique: à l'approximation de nos mesures on peut les considérer comme identiques. Ces liaisons sont fortes et assurent la polymérisation des molécules en rubans infinis.

Groupements carboxyliques

Forme α

La molécule a perdu toute symétrie, on doit donc distinguer les deux groupements.

(i) Groupement initial [proche du C(1)]

Les deux liaisons C-O sont égales aux erreurs expérimentales près: C(1)-O(1)=1,253 Å et C(1)-O(2)

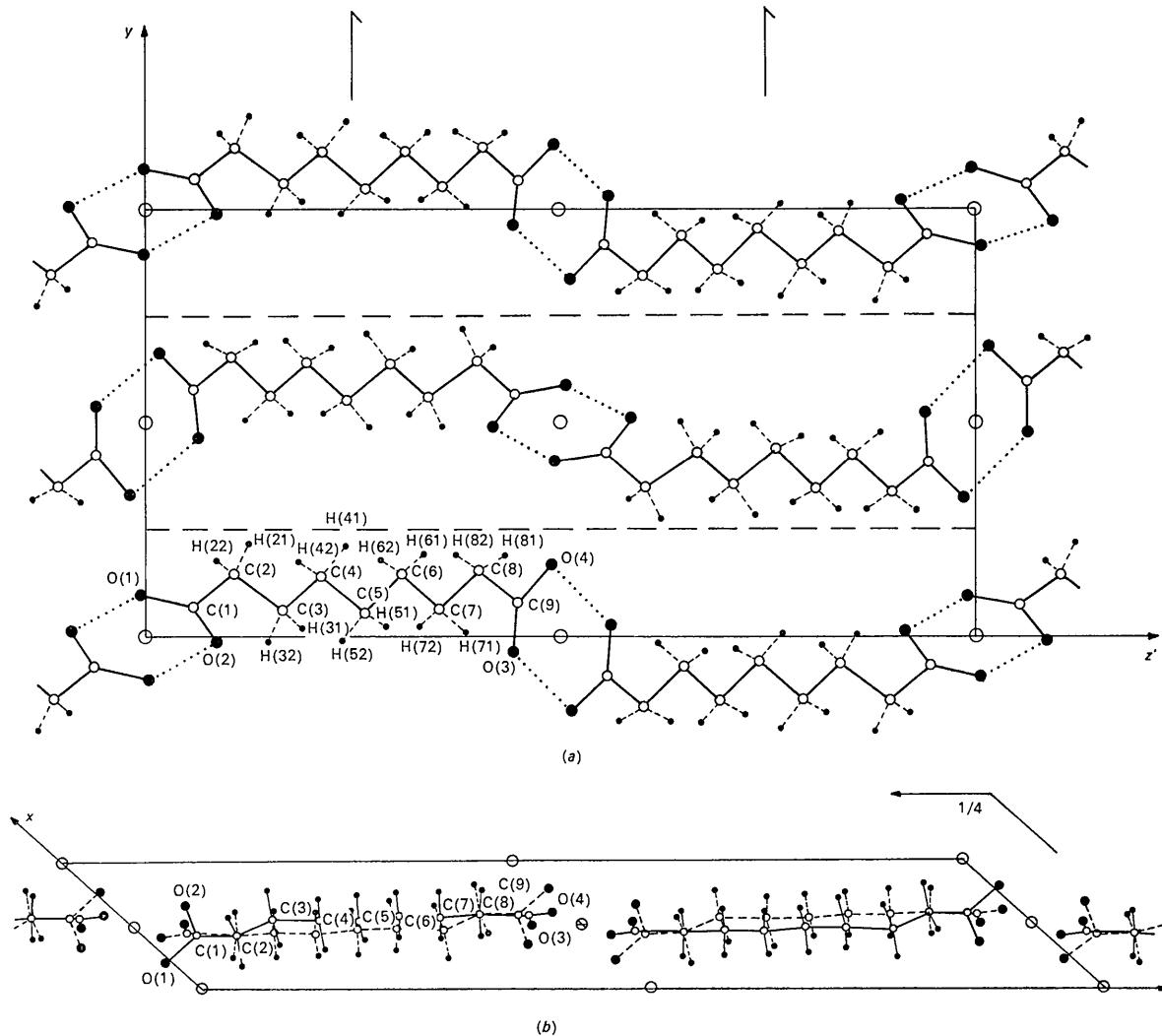


Fig. 3. Acide azelaïque α : (a) Projection de la structure suivant l'axe O_x, (b) Projection de la structure suivant l'axe O_y.

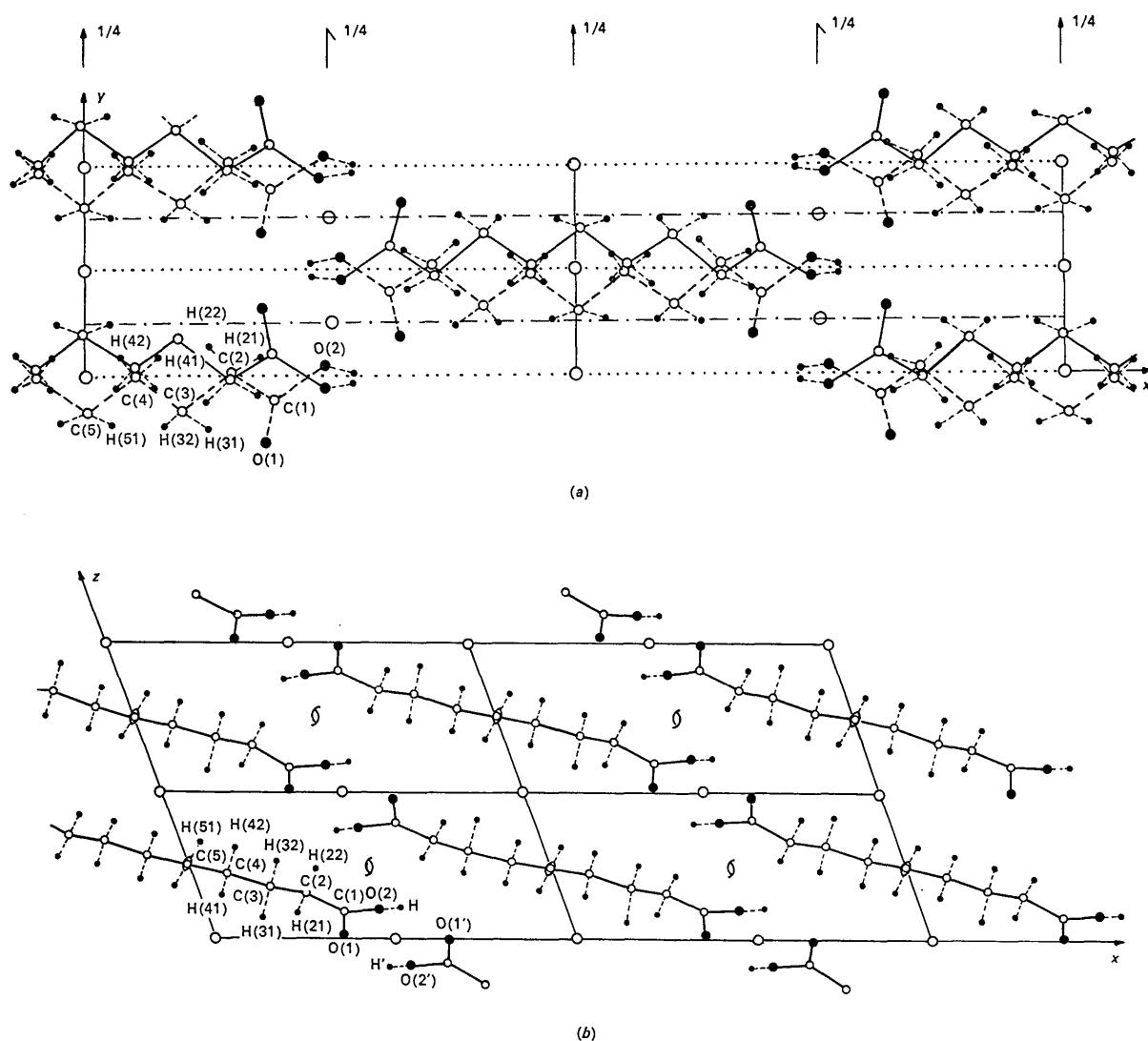


Fig. 4. Acide azélaïque β : (a) Projection de la structure suivant l'axe Oz . (b) Projection de la structure suivant l'axe Oy .

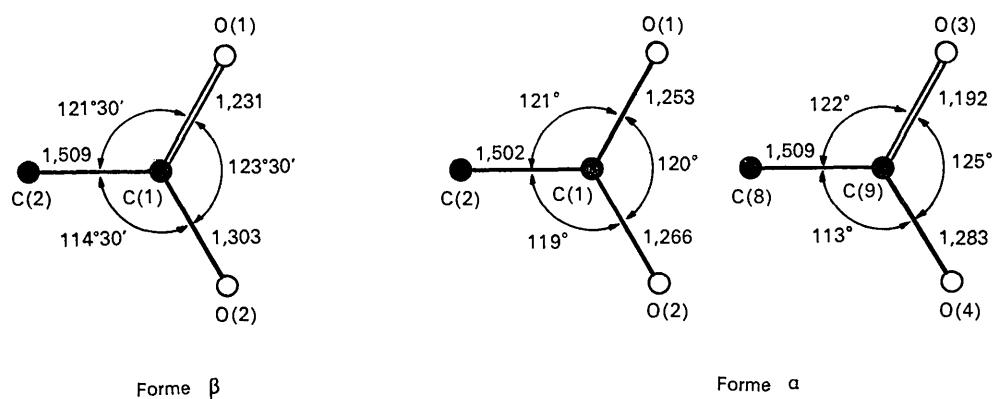


Fig. 5. Groupements carboxyliques des deux formes.

Tableau 6. Acide azélaïque β : Facteurs de structure observés et calculés

$h \ k \ l$	F_o	F_c	$h \ k \ l$	F_o	F_c	$h \ k \ l$	F_o	F_c
02 00 02	58.76	-61.55	+21 01 05	4.43	8.27	34 02 06	15.65	-11.94
04 00 02	15.17	-15.17	-19 01 05	6.11	7.50	-16 02 07	14.64	-15.28
06 00 02	17.40	15.25	-26 01 05	76.15	75.56	-16 02 07	10.26	-10.61
08 00 02	16.23	-16.03	-15 01 05	28.52	24.19	-16 02 07	10.26	-10.61
10 00 02	18.18	-18.18	-15 01 05	53.73	52.59	-16 02 07	10.26	-10.61
12 00 02	35.37	31.76	-11 01 05	17.05	16.75	-16 02 07	14.48	-16.19
14 00 02	33.46	33.46	-11 01 05	17.05	16.75	-16 02 07	14.48	-16.19
16 00 02	24.82	23.43	-07 01 05	15.16	15.29	-16 02 07	18.89	-20.74
18 00 02	23.43	23.43	-07 01 05	10.68	10.52	-16 02 07	18.89	-20.74
20 00 02	21.61	22.26	-05 01 05	11.11	12.64	-16 02 07	10.00	-11.93
22 00 02	11.12	12.76	-01 01 05	11.11	12.64	-16 02 07	10.00	-11.93
-24 00 02	10.07	-9.91	03 01 05	1.21	-0.76	-17 02 07	4.41	-1.07
-26 00 02	10.07	-9.91	03 01 05	14.89	15.16	-17 02 07	4.41	-1.07
-28 00 02	14.49	-14.74	-01 01 05	14.89	15.16	-17 02 07	17.01	-15.58
-30 00 02	21.47	-10.02	-11 01 05	9.46	-7.79	-17 02 07	10.94	-13.63
-32 00 02	21.47	-10.02	-11 01 05	18.08	16.04	-17 02 07	10.94	-13.63
-34 00 02	21.47	-10.02	-17 01 05	6.04	-4.90	-17 02 07	13.92	-12.21
-36 00 02	21.47	-10.02	-17 01 05	17.01	15.29	-17 02 07	13.92	-12.21
-38 00 02	16.64	15.12	-13 01 06	4.48	-3.48	-17 02 07	9.13	-9.64
-40 00 02	16.64	15.12	-13 01 06	1.48	-0.48	-17 02 07	9.13	-9.64
-42 00 02	47.21	-47.21	-09 01 06	4.13	-3.12	-17 02 07	13.47	-11.46
-44 00 02	31.44	-31.44	-07 01 06	24.47	29.36	-17 02 07	13.47	-11.46
-46 00 02	31.44	-31.44	-07 01 06	24.47	29.36	-17 02 07	2.19	-2.63
-48 00 02	21.47	-10.02	-01 01 06	21.59	26.62	-17 02 07	7.81	-1.43
-50 00 02	21.47	-10.02	-01 01 06	21.59	26.62	-17 02 07	10.77	-10.21
-52 00 02	11.95	11.95	01 01 06	16.04	16.15	-18 02 07	11.46	-11.46
-54 00 02	71.07	-71.07	01 01 06	16.04	16.15	-18 02 07	4.68	4.07
-56 00 02	16.79	16.79	01 01 06	17.08	15.84	-18 02 07	10.94	-10.94
-58 00 02	12.23	12.23	01 01 06	17.08	15.84	-18 02 07	12.61	18.10
-60 00 02	12.23	12.23	01 01 06	17.08	15.84	-18 02 07	12.61	18.10
-62 00 02	11.85	11.85	-25 01 01	12.77	-15.18	-19 02 07	9.12	-6.31
-64 00 02	16.85	16.85	-25 01 01	3.80	-2.02	-19 02 07	10.01	-10.01
-66 00 02	16.85	16.85	-25 01 01	3.80	-2.02	-19 02 07	11.31	-11.31
-68 00 02	11.76	11.76	-19 01 07	10.62	-11.20	-19 02 07	6.82	-8.37
-70 00 02	11.85	11.85	-17 01 07	7.77	-1.03	-19 02 07	8.82	-7.14
-72 00 02	11.85	11.85	-17 01 07	15.53	-11.09	-19 02 07	12.78	-21.54
-74 00 02	14.18	13.92	-13 01 07	11.71	-16.09	-19 02 07	14.12	-14.35
-76 00 02	14.18	13.92	-13 01 07	11.71	-16.09	-19 02 07	14.12	-14.35
-78 00 02	61.21	60.92	-09 01 07	3.71	0.99	-21 01 03	10.13	9.42
-80 00 02	11.76	11.76	-07 01 07	3.71	0.99	-21 01 03	10.13	9.42
-82 00 02	16.79	16.79	-07 01 07	3.71	0.99	-21 01 03	10.13	9.42
-84 00 02	12.23	12.23	-07 01 07	3.71	0.99	-21 01 03	10.13	9.42
-86 00 02	11.85	11.85	-07 01 07	10.00	-9.56	-21 01 03	10.13	9.42
-88 00 02	11.00	11.00	-19 01 10	10.85	-1.54	-21 01 03	15.12	14.80
-90 00 02	11.00	11.00	-19 01 10	10.85	-1.54	-21 01 03	15.12	14.80
-92 00 02	48.95	-45.18	-15 01 03	5.16	-1.27	-21 01 03	15.12	14.80
-94 00 02	61.09	-61.06	-09 01 08	9.85	-5.48	-21 01 03	15.12	14.80
-96 00 02	11.76	11.76	-07 01 08	8.91	-5.01	-21 01 03	15.12	14.80
-98 00 02	11.76	11.76	-07 01 08	8.91	-5.01	-21 01 03	15.12	14.80
-100 00 02	11.76	11.76	-07 01 08	8.91	-5.01	-21 01 03	15.12	14.80
-102 00 02	46.84	46.84	-03 01 08	11.77	12.14	-21 01 03	6.26	-11.07
-104 00 02	31.44	31.44	-03 01 08	10.35	10.72	-21 01 03	10.94	-10.94
-106 00 02	9.81	9.81	-03 01 08	4.80	5.18	-21 01 03	2.31	2.31
-108 00 02	5.36	5.36	-03 01 08	5.75	-2.13	-21 01 03	15.12	-15.12
-110 00 02	11.00	11.00	-03 01 08	6.75	-2.13	-21 01 03	15.12	-15.12
-112 00 02	32.77	-32.77	04 02 00	32.34	29.75	-15 03 01	8.17	8.46
-114 00 02	32.77	-32.77	04 02 00	32.34	29.75	-15 03 01	14.85	-14.07
-116 00 02	25.40	24.53	10 02 00	57.58	-57.75	-15 03 01	10.69	-10.34
-118 00 02	11.31	15.66	10 02 00	57.58	-57.75	-15 03 01	10.69	-10.34
-120 00 02	11.31	15.66	16 02 00	4.87	2.91	-15 03 01	8.46	8.46
-122 00 02	11.31	15.66	16 02 00	11.78	-1.18	-15 03 01	8.46	8.46
-124 00 02	11.31	15.66	16 02 00	11.78	-1.18	-15 03 01	8.46	8.46
-126 00 02	11.31	15.66	16 02 00	11.78	-1.18	-15 03 01	8.46	8.46
-128 00 02	11.31	15.66	16 02 00	11.78	-1.18	-15 03 01	8.46	8.46
-130 00 02	5.86	5.86	-18 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	8.17	8.46
-132 00 02	9.43	9.43	-16 02 01	11.97	-11.78	-05 03 01	14.85	-14.07
-134 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-136 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-138 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-140 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-142 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-144 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-146 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-148 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-150 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-152 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-154 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-156 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-158 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-160 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-162 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-164 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-166 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-168 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-170 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-172 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-174 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-176 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-178 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-180 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-182 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-184 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-186 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-188 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-190 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-192 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-194 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-196 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-198 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-200 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-202 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-204 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-206 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-208 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-210 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-212 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-214 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-216 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-218 00 02	11.31	15.66	-07 02 01	12.31	11.79	-05 03 01	10.69	-10.34
-220 00 02	1							