

- EHRlich, H. W. W. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 946.  
 FULLER, W. (1959). *J. Phys. Chem.* **63**, 1705.  
 GOLDSTEIN, P., LADELL, J. & ABOWITZ, G. (1969). *Acta Cryst.* **B25**, 135.  
 GOLDSTEIN, P. & TRUEBLOOD, K. N. (1967). *Acta Cryst.* **23**, 148.  
 KARLE, I. L. & KARLE, J. (1965b). *Acta Cryst.* **19**, 92.  
 KARLE, J. (1968). *Acta Cryst.* **B24**, 182.  
 KARLE, J., FLIPPEN, J. & KARLE, I. L. (1967). *Z. Kristallogr.* **125**, 201.  
 KARLE, J. & KARLE, I. L. (1965b). *Computing Methods in Crystallography*, Ed. J. S. ROLLETT, p. 151. New York: Pergamon Press.  
 KARLE, J. & KARLE, I. L. (1966). *Acta Cryst.* **21**, 849.  
 KRONDRAŠEV, YU D. (1969). *Sov. Phys. Crystallogr.* **13**, 530.  
 MARTINEZ-CARRERA, S. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 783.  
 MATTHEWS, B. W. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 1413.  
 MORNON, J. P. (1970). *Acta Cryst.* **B26**, 1985.  
 NAJER, H., GIUDICELLI, R., MOREL, R. & MENIN, J. (1963). *Bull. Soc. chim.* p. 1022.  
 NARDELLI, M., FAVA, G. & GIRALDI, G. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 227.  
 PAULING, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond*, 3ème édition. Ithaca: Cornell Univ. Press.  
 REEVE, W. & NEES, M. J. (1967). *J. Amer. Chem. Soc.* **89**, 647.  
 SABELLI, C. & ZANAZZI, P. F. (1969). *Acta Cryst.* **B25**, 182.  
 SENKO, M. E. & TEMPLETON, D. H. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 808.  
 UBBELOHDE, A. R. & GALLACHER, K. J. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 71.  
 VALLINO, M. Communication privée.  
 WALLWORK, S. C. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 758.

*Acta Cryst.* (1971). **B27**, 108

## Structure Cristalline et Moléculaire de la Chloro-3-decalone-2

PAR J. LAPASSET ET J. FALGUEIRETTES

*Laboratoire de Minéralogie Cristallographie, Faculté des Sciences de Montpellier, France*

(Reçu le 13 février 1970)

The inactive 3-chloro-2-decalone,  $C_{10}H_{15}ClO$ , splits spontaneously when allowed to crystallize by slow evaporation of a solvent. The crystal structure has been determined from three-dimensional data collected on a single-crystal diffractometer with Cu  $K\alpha$  radiation. The crystals are orthorhombic, space group  $P2_12_12_1$  and the lattice constants are  $a=23.76$ ,  $b=7.61$ ,  $c=5.41$  Å. The unit cell contains four molecules. Refinement was carried out by the full-matrix least-squares method for 1021 observed reflexions. The final  $R$  value was 0.061. The structural features of this molecule are discussed.

La synthèse et l'étude chimique de la chloro-3-décalone-2 ont été effectuées dans le laboratoire de M. le Professeur Casadevall.

L'étude cristallographique de ce composé a été entreprise afin de préciser sa conformation moléculaire.

### Partie expérimentale

Nous avons obtenu des cristaux en aiguilles aplaties par évaporation lente d'une solution de chloro-3-décalone-2 dans l'hexane.

Une étude préliminaire sur rétigraphe et chambre de précession a permis de déterminer le groupe spatial et la valeur des paramètres. La mesure précise de ces derniers a été terminée sur un diffractomètre semi-automatique Enraf-Nonius.

#### Données cristallographiques

$$a = 23,76 \pm 0,02 \text{ \AA} \quad V = 978 \text{ \AA}^3$$

$$b = 7,61 \pm 0,01 \quad Z = 4$$

$$c = 5,41 \pm 0,01$$

Coefficient linéaire d'absorption  $\mu_l = 28,6 \text{ cm}^{-1}$ .

Groupe spatial  $P2_12_12_1$  (d'après les extinctions systématiques)

Densité mesurée:  $1,26 \pm 0,02$

Densité calculée: 1,28

Le groupe  $P2_12_12_1$  possède quatre positions équivalentes; or ce groupe n'a aucun élément de symétrie inverse; par conséquent, les quatre molécules contenues dans la maille sont identiques et superposables. Comme la molécule possède un carbone asymétrique et que le produit fourni est inactif, ceci prouve que celui-ci s'est spontanément dédoublé en cristaux droits et gauches. Une mesure de points de fusion a permis de vérifier ce dédoublement.

La chloro-3-décalone-2 se décompose sous l'action des rayons X: un cristal en aiguille, dont les dimensions transversales sont de l'ordre du  $\frac{1}{10}$ e de mm, constamment exposé aux rayons X (rayonnement  $K\alpha$  du cuivre), est détruit au bout d'une semaine environ.

Le cristal utilisé pour la mesure des intensités formait une aiguille aplatie de quelques millimètres de longueur, allongée suivant la direction [001]. Il était

limité par les faces  $\{100\}$  et  $\{210\}$ . La plus grande dimension de la section était de 0,18 mm.

Les mesures d'intensité ont été faites sur diffractomètre semi-automatique Enraf-Nonius à la température ambiante. Nous avons utilisé le rayonnement  $K\alpha$  du cuivre filtré par du nickel. Les 1058 réflexions possibles ( $\theta \leq 68^\circ$ ) ont été explorées.

Pour diminuer au maximum l'attaque du cristal, le faisceau de rayons X a été interrompu immédiatement après chaque mesure. Il fallait tenir compte de l'effet de la destruction du cristal sur les intensités diffractées. Pour cela, nous avons mesuré trois réflexions de référence à intervalles réguliers, ce qui nous a permis d'établir un facteur correctif pour chaque jour de mesure. Ces résultats sont consignés dans le Tableau 1; la mesure de toutes les réflexions a demandé 9 jours.

L'intensité de chaque réflexion a d'abord été multipliée par le facteur correctif correspondant. Ensuite, nous avons effectué les corrections de Lorentz-polarisation et de volume irradié.

Dans un premier temps, nous avons effectué la correction d'absorption en supposant le cristal cylindrique (rayon moyen 0,074 mm) à l'aide d'un programme utilisant la méthode décrite dans *International Tables for X-ray Crystallography* (1952). La structure a été déterminée à partir des valeurs des facteurs observés obtenus de cette manière. Nous avons repris ultérieurement les calculs de correction d'intensité lorsque nous avons disposé d'un programme permettant d'effectuer les corrections d'absorption et de volume irradié pour des cristaux prismatiques; l'affinement a alors été repris à l'aide des nouvelles valeurs des facteurs observés.

### Détermination de la structure

L'étude des composés bromés et chlorés a été entreprise simultanément. Les deux composés sont isomorphes et présentent les mêmes propriétés de dédouble-

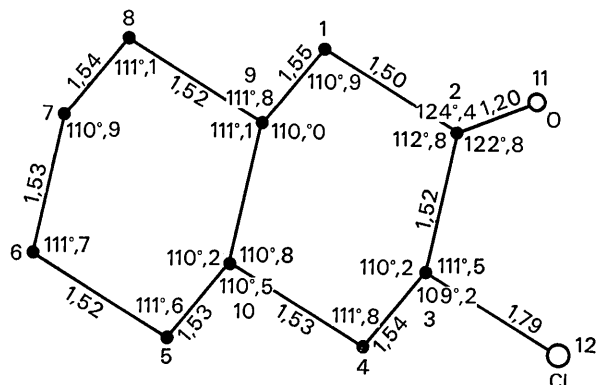


Fig. 1. Distances interatomiques et angles de valence.

ment spontané. L'étude de leur structure a été commencée à partir d'une série de mesures effectuées sur chambre de Weissenberg pour le dérivé bromé. Une projection de la fonction de Patterson suivant l'axe  $c$  a permis d'obtenir la position de l'atome de brome. Par application de la méthode de l'atome lourd, nous avons obtenu la position des autres atomes dans la projection  $xOy$ .

Dans l'attente d'un programme d'absorption, nous avons poursuivi l'étude du dérivé chloré beaucoup moins absorbant. L'hypothèse obtenue pour le composé bromé a été directement reprise pour le composé chloré; cette hypothèse a donné  $R=0,49$  pour la projection sur  $xOy$  (avec  $R = \frac{\sum |F_o| - |F_c|}{\sum |F_o|}$ ).

Nous avons ensuite effectué une synthèse de Fourier puis quatre séries différence qui ont permis d'abaisser  $R$  à la valeur 0,16. L'affinement a été ensuite poursuivi par la méthode des moindres carrés en prenant une agitation thermique isotrope pour chaque atome. Cinq cycles d'affinement ont amené à  $R=0,11$ .

Une projection de la fonction de Patterson sur le plan  $xOz$  a permis de connaître la cote  $z$  du chlore. A partir de cette cote et à l'aide de la configuration moléculaire, nous avons pu connaître approximativement les coordonnées  $z$  des autres atomes de la molécule. Nous avons obtenu pour la projection  $xOz$  (réflexions  $h0l$ )  $R=0,34$ . Deux séries différence bidimensionnelles en projection sur  $xOz$  ont permis d'abaisser  $R$  à 0,15.

Nous avons ensuite utilisé une version modifiée du programme de Busing, Martin & Levy (1962) d'affinement par la méthode des moindres carrés. Ce programme tient compte d'une agitation thermique anisotrope pour chaque atome. Au cours de ces cycles d'affinement, les atomes d'hydrogène ont été fixés *a priori* en fonction des atomes de carbone correspondants. La distance C-H a été prise égale à 1,07 Å et le coefficient d'agitation thermique isotrope à 3,5 Å<sup>2</sup>. Nous n'avons affiné ni sur les paramètres de position, ni sur les facteurs d'agitation thermique des atomes d'hydrogène. Au bout de trois cycles d'affinement, le facteur de reliabilité est descendu à la valeur  $R=0,088$ .

Pendant la recherche de la structure de la chloro-3-décalone-2, un second programme d'absorption pour IBM 360 64 K a été écrit au laboratoire (Escande, 1970).

Une version de ce programme calcule le coefficient d'absorption dans le cas où le cristal est un prisme traversant complètement le faisceau de rayons X. Il effectue également la correction de volume irradié. Le calcul des intensités corrigées a été repris à l'aide de ce programme. Deux cycles d'affinement dans les mêmes conditions que précédemment ont permis d'abaisser  $R$  à la valeur 0,061. Le Tableau 2 contient la liste des facteurs de structure observés et calculés. Le Tab-

Tableau 1. Facteurs correctifs

Numéro du jour de mesure	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Facteur correctif	1	1,04	1,08	1,15	1,22	1,29	1,38	1,48	1,60

Tableau 2. Facteurs de structure observés et calculés

HKL	Fo	Fc	A	B	HKL	Fo	Fc	A	B	HKL	Fo	Fc	A	B	HKL	Fo	Fc	A	B	
2 0 0	39.12	44.14	-44.14	0.0	1 5 0	6.67	5.77	6.37	8 3 1	17.67	16.26	12.52	-14.37	15 0 0	2.63	2.25	-2.35	0.0	0.0	
2 0 0	52.14	54.97	-54.97	0.0	1 5 0	34.34	33.58	3.0	-33.58	8 3 1	11.07	10.54	-10.56	-0.51	16 0 0	1.25	1.25	-1.25	0.0	0.0
2 0 0	39.12	34.24	34.24	0.0	1 5 0	13.47	13.47	0.0	0.0	10 3 1	9.18	8.47	0.0	0.0	17 0 0	4.27	4.68	4.68	0.0	0.0
7 0 0	4.23	0.0	0.0	0.0	5 5 0	17.84	17.00	0.0	17.00	11 3 1	11.98	10.52	3.81	-9.40	18 0 0	3.74	3.68	3.68	0.0	0.0
7 0 0	37.13	33.77	-33.77	0.0	6 5 0	2.59	3.10	3.10	0.0	12 3 1	7.27	7.48	-1.03	7.41	19 0 0	6.55	6.42	6.42	0.0	0.0
10 0 0	7.63	7.04	-7.04	0.0	10 0 0	2.03	2.52	2.52	0.0	13 3 1	6.78	6.13	-0.72	0.0	20 0 0	6.13	7.03	-7.03	0.0	0.0
12 0 0	16.24	9.03	-9.03	0.0	9 6 0	7.15	5.94	0.0	-6.96	14 3 1	4.35	4.14	2.25	-3.47	21 0 0	6.34	5.95	-5.95	0.0	0.0
12 0 0	19.86	20.00	-20.00	0.0	10 6 0	1.57	1.64	-1.64	0.0	15 3 1	7.95	7.77	-7.73	-0.80	22 0 0	3.66	2.77	2.77	0.0	0.0
16 0 0	10.94	11.13	0.0	0.0	11 6 0	5.89	5.59	0.0	5.59	16 3 1	4.42	4.47	-3.38	-3.38	23 0 0	10.12	9.84	-9.84	0.0	0.0
18 0 0	9.00	9.04	-9.04	0.0	12 6 0	1.51	0.37	-0.37	0.0	17 3 1	2.06	2.33	1.87	1.39	24 0 0	2.03	1.99	-1.99	0.0	0.0
18 0 0	3.01	2.99	-2.99	0.0	13 6 0	3.23	5.25	3.0	5.25	18 3 1	0.94	2.05	-1.16	1.65	25 0 0	2.58	5.66	5.66	0.0	0.0
22 0 0	2.97	2.19	-2.19	0.0	14 6 0	4.55	5.06	5.06	0.0	19 3 1	9.95	16.12	3.04	-6.66	26 0 0	2.13	1.96	-1.96	0.0	0.0
24 0 0	0.01	6.66	-6.66	0.0	16 6 0	1.56	1.63	-1.63	0.0	20 3 1	5.46	5.05	-1.71	-1.71	27 0 0	1.03	0.96	-0.96	0.0	0.0
26 0 0	2.24	1.92	-1.92	0.0	17 6 0	4.33	4.52	0.0	4.52	21 3 1	3.57	3.50	-2.47	-2.47	28 0 0	1.09	1.09	-1.09	0.0	0.0
27 0 0	1.31	0.0	0.0	0.0	18 6 0	2.77	2.79	-2.79	0.0	22 3 1	2.99	3.04	-3.02	0.35	29 0 0	78.61	25.72	-25.56	2.81	2.81
28 0 0	5.69	5.32	-5.32	0.0	20 6 0	0.89	4.31	-4.31	0.0	23 3 1	2.16	2.43	0.0	2.31	30 0 0	21.72	10.74	-10.74	10.98	10.98
1 1 1	27.48	76.98	0.0	-76.98	21 4 0	2.94	3.66	0.0	-3.66	25 3 1	3.30	3.81	1.13	0.0	31 0 0	33.67	23.95	-23.95	10.84	10.84
1 1 1	41.10	62.15	62.15	0.0	1 7 0	1.49	1.39	0.0	1.39	26 3 1	2.37	2.34	2.26	-0.59	32 0 0	20.55	20.45	19.45	6.32	6.32
4 1 0	8.47	7.92	7.92	0.0	3 7 0	7.43	2.24	2.24	0.0	1 4 1	16.98	15.74	15.67	1.43	33 0 0	18.52	13.19	-11.95	6.37	6.37
5 1 0	47.27	47.27	0.0	47.27	4 7 0	9.69	17.10	-10.15	0.0	2 4 1	22.32	21.02	2.91	-20.81	8 1 1	16.74	16.56	-19.18	-13.79	-13.79
6 1 0	38.93	38.61	38.61	0.0	5 7 0	3.69	4.63	0.0	4.63	3 6 1	6.80	6.63	-6.63	0.0	9 1 1	26.76	26.31	-26.14	3.61	3.61
7 1 0	13.27	13.78	0.0	-13.78	6 7 0	15.54	15.03	15.03	0.0	4 4 1	12.21	13.15	-6.80	11.26	10 1 1	15.66	15.04	-13.79	-6.01	-6.01
8 1 0	47.85	45.81	-45.81	0.0	7 7 0	4.02	5.34	0.0	-5.34	5 4 1	10.00	8.97	8.51	2.81	11 1 1	21.90	21.57	-21.48	2.03	2.03
9 1 0	37.13	37.32	0.0	37.32	8 7 0	10.13	9.75	9.75	0.0	6 4 1	10.59	8.94	-5.95	-7.38	12 1 1	9.16	8.85	-8.62	8.93	8.93
10 1 0	61.54	63.79	63.79	0.0	9 7 0	9.51	9.94	0.0	-9.94	7 4 1	1.51	-0.33	-0.33	1.47	13 1 1	8.51	8.47	-8.33	0.14	0.14
11 1 0	15.93	15.87	0.0	15.88	10 7 0	14.44	14.07	-14.07	0.0	8 4 1	18.43	17.93	7.33	-16.36	14 1 1	8.41	8.37	-10.1	-8.15	-8.15
12 1 0	12.97	12.01	12.01	0.0	11 7 0	5.93	7.42	7.42	0.0	9 4 1	16.43	16.25	-1.96	-16.13	15 1 1	1.98	2.49	1.69	-1.84	-1.84
13 1 0	49.84	49.47	0.0	49.47	12 7 0	0.00	0.00	0.00	0.00	10 1 1	12.49	12.43	0.0	12.40	16 1 1	12.49	12.43	-14.89	-14.89	-14.89
14 1 0	14.95	12.34	-12.34	0.0	13 7 0	0.71	0.20	0.0	-0.20	11 1 1	13.61	12.67	3.56	12.16	18 1 1	2.49	5.91	-4.74	3.53	3.53
15 1 0	10.18	9.24	0.0	9.24	14 7 0	3.73	3.85	3.85	0.0	12 1 1	14.01	13.81	-1.84	-13.68	19 1 1	2.37	2.68	1.69	1.90	1.90
16 1 0	15.93	15.13	-15.13	0.0	15 7 0	1.40	1.31	-1.31	0.0	13 1 1	10.72	10.52	-1.00	-1.00	20 1 1	1.82	1.82	-1.82	-1.82	-1.82
17 1 0	21.05	20.49	0.0	20.49	17 7 0	1.14	1.39	0.0	-1.39	14 1 1	14.48	14.41	13.01	-6.29	21 1 1	7.43	7.89	-7.79	-1.25	-1.25
18 1 0	19.79	19.51	-19.51	0.0	18 7 0	3.23	3.46	3.46	0.0	15 1 1	9.26	9.53	-1.92	-9.44	22 1 1	2.33	2.69	2.27	1.04	1.04
19 1 0	21.59	20.74	0.0	-20.74	1 8 0	1.22	0.27	0.0	-0.27	17 1 1	17.85	17.21	17.85	-1.64	23 1 1	2.15	2.15	-2.15	-2.15	-2.15
20 1 0	6.75	7.15	-7.15	0.0	2 8 0	2.85	2.88	-2.88	0.0	18 1 1	4.1	6.57	6.46	4.18	24 1 1	1.92	1.74	-0.03	1.74	1.74
21 1 0	5.39	5.93	0.0	-5.93	3 8 0	8.43	8.64	-8.64	0.0	19 1 1	7.10	7.08	-6.34	3.14	25 1 1	3.10	3.96	3.56	-1.58	-1.58
22 1 0	10.98	11.93	11.93	0.0	4 8 0	9.43	8.64	-8.64	0.0	20 1 1	4.23	5.39	-2.82	-2.75	26 1 1	1.82	1.82	-1.82	-1.82	-1.82
23 1 0	1.31	1.55	0.0	1.55	5 8 0	4.94	4.98	-4.98	0.0	20 4 1	3.35	3.88	2.43	-3.80	27 1 1	2.38	4.47	-3.34	-1.06	-1.06
24 1 0	5.00	4.34	-4.34	0.0	6 8 0	8.63	8.43	0.0	8.43	21 4 1	6.14	5.70	-1.67	-5.45	0 2 2	26.75	25.05	-25.05	0.0	0.0
25 1 0	3.10	3.03	-3.03	0.0	7 8 0	3.03	3.29	3.29	0.0	2 5 2	3.37	3.33	-3.29	-3.29	1 2 2	33.37	33.33	-33.29	0.0	0.0
26 1 0	1.18	0.47	0.0	0.47	8 8 0	7.56	7.53	0.0	-7.53	3 4 2	3.21	2.97	0.95	-2.81	2 2 2	45.94	45.79	-45.79	0.16	0.16
27 1 0	6.98	7.81	-7.81	0.0	10 8 0	3.32	3.00	3.00	0.0	24 4 1	4.65	4.18	-2.13	-3.60	3 2 2	7.55	11.10	-10.46	3.72	3.72
2 2 0	20.22	18.46	18.46	0.0	12 8 0	1.46	1.28	-1.28	0.0	4 1 2	9.88	9.84	-1.75	-1.75	4 2 2	28.17	27.68	-2.30	27.58	27.58
3 2 0	30.30	28.53	0.0	28.53	1 9 0	5.32	5.64	0.0	-5.64	5 1 2	8.85	8.59	8.49	-1.27	6 2 2	2.50	1.84	1.02	1.53	1.53
4 2 0	41.00	40.62	0.0	40.62	2 9 0	4.96	7.28	0.0	-7.28	6 2 2	18.43	18.64	-2.50	-16.69	7 2 2	12.49	11.93	-9.57	-10.44	-10.44
5 2 0	55.58	56.28	0.0	-56.28	3 9 0	0.95	0.98	0.0	0.98	8 2 2	16.55	16.55	-13.55	-7.04	8 2 2	2.49	2.49	-2.49	-2.49	-2.49
6 2 0	38.38	37.35	37.35	0.0	4 9 0	2.17	2.58	0.0	2.58	4 5 1	18.52	17.78	-16.96	5.34	9 2 2	12.49	12.49	-11.46	13.26	13.26
8 2 0	3.01	2.74	-2.74	0.0	5 9 0	1.02	1.25	0.0	-1.25	5 5 1	9.34	8.87	-5.76	-6.75	10 2 2	24.15	24.44	-0.29	24.44	24.44
9 2 0	41.65	41.34	0.0	41.34	6 9 0	4.27	4.47	0.0	-4.47	7 5 1	12.15	11.60	9.86	-6.10	11 2 2	6.45	5.87	-6.09	-5.80	-5.80
10 2 0	22.60	20.57	-20.57	0.0	7 9 0	21.32	20.44	0.0	-20.44	8 5 1	12.98	12.13	11.88	2.47	12 2 2	7.02	7.07	-6.96	1.25	1.25
11 2 0	6.26	6.24	0.0	-6.24	8 9 0	7.58	7.23	0.0	-7.23	11 5 1	11.96	11.85	-10.97	-10.97	13 2 2	7.40	7.40	-7.40	-7.40	-7.40
12 2 0	11.45	11.51	0.0	11.51	9 9 0	3.11	2.89	0.0	2.89	12 5 1	12.58	11.86	-8.88	7.85	15 2 2	24.14	24.84	-2.52	24.71	24.71
13 2 0	9.16	9.31	0.0	9.31	10 9 0	7.58	7.23	0.0	-7.23	14 5 1	14.01	12.94	12.01	-2.91	16 2 2	7.26	7.20	-6.22	0.62	0.62
14 2 0	1.55	1.49	0.0	1.49	11 9 0	9.43	9.30	0.0	9.30	15 5 1	8.31	8.28	-8.28	-8.28	17 2 2	18.34	18.34	-18.34	-18.34	-18.34
15 2 0	3.53	4.13	-4.13	0.0	12 9 0	23.61	21.84	0.0	-21.84	16 5 1	2.90	3.12	-1.01	-2.95	19 2 2	8.57	8.01	-1.43	-8.78	-8.78
16 2 0	10.56	10.93	-10.93	0.0	13 9 0	23.61	21.84	0.0	-21.84	17 5 1	4.42	4.50	-4.10	-1.86	21 2 2	6.33	6.05	-3.41	5.00	5.00
21 2 0	1.82	0.72	0.0	0.72	14 9 0	26.76	25.67	0.0	-25.67	18 5 1	6.72	6.71	6.42	-1.96	23 2 2	3.62	3.29	-1.44	-2.94	-2.94
22 2 0	9.60	9.19	0.0	9.19	15 9 0	11.87	11.57	0.0	-11.57	19 5 1	12.15	12.15	0.0	12.15	24 2 2	22.52	22.52	-22.52	-22.52	-22.52
23 2 0	9.60	9.19	0.0	9.19	16 9 0	11.87	11.57	0.0	-11.57	20 5 1	5.80	5.27	-3.63	3.76	25 2 2	3.36	3.49	-3.41	0.51	0.51
24 2 0	2.46	2.37	-2.37	0.0	17 9 0	12.84	12.10	0.0	-12.10	20 5 1	5.33	5.59	-1.84	5.28	0 3 2	2				

Tableau 2 (suite)

HKL	Fo	Fc	A	B	HKL	Fo	Fc	A	B	HKL	Fo	Fc	A	B	HKL	Fo	Fc	A	B
0 6 2	1.49	1.43	1.43	0.0	3 3	11.38	11.47	-1.44	-11.86	22 0 4	1.97	2.46	-2.46	0.1	5 5 5	4.27	3.98	0.0	3.98
1 6 2	7.14	7.01	-6.81	1.68	4 3 3	1.79	1.76	-1.79	-1.71	0 1 4	22.67	22.92	0.0	22.92	6 5 5	6.26	6.45	0.0	-6.45
2 6 2	7.86	8.14	0.00	8.09	5 3 3	8.14	7.78	-3.26	-7.03	1 1 4	11.54	13.00	-1.78	13.99	7 5 5	11.01	10.21	0.0	-10.21
3 6 2	6.44	6.18	-6.44	0.94	6 3 3	12.11	12.16	0.00	-11.72	2 1 4	10.16	6.60	-6.56	0.00	8 5 5	3.39	2.05	0.0	-2.05
4 6 2	5.25	5.15	-3.91	-3.47	7 3 3	12.11	12.16	2.40	11.92	3 1 4	10.44	18.01	-17.48	-6.06	9 5 5	8.61	9.27	0.0	-9.27
5 6 2	7.89	7.96	7.85	1.35	8 3 3	13.54	14.33	13.94	-3.56	4 1 4	13.54	14.20	-0.17	-1.71	11 5 5	5.25	5.53	0.0	-5.53
6 6 2	2.91	2.45	2.05	-1.34	9 3 3	14.56	15.91	-13.83	-11.55	5 1 4	17.68	17.14	13.64	-10.37	12 5 5	8.05	7.98	0.0	-7.98
7 6 2	4.23	4.23	1.57	0.76	10 3 3	10.84	10.01	-0.55	10.00	6 1 4	10.44	9.69	-6.46	-6.59	13 5 5	9.05	9.06	0.0	-10.38
8 6 2	4.50	4.28	3.94	-1.68	11 3 3	23.57	23.44	-4.72	-22.96	7 1 4	9.45	8.70	6.23	6.08	14 5 5	3.11	2.13	0.0	-2.13
9 6 2	1.06	0.84	0.76	0.34	12 3 3	10.36	10.69	-4.78	9.66	8 1 4	7.74	7.14	6.77	-2.27	15 5 5	1.67	1.58	0.0	-1.58
10 6 2	4.43	3.65	-2.92	-2.18	13 3 3	8.27	7.43	-2.28	7.97	9 1 4	6.48	9.34	-7.69	-5.43	16 5 5	6.67	6.17	0.0	-6.17
11 6 2	2.25	2.41	0.70	2.31	14 3 3	3.14	12.59	0.27	-8.52	10 1 4	9.67	9.17	-7.96	-4.69	17 5 5	5.06	6.00	0.0	-6.00
12 6 2	2.64	3.01	-2.81	1.07	15 3 3	9.26	8.52	-8.47	0.11	11 1 4	7.27	6.20	4.95	-3.87	18 5 5	5.16	5.55	0.0	-5.55
13 6 2	5.24	6.32	-2.73	5.99	16 3 3	15.09	14.66	-14.47	-2.37	12 1 4	9.16	9.35	4.21	8.25	1 1 5	7.54	9.06	-1.06	9.06
14 6 2	3.05	3.61	1.16	-3.42	17 3 3	3.32	4.02	2.89	2.80	13 1 4	2.19	1.71	1.67	0.38	2 1 5	8.42	8.85	-3.29	-8.21
15 6 2	5.16	5.40	-2.13	-4.96	18 3 3	8.19	8.43	2.39	0.08	14 1 4	5.12	5.13	-4.91	-1.40	3 1 5	2.84	2.70	-2.11	-0.63
16 6 2	3.54	3.26	0.86	3.14	19 3 3	12.99	11.90	2.32	13.40	15 1 4	7.56	7.61	7.61	-0.39	4 1 5	11.51	12.10	6.46	10.23
17 6 2	3.32	2.89	1.63	2.38	20 3 3	3.87	3.23	-1.15	-3.30	16 1 4	1.40	1.82	1.70	0.66	5 1 5	8.63	9.38	8.78	8.28
18 6 2	2.49	3.07	0.00	3.07	21 3 3	6.02	7.76	-7.63	-7.28	17 1 4	4.70	4.95	-3.35	-3.64	6 1 5	6.54	6.33	-6.25	-1.02
1 7 2	6.36	7.11	1.24	-0.49	22 3 3	7.83	8.05	-4.90	-4.30	18 1 4	3.32	3.42	0.77	3.49	7 1 5	9.07	-5.22	7.78	7.78
2 7 2	4.41	4.56	4.35	-1.37	23 3 3	2.33	2.22	2.16	-0.53	19 1 4	3.48	3.17	-0.63	3.17	8 1 5	7.26	7.37	-7.76	-0.42
3 7 2	4.44	4.40	4.17	-1.41	0 4 3	3.15	3.91	-3.58	-3.58	20 1 4	6.42	6.33	0.66	-3.47	9 1 5	8.18	7.38	-6.33	-3.81
4 7 2	3.14	4.03	0.89	-3.93	1 4 3	16.97	17.71	3.73	17.30	0 2 4	3.62	3.94	3.84	0.00	10 1 5	6.78	6.66	-4.45	-2.19
5 7 2	7.36	7.65	-6.30	4.35	2 4 3	3.93	4.47	-0.07	-4.41	1 2 4	5.80	5.78	-0.22	5.77	11 1 5	5.28	4.96	4.45	2.19
6 7 2	5.95	5.95	-0.65	-0.98	3 4 3	27.98	23.88	12.34	-20.45	2 2 4	6.49	7.41	7.38	0.63	12 1 5	6.49	5.97	-3.32	-4.95
7 7 2	5.14	5.90	-1.13	-5.79	4 4 3	11.88	11.92	-5.66	-10.51	3 2 4	4.48	4.89	7.71	5.52	13 1 5	5.42	5.95	5.73	1.60
8 7 2	0.77	1.36	0.42	-1.30	5 4 3	3.70	5.19	-2.53	4.53	5 2 4	4.10	3.98	9.44	-5.91	14 1 5	11.00	9.78	-3.02	9.30
9 7 2	4.70	4.71	4.68	0.51	6 4 3	3.86	3.76	-3.71	-0.61	6 2 4	16.80	15.99	-11.84	-10.75	15 1 5	5.90	5.44	-5.43	-0.23
10 7 2	2.43	3.03	0.25	-1.38	7 4 3	11.43	10.95	-10.59	-2.35	10 2 4	16.55	15.13	6.52	13.65	16 1 5	5.42	5.95	-5.73	1.60
11 7 2	3.14	3.58	3.55	0.52	8 4 3	7.01	8.19	-11.71	-8.01	8 2 4	11.75	13.06	10.25	-8.09	17 1 5	3.63	4.63	-4.22	-3.99
12 7 2	0.90	0.72	0.64	0.33	9 4 3	12.29	12.96	9.84	-8.44	9 2 4	8.05	8.16	7.62	-2.92	18 1 5	4.84	4.63	2.33	-4.00
13 7 2	1.74	2.04	2.02	-1.91	10 4 3	11.43	10.95	-10.59	-2.35	10 2 4	16.55	15.13	6.52	13.65	1 2 5	6.49	7.66	-6.95	-3.27
14 7 2	0.39	0.37	0.12	-0.99	11 4 3	6.31	5.95	-1.98	5.82	11 2 4	2.45	2.20	4.73	3.10	2 2 5	4.85	4.87	6.27	6.02
15 7 2	3.24	3.68	2.52	2.68	12 4 3	6.31	5.95	-1.98	5.82	12 2 4	5.86	4.73	4.44	-1.63	3 2 5	4.26	5.24	-3.51	3.90
16 7 2	1.45	1.13	-1.13	-0.67	13 4 3	5.77	6.44	-4.19	-4.68	13 2 4	1.68	1.29	-0.10	-1.29	4 2 5	6.43	7.11	6.47	-2.94
1 8 2	1.85	2.68	0.56	0.00	14 4 3	6.59	6.98	-5.49	-5.49	14 2 4	2.45	2.20	4.73	3.10	5 2 5	7.55	8.31	-5.81	-6.81
2 8 2	6.87	6.76	6.76	0.12	15 4 3	5.97	5.87	-2.29	-5.41	15 2 4	4.05	3.44	1.91	-2.86	6 2 5	11.45	11.65	-8.07	15.59
3 8 2	5.19	4.81	-1.33	-4.62	16 4 3	4.03	3.66	3.45	-1.22	16 2 4	5.29	5.15	-0.83	5.08	7 2 5	4.74	3.65	-3.08	1.97
4 8 2	1.55	1.81	1.81	0.62	17 4 3	2.66	1.73	-0.61	-1.13	17 2 4	2.85	2.23	0.96	2.01	8 2 5	5.96	5.58	-4.14	-3.74
5 8 2	1.92	2.10	-2.01	-0.61	18 4 3	2.66	1.73	-0.61	-1.13	18 2 4	1.68	1.08	3.31	1.93	9 2 5	3.82	4.07	-3.82	-3.82
6 8 2	4.64	5.27	-5.21	-0.79	19 4 3	5.86	6.13	-3.09	-5.29	19 2 4	3.39	3.78	1.56	-3.44	10 2 5	2.46	2.26	1.11	1.96
7 8 2	1.52	2.39	2.34	0.48	20 4 3	4.62	5.18	-4.96	-1.47	20 2 4	3.72	3.38	1.80	-2.88	11 2 5	3.72	2.92	1.99	2.15
8 8 2	3.95	4.24	0.35	-2.49	21 4 3	5.50	6.46	-4.86	-3.95	21 2 4	4.84	8.84	-7.66	0.41	12 2 5	6.43	6.43	-6.27	-6.27
9 8 2	3.31	3.82	-2.95	2.43	22 4 3	6.73	7.17	-0.92	1.88	1 3 4	6.43	6.59	4.42	-4.88	13 2 5	4.63	3.92	-3.91	-0.27
10 8 2	3.74	3.78	-1.29	3.56	0 5 3	5.37	5.20	0.00	-5.20	2 3 4	9.12	8.86	6.14	6.38	14 2 5	3.44	2.70	2.37	-1.29
11 8 2	1.13	1.67	-1.67	-0.81	1 5 3	5.50	6.46	-4.86	-3.95	3 3 4	8.44	8.84	-7.66	0.41	15 2 5	1.23	1.37	1.18	0.71
20 0 3	4.69	3.61	0.00	-3.61	2 5 3	9.39	9.05	0.74	-3.24	4 3 4	9.26	8.61	-7.74	7.77	16 2 5	8.00	8.00	-8.00	-8.00
1 0 3	16.95	16.36	0.00	-8.06	3 5 3	5.11	4.35	3.86	2.00	5 3 4	8.96	8.21	7.39	-3.20	17 2 5	7.83	8.27	3.93	7.28
2 0 3	8.36	8.01	0.00	-8.31	4 5 3	13.99	14.44	-13.51	-1.51	6 3 4	5.23	4.48	3.13	-7.25	18 2 5	3.70	4.35	3.83	2.06
3 0 3	29.30	28.01	0.00	-28.50	5 5 3	1.68	1.56	-0.64	-1.68	7 3 4	4.16	3.80	-3.16	-2.84	19 2 5	6.43	6.43	-6.43	-6.43
4 0 3	1.66	1.99	0.00	1.99	6 5 3	4.37	4.99	-3.41	-3.64	8 3 4	10.12	10.71	-10.65	-1.18	5 3 5	4.31	4.25	-3.81	-1.89
5 0 3	17.73	17.15	0.00	-17.15	7 5 3	7.81	7.80	-5.66	-5.66	9 3 4	7.44	6.70	-4.86	4.73	6 3 5	5.28	5.46	-3.61	-4.10
6 0 3	0.75	1.46	0.00	-1.46	8 5 3	3.03	3.03	-3.03	-3.03	10 3 4	3.76	2.65	-2.62	-0.23	7 3 5	2.33	2.26	0.95	-2.05
7 0 3	2.74	2.23	0.00	-2.23	9 5 3	6.28	5.87	-0.08	-0.87	11 3 4	6.43	7.49	-5.54	-9.46	8 3 5	1.63	1.59	0.93	-1.30
8 0 3	6.57	7.04	0.00	7.04	10 5 3	8.33	8.45	-7.79	-3.28	12 3 4	9.71	9.49	5.54	-7.70	11 3 5	2.57	2.52	1.59	-1.96
9 0 3	11.89	11.19	0.00	-11.19	11 5 3	8.76	8.39	1.81	1.81	13 3 4	3.26	2.87	1.34	2.54	12 3 5	6.43	6.43	-6.43	-6.43
10 0 3	1.72	1.51	0.00	-1.51	12 5 3	9.08	9.01	-8.31	-5.28	14 3 4	4.16	3.80	-3.16	-2.84	13 3 5	3.10	3.01	-0.11	-3.00
11 0 3	12.18	12.57	0.00	-12.57	13 5 3	1.91	1.82	0.72	1.67	16 3 4	5.30	5.10	-5.09	-0.31	14 3 5	1.16	1.44	1.36	0.40
12 0 3	1.27	1.63	0.00	-1.63	14 5 3	1.68	1.56	-0.64	-1.60	17 3 4	7.11	7.39	-6.43	-3.64	15 3 5	3.60	3.84	3.84	0.00
13 0 3	9.14	8.54	0.00	-8.54	15 5 3	4.37	4.99	-3.41	-3.64	18 3 4	2.26	2.45	-1.08	-1.32	1 4 5	6.01	6.01	-6.01	-6.01
14 0 3	6.86	6.72	0.00	-6.72	17 5 3	1.97	1.85	-0.41	-1.80	19 3 4	4.05	3.27	-2.04	-2.56	2 4 5	8.11	8.01	-3.07	7.39
15 0 3	16.98	16.96	0.00	-16.96	18 5 3	1.87	1.40	-0.54	-1.64	20 3 4	4.54	4.62	3.88	2.12	3 4 5	2.47	3.61	1.48	-3.30
16 0 3	5.05	6.07	0.00	-6.07	19 5 3	3.03	2.77	0.19	-0.76	0 0 4	7.55	7.59	0.00	0.00	4				

sont indépendants, nous obtenons un écart type de 0,009 Å pour les longueurs de liaison C-C et C-O et de 0,007 Å pour la distance Cl-C(3). Les écarts types sur les angles de valences sont égaux à 0,8°.

#### Géométrie de la molécule

Les atomes C(2), C(3), C(10), C(6), C(7), C(9) sont contenus dans un même plan. Un calcul de plan moyen, dont les résultats figurent dans le Tableau 4,

Tableau 3. Paramètres de position et d'agitation thermique de la chloro-3-décalone-2

Les écarts types portant sur la dernière décimale sont donnés entre parenthèses; le facteur d'agitation thermique est égal à:

$$\exp [-(h^2\beta_{11} + k^2\beta_{22} + l^2\beta_{33} + 2hk\beta_{12} + 2hl\beta_{13} + 2kl\beta_{23})]$$

sauf pour les atomes d'hydrogène.

	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$10^4 \beta_{11}$	$10^4 \beta_{22}$	$10^4 \beta_{33}$	$10^4 \beta_{12}$	$10^4 \beta_{13}$	$10^4 \beta_{23}$
Cl	0,3296 (1)	0,6185 (2)	0,4228 (4)	28 (0,5)	208 (3)	473 (12)	16 (1)	20 (2)	164 (5)
O	0,2714 (2)	0,2841 (6)	0,3926 (8)	25 (1)	290 (11)	289 (19)	0 (3)	33 (4)	30 (14)
C(1)	0,3004 (2)	0,1483 (8)	0,7700 (11)	15 (1)	181 (12)	289 (24)	-6 (3)	-7 (4)	84 (16)
C(2)	0,2973 (2)	0,2927 (8)	0,5831 (11)	12 (1)	225 (12)	266 (22)	6 (3)	5 (4)	13 (16)
C(3)	0,3311 (2)	0,4543 (7)	0,6579 (10)	20 (1)	156 (10)	252 (20)	9 (3)	10 (4)	67 (12)
C(4)	0,3927 (2)	0,4030 (7)	0,7115 (11)	17 (1)	149 (10)	324 (23)	-7 (3)	-1 (4)	35 (14)
C(5)	0,4580 (2)	0,2038 (8)	0,9447 (11)	13 (1)	212 (11)	330 (26)	-4 (3)	-13 (4)	9 (17)
C(6)	0,4631 (2)	0,0552 (9)	0,1304 (12)	14 (1)	305 (16)	368 (26)	11 (3)	-7 (4)	40 (20)
C(7)	0,4282 (2)	-0,1051 (8)	0,0536 (13)	20 (1)	218 (13)	442 (31)	21 (4)	12 (5)	93 (20)
C(8)	0,3663 (2)	-0,0533 (8)	0,0070 (12)	16 (1)	178 (11)	379 (28)	-2 (3)	-1 (5)	83 (16)
C(9)	0,3622 (2)	0,0943 (7)	0,8189 (9)	15 (1)	127 (10)	193 (20)	-2 (3)	5 (4)	21 (12)
C(10)	0,3967 (2)	0,2556 (7)	0,9019 (10)	13 (1)	140 (10)	223 (20)	-1 (3)	-2 (4)	-13 (14)
H(13)	0,2783	0,036	0,700						
H(14)	0,2814	0,189	0,940						
H(15)	0,3130	0,507	0,824						
H(16)	0,4135	0,518	0,783						
H(17)	0,4120	0,365	0,544						
H(18)	0,4807	0,320	0,007						
H(19)	0,4760	0,163	0,773						
H(20)	0,5062	0,027	0,154						
H(21)	0,4470	0,109	0,305						
H(22)	0,4312	-0,200	0,197						
H(23)	0,4464	-0,156	0,888						
H(24)	0,3445	-0,166	0,939						
H(25)	0,3478	-0,014	0,179						
H(26)	0,3814	0,056	0,649						
H(27)	0,3787	0,298	0,073						

$B = 3,5 \text{ \AA}^2$

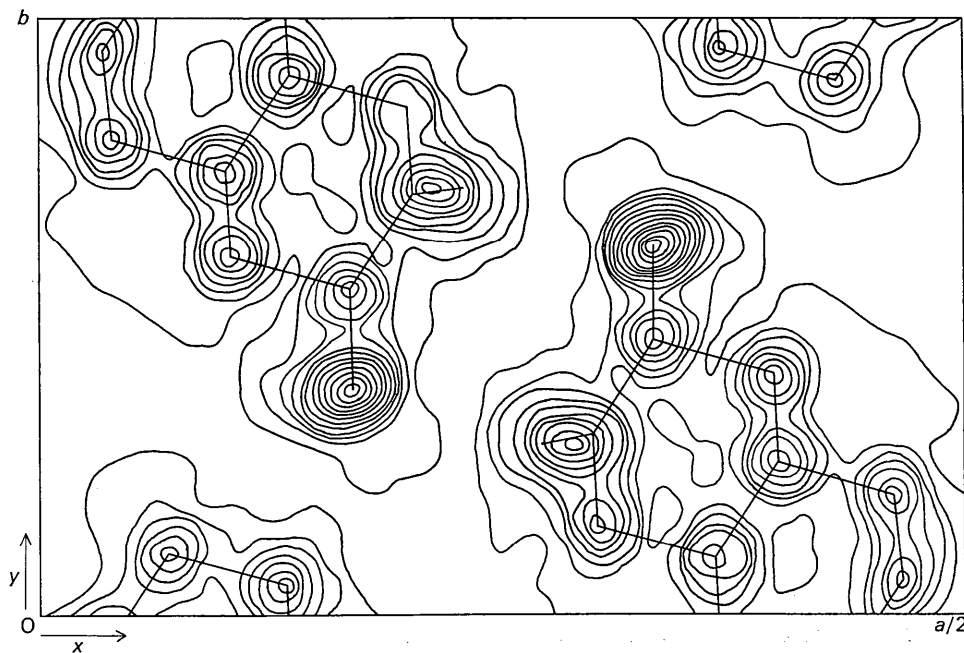


Fig. 2. Projection de densité électronique sur le plan  $xOy$ .

Tableau 4. *Plans moyens importants*

L'espace est rapporté à trois axes orthonormes  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$  dirigés suivant  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ; les distances sont exprimées en Å.

Plan moyen 1 défini par C(2), C(3), C(10), C(6), C(7), C(9)						
Equation du plan: $0,570x - 0,098y - 0,816z = 1,23$						
Atome	C(2)	C(3)	C(10)	C(6)	C(7)	C(9)
Distance au plan 1	0,006	0,012	-0,027	0,016	0,001	-0,007
Plan moyen 2 défini par C(1), C(2), C(3), O						
Equation du plan: $0,806x - 0,372y - 0,460z = 3,41$						
Atome	C(1)	C(2)	C(3)	O		
Distance au plan 2	0,0003	-0,0011	0,0004	0,0003		
Plan 3 défini par C(2), C(3), Cl						
Equation du plan: $0,819x - 0,398y - 0,413z = 3,60$						
Angle dièdre des plans No 2 et 3: $3,17^\circ$						

montre que l'écart le plus important est fourni par l'atome C(10) qui est distant de 0,024 Å de ce plan.

Les angles de valences de tous les atomes de carbone  $sp^3$  sont près de la valeur théorique de  $109^\circ 28'$ . Les distances carbone-carbone sont également proches de la valeur 1,54 Å correspondant à une simple liaison.

La distance C-Cl est de 1,79 Å. Cette valeur est à rapprocher de celles obtenues pour le chlorométhane 1,78 Å (Costain, 1958) et pour le chlorure d'éthyle 1,778 Å (Wagner & Dailez, 1957).

La distance carbone-oxygène est égale à 1,20 Å; cette valeur est nettement plus courte que celle trouvée pour la cyclohexanone (Romers, 1956) qui est de 1,24 Å. Les quatre atomes O, C(1), C(2), C(3) sont contenus dans un même plan (Tableau 4); l'angle C(1)-C(2)-C(3) est égal à  $112,8^\circ$ . Cette valeur est plus faible que celle donnée par Romers pour la cyclohexanone ( $117^\circ$ ) qui est encore plus faible que la valeur de  $120^\circ$  prévue théoriquement. De plus, l'angle entre les plans définis par C(1), C(2), C(3), O d'une part, et C(2), C(3), Cl d'autre part, n'est que de  $3,6^\circ$  au lieu  $15,6^\circ$  prévu pour la cyclohexanone (Corey & Sneen, 1955) ceci montre (Mion, 1969) que la présence de la double liaison

modifie peu la conformation des cycles par rapport à celle du cyclohexane.

Pour chaque atome, nous avons calculé les valeurs des écarts quadratiques moyens suivant les trois axes principaux des ellipsoïdes d'agitation thermique. Les résultats figurent dans le Tableau 5.

Tableau 5. *Mouvements d'agitation thermique et orientation des ellipsoïdes d'agitation thermique*

L'espace est rapporté à un trièdre orthonormé  $Ox$ ,  $Oy$ ,  $Oz$  dont les axes sont dirigés suivant  $a$ ,  $b$ ,  $c$  respectivement.

Le Tableau donne, pour chaque atome, l'écart quadratique moyen  $\sqrt{u^2}$  suivant les trois axes principaux de l'ellipsoïde et les cosinus directeurs de ces axes.

	$\sqrt{u^2}$	Cosinus directeurs suivant		
		$Ox$	$Oy$	$Oz$
C(1)	0,172	0,058	-0,590	0,805
	0,262	0,278	-0,765	-0,581
	0,205	0,959	0,258	0,120
C(2)	0,183	0,902	-0,123	-0,414
	0,260	0,187	0,975	0,118
	0,200	0,389	-0,184	0,903

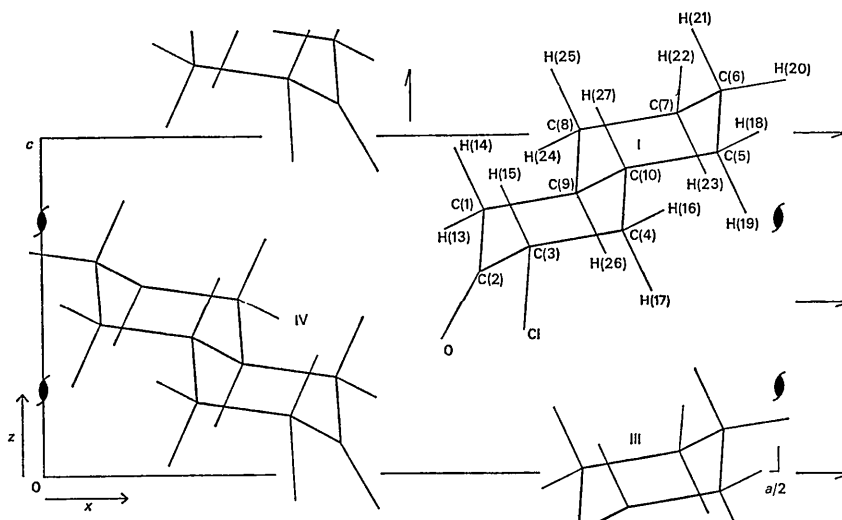
Fig. 3. Projection de la structure sur le plan  $xOz$ .

Tableau 5 (suite)

	$\sqrt{u^2}$	Cosinus directeurs suivant		
		Ox	Oy	Oz
C(3)	0,260	0,714	0,555	0,426
	0,213	0,699	-0,587	-0,408
	0,165	0,023	0,590	-0,807
C(4)	0,239	0,590	-0,601	-0,540
	0,190	0,391	0,797	-0,459
	0,219	0,706	0,059	0,705
C(5)	0,179	0,898	0,075	0,434
	0,252	0,194	-0,952	-0,237
	0,228	0,395	0,297	-0,869
C(6)	0,190	0,921	-0,229	0,314
	0,305	0,175	0,966	0,190
	0,235	0,347	0,120	-0,930
C(7)	0,196	0,604	-0,722	0,337
	0,308	0,476	0,666	0,575
	0,232	0,640	0,187	-0,746
C(8)	0,215	0,988	-0,061	0,141
	0,192	0,138	0,745	-0,653
	0,268	0,065	-0,665	-0,744
C(9)	0,210	0,963	-0,228	0,145
	0,197	0,148	0,894	0,423
	0,161	0,226	0,386	-0,895
C(10)	0,191	0,942	-0,082	-0,327
	0,205	0,018	-0,958	0,286
	0,178	0,336	0,275	0,901
O	0,284	0,777	0,519	-0,357
	0,296	0,419	-0,849	-0,322
	0,175	0,470	-0,100	0,877
Cl	0,335	0,526	0,573	0,628
	0,263	0,849	-0,305	-0,432
	0,176	0,056	-0,761	0,647

**Empilement des molécules**

La forme de la molécule est assez compacte; les contacts entre molécules voisines sont du type de van der Waals. Nous avons réuni dans le Tableau 6, les distances les plus courtes faisant intervenir des atomes de deux molécules différentes.

Tableau 6. Distances intermoléculaires les plus courtes

Le premier atome est toujours pris dans la molécule 1 (Fig. 3); les positions équivalentes utilisées sont définies par:

i	x, y+1, z	iv	$\frac{1}{2}-x, -y, z-\frac{1}{2}$
ii	x, y, z+1	v	$1-x, \frac{1}{2}+y, \frac{3}{2}-z$
iii	x, y, z-1	vi	$\frac{1}{2}-x, 1-y, z-\frac{1}{2}$

	Distance		Distance
O—H(14 <sup>iii</sup> )	2,57 Å	H(17)—H(20 <sup>v</sup> )	2,54 Å
O—H(15 <sup>vi</sup> )	2,59	H(17)—H(21 <sup>iii</sup> )	2,48
Cl—H(22 <sup>vii</sup> )	3,04	H(17)—H(27 <sup>iii</sup> )	2,72
Cl—H(24 <sup>viii</sup> )	3,11	H(18)—H(23 <sup>v</sup> )	2,76
Cl—H(25 <sup>viii</sup> )	3,13	H(19)—H(23 <sup>v</sup> )	2,46
H(13)—H(14 <sup>iv</sup> )	2,63	H(19)—H(21 <sup>iii</sup> )	2,65
H(15)—H(24 <sup>i</sup> )	2,67	H(21)—H(26 <sup>ii</sup> )	2,46
H(16)—H(23 <sup>i</sup> )	2,66	H(25)—H(26 <sup>ii</sup> )	2,72
H(16)—H(19 <sup>v</sup> )	2,86		

**Conclusion**

Cette étude a permis d'obtenir la conformation moléculaire de la chloro-3-décalone-2 et de montrer en particulier que la double liaison C=O modifie peu la conformation des cycles déduite de celle du cyclohexane.

Nous remercions Monsieur le Professeur Casadevall de nous avoir suggéré cette étude et Monsieur Mion pour l'intérêt qu'il a apporté aux résultats que nous avons obtenus.

**Références**

- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962). *ORFLS, A Fortran Crystallographic Least-Squares Program*. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- COREY, E. J. & SNEEN, R. A. (1955). *J. Amer. Chem. Soc.* **77**, 2505.
- COSTAIN, C. C. (1958). *J. Chem. Phys.* **29**, 864.
- ESCANDE, A. (1970). Thèse spécialité, Montpellier.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1952). Vol. I. Birmingham: Kynoch Press.
- MION, L., CASADEVALL, A. & CASADEVALL, E. (1968). *Bull. Soc. Chim. Fr.* p. 2950.
- MION, L. (1969). Thèse No. 852, CNRS AO 3428.
- ROMERS, C. (1956). *Rec. Trav. Chim. Pays-Bas*, **75**, 956.
- WAGNER, R. S. & DAILEZ, B. P. (1957). *J. Chem. Phys.* **26**, 1588.