

Au sujet de la structure cristalline de $\text{Ca}(\text{ReO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

J. P. PICARD, J. P. BESSE, ET R. CHEVALIER

Laboratoire de Cristallographie et Physico-Chimie des Matériaux, U.A. 444, Université de Clermont-Fd II, B.P. 45, 63170 Aubière, France

ET M. GASPERIN

Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie associé au C.N.R.S., Université P. et M. Curie, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

Received January 22, 1988

A la suite de la récente parution de l'article décrivant la structure de $\text{Ca}(\text{ReO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (1), un de nos confrères (2) nous faisait remarquer que la structure, établie

TABLEAU I
COORDONNÉES ATOMIQUES ET FACTEURS
D'AGITATION THERMIQUE

	x	y	z	B_{eq}^a
Re(1)	3269(1)	1620(3)	4186(2)	0.91(.04)
Re(2)	5758(1)	3858(1)	6839(1)	0.83(.04)
Ca	6493(2)	3515(4)	4505(2)	0.71(.04)
O(1)	4201(9)	1665(23)	7569(12)	2.12(2)
O(2)	1723(7)	1826(19)	4868(10)	1.42(2)
O(3)	2614(8)	2384(21)	2967(11)	1.81(2)
O(H ₂ O)(4)	2183(7)	3785(18)	8516(9)	1.29(1)
O(5)	2028(8)	4445(22)	608(11)	1.83(1)
O(6)	3711(7)	4551(19)	2203(10)	1.45(1)
O(7)	4797(8)	4647(22)	6276(11)	1.88(1)
O(8)	821(10)	3483(27)	5806(14)	2.67(1)
O(H ₂ O)(9)	506(9)	3810(25)	8720(13)	2.33(1)
O(10)	3888(8)	3707(20)	9092(10)	1.55(1)

^a $B_{\text{eq}} = 4/3 \sum_i \sum_j \beta_{ij} a_i a_j$.

TABLEAU II
DISTANCES (Å) ET ANGLES (°) CARACTÉRISTIQUES

Polyèdres du rhém:		
Re(1)-O(5)	1.70(2)	Re(1)-O = 1.71 ₈
-O(8)	1.72(2)	
-O(3)	1.72(1)	
-O(2)	1.73(1)	
O(5)-Re(1)-O(8)	111.4(2)	Re(2)-O = 1.71 ₅
O(5)-Re(1)-O(3)	107.8(7)	
O(5)-Re(1)-O(2)	109.5(8)	
O(8)-Re(1)-O(3)	107.9(9)	
O(8)-Re(1)-O(2)	110.4(8)	
O(3)-Re(1)-O(2)	109.9(7)	
Re(2)-O(1)	1.69(2)	
-O(6)	1.72(1)	
-O(10)	1.72(2)	
-O(7)	1.73(1)	
O(1) -Re(2)-O(6)	111.2(7)	O(1) -Re(2)-O(10) 109.0(8)
O(1) -Re(2)-O(10)	109.0(8)	
O(1) -Re(2)-O(7)	109.8(8)	
O(6) -Re(2)-O(10)	110.1(7)	
O(6) -Re(2)-O(7)	107.1(7)	
O(10)-Re(2)-O(7)	109.6(7)	

TABLEAU II—*Continued*

Polyèdres du calcium		
Ca-OH ₂ (9)	2.37(2)	
-O(10)	2.39(2)	
-O(2)	2.40(1)	
-O(6)	2.40(1)	Ca-O = 2.47 ₇
-OH ₂ (4)	2.53(1)	
-O(5)	2.55(1)	
-O(7)	2.56(1)	
-OH ₂ (4)	2.62(2)	

dans le groupe *C*2, était descriptible dans le groupe *C*2/*c* par un changement d'origine.

Les affinements, effectués dans les mêmes conditions que pour le groupe non centré, conduisent à une valeur de $R = 0.079$ et $R_w = 0.086$ pour 4036 réflexions.

Les coordonnées atomiques et les facteurs de température qui en découlent sont reportés dans le tableau I; les distances et les angles de liaison caractéristiques figurent dans le tableau II.

Cette nouvelle description conduit à des distances *M*-O plus précises et plus régulières, mais elle ne modifie aucun des caractères structuraux figurant dans l'article précédent.

References

1. J. P. PICARD, J. P. BESSE, R. CHEVALIER, ET M. GASPERIN, *J. Solid State Chem.* **69**, 380 (1987).
2. R. E. MARSH, communication privée.