Acta Cryst. (1972). B28, 2438

## Structure Cristalline du Ditellurure de Diphényle (C<sub>12</sub>H<sub>10</sub>Te<sub>2</sub>)

PAR G. LLABRES, O. DIDEBERG ET L. DUPONT

Laboratoire de Cristallographie approfondie et de Physique de l'Etat Solide, Université de Liège, B-4000 Liège, Belgique

(Reçu le 21 mars 1972)

The crystal and molecular structure of diphenyl ditelluride  $C_{12}H_{10}Te_2$  has been determined by threedimensional X-ray analysis. Crystals are orthorhombic and belong to the space group  $P2_12_12_1$ . The unit cell has dimensions a = 27.028, b = 8.703, c = 5.221 Å and contains four molecules. Three-dimensional intensity data were collected with a Hilger four-circle diffractometer. Positional and temperature factor parameters for tellurium and carbon atoms have been refined by Fourier and block-diagonal matrix least-squares methods on 1596 independent reflexions to a final R value of 0.073. The molecule has a non-planar configuration and the planes of the benzene rings are inclined at an angle of 20.1°. The Te-Te bond length is 2.712 Å ( $\sigma = 0.002$ ). The average of the observed Te-C bond distances is 2.115 Å ( $\sigma = 0.016$ ).

### Introduction

La détermination de la structure du ditellurure de diphényle s'inscrit dans le cadre général d'une étude entreprise sur des molécules formées par deux phényles reliés entre eux par O, S, Se ou Te.

Actuellement, il n'existe que peu de données cristallographiques sur les composés tellurés. Ce travail nous a permis d'obtenir la longueur des liaisons C-Te, Te-Te, et l'angle des liaisons C-Te-Te, avec une bonne précision.

La molécule n'est pas plane et les deux liaisons C-Te définissent avec la liaison Te-Te deux plans. Nous avons déterminé l'angle dièdre entre ces plans, qui est une des principales caractéristiques de ce type de composés. De plus, il était intéressant de comparer ce composé avec le disulfure de diphényle et le diséléniure de diphényle dont les structures cristallographiques sont connues (Lee & Bryant, 1969; Marsh, 1952).

#### Partie expérimentale

Le ditellurure de diphényle a été préparé par J. L. Piette (laboratoire de chimie organique de l'Université de Liège, Service du Professeur Renson). Les cristaux ont été obtenus par refroidissement d'une solution saturée de ditellurure de diphényle dans l'éther de pétrole 40-60.

Ils se présentent sous forme d'aiguilles allongées suivant l'axe c. Les paramètres de la maille unité ont été calculés par moindres carrés à partir de douze réflexions; la densité a été mesurée à l'aide de la balance de Berman. Les données cristallographiques et physiques sont reprises dans le Tableau 1.

Les intensités ont été enregistrées à l'aide d'un diffractomètre Hilger, les dimensions du cristal utilisé étaient de  $0,12 \times 0,16 \times 0,35$  mm. Nous avons mesuré 2796 réflexions indépendantes dont 1200 sont considérées comme inobservées  $[I < 2\sigma(I)]$ , les principales caractéristiques des mesures sont:

rayonnement du Mo  $K\alpha = 0,7107$  Å  $\theta < 20^{\circ}$  balayage  $\omega$  avec 80 pas  $20^{\circ} < \theta < 35^{\circ}$  balayage  $\theta/\omega$  avec 90 pas  $\Delta\theta, \Delta\omega = 0,01^{\circ}$ temps de mesure du fond continu: 20 sec temps de mesure d'un pas: 1 sec compteur à scintillation.

 Tableau 1. Données physiques et cristallographiques du ditellurure de diphényle

 C. H. To

$C_{12} C_{11} C_{10} C_{2}$	
P.M. 409,41	•
Maille orthorhombique	$a = 27,028 \pm 0,005$ Å
-	$b = 8.703 \pm 0.003$
	$a = 5221 \pm 0.003$
DO 0 0	$t = 5,221 \pm 0.005$
$P Z_1 Z_1 Z_1$	h00  h = 2n + 1
	0k0  k=2n+1
	00l  l = 2n+1
$V = 1228 \pm 4 \text{\AA}^3$	
Z=4	
$a_{\rm c} = 2.215 \ {\rm g. cm^{-3}}$	
$-2.22 \pm 0.01$ a sm $-3$	
$Q_m = 2,23 \pm 0,01$ g.cm <sup>-3</sup>	· -··· *-
$\mu = 48,7 \text{ cm}^{-1} [\lambda(Mo K\alpha) =$	=0,7107 A]
F(000) = 744.	

Les corrections de Lorentz et de polarisation ont été effectuées, mais pas celles d'absorption.

#### Détermination et affinement de la structure

Les coordonnées des atomes de tellure dans la maille ont été obtenues à partir d'une synthèse de Patterson tridimensionnelle.

Ces positions ont été ensuite affinées par moindres carrés jusqu'à une valeur du facteur d'accord  $R = [\sum ||F_o| - |F_c|] |/\sum |F_o|$  égale à 0,17. La synthèse  $(F_o - F_c)$  a permis de déterminer les positions des atomes de carbone.

Quelques cycles d'affinement avec les facteurs de température isotropes ont fait descendre le facteur R

jusque 0,12. La structure a été ensuite affinée avec des facteurs de température anisotropes suivant l'approximation des blocs diagonaux  $(3 \times 3, 6 \times 6)$ , avec les 1596  $F_o$ . La fonction à minimiser  $\sum W(|F_o| - |F_c|)^2$  a été pondérée suivant le schéma de Cruickshank (1961),

 $W = (a + |F_o| + cF_o^2)^{-1}$  avec  $a = 2F_{omin}$  et  $c = 2/F_{omax}$ . Le facteur *R* final est égal à 0,073.

L'ensemble des calculs a été effectué sur les ordinateurs IBM 360-65 et 360-50 du centre de Calcul de l'Université de Liège au moyen des programmes de

## Table 2. Facteurs de structure calculés et observés

L FO FC ALPHA	L FO FC ALPHA	L FG FC ALPHA	L FO FC ALPHA	L FU FC ALPHA	L FC FC ALPHA	L FJ FC ALPHA	L FO FC ALPMA
P. U. K. 0 2 674 743 F.0 4 6C7 717 18C.0C 4 91 25 18C.CC 4 113 57 0.0	2 313 330 0.0 3 352 364 270.00 4 251 244 140.00 4 140.00 5 140.00	5 213 215 264,97 6 263 287 82.67 H= 7, K= 1 0 1936 1961 90-00	He 24, K# 1 0 323 329 140.00 1 405 409 77.43 2 201 210 228.30 3 e1 19 247.20	6 138 119 287-13 8 118 92 200-98 H= 10, 34 2	** 2*, 2* 2 n 204 196 0.0 1 217 212 291.47 2 275 262 249.49	H+ 13, K+ 3 0 478 528 270.00 1 974 946 45,53 2 971 970 260-36	3 1202 1121 0.0 4 245 212 0.0 7 110 56 180.00 8 122 29 180.00
- 1, Kr 0 1 7e3 8e2 27C.cc	n 794 773 140.00 1 375 340 270.00 2 84 41 174.45	1 153 138 56.45 2 063 645 20.42 3 366 347 210.17 4 544 586 289.41	4 111 118 00.30 H- 25. K+ 1	1 1043 1696 272,39 2 1215 1326 277,35 3 306 346 59,74 4 152 174 286,06	3 120 134 20.71 5 129 70 20.04	3 169 364 68.04 4 149 141 241.43 5 251 248 248.47	0 1355 1218 90.00 1 406 414 11.72 2 446 588 118.20
2 326 342 040 3 768 205 277.30 4 557 641 180.00 6 337 377 180.00 H	4 192 171 0.0	3 324 332 20040 7 125 91 312,25 He A, Ke 1	1 130 124 156.70 2 257 254 16.59 4 225 224 308.87	+ 11, x+ 2	0 174 172 90,00 1 112 300 543.00 2 170 179 146.94 4 134 121 233.45	0 787 733 180.00 1 578 536 233.42 2 288 293 97.09	3 38 338 338 300.76 5 119 86 364.86 7 183 159 180.36
0 1260 1597 180.CC 1 944 1C98 27C.CC 2 438 469 180.CC	1 553 553 40.00 2 301 317 180.00 3 961 580 90.00	0 755 747 0.0 1 1146 1145 322,76 2 773 804 53,13 3 682 732 4,70 4 256 289 314,28	0 271 244 0.0 1 201 199 342.06 2 288 254 51.37	1 1287 1243 344.86 2 907 611 157.45 3 207 220 176.32 4 3c7 395 227.13	- 114 74 219,49	4 338 363 2.84 5 207 215 156.30	7 325 314 0.0 1 1036 922 176.76 2 272 238 68.81
3 930 1045 230.00 9 345 382 6.0 5 137 132 270.00 7 186 226 50.00	0 438 556 140.00 1 99 95 90.00 2 240 240 140.00 3 303 508 90.00	5 157 187 159,52 6 191 206 233-22 He 9, Ke 1	3 103 191 18.91 H= 27, K= 1 1 126 106 235.69	5 315 312 141.47 H= 12. X= 2 0 192 178 181.07	* 132 94 178.07 ** 31. ** 2 C 176 174 270.00	0 297 312 270,00 1 P67 857 186,29 2 648 640 193,07 3 199 206 166,66	3 546 488 153.94 4 528 488 269.86 5 122 125 37.73 6 279 264 267.80
3, 8+ 0 1 1416 1695 CC.07 2 144 149 180.00 3 1447 174C 50.00	* 21. K* 0 1 190 198 270.00 2 71 80 0.0	0 206 203 270.00 1 174 185 241.06 2 1019 1089 178.84 3 524 544 347.19 4 277 334 166.39	2 262 265 173.89 3 211 222 318.61 H= 26.5= 1	1 307 246 334,43 2 444 34 166,10 3 169 165 233.07 4 253 278 201.16 5 440 458 120.57	1 185 175 197.06 2 152 196 320.37 3 123 96 58.06	• P9 97 30.80 9 127 126 41.08 • 160 175 10.16 • 10. 1. 3	
4 89 90 180,00 5 121 145 270,00 Pe 4, K+ 0	1 223 251 270+00 4 213 224 0.0 + 125 105 0.0 7 119 14 90.00	5 146 149 6.22 7 115 155 174,50 4 120 14 242,31	1 359 349 232.16 2 133 128 219.01 3 177 145 200.52 4 105 100 206.82	H= 13, K= 2 0 357 340 270.00 1 1008 1010 124.24	C 130 114 180.00 1 145 149 121.60 2 149 147 84.07	0 820 837 0.0 1 146 142 347.68 2 449 457 93.24 1 247 24 24 59	3 344 311 279.03 4 401 545 90.12 5 94 82 112.61
c 1443 1759 140,00 H 1 341 222 ch,nn 2 522 542 184,00 3 1074 1243 ch,nn 4 139 184 0,0	• 24, x= 0 C 487 977 0.0 1 741 287 90.00 2 200 225 0.0	0 702 755 140.00 1 984 1140 219.21 2 543 666 164.30	Her 29, K- 1 0 271 245 270.00 3 199 194 132.52 4 102 5 104.73	2 #27 #43 337.14 3 314 310 41.57 4 257 261 338.43 5 232 229 33.77 7 167 49 167.53	H- 0, K- 3 1 998 854 90.00 2 1006 869 270.00 1 800 755 270.00	4 420 425 151.00 5 172 134 354.44 H= 17, E= 3	0 343 361 0,0 1 951 874 171.51 2 444 410 302.25
5 01 34 00.00 7 368 222 230.00 9 0, 80 0	- 143 140 140.00	4 304 371 204.18 5 239 258 32.81 4 130 31 3114.55	H+ 30, X+ 1 0 194 192 180.00 1 217 233 80.75	- 14, E+ 2 - 446 448 180,00 1 810 816 101-13	4 444 616 270.00 5 255 257 270.00 7 1+2 172 90.00	0 756 737 00.00 1 432 433 293.35 2 000 010 03.04 3 277 287 271.86	+ 363 358 98.58 5 97 86 274.28 + 200 201 86.73
1 721 742 264,54 2 144 154 129.00 3 625 713 270.00 6 555 626 7.0	2 161 200 0.0 3 277 254 273.00 4 153 150 180.00	0 1538 1618 270+00 1 163 185 5-92 2 466 476 328-53	2 112 111 251.52 	2 991 1015 93.23 3 218 209 228.17 4 303 316 52.09 5 249 255 325.05	0 1240 1161 270.00 1 1222 1109 48.45 2 447 754 366.39	He 18, Ke 3 0 190 81 180.00 1 500 505 57.39	0 1181 1046 90.00 1 419 398 149.10 2 243 232 49.65
5 147 164 C	C 473 457 180.00 1 3C1 272 270.00 1 218 175 270.00	4 354 404 76.28 5 300 332 118.30	1 116 102 134.17 2 121 134 10.72	++ 15, k+ 2 0 57 76 270,00	• 10* 77 1#1.68 • 348 333 249.84 • 160 162 147.65	3 343 352 297,65 4 267 277 246,71 5 96 106 276,28 7 123 84 90,71	4 371 353 250.67 7 163 156 3.52
1 279 274 50.00 2 279 274 50.00 4 528 545 5.0 H 6 651 777 180.00	• 2*• #• 0 1 301 310 90-00	0 432 438 180.00 1 1451 1590 86.14 2 645 679 260.19 4 327 355 73.12	0 174 166 0.0 1 104 93 327.83 2 171 104 51.21	1 120 101 122.14 2 455 459 61.04 3 199 207 255.13 4 343 348 75.66 5 221 246 270.38	U 1844 1649 180.00 1 893 736 252468 2 833 740 7244	He 19. K- 3 N 320 312 270.00 1 584 600 43.65	0 711 605 180.00 1 1325 1213 359.67 2 374 335 115.83 3 1047 971 354.68
1 200 854 270.00 2 321 333 0.0 H 3 594 778 270.00	2 234 234 [aning 3 325 316 40.00	13, K+ 1	0 1056 890 180.00 1 1617 1295 0.0 2 1179 931 160.00	H= 10, K+ 2 C 324 927 0.C 3 684 717 285+36	5 702 720 156.61 4 62C 501 13.56 5 316 316 164.62 H- 3, K- 3	2 211 210 267.84 3 260 277 73.25 5 169 189 249.25 ma 20, 54 3	4 170 142 357.52 5 142 109 177.38
* *** *** 1#0.Cr = 12< 372 1#0.CO N# #. ** 0 M	n 174 341 140,00 2 153 155 140,00 3 249 231 90,00 * 29, 6* 0	0 1349 1488 90.00 1 269 268 130.18 2 572 598 14.13 3 259 287 225.57	3 243 260 150.00 4 476 441 180.00 5 601 547 150.00 6 117 132 0.0	2 477 614 297.52 3 210 252 37.59 4 116 57 271.42 5 144 163 44.58	0 279 246 270.00 1 1613 1252 175.03 2 17.1 1082 186.15 3 215 179 107.66	0 397 383 180.00 1 343 363 246.06 2 170 155 61.65 3 378 393 148.83	0 1175 1037 90.00 1 317 305 83.05 2 343 379 133.63 3 631 593 11.59 4 268 271 296.99
C 1475 1507 179,99 1 208 248 230,00 2 203 189 187,00 3 540 734 270,00 4 354 435 0.0	1 178 130 270.00 2 100 41 0.0 3 120 19 270.00 4 141 147 0.0	5 231 220 265.66	1, x 2 0 576 495 270.00 1 2313 2080 175.25 2 1442 1279 139.23	++ 17, K# 2 0 292 279 60.00 1 252 273 550.03 2 520 538 163.09	4 213 202 4.26 5 140 172 12.03 6 292 203 1.41	4 202 194 4,22 5 165 166 147,96 He 21, Ke 3	6 129 110 330.98 7 151 150 181.66 Ma 8, Ka 4
7 145 184 40.00 H	= 30, 8+ 0 0 405 405 5,0 1 212 217 50,00	7 614 637 7.0 1 714 746 329.75 2 687 713 41.44 3 445 143 2.34 4 192 151 322.21	3 354 344 8,70 4 403 368 312.46 5 347 338 34.63 6 108 114 143.44	3 132 146 221.94 4 276 275 230.42 5 213 147 141.18 H= 14, X= 2	n 1700 1494 n.n 1 653 570 325.12 2 749 074 100.08 3 411 554 29.58	0 286 240 270.00 1 427 437 140.14 2 392 383 196.04 3 92 93 202.98	0 217 274 0.0 1 649 623 166.24 7 200 169 52.38 5 576 557 150.08 4 662 449 258.74
2 252 267 100.00 3 1123 1227 50.00 4 89 75 120.00 H 7 115 65 270.00	2 106 106 3.0 • 33. K- 0 1 100 91 270.00	5 107 104 148.07 6 141 161 214.93 He 15. 4. 1	He 2, Ke 2 0 576 460 180.00 1 1967 1727 93.78 2 1653 1525 73.43	1 314 321 345,73 2 256 262 145,34 3 142 157 257,19 4 163 163 166,88	4 A67 676 167,74 5 745 248 18,52 P* 5, K* 3	H= 22, K= 3 ^ 516 517 0,0 1 138 132 11.89 2 241 242 109,89	5 131 130 34.33 6 216 204 274.72 9, x= 4
P= 1", K= 0 1 V5C 1226 149.0C 2 766 336 140.0C H 3 765 471 50.00	2 116 96 0.0 3 124 133 270,00 - 32, ** 0	0 85 83 270.00 1 277 273 248.21 2 756 835 173.93 3 547 584 332.57 4 260 279 163.73	3 244 222 283.22 4 412 395 05.39 5 311 297 317.37 6 145 159 238.04	5 261 249 177.39 7 114 52 144.80 H= 10, 4= 2	n 1107 1210 20,90 1 941 #26 306.31 2 948 796 40.28 3 560 533 274.81 4 97 50 124.85	3 125 143 19.16 • 266 281 144.45 5 138 99 357.23 23, K+ 3	1 345 417 299.11 2 343 395 276.09 3 170 185 252.01 4 430 509 88.88 5 117 85 152.58
- 4 256 305 C.0 7 173 180 270.00 8 113 13 180.00 H	t 140 135 270.00 • 0.00 1 1 2253 2124 co.ne	5 169 151 360.39 7 126 123 178.79 He 10, Ke 1	H+ 3, K+ 2 0 458 364 90.00 1 298 232 157.57 2 873 728 79.62	n 325 321 270.00 1 704 738 172.22 2 493 517 375.15 3 232 240 37.26 5 115 134 22.35	5 207 272 104.44 + 200 143 210.76 H+ 0, 44 3	n 447 443 90.00 1 184 191 280.50 2 368 388 36.89 3 172 172 271.17	He 10, Ke 4 0 353 352 0.0 1 544 518 172-80
1 #37 #42 27C.CC 3 571 541 270.CC 4 #75 511 0.C	2 1151 1724 270.00 3 156 334 270.00 4 432 451 90.00 5 204 211 270.00 6 254 345 50.00	n 120 122 180.00 1 872 928 220.37 2 374 396 191491 3 445 474 193.74 5 235 255 208.06	3 149 180 201.01 4 661 638 46.18 5 399 302 271.13 6 174 162 785.00	He 20, Ke 2 0 233 233 140.00 1 519 573 119.55	n 114 33 9,0 1 855 195 74,47 2 951 957 240,40 3 755 704 277,47 4 438 424 272,90	4. 24, K. 3 1 233 243 43.22 2 296 296 291.90	2 408 395 298.11 3 558 542 203.43 4 421 421 99.41 6 243 231 87.17
не 12, ке ( н 0 2340 2584 С.0 1 540 557 95.00	• 1, *• 1 ^ 1924 1770 50.00 1 329 257 292.32	3 103 200 33.40 6 102 #7 317.32 4. 17, K. 1	H= 4, ET 2 0 158 133 180.12 1 1638 1446 272.26 7 1777 1215 285.87	2 5C2 542 72.78 3 155 133 224.68 4 214 261 48.72 5 146 154 320.06	4 105 174 262.28 7 120 137 84.00 H= 7, 8= 3	3 203 203 107.12 4 158 177 249.07 25, 8- 3	H= 11, X0 4 0 964 852 90,00 1 415 377 141.38 2 208 211 20.67
2 555 612 f.d 3 143 146 270.0C 4 555 624 180.0C 5 112 41 f.0	2 064 078 30.68 3 542 535 218.31 4 660 671 287.38 5 472 454 267.64 7 108 100 324.49	0 871 907 277.00 1 249 263 24.70 2 290 288 315.41 3 394 411 134.01 4 230 255 95.01	3 242 284 60.60 4 267 212 306.85 5 353 362 41.16 6 172 175 117.77	++ 23, x+ 2 C 114 117 50.00 1 133 01 124.75 2 221 243 50.50	C 1146 1014 270.00 1 1261 1147 56.33 2 775 716 309.14 3 424 404 74.34 4 40 80 225.47	0 199 183 270.00 1 325 350 36.89 2 92 111 268.77 3 190 177 69.38	3 454 440 172.63 4 258 288 246.51 7 126 124 356.49
He 13. KH C H 1 543 ens 270.00 2 140 157 C.0	* 7, K* 1 ^ 643 555 0.0	5 236 242 113,39 He 18, Ke 1 1 745 778 86.28	H= 5, K= 2 0 280 225 90.00 1 1443 1702 352.67 2 1102 109 191.22	4 220 240 27,87 5 157 143 281.93 +* 22, ** 2	5 111 131 251,38 6 124 112 141,70 H# #, K# 3	++ 20, 5 3 0 235 243 180.00 1 245 249 242.00 1 258 262 147.78	n 472 456 180.00 1 924 856 0.41 2 355 349 114.79
4 404 424 120.00 6 308 310 120.00	2 730 706 28.70 3 744 790 2.55 4 257 271 327.83 5 248 257 135.66	2 445 459 240.81 3 118 131 276.01 4 224 219 71.63 5 111 143 231.97	3 293 281 192.57 4 451 449 230.12 5 282 299 146.48 6 140 130 40.74	C 273 272 C.C 1 473 482 281.45 2 530 534 283.28 3 135 104 10.44	0 1162 1076 183,00 1 679 864 244,66 2 445 407 86.37 3 739 720 142,21	4 130 103 10.22 5 122 101 143.26 6 123 2 150.80	4 158 152 12.84 He 13, 54 4
0 +00 712 100.00 1 355 371 270.00 + 2 100 100 100,00 3 571 405 270,00	• 3, 4• 1 • 110 ve 0^.00	He 19, Te 1	H+ 6. 5- 2 1 592 552 0.48 2 630 613 189.35 2 630 613 189.35	ne 23, Ke 2 0 145 133 50.00 1 538 552 346.48 2 313 314 101.38	5 227 235 152.14 He 9, ke 3	0 195 220 270.00 1 269 268 189.94 2 221 203 201.30	1 110 110 62.94 2 351 334 119.42 3 468 444 15.55 4 169 147 268.86 5 109 70 30 30
4 532 374 5.7 7 135 145 50.00	2 1420 1533 170.02 3 851 870 15511 4 401 440 177.45 5 141 103 350.11	3 104 00 201.43 4 344 370 304.02 5 175 183 270.54	4 324 313 147.14 5 500 510 177.28 8 122 70 3.24	3 100 A0 253.52 4 234 235 241.65 5 142 120 138.02	1 1106 1247 185.44 2 684 788 179.28 3 197 225 188.69 4 66 84 52.32	H- 28, K- 3 0 236 241 0.C 2 160 140 103.00	• 14. E. 4 0 153 171 0.0
1 1000 1120 00.00 2 342 394 190.00 3 920 1000 50.00 H	- 4, K- 1 - 424 376 0.0	1 371 360 341.63 2 380 389 97.09 3 325 316 11.19	0 145 125 270.00 1 1843 1434 179.00 2 1128 1054 339.09	C P3 68 14C.0C 1 171 1C7 354.PR 2 236 223 100.07	6 236 220 7.70 H+ 10, K+ 3	He 29, Ee 3 0 277 277 90.00	2 136 118 354.27 3 375 364 149.29 4 357 376 263.83 5 109 130 25.56
0 x26 £14 180.00 2 427 447 180.07 3 610 £55 50.00 4 113 115 7.0	2 747 75# 165.89 3 733 75# 165.89 4 745 28# 212.51 5 274 798 35.17	H+ 21, K+ 1 1 173 170 237.34 2 517 520 176.62	4 301 306 320.30 5 303 318 28.79 6 156 129 144.65 7 114 84 165.36	5 173 167 175.84 No 25, Ko 2	1 201 257 364.45 2 457 402 74.18 3 438 446 24.36 4 530 544 154.03	2 227 225 30.78	- 13. K- 4
- 124 135 270,40 	• 101 140 308.53 • 5, 4+ 1 • 1771 1728 270.00	He 22, Ke 1	H- 8, K- 2 0 281 280 180.00 1 1062 1024 108.24	1 424 432 149.02 2 265 372 326.26 3 165 172 54.05 5 113 75 42.29	H= 11, K= 3	2 143 138 288.09 3 147 127 316.32 He 31, Ke 3	2 502 293 284.11 3 192 186 244.69 4 350 334 48.68 5 111 93 149.15
3 375 310 270,00 4 325 350 0,0 6 140 176 0,0 24 14, Ke 0	1 CP2 200 350.17 2 CP2 200 350.17 3 S53 589 136.12 4 699 522 75.01 5 326 334 113.70	1 072 075 210,04 2 241 247 196,10 3 256 255 187.27 4 140 154 214,17 5 123 120 33,12	c 12vv 1316 83.75 3 352 332 257.23 4 850 367 51.35 5 324 334 323.52 6 148 124 236.97	HE 20, Ke 2 0 128 127 180.00 1 373 347 127.44	1 920 114 914 914 914 914 914 914 914 914 914	0 99 113 270.00 1 195 188 34.15 4 120 43 235.94	He 16, 8e 6 0 200 160 0.0 1 3e3 372 173.59
1 35# 372 \$0.00 2 269 311 0.0 H 4 517 376 183.00 5 125 112 270.00	7 105 104 23.49 • 6. K# 1 • 140 135 187.00	He 23, Ke 1 1 224 230 25.47 2 210 200 320.02	He 9, K- 2 0 224 216 270.00 1 09 75 134.19	2 306 320 76.35 4 173 173 49.18 5 116 41 323.49	u 176 176 208.22 He 12, Ke 3 1 563 503 70.96	0 127 103 180.00 3 137 144 139.33	2 241 279 275.15 3 393 386 209.41 4 227 229 93.66 6 137 170 96.22
P+ 25, 5+ 0 1 324 345 270,00	1 1688 1737 91.60 2 982 905 255.45 4 172 184 271.12 4 354 384 85.77	3 248 300 133.55 4 114 134 84.96 5 140 150 116.86	2 614 675 89.03 3 179 199 254.51 4 349 404 86.59 5 340 353 267.92	2 141 177 84.61 4 132 137 65.18 5 114 91 271.22	2 7C1 65# 272.44 3 644 632 283.82 4 371 390 247.84 5 125 139 270.40	H+ N, K+ 4 N 833 768 180,00 1 1337 1310 0+0	H+ 17, X+ 4 0 474 463 90.00 1 323 317 144.91

Ahmed, Hall, Pippy & Huber (1966). Les facteurs de diffusion sont ceux calculés par Hanson, Herman, Lea & Skillman (1964).

Les valeurs des facteurs de structure, calculés et observés, sont reprises dans le Tableau 2.

## Description de la structure

Les coordonnées atomiques et les paramètres d'agitation thermique sont donnés avec leurs déviations standards dans le Tableau 3.

Tableau 2 (suite)

L PO FC ALPHA	L FO FC ALPHA	L FC FC ALPHA	L FO FC ALPHA	L FU FC ALPHA	L FO FC ALPHA	L FC FC &LPHA	L FO FC ALPHA
H 17. K 4 H	6, K= 5	1 183 167 221.34 2 302 309 82.94 3 164 176 244.99	3 135 136 144.55 4 307 294 352.53 5 121 90 149.62	+= 4, K= 7	3 104 81 114.68	3 169 192 305.91	0 309 326 90.00
4 213 225 242.56	1 200 220 238.79 2 1066 976 92.73	H= 25, K= 5	H= 13, K= 6	1 536 516 324.92 2 405 390 216.07	0 271 266 0.0	0 260 270 270.00	2 251 249 142.17
0 429 400 180.00 1 541 539 5.28	5 554 504 268.78 4 161 184 75.80 5 99 61 255.69	1 261 275 148.19 2 136 120 150.74	2 679 669 189.56 3 162 180 299.40	4 123 67 3.82 5 160 191 165.73	H= 27, E= 7	3 165 161 27.50	1 350 372 208.00
2 340 343 101.86 3 505 526 359.16 4 105 99 23.24	6 124 125 255.79 7 145 115 85.78	3 153 175 87.00 4 137 131 121.14 5 117 40 341.03	- 14, K- 0	H0 5, K0 7	1 110 124 340.69 4 110 94 206.01	0 368 387 180.00	H= 13, K= 9
H= 19, K= 4	0 212 220 270+00	H= 26, K= 5	1 760 754 260.94 2 267 267 119-18	C 507 501 40.00 1 534 517 133.93 2 164 139 308.55	н- 28, 4- 7	3 188 189 104.45 4 142 117 354.43	0 260 290 270.00
0 534 552 50.00 2 246 254 126.17 3 392 396 16.34	1 900 836 136-13 2 426 389 101-60 3 606 594 73-87	0 209 297 180.00 2 133 141 229.20 3 123 125 52.55	6 224 234 160.72 5 125 139 60.31	3 425 416 75.25 4 335 342 262.41 5 115 110 58.00	H= 29, K= 7	H- 19, K- 8	4 106 85 124.31
4 126 133 311.7C	4 351 325 122.64 5 115 130 347.44 6 157 129 230.17	H= 27. K= 5	H= 15, K= 6	n. 6. K. 7	1 157 145 134.97 3 109 118 00.10	1 122 128 95.19 3 171 197 143.03	1 130 165 123-30
0 145 131 0.0 H- 1 321 341 166.81	0, K- 5	0 199 204 90.00 1 236 235 353.68 3 112 48 176.45	0 127 110 90.00 1 235 244 242.27 3 100 89 127.78	1 522 509 53.64 2 548 551 92.88 3 177 158 111.70	H= 30, K= 7	H= 20, K= 8	3 [61 ]78 205.60
3 179 180 146.38 4 222 233 263.70	0 1372 1260 180.00 1 96 114 154.41 2 633 596 241.17	H= 28, K= 5	5 251 254 91.27 H= 16, K= 6	0 124 107 274.14 += 7, K= 7	0 105 76 180.00	1 168 150 55+41 3 120 109 46-92	1 161 165 160-05
m 21, X= 4	3 368 305 78.53 4 231 212 346.89 5 247 249 10.34	0 239 251 0.0 1 121 124 54.83 2 141 138 290.75	0 177 192 100.00	0 487 459 270.00 1 414 343 245.92	n 146 147 0.0	4 111 113 127.41 He 21. Ke 8	3 110 119 144.65
1 270 279 327.23 2 269 273 274.68 H- 3 189 184 236.67	• •, *• •	4 113 86 228.38 He 29.54 5	3 162 174 295.01 5 107 117 286.10	3 354 338 283.50 4 372 371 63.59	н. 0, к. я	0 271 272 90.00	C 108 118 180.00
4 183 202 85.40 22, K- 4	0 156 161 90.00 1 887 1037 356.22 2 75 88 183.40	1 108 87 244.60 2 133 129 307.90	H 17. K- 6	- R. X. 7	1 340 347 180.00 2 208 182 180.00	3 161 157 277-02	2 108 105 70.39 3 152 142 346.73
0 143 158 0.0 1 182 180 158.27	4 296 304 343.33 5 197 203 170.65	4 114 30 241.18	1 275 282 49.67 2 534 532 3.46	1 421 407 215.29	4 211 218 0.0	0 153 141 0.0	5 123 49 288.90
2 152 180 20045 3 245 254 202.94 4 135 103 106.23 H	• 10, *• 5	1 109 100 225.69	4 169 167 340.37 5 117 124 242.42	4 136 111 160.75 5 192 184 359.4C	0 339 343 270.00	3 131 128 307.01	0 298 305 90.00
- 23, x= 4	C 1130 1087 0.0 1 293 281 58.20 2 573 589 27.60	3 153 112 226.16 4 130 40 55.56	→ 18, <= 0 2 228 229 0.30	No 9, 51 7	3 341 356 139,94 4 182 170 23.72	0 119 106 270.00	2 107 100 137.57
0 323 344 90.00 1 255 254 165.35 3 190 204 164.04	3 184 186 90.23 4 283 282 203.74 5 238 252 180.50	H= 31, K= 5 1 131 141 144.25	* 176 207 347.14 H* 19, 5* 6	1 377 419 353.36 2 236 259 181.44 3 267 271 188.95	H+ 2, K= 8 C 403 415 0.0	H= 24, K= 8	0 127 116 0.0
4 59 120 243.21	• 11. *• *	H= 32, K= 5	0 108 124 270.00	4 254 279 185.39 5 111 91 183.76	1 282 258 37.78 2 149 147 322.14 3 278 30# 56.77	1 149 173 224.53 2 110 80 194.29 3 126 117 158.00	4 130 101 244.98 H= 19. K= 9
0 218 215 100.00	1 708 680 222.06 2 492 468 285.20 3 510 501 282.28	0 150 146 180.00 H= 0, K= 8	3 157 145 275.31 5 109 108 298.74	+= 10, K+ 7 0 549 541 180,00	4 178 193 138.15 e 123 105 90.86	H= 25. K= B	0 224 218 270.00 1 161 191 330.27
2 252 270 1C2.64 3 294 252 356.09	4 213 216 242.18 6 136 150 142.60	2 532 489 0.0 3 127 112 180.00	H= 20, K= 6 0 224 238 0.0	1 432 415 320.01 2 334 349 266.59 3 235 234 325.44	H= 3, X= 4 C 66C 6C9 90.00	n 124 112 270.00 3 148 121 135.43	2 151 149 215.32 He 21, Ke 9
N= 25, K= 4 H	- 12, K- 5 1 236 222 240.85	4 392 388 040 H= 1, K= 6	1 511 501 279.05 2 149 145 125.80 3 90 98 140.28	9 199 186 169,95 ++ 12, x+ 7	1 424 400 200,77 2 184 186 62,65 3 422 422 271.42	He 20, K- 8 1 107 133 65-14	1 138 145 149.40 2 193 212 352.94
2 172 156 115.08 3 245 244 5.57	2 642 747 86.63 3 446 447 249.09 4 163 170 76.26	0 74 62 270.00 1 459 411 167.60	+ 158 Lot Lov.03	0 388 380 50.00 1 434 428 119.55	4 [75 ]64 276.77	H. 27. K. P	H1 22, 84 9
He 20, Ke 4	• 13, K• 5	2 1108 1047 188.86 4 192 171 191.27 5 214 230 296.26	1 113 85 270.92	2 101 75 318.70 3 404 367 85.86 4 255 249 266.55	r 502 504 0.0 1 194 178 350.11	2 119 119 26-01	2 105 102 77.84 H= 23, K= 9
5 132 70 17.45	2 378 371 106.50	H= 2, K+ 6	H= 22. K= 6	6 112 44 13.25	3 271 265 302.23	C 114 105 C.O	0 155 165 90.00 2 136 123 135.98
0 442 443 270.00	5 111 106 340.61 6 121 86 228.99	0 182 185 0.0 1 1197 1123 268.04	0 178 202 180+00 1 332 342 74+28 2 141 143 210-27	C 144 113 187.00	H- 5, K- R	HE 29, KE 8	H4 24, K4 9
2 150 164 279.33 H 4 124 105 80.05	• L6, K= 5	3 216 202 106.09 4 246 239 160.19 5 179 196 70.63	3 112 106 320.01 5 126 80 204.06	2 430 437 92.02 3 159 163 64.87	1 252 250 70.91 3 304 335 27.32 4 152 200 156.77	w. 30, K. 8	H= 25, K= 9
HE 27, 24 4	2 451 445 224,44 3 321 334 68.07 4 141 128 12.95	6 133 71 327.51 He 3.6. 6	H= 23, K= 6 3 205 180 57.65	H- 13, K- 7 D 513 507 270.00	H+ 6, K+ 8	1 137 113 239.99 3 141 64 163.91	0 121 122 270.00
2 117 123 200.94 3 190 170 202.04	5 214 231 10.62 6 115 5# 54.88	0 298 268 90.00	2 325 324 358.31 3 98 90 97.73 4 119 110 332.25	L 202 274 249.03 2 216 188 25.30 3 246 237 2*1.19	C 769 780 180.00 1 295 308 204.97 2 127 114 185.10	H= 0, K= 9 1 406 422 270.00	0 109 74 180.00 2 113 80 84.00
He 29, K+ 4 H	• 15, K+ 5 1 822 790 358.17	2 107 100 102.20 3 88 73 149.25 5 401 398 90.46	H= 24, K= 6	• 208 200 57.00 5 104 71 279.91	3 325 310 171.08 4 221 243 3.75 e 104 22 12.23	3 184 176 90.00 4 138 159 270.00 5 159 145 90.00	H= 0, K= 10
1 131 140 161.19 3 110 165 174.11	3 180 189 191.28 4 212 204 343.01 5 121 141 163.73	H= 4, 4 0	2 192 196 0.52 4 122 132 339+84	No 14. Ko 7 U 692 690 7.0	··- 7. K- B	H+ ], K+ 9	3 112 83 0.0 5 146 178 0.0
H- 30, K+ 4 0 150 135 180.0C H	e 127 148 353.05 = 14, K= 5	0 87 74 140.00 1 1031 973 90.12 2 500 479 210.38	H= 25, K= 6 0 134 145 270.00	1 236 240 210.19 2 431 452 313.06 3 128 157 207.93	1 382 380 270.00 1 172 151 105.74 2 164 172 235.37	0 432 453 270.00 1 126 156 306.54 2 345 364 211.36	1 409 428 352.07
1 138 162 350.10 2 201 194 110.56 3 162 156 1.67	1 279 291 55.91	\$ 271 255 290.90 \$ 270 202 182.59 \$ 241 210 280.49	1 124 101 213.03 2 219 261 164.32	** 15, K* 7	3 344 334 141.75 • 130 112 20.54	5 143 157 89.41 H= 2. K= 9	2 133 116 74,30 H= 2, k= 10
H= 31, K+ 4	3 150 161 74.94 4 217 228 214.07 5 184 174 187.68	H- 5, K- 6	0 171 174 0.0	2 159 155 176.40	n 376 311 0.0	1 299 303 135.86 2 124 128 176.88	2 371 389 271.77 4 138 121 280.41
0 140 172 50.0C 2 137 104 108.49 H	- 17, K- 5	2 1010 945 351.93	3 106 54 182.54 4 148 106 154.28	N= 1c, K= 7	2 122 116 297.44	4 162 145 156-15	M 3, E- 10
1 304 270 270.00	2 282 285 308.83	5 227 216 245.54	H# 27, K= 6	0 324 334 140.CC 1 349 353 354.41	K+ 9, K+ A	1 239 245 163.37	H= 4, K= 10
2 1244 1147 50.00 3 429 455 270.00 4 336 339 50.00 H	- 14, 4- 5	1 122 102 24.81	2 47 22 117444 HM 28, R+ 6	3 140 173 310.09 5 150 151 165.04	C 675 690 90.00 1 403 604 260.76	3 160 157 172.15	2 345 371 41.66 4 138 111 71.50
7 131 121 50.00	0 165 156 180.00 1 252 256 229.23	3 134 120 118.86 4 380 365 351.40	0 143 164 180.00 1 184 192 70.30 2 110 103 200.92	P+ 17, K+ 7	3 352 369 207.25 4 116 116 282.68	0 156 156 180.00	H= 5, K= 10 1 408 455 179.79
1 919 842 135-12	3 289 305 244.24 4 156 149 63.21	He 7, Ke 6	3 114 90 328,78	1 337 331 138.59 3 313 324 62.98 5 160 165 285.33	H. 17. K. A	2 128 117 52-11 3 218 221 344-04 4 132 128 32.76	2 98 95 104-18 3 111 95 15-97
3 705 637 79.35 H 4 366 355 123.30 5 104 124 354.09	• 19, K• 5 0 193 198 270.00	0 181 188 270.00 1 230 198 164.68 2 916 874 176.92	1 113 106 70.50 2 160 179 10.63	** 18, K* 7	1 147 145 16.35 2 138 158 42.12 3 237 258 302.32	H= 5, K= 9	H= 6, K= 10 5 136 164 358.31
6 105 104 227.45	1 401 410 137.36 2 176 157 132.38 3 291 279 46.21	3 139 117 305.83 4 177 146 160.06 5 188 194 303.84	3 105 71 88.76 H= 32, K= 6	C 165 162 18C.CC 1 285 1CH 1CH.56 2 255 281 1C3.G5	4 137 114 237.29 He 11, Kr A	n 383 389 90.00 1 186 198 50.25 2 290 390 139.69	H+ 7, K+ 10
0 1662 1520 180.0C 1 285 260 154.81 H	• 173 188 121.86 • 20, K+ 5	6 129 114 12.67 H= 8, K= 6	1 189 161 255.25	3 110 106 100.37 19, Kt 7	C 300 311 270.00 1 218 199 64.00	5 151 144 279.6F	0 103 133 90.00 1 346 378 353.60 5 124 82 169.76
2 720 846 244.23 3 510 488 62.25 4 322 308 344.46	n 596 598 180.00 1 87 96 241.00	0 206 218 0.0 1 1057 992 265.24	He D, Ke 7 1 585 559 90.00	C 184 190 279.00 1 165 176 249.78	3 240 251 30.53	1 361 378 271.34	H. 8. K. 10
5 338 317 5.45 7 144 84 306.26	2 270 273 221.34 3 221 229 52.21 5 141 132 19.00	2 362 348 117.92 3 181 179 88.99 4 262 247 162.48	2 502 483 90.00 3 163 144 90.00 6 141 137 270.00	2 141 148 24.12 2 166 156 264.24 4 216 215 54.01	0 610 605 150.00	4 156 164 258.01 5 143 136 70.07	2 321 325 272.47
H= 3, K= 5 1 1297 1174 355.22	- 21. ** 5	5 162 160 73.59 He 9, Ke 6	H+ 1, K+ 7	×= 20, K= 7	1 246 234 214.77 2 119 126 199.54 3 232 235 167.74	H= 7, K= 9 0 409 409 270.00	H= 9, K= 10 2 199 190 270.15
2 203 196 131.15 3 440 404 176.96 4 344 321 357.72	0 189 183 90.00 1 412 402 352.48 2 92 96 104.27	1 268 323 270.73 3 72 73 82.07	0 484 445 270.00 1 488 465 235.52 2 262 228 25.19	0 463 466 C.O 1 139 136 153.46 2 237 259 307.87	+ 167 180 355.63 H= 13, K= 4	1 216 212 307.32 2 262 275 220.00 5 132 130 99.59	H- 10, K- 10
209 214 173.01 6 205 213 0.09	5 146 146 184.09 4 160 154 334.78 5 106 100 151.13	7 314 333 89.02 H- 10.5- 0	3 303 482 294.30 4 396 388 63.20 5 110 83 293.19	H= 22, K= 7	0 232 238 270.00 1 196 192 100.04	HP 8, 59 9	2 296 330 87-51
0 1428 1337 0.0	. 22, 1. 5	0 192 195 180.00 1 837 800 85.19		2 122 107 189.30 4 145 153 196.92	He les Ke 8	2 105 96 189.24 3 233 224 201.46	1 315 341 181-10
2 722 688 3C0.56 3 296 282 98.97	1 220 222 54.30	2 414 410 231.02 3 294 294 297.02 4 154 139 204.42 5 117 146 272.4	1 561 556 211-08 2 472 462 315-17 3 283 379 207.04	N# 22, K# 7 0 191 203 180.00	C 230 238 0.0 1 176 141 57.22 3 168 174 43.14	4. 14. K. 9	H= 13. K= 10 1 275 120 140-47
5 304 245 177.76 6 105 99 124.01	5 110 129 188.30	H= 11, K= 0	5 189 192 10.98	1 249 227 314.61 3 140 107 322.52	+ to2 140 138-10	1 191 188 104.01 2 404 430 350.22 3 138 130 169.41	3 104 94 205.59 5 114 72 174.86
N= 5, K= 5	0 162 115 270-00	1 375 329 55.83 2 764 750 2.02 4 199 207 343.02	H= 3, K= 7 1 501 553 351-33	H= 23, K= 7 C 118 102 50.00	0 439 456 90.00	H= 10, K= 9	H= 14, K= 10 2 245 256 276-61
1 807 745 232.72 2 354 340 287.27 3 710 664 289.07	2 193 176 317.01 3 217 231 300.54	5 164 180 242.03 He 12. 44 6	2 282 277 204.44 3 279 277 187.50 4 356 353 185.62	1 214 222 139.95 3 172 208 65.51	2 181 189 32.57 3 250 266 278.37	0 97 77 180.00 1 277 283 43.37 2 167 157 57.54	H= 15. K+ 10
4 203 259 240.85 H 5 108 118 2.39 6 173 162 138.07	- 24, K+ 5 C 105 110 180.00	i 80 25 1.41 2 287 282 3.41	5 122 105 187.72 6 107 82 175.70 7 127 83 0.92	}= 24. KF 7 1 183 185 112.91	H= 16, K= R C 217 228 0.0	3 190 198 343.62 4 123 153 26.85	2 116 144 203.99 H= 10. K= 10

2440

Tableau 2 (suite)

L FO FL ALPHA	L FC FC ALPHA	L FC FC ALPHA	L FO FC ALPHA	L FO FC ALPHA L FO FC ALPHA	L FC FC ALPHA L	FO FC ALPHA
H= 16, K= 10	1 119 42 15.74	H= 4, K+ 11	H# 9. K# 11	0 236 266 0.0	0 269 302 0.0 He :	17. 4. 12
-1 108 79 225.81 2 213 238 52.87	H. 28, F. 10	1 144 129 159.14 2 102 88 333.52	2 154 174 4.90	H= 1, K= 12	3 109 101 178.06 2	113 9 208.64
He 17. Ke 10	C 125 39 190.00	* 113 132 334.08	3 114 101 13+21	f 119 102 270.00     he 17. Ke 11 3 114 90 237.18     h	не 7, Ке 12 не	18. K- 12
1 236 236 179.74	"H= 0, K= 11	H. 5, K. 11	H= 10, K= 11	C 205 229 270.0C H+ 2, K+ 12	-0 129 96 270.00 0 3 113 75 237.34	145 159 0.0
4 152 90 83.75	175 185 270.00	0 281 303 270.00	1 104 119 155.40 3 115 128 173.63	2 120 124 214.44 r 122 131 140.00	H= 9, K= 12	21, ** 12
H= 19. K= 10	H* 1. ** 11	H* C. K* 11	HH 11, 5+ 11	F= 18, 4+ 11 2 121 51 140-03	0 140 168 90.00	110 88 121-19
1 193 201 350.54	0 255 308 90.00	1 166 210 203.83	9 256 266 270.00	1 19A 124 244,83 H+ 3, K+ 12	1 160 150 104.79 H	0, K# 13
	2 122 124 137.88	H= 7, K= 11	3 106 44 166.10	1 151 104 101-35	H+ 12, K+ 12	125 116 270.00
he 32, re 10	H. 2 11	236 266 90.00	- 13, x+ 11	3 [10 43 340.47 3 [41 148 44.43	0 184 221 0.0	117 01 154 01
2 137 146 84-20	1 120 190 37.24	2 113 100 142-31	We 14. Ke 11		2 141 07 20417 J	A. Ka. 13
F• 23. K• 10	4 121 107 107.51	H. R. K. 11	1 117 132 36-93	+ 15P 51 303+16	0 122 118 180-00 0	136 7 0.0
1 167 171 173.56	HP 3, K+ 11	1 134 163 33.69	3 150 144 341.31	0 118 132 270-CC	He 15. Ke 12 He	13, 4- 13
F. 26. K. 10	1 111 98 9.38	3 157 163 345.89 • 128 88 191.96	H= 15, K= 11	1 107 112 294.40	0 114 132 90.00 0	140 89 90.00
		5 140 18 283.76	2 126 130 20.68	He 6, Ke 12		

Tableau 3. Coordonnées atomiques (× 10<sup>4</sup>) et paramètres d'agitation thermique (× 10<sup>4</sup>) avec les déviations standards Le facteur d'agitation thermique est égal à exp  $[-(B_{11}h^2 + B_{22}k^2 + B_{33}e^2 + B_{12}hk + B_{13}hl + B_{23}kl)]$ .

	X	Y	Z	<b>B</b> <sub>11</sub>	$B_{22}$	B <sub>33</sub>	<b>B</b> <sub>23</sub>	B <sub>13</sub>	$B_{12}$
Te(1)	3364 (0)	1757 (1)	654 (2)	14 (0)	110 (1)	499 (5)	71 (4)	19 (1)	10 (1)
Te(2)	3306 (0)	-767 (1)	3683 (2)	17 (0)	117 (1)	308 (3)	10 (4)	1 (1)	-11 (1)
C(I)	4128 (6)	2008 (17)	407 (32)	20 (3)	77 (16)	364 (58)	-72 (52)	0 (22)	6 (10)
C(2)	4398 (7)	2990 (25)	2107 (41)	21 (3)	165 (29)	422 (76)	- 148 (87)	8 (28)	-14 (15)
C(3)	4907 (8)	3269 (24)	1827 (49)	27 (4)	157 (29)	482 (100)	-212 (101)	-7 (30)	-23 (17)
C(4)	5148 (6)	2517 (25)	- 186 (57)	14 (2)	188 (29)	737 (126)	162 (118)	-44 (31)	-18 (15)
C(5)	4914 (6)	1587 (29)	-1722(54)	13 (2)	239 (40)	587 (115)	4 (127)	42 (27)	23 (16)
C(6)	4395 (6)	1297 (21)	-1477 (38)	19 (2)	129 (21)	357 (71)	-221 (72)	-10 (24)	-5 (12)
C(7)	3289 (5)	-2454(15)	674 (29)	13 (2)	69 (14)	376 (52)	36 (45)	6 (20)	-4 (9)
C(8)	3732 (6)	-3199(20)	- 84 (50)	11 (2)	133 (23)	704 (117)	133 (104)	-6 (26)	-2(12)
C(9)	3721 (6)	-4264 (20)	- 1977 (43)	16 (2)	123 (21)	496 (78)	9 (81)	-33 (24)	14 (12)
C(10)	3267 (6)	-4627(17)	-3155(36)	20 (3)	83 (15)	469 (68)	- 36 (53)	-48 (25)	-27 (11)
$\mathbf{C}(11)$	2843 (7)	- 3925 (25)	-2377(39)	18 (3)	175 (32)	382 (80)	66 (87)	40 (25)	-32 (15)
C(12)	2353 (5)	-2853 (15)	-405 (38)	10 (2)	82 (16)	472 (76)	13 (57)	25 (20)	-11 (8)

Tableau 4.	Longueur	des liaisons	et	déviations	standa	rds
	U	(en Å)				

Liaison	Distance	
Te(1)-Te(2)	2,712 Å	0,002 Å
Te(1) - C(1)	2,081	0,018
Te(2) - C(7)	2,150	0,015
C(1) - C(2)	1,43	0,03
C(2) - C(3)	1,40	0,03
C(3) - C(4)	1,40	0,03
C(4) - C(5)	1,30	0,03
C(5) - C(6)	1,43	0,03
C(6) - C(1)	1,37	0,02
C(7) - C(8)	1,42	0,02
C(8) - C(9)	1,35	0,03
C(9) - C(10)	1,40	0,02
C(10)-C(11)	1,36	0,03
C(11)-C(12)	1,39	0,03
C(12)-C(7)	1,35	0,02

Tableau 5. Angle des liaisons et déviations standards

	Angles	
C(1) - Te(1) - Te(2)	100,3°	0,5
C(7) - Te(2) - Te(1)	97,4	0,4
Te(1)-C(1)-C(2)	122,0	1,3
Te(1)-C(1)-C(6)	121,4	1,3
Te(2) - C(7) - C(8)	119,9	1,2
Te(2) - C(7) - C(12)	119,9	1,1
C(1) - C(2) - C(3)	122,5	1,9
C(2) - C(3) - C(4)	117,0	2,1
C(3) - C(4) - C(5)	121,8	2,3
C(4) - C(5) - C(6)	122,0	2,2
C(5) - C(6) - C(1)	120,1	1,8
C(6) - C(1) - C(2)	116,5	1,6
C(7) - C(8) - C(9)	119,9	1,8
C(8) - C(9) - C(10)	119,4	1,8
C(9) - C(10) - C(11)	120,2	1,7
C(10)-C(11)-C(12)	120,3	1,8
C(11)-C(12)-C(7)	119,9	1,6
C(12)-C(7)-C(8)	120,1	1,5

La Fig. 1 fournit une vue de la molécule selon l'axe c, en perspective; chaque atome y est représenté par son ellipsoïde d'agitation thermique à 50% de probabilité (programme *ORTEP*, Johnson, 1965). La disposition des molécules dans la maille est donnée par la projection (001) (Fig. 2).

Les valeurs des distances et angles de liaison sont reprises dans les Tableaux 4 et 5 ainsi que sur la Fig. 3.

Par la méthode des moindres carrés, nous avons calculé les plans moyens des cycles phényles I et II et les plans moyens formés par les cycles phényles en incluant l'atome de tellure lié au cycle. Les équations des plans et les écarts aux plans moyens sont donnés dans les Tableaux 6 et 7.

## Discussion

Les Tableaux 4 et 5 montrent que les cycles phényles ne sont pas déformés et qu'ils sont plans (Tableaux 6 et 7) dans les limites des déviations standards. Les Tableaux 6 et 7 montrent que l'atome de tellure (2) est contenu dans le plan du cycle phényle II, tandis que l'atome de tellure (1) s'écarte significativement

Plan	Atomes dans le plan		Equati	χ2			
I II III IV	C(1)C(2)C(3)C(4)C(5 C(7)C(8)C(9)C(10)C( Te(1)C(1)C(2)C(3)C(4 Te(2)C(7)C(8)C(9)C(1)C(4)C(4)C(4)C(4)C(4)C(4)C(4)C(4)C(4)C(4	C(1)C(2)C(3)C(4)C(5)C(6) C(7)C(8)C(9)C(10)C(11)C(12) Te(1)C(1)C(2)C(3)C(4)C(5)C(6) Te(2)C(2)C(2)C(4)C(5)C(4)C(12)		$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$			1,07 3,39 1836,9 10,23
1 *	Tableau 7 Distance	es des atomes au n	lan moven en Å et dévia	$tions standards ( \times 10^4)$	19,23		
Dian I	Ecart ( $\times 10^4$ Å)	D.S. (×104)		Ecart ( $\times 10^4$ Å)	) D.S. (×104)		
C(1) C(2) C(3) C(4) C(5) C(6)	$     \begin{array}{r}       127 \\       -99 \\       -2 \\       83 \\       -53 \\       -56     \end{array} $	160 218 232 254 265 192	Pian III C(1) C(2) C(3) C(4) C(5) C(6) Te(1)	- 390 - 391 129 413 80 - 354 511	160 218 233 254 266 193 12		
Plan II C(7) C(8) C(9) C(10) C(11)	191 64 64 72 50	143 223 201 172 216	Plan IV C(7) C(8) C(9) C(10) C(11)	145 90 53 103 62	143 223 201 172 216		
C(12)	- 105	109	Te(2)	45	169		

Tableau 6. Plans moyens

Tableau 8. Distances intermoléculaires tellure-carbone les plus courtes pour les cycles phényles I et II (en Å)

Te(3)en positionTe(4)en positionTe(5)en position	(0,3306, -0,0767 (0,3364, 1,1757 (0,6694, 0,4232	, -0,6316) , 0,0655) , 0,1316)	
Cycle II	Tellure voisin	Distance	$\sigma$
C(7)	Te(3)	3,93 Å	0,01 Å
<b>C</b> (8)	Te(3)	4,05	0,02
C(9)	Te(3)	3,95	0,02
C(10)	Te(3)	3,74	0,02
C(11)	Te(3)	3,65	0,02
C(12)	Te(3)	3,78	0,02
C(9)	Te(4)	3,85	0,02
C(10)	Te(4)	3,73	0,02
C(11)	Te(4)	4,31	0,02
Cycle I			
C(1)	Te(3)	4.80 Å	0.015 Å
C(3)	Te(5)	4.90	0.02
C(4)	Te(5)	4,50]	0,02



Fig. 1. Configuration de la molécule de ditellurure de diphényle.

 

 Tableau 9. Distances intermoléculaires les plus courtes carbone-carbone et tellure-tellure (en Å)

Te(2)	Te	(0,1636, -0,1757, 0,5655)	4,71 Å	0,002 Å
Te(2)	Te	(0,3364, 0,1757, 1,0655)	4,255	0,002
C(1) C(2) C(2) C(2) C(2) C(3) C(4)	000000	(0,3721, 0,5736, -0,1977) (0,4915, 0,1587, 0,8278) (0,4395, 0,1297, 0,8524) (0,3721, 0,5736, -0,1976) (0,4915; 0,1587, 0,8278) (0,6278, 0,0736, -0,3023)	3,64 3,71 3,66 3,69 3,67 3,73	0,02 0,03 0,03 0,03 0,03 0,03

(c'est-à-dire>3 $\sigma$ ) du plan du cycle phényle I [l'angle Te(2)-C(7)-C(10) est de 179,6 ( $\sigma$ =0,8)° tandis que l'angle Te(1)-C(1)-C(4) est de 175,8 ( $\sigma$ =0,9)°].

Nous avons effectué le même calcul pour le disulfure de diphényle (Lee & Bryant, 1969). Dans ce composé, la situation est similaire: nous obtenons un écart significatif au plan moyen du cycle phényle pour un des atomes de soufre.

Les distances intermoléculaires les plus courtes carbone-tellure sont reprises dans le Tableau 8. On constate une grande différence d'environnement entre les deux cycles phényles. Eneffet, si nous admettons comme rayon de van der Waals pour l'atome de tellure 2,20 Å et 1,70 Å pour la demi épaisseur du cycle phényle (Pauling, 1960), il apparaît que seuls les atomes du cycle II sont proches des atomes de tellure. Le cycle II se dipose presque tangentiellement au tellure en position (0,3306,

-0,0767, -0,6316).

Le Tableau 9 reprend les distances intermoléculaires les plus courtes entre atomes de carbone et entre atomes de tellure. Aucune distance carbone-carbone n'est inférieure à 3,60 Å. La cohésion cristalline serait principalement due à des contacts carbone-tellure et tellure-tellure. Les deux longueurs des liaisons carbone-



Fig. 2. Projection selon (001) de la structure.

tellure présentent entre elles un écart significatif C(1)-Te(1)=2,081 ( $\sigma=0,018$ ) et C(7)-Te(2)=2,150 Å ( $\sigma=0,015$ ): cependant, vis-à-vis de la valeur moyenne 2,115 Å ( $\sigma=0,016$ ) l'écart n'est plus significatif. Cette valeur moyenne est plus grande que la longueur de liaison donnée par Blackmore & Abrahams (1955) dans le tellurure di-p-tolyle ( $2,05 \pm 0,05$  Å).

La comparaison de nos résultats avec ceux de Kruse, Marsh & McCullough (1957) dans le ditellurure *p*dichlorodiphényle conduit aux considérations suivantes: la substitution en *para* par des atomes de chlore change considérablement la géométrie et l'arrangement moléculaire. Les deux différences les plus marquantes sont: les modifications de l'angle de liaison du tellure et de l'angle dièdre. Le ditellurure de diphényle posséde un angle de liaison de 98,8 ( $\sigma$ =0,4)° et un angle dièdre de 88,55°, le ditellurure *p*-dichlorodiphényle, un angle de liaison de 94 ± 1° et un angle dièdre de 72°.

# Comparaison entre disulfure, diseleniure et ditellurure de diphényle

Le Tableau 10 fait apparaître plusieurs similitudes entre les trois composés envisagés. Cependant, le ditellurure de diphényle n'est pas isotype des deux autres.

Nous nous bornerons à formuler trois remarques concernant ce tableau.

1. La longueur de la liaison X-X est, dans les trois composés, inférieure de manière significative à la liasion simple covalente de Pauling (1960).

2. Pour le composé telluré, l'angle dièdre et l'angle des liaisons C-Te-Te se rapprochent sensiblement de 90°.

3. Les éléments de la famille VI possèdent un doublet libre sur une orbitale p. L'orientation des cycles phényles vis-à-vis de l'axe de cette orbitale p varie considérablement lorsque l'on passe du soufre ou du sélénium au tellure. Dans les composés sulfuré et sélénié, les normales aux cycles phényles sont presque parallèles à l'axe de l'orbitale  $p(\Phi_s = 9^\circ; \Phi_{se} = 13^\circ)$ . Par con-



Fig. 3. Distances et angles de liaison.

Maille Liaison X-X Liaison X-X simple – Pauling (1960)	$\begin{array}{c} C_{12}H_{10}S_2 \\ \text{Orthorhombique} \\ a = 23,78 \text{ Å} \\ b = 8,13 \\ c = 5,64 \\ P_{2,1}2_{12} \\ 2,03 \ (\sigma = 0,005) \text{ Å} \\ 2,08 \end{array}$	$\begin{array}{c} C_{12}H_{10}Se_2 \\ Orthorhombique \\ a=23,70 \text{ Å} \\ b=8,255 \\ c=5,645 \\ P_{21}2_{12} \\ 2,29 \pm 0,01 \text{ Å} \\ 2,34 \end{array}$	$\begin{array}{c} C_{12}H_{10}Te_2 \\ \text{Orthorhombique} \\ a = 27,028 \text{ Å} \\ b = 8,703 \\ c = 5,221 \\ P_{2},2_{2},12 \\ 2,712 \ (\sigma = 0,002) \text{ Å} \\ 2,74 \end{array}$
Liaison C-X moyenne	1,80±0,01	$1,93 \pm 0,05$	2,115 ( $\sigma$ = 0,016)
Liaison C-X simple – Pauling (1960)	1,81	1,94	2,14
Angle C-X-X	106,15 ( $\sigma = 0,4$ )°	106,05 ± 2,0°	98,8 ( $\sigma = 0,4$ )°
Angle dièdre	96,2	97,1±3,0	88,5
Angle entre les normales aux cycles	77,3	79,45	20,1
Angle moyen entre l'axe de l'orbitale p et l'axe du cycle phényle	9	13,05	91,35

Tableau 10. Résumé de quelques données cristallographiques sur le disulfure, diséléniure et ditellurure de diphényle

(X = S, Se ou Te).

tre, pour le tellurure, les normales aux cycles phényles sont pratiquement perpendiculaires à l'axe de l'orbitale  $p(\Phi_{Te}=91,35^{\circ})$ .

En terminant ce travail, il nous est agréable de remercier MM les Professeurs H. Brasseur et J. Toussaint de l'Université de Liège pour l'aide et les conseils qu'ils nous ont prodigués.

#### Références

AHMED, F. R., HALL, S. R., PIPPY, M. E. & HUBER, C. P. (1966). N.R.C. Crystallographic programs for the IBM/360 system, Division of Pure Physics and Pure Chemistry, National Research Council, Ottawa, Canada. BLACKMORE, W. R. & ABRAHAMS, S. C. (1955). Acta Cryst. 8, 317.

- CRUICKSHANK, D. W. J. (1961). Computing Methods and the Phase Problem in X-ray Crystal Analysis. Edited by PEPINSKY, R., ROBERTSON, J. M. & SPEAKMAN, J. C. Oxford: Pergamon Press.
- HANSON, H. P., HERMAN, F., LEA, J. D. & SKILLMAN, S. (1964). Acta Cryst. 17, 104.
- JOHNSON, C. K. (1965). ORTEP, ORNL-3794. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- KRUSE, F. M., MARSH, R. E. & MCCULLOUGH, J. D. (1957). Acta Cryst. 10, 201.
- LEE, J. D. & BRYANT, M. W. R. (1969). Acta Cryst. B25, 2094.
- MARSH, R. E. (1952). Acta Cryst. 5, 458.
- PAULING, L. (1960). The Nature of the Chemical Bond. 3rd ed. Ithaca: Cornell Univ. Press.