

Détermination et étude de la structure cristalline de l'henritermiérite, hydrogrenat de symétrie quadratique

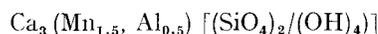
PAR ANDRÉ AUBRY, YVES DUSAUSOY, ALAIN LAFFAILLE et JEAN PROTAS,
Laboratoire de minéralogie et cristallographie, Faculté des sciences, Nancy.

Résumé. — L'henritermiérite, $\text{Ca}_3(\text{Mn}_{1,5}, \text{Al}_{0,5})[(\text{SiO}_4)_2/(\text{OH})_4]$ est quadratique avec les paramètres $a = 12,39 \text{ \AA}$, $c = 11,91 \text{ \AA}$ et huit unités formulaires par maille. Le groupe spatial est $I_{41}/acd-D_{3h}^{20}$. La structure cristalline a été déterminée par déconvolution de la fonction de Patterson, puis à l'aide de séries de Fourier F_o , séries « différence » ($F_o - F_c$) et affinée par méthodes de moindres carrés. Chaque sommet du tétraèdre SiO_4 est commun avec un sommet d'un octaèdre MnO_6 . Quatre des six sommets de MnO_6 sont des sommets de tétraèdres SiO_4 , les deux derniers sont des groupements OH. Les atomes de calcium se trouvent dans des cavités cubiques déformées. L'étude de l'électronéutralité montre que la structure est ionique. L'henritermiérite appartient à la famille des hydrogrenats avec substitution ordonnée de SiO_4 par $(\text{OH})_4$.

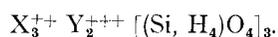
Abstract. — Henritermierite, $\text{Ca}_3(\text{Mn}_{1,5}, \text{Al}_{0,5})[(\text{SiO}_4)_2/(\text{OH})_4]$ is tetragonal with $a = 12.39 \text{ \AA}$, $c = 11.91 \text{ \AA}$ and eight formula units in the cell. The space group is $I_{41}/acd-D_{3h}^{20}$. The crystal structure has been determined with the use of three-dimensional F_o and $(F_o - F_c)$ Fourier synthesis and refined by least-squares methods. Each oxygen of a SiO_4 tetraedron is shared with an MnO_6 octaedron. Four of the six oxygens of MnO_6 are shared with SiO_4 tetraedra, the two last are OH. Calcium atoms lie in distorted cubic cavities; the study of electroneutrality shows that the structure is ionic. Henritermierite belongs to the hydrogarnet family with regular replacement of SiO_4 by $(\text{OH})_4$ tetraedra.

I. — INTRODUCTION.

L'henritermiérite a été signalée et décrite pour la première fois en 1969 par C. Gaudefroy, M. Orliac, F. Permingeat et A. Parfenoff dans des échantillons de minerai de manganèse, provenant du gisement de Tachgagalt (Anti-Atlas, Maroc). Sa composition chimique est représentée par la formule :



ce qui la classe dans le groupe des hydrogrenats de formule générale :



Cette espèce minérale cristallise dans l'holoédrie du système quadratique. Les valeurs des para-

mètres déterminées à partir de diagrammes de cristaux tournants et de Weissenberg sont les suivantes :

$$a = 12,39 \pm 0,01 \text{ \AA}, \quad c = 11,91 \pm 0,01 \text{ \AA}.$$

La densité moyenne mesurée, $d_m = 3,34 \pm 0,02$, conduit à huit unités formulaires par maille ($z = 8$).

L'étude des extinctions systématiques dans le réseau réciproque révèle la présence de réflexions si les conditions suivantes sont satisfaites :

$$hkl \quad - \quad h + k + l = 2n$$

$$hko \quad - \quad h = 2n, k = 2n$$

$$okl \quad - \quad k = 2n, l = 2n$$

$$hhl \quad - \quad 2h + l = 4n.$$

Ces conditions caractérisent le groupe spatial $I_{41}/acd (D_{3h}^{20} - n^\circ 142$ des tables internationales).

II. — ENREGISTREMENT ET MESURE
DES INTENSITÉS DIFFRACTÉES.

La source diffractante est un fragment monocristallin, sans formes précises, prélevé sur un cristal maclé, de dimension maximale inférieure au 1/10 de mm. Les diagrammes ont été réalisés à l'aide d'une chambre de Weissenberg montée en équi-inclinaison. L'axe *a* étant choisi comme axe de rotation, nous avons enregistré onze strates de $h = 0$ à $h = 10$ en utilisant le rayonnement $K\alpha$ du cuivre. Les intensités, mesurées en moyenne sur trois ou quatre films, par une méthode optique en les comparant à une échelle étalon, ont ensuite été normalisées relativement puis corrigées des phénomènes de Lorentz et de polarisation. L'absorption a été négligée du fait de la très faible dimension du cristal utilisé. Les réflexions d'indices $4kl$ ont permis d'ajuster les strates entre elles de façon approximative.

III. — DÉTERMINATION DE LA STRUCTURE.

A l'aide des 278 réflexions observées, nous avons alors calculé des sections de la fonction de Patterson dans le volume de la maille défini par les limites suivantes : $0 \leq u \leq 1/2$, $0 \leq v \leq 1/2$, $0 \leq w \leq 1/2$; puis nous avons traité les 228 pics de la maille totale par la méthode de Garrido. Après quatre déconvolutions — en prenant pour origines : (112), (200), (321), (363), (302) — le nombre des pics s'est abaissé à 56,

assimilables aux 56 atomes lourds prévus par la composition chimique. Le tableau I donne en huitième de maille les coordonnées de ces pics restants. D'après la formule chimique proposée, la maille unitaire doit contenir 24 Ca, 16 Mn et 16 Si. La disposition relative des pics issus de la déconvolution impose dans le groupe I_{41}/acd , la répartition des atomes dans les quatre sites : 8 (*b*) (0, 1/4, 1/8), 16 (*c*) (0, 0, 0), 16 (*e*₁) (1/8, 0, 1/4), 16 (*e*₂) (3/8, 0, 1/4). N'ayant pas d'idées particulières sur la place relative des cations dans les différents sites, nous avons supposé que tous les atomes possédaient le même facteur de diffusion atomique moyen que nous avons choisi égal à celui du calcium. Le calcul des facteurs de structure et l'affinement simultané par une méthode de moindres carrés des positions atomiques et des poids affectés à chaque atome moyen, nous a conduit à un facteur résiduel $R = 0,330$. De ce calcul nous avons déduit les positions des atomes lourds suivants :

- Mn en 16 (*e*₁)
- Si en 16 (*e*₂)
- Ca en 16 (*c*)
- Ca en 8 (*b*).

TABLEAU I.

**Coordonnées des pics
de la fonction de Patterson
après quatre déconvolutions,
exprimées en 1/8 de maille.**

000	112	004	116
040	132	044	136
120	152	124	156
160	172	164	176
200	302	204	306
240	342	244	346
400	512	404	516
440	532	444	536
520	552	524	556
560	572	564	576
600	702	604	706
640	742	644	746
321	363	325	367
761	723	765	727

Un affinement des positions atomiques avec facteur d'agitation thermique général et isotrope a permis d'améliorer R jusqu'à 0,270. A ce stade nous avons affecté les signes des facteurs de structure calculés aux facteurs de structure observés, puis calculé des sections de la densité électronique et des sections différences normalement à la direction Oz dans le volume de la maille fixée par les limites $0 \leq x \leq 1/4$; $1/4 \leq y \leq 3/4$; $0 \leq z \leq 1/8$. Les coefficients des séries de Fourier-Bragg ont été pondérés par la méthode de Woolfson. Trois pics correspondant aux trois atomes d'oxygène sont alors apparus.

Un modèle approché nous a conduit à échanger les positions des atomes de manganèse et de calcium situés en 16 (*e*) et 16 (*c*) pour respecter la coordinance de chacun de ces cations. Les positions des 7 atomes indépendants trouvés dans la structure ont été affinées par une méthode de moindres carrés avec approximation diagonale et facteur d'agitation thermique isotrope et individuel. Nous avons affecté à l'atome de manganèse un facteur de diffusion atomique égal à la moyenne des facteurs de diffusion atomique correspondant à la répartition 3/4 de Mn + 1/4 de Al. Le facteur R s'est alors abaissé à 0,101. Le tableau II indique les coordonnées des atomes indépendants, la valeur du facteur d'agitation

TABLEAU II.

Coordonnées atomiques fractionnaires, facteur d'agitation thermique et écarts types.

	x	$10^4 \sigma x$	y	$10^4 \sigma y$	z	$10^4 \sigma z$	B	σB
Si.....	0,1170	6	0	0	1/4	0	0,435	0,126
Mn, Al.....	0	0	0	0	0	0	0,996	0,089
Ca _I	0,3636	6	0	0	1/4	0	0,535	0,086
Ca _{II}	0	0	1/4	0	1/8	0	0,747	0,095
O _I	0,2930	18	0,7158	14	0,0950	13	0,641	0,221
O _{II}	0,1568	16	0,5537	17	0,0475	14	1,247	0,264
O _{III} = OH.....	0,4400	16	0,3602	13	0,0205	13	0,371	0,182

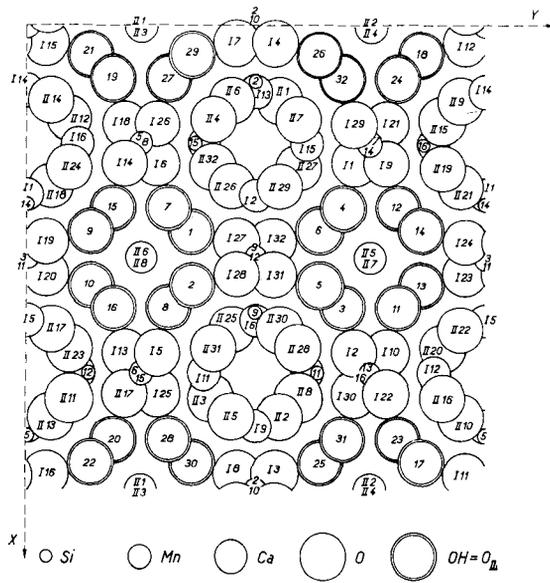


FIG. 1. — Projection de la structure sur le plan xOy.

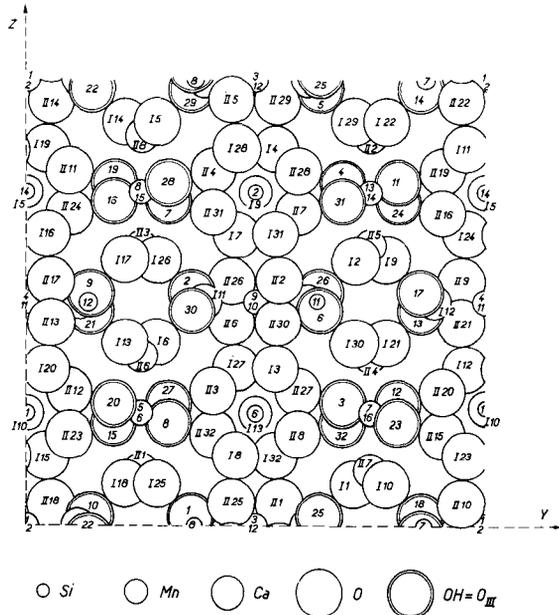


FIG. 2. — Projection de la structure sur le plan yOz.

				Mn				
				1	0,00000	0,00000	0,00000	
				2	0,50000	0,00000	0,00000	
				3	0,00000	0,50000	0,00000	
				4	0,00000	0,00000	0,50000	
				5	0,25000	0,25000	0,25000	
				6	0,75000	0,25000	0,25000	
				7	0,25000	0,75000	0,25000	
				8	0,25000	0,25000	0,75000	
				9	0,50000	0,50000	0,50000	
				10	0,00000	0,50000	0,50000	
				11	0,50000	0,00000	0,50000	
				12	0,50000	0,50000	0,00000	
				13	0,75000	0,75000	0,75000	
				14	0,25000	0,75000	0,75000	
				15	0,75000	0,25000	0,75000	
				16	0,75000	0,75000	0,25000	
				17	0,29304	0,71580	0,09498	
				18	0,70696	0,71580	0,59498	
				19	0,96580	0,54304	0,34498	
				20	0,03420	0,54304	0,84498	
				21	0,70696	0,29420	0,90502	
				22	0,03420	0,29420	0,40502	
				23	0,03420	0,45696	0,65502	
				24	0,96580	0,45696	0,15502	
				25	0,29304	0,78420	0,59498	
				26	0,70696	0,78420	0,09498	
				27	0,96580	0,95696	0,84498	
				28	0,03420	0,95696	0,34498	
				29	0,70696	0,21580	0,40502	
				30	0,29304	0,21580	0,90502	
				31	0,03420	0,04304	0,15502	
				32	0,96580	0,04304	0,65502	
				33	0,29304	0,21580	0,59498	
				34	0,70696	0,21580	0,09498	
				35	0,96580	0,04304	0,84498	
				36	0,03420	0,04304	0,34498	
				37	0,70696	0,78420	0,40502	
				38	0,03420	0,78420	0,90502	
				39	0,03420	0,95696	0,15502	
				40	0,96580	0,95696	0,65502	
				41	0,29304	0,28420	0,09498	
				42	0,70696	0,28420	0,59498	
				43	0,96580	0,45696	0,34498	
				44	0,03420	0,45696	0,84498	
				45	0,50000	0,75000	0,62500	
				46	0,50000	0,25000	0,37500	
				47	0,50000	0,75000	0,62500	
				48	0,50000	0,25000	0,37500	
				49	0,50000	0,75000	0,12500	
				50	0,50000	0,25000	0,87500	

TABLEAU III.

Coordonnées d'atomes équivalents.

				1	0,43998	0,36022	0,02052	
				2	0,56002	0,36022	0,52052	
				3	0,61022	0,68998	0,27052	
				4	0,38978	0,68998	0,77052	
				5	0,84324	0,44631	0,95251	
				6	0,15676	0,44631	0,45251	
				7	0,19631	0,59324	0,70251	
				8	0,80369	0,59324	0,20251	
				9	0,15676	0,05369	0,95251	
				10	0,84324	0,94631	0,04749	
				11	0,80369	0,09324	0,79749	
				12	0,19631	0,09324	0,29749	
				13	0,84324	0,05369	0,45251	
				14	0,15676	0,05369	0,95251	
				15	0,19631	0,90676	0,20251	
				16	0,80369	0,90676	0,70251	
				17	0,65676	0,05369	0,54749	
				18	0,34324	0,05369	0,04749	
				19	0,30369	0,90676	0,79749	
				20	0,68631	0,90676	0,29749	
				21	0,34324	0,94631	0,45251	
				22	0,65676	0,94631	0,95251	
				23	0,68631	0,09324	0,20251	
				24	0,30369	0,09324	0,70251	
				25	0,65676	0,44631	0,04749	
				26	0,34324	0,44631	0,54749	
				27	0,30369	0,59324	0,29749	
				28	0,68631	0,59324	0,79749	
				29	0,34324	0,55369	0,95251	
				30	0,65676	0,55369	0,45251	
				31	0,68631	0,40676	0,70251	
				32	0,30369	0,40676	0,20251	
				33	0,43998	0,36022	0,02052	
				34	0,56002	0,36022	0,52052	
				35	0,61022	0,68998	0,27052	
				36	0,38978	0,68998	0,77052	
				37	0,84324	0,44631	0,95251	
				38	0,15676	0,44631	0,45251	
				39	0,19631	0,59324	0,70251	
				40	0,80369	0,59324	0,20251	
				41	0,15676	0,05369	0,95251	
				42	0,84324	0,94631	0,04749	
				43	0,80369	0,09324	0,79749	
				44	0,19631	0,09324	0,29749	
				45	0,84324	0,05369	0,45251	
				46	0,15676	0,05369	0,95251	
				47	0,19631	0,90676	0,20251	
				48	0,80369	0,90676	0,70251	
				49	0,65676	0,05369	0,54749	
				50	0,34324	0,05369	0,04749	
				51	0,30369	0,90676	0,79749	
				52	0,68631	0,90676	0,29749	
				53	0,34324	0,94631	0,45251	
				54	0,65676	0,94631	0,95251	
				55	0,68631	0,09324	0,20251	
				56	0,30369	0,09324	0,70251	
				57	0,65676	0,44631	0,04749	
				58	0,34324	0,44631	0,54749	
				59	0,30369	0,59324	0,29749	
				60	0,68631	0,59324	0,79749	
				61	0,34324	0,55369	0,95251	
				62	0,65676	0,55369	0,45251	
				63	0,68631	0,40676	0,70251	
				64	0,30369	0,40676	0,20251	

thermique individuel et les écarts types calculés à l'aide de la formule de Cruickshank dans le cas d'une pondération arbitraire des facteurs de structure.

Les figures 1 et 2 représentent les projections de la structure sur les plans xOy et yOz .

IV. — COORDINATION DES IONS.
DESCRIPTION DE LA STRUCTURE.

Le silicium se trouve pratiquement au centre de son tétraèdre de coordination. Le tableau IV montre que les distances mesurées dans ce polyèdre sont normales.

TABLEAU IV.
Distances, angles,
écarts types du tétraèdre SiO_4 .

	$d \text{ \AA}$	$\sigma \text{ \AA}$
$Si_{15}-O_{16}$	1,617	0,018
$Si_{15}-O_{116}$	1,616	0,020
$O_{16}-O_{116}$	2,680	0,028
$O_{116}-O_{126}$	2,700	0,026
$O_{116}-O_{1126}$	2,569	0,027
$O_{16}-Si_{15}-O_{126}$	$101^\circ 4$	
$O_{116}-Si_{15}-O_{1126}$	$105^\circ 3$	
$O_{16}-Si_{15}-O_{116}$	$111^\circ 9$	
$O_{16}-Si_{15}-O_{1126}$	$113^\circ 3$	

Les atomes de manganèse sont entourés par six oxygènes situés aux sommets de l'octaèdre dont ils occupent le centre. Les distances MnO rassemblées dans le tableau V sont respectivement 1,89, 1,97 et 2,13 Å. Ce type de coordination comportant quatre liaisons courtes situées dans un plan contenant l'atome de manganèse, approximativement perpendiculaires à deux liaisons longues, est caractéristique de l'ion manganèse trivalent et confirme donc l'existence de cette valence dans l'henritermiérite.

L'atome de calcium occupe deux sites indépendants (16 (e) et 8 (b)). Dans chacun d'eux, il se trouve coordonné à huit oxygènes placés aux sommets d'un cube déformé (fig. 3). Pour l'atome Ca_I , deux arêtes opposées du cube proviennent de deux arêtes de tétraèdres SiO_4 , deux sommets opposés proviennent de deux sommets de SiO_4 ,

Bull. Soc. fr. Minéral. Cristallogr., 1969.

TABLEAU V.

Distances, angles
et écarts types de l'octaèdre MnO_6 .

	$d \text{ \AA}$	$\sigma \text{ \AA}$
Mn_9-O_{127}	1,970	0,016
Mn_9-O_{1126}	2,126	0,019
Mn_9-O_{1112}	1,897	0,016
$O_{127}-O_{126}$	2,855	0,024
$O_{127}-O_{130}$	2,942	0,026
$O_{127}-O_{112}$	2,679	0,024
$O_{127}-O_{1116}$	2,791	0,025
$O_{1126}-O_{112}$	2,902	0,027
$O_{1126}-O_{1116}$	2,795	0,026
$O_{127}-Mn_9-O_{1126}$	$88^\circ 3$	
$O_{127}-Mn_9-O_{1112}$	$87^\circ 6$	
$O_{1126}-Mn_9-O_{1112}$	$87^\circ 8$	

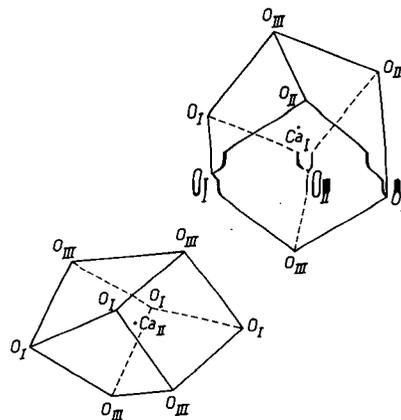


FIG. 3. — Polyèdres de coordination du calcium.

les deux derniers étant les sommets de l'octaèdre MnO_6 , qui ne forment pas de liaison avec les tétraèdres SiO_4 . Dans le cube de coordination de l'atome Ca_{II} , deux arêtes opposées proviennent de quatre sommets appartenant aux octaèdres de Mn n'échangeant pas de liaison avec SiO_4 , les quatre autres sommets provenant de quatre sommets de tétraèdres SiO_4 .

Les tableaux VI et VII donnent les valeurs des distances Ca-O de chacun des polyèdres de coordination du calcium.

La structure peut alors se décrire de la façon suivante : chaque sommet d'un tétraèdre SiO_4 est commun avec un sommet d'un octaèdre

TABLEAU VI.
Distances, angles
et écarts types de l'octaèdre Ca_I-O.

	<i>d</i> Å	σ Å
Ca _{I16} -O _{I6}	2,453	0,018
Ca _{I16} -O _{II12}	2,518	0,018
Ca _{I16} -O _{II9} '.....	2,435	0,021
Ca _{I16} -O _{III9}	2,384	0,020
O _{I6} -O _{I26}	2,504	0,023
O _{I6} -O _{II12}	2,942	0,026
O _{I6} -O _{III9}	2,896	0,026
O _{II9} '-O _{II21} '.....	2,569	0,027
O _{II9} '-O _{II24}	3,166	0,027
O _{II9} '-O _{III21}	2,795	0,026
O _{II24} -O _{III9}	2,808	0,025
O _{I6} -Ca _{I16} -O _{I26}	61° 4	
O _{I6} -Ca _{I16} -O _{II12}	72° 5	
O _{I6} -Ca _{I16} -O _{III9}	73° 5	
O _{II9} '-Ca _{I16} -O _{II21} '.....	63° 7	
O _{II9} '-Ca _{I16} -O _{II24}	79° 4	
O _{II9} '-Ca _{I16} -O _{III21}	70° 9	
O _{II24} -Ca _{I16} -O _{III9}	69° 8	

TABLEAU VII.
Distances, angles
et écarts types de l'octaèdre Ca_{II}-O.

	<i>d</i> Å	σ Å
Ca _{II6} -O _{I6}	2,619	0,022
Ca _{II6} -O _{III2}	2,329	0,016
O _{I6} -O _{I27}	3,105	0,028
O _{I6} -O _{III15}	2,679	0,024
O _{I27} -O _{III8}	2,897	0,026
O _{III8} -O _{III15}	3,104	0,024
O _{I6} -Ca _{II6} -O _{I27}	72° 7	
O _{I6} -Ca _{II6} -O _{III15}	65° 3	
O _{I27} -Ca _{II6} -O _{III8}	71° 4	
O _{III8} -Ca _{II6} -O _{III15}	83° 6	

MnO₆ (fig. 4). Dans ces octaèdres quatre oxygènes situés dans un plan sont communs avec les tétraèdres SiO₄ (fig. 5). Cet assemblage forme dans la structure des cavités octaédriques libres et des cavités cubiques déformées où viennent se placer les atomes de calcium. Les figures 6 et 7 montrent l'assemblage des polyèdres entre eux projetés sur *xOy* et *yOz*.

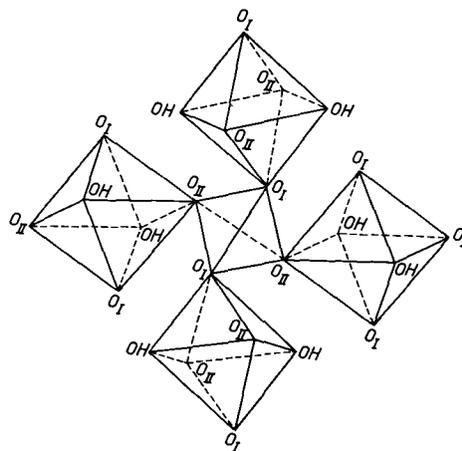


FIG. 4. — Entourage polyédrique du tétraèdre SiO₄.

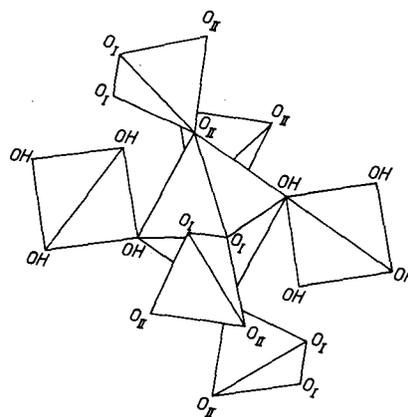


FIG. 5. — Entourage polyédrique de l'octaèdre MnO₄(OH)₂.

V. — CARACTÈRE IONIQUE DE LA STRUCTURE.

L'application des règles de Pauling sur l'électroneutralité de la structure montre que le cristal possède un caractère ionique franchement marqué. En effet l'oxygène de type O_I est entouré par 1 Si, 1 Ca_I, 1 Ca_{II} et 1 Mn dont la somme des valences électrostatiques (4/4, 3/6, 2/8, 2/8) est égale à la charge de l'ion O²⁻. Il en est de même pour O_{II} entouré par 1 Si, 1 Mn, 2 Ca_I. L'oxygène O_{III} est entouré par 1 Mn, 1 Ca_I et 1 Ca_{II}; la règle d'électroneutralité est satisfaite si on suppose que cet oxygène est un hydroxyle OH. Il existe alors 32 groupements OH par maille unitaire, conformément à la formule chimique proposée. Ces derniers se placent sur les deux sommets de l'octaèdre MnO₆ non communs aux tétraèdres SiO₄.

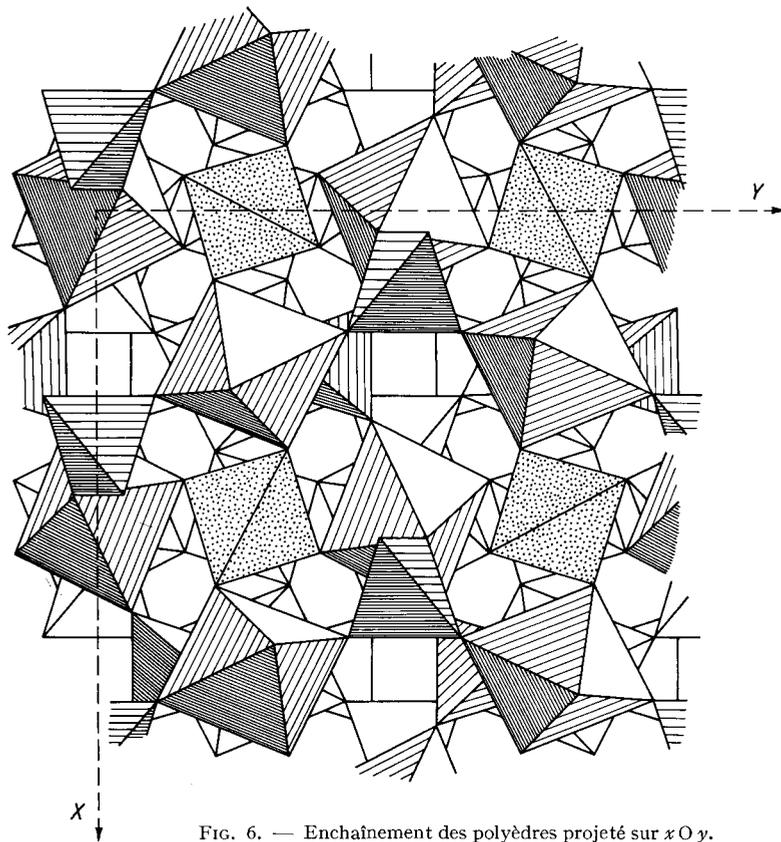


FIG. 6. — Enchaînement des polyèdres projeté sur xOy .

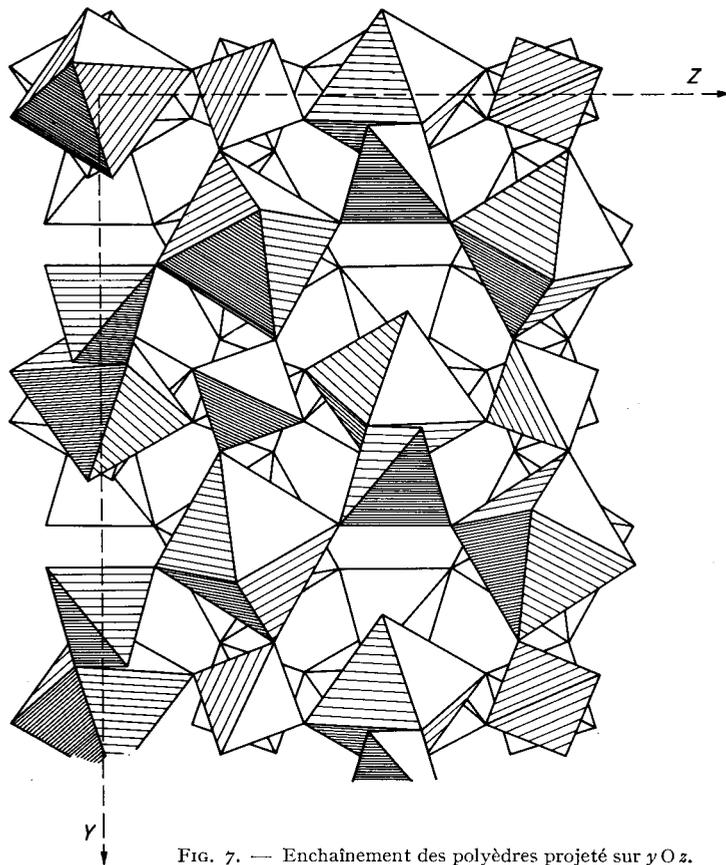
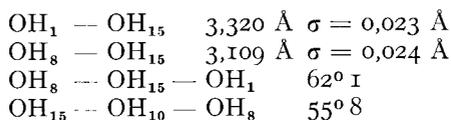


FIG. 7. — Enchaînement des polyèdres projeté sur yOz .

VI. — CLASSIFICATION STRUCTURALE.

Les groupements OH dans la maille se disposent suivant un tétraèdre (OH)₄ dont le centre occupe le site 8 (a). Les distances et les angles de ce tétraèdre ont pour valeurs :



Comme pour le tétraèdre SiO₄, chaque sommet OH est commun avec un octaèdre MnO₄(OH)₂. Ce dernier possède donc quatre sommets appartenant à quatre tétraèdres SiO₄ et deux sommets appartenant à deux tétraèdres (OH)₄. Le polyèdre de calcium I possède six sommets appartenant à quatre tétraèdres SiO₄ et deux sommets à deux tétraèdres (OH)₄. Le polyèdre de calcium II possède quatre sommets provenant de quatre tétraèdres SiO₄ et quatre sommets appartenant à deux tétraèdres (OH)₄. Deux atomes de Ca_I sont donc séparés par un tétraèdre SiO₄; deux atomes de Ca_{II} le sont par un tétraèdre (OH)₄. On peut donc dire que ces tétraèdres (OH)₄ résultent d'une substitution ordonnée des groupements SiO₄. Une telle substitution permet de placer l'henritermiérite dans la famille

des hydrogrenats de formule X₃⁺⁺ Y₃⁺⁺⁺ [(Si, H₄)O₄]₃ dans laquelle X représente le calcium et Y le manganèse substitué partiellement par de l'aluminium. Cohen Addad *et al.* (1967) ont montré que la substitution SiO₄ → (OH)₄ entraîne la formation d'hydroxydes cubiques à groupements hydroxydes libres et que celle-ci n'entraîne pas une déformation importante de l'octaèdre AlO₆. Par contre dans l'henritermiérite, la substitution quasi complète de l'aluminium par le manganèse provoque une déformation importante des octaèdres de coordination et le remplacement de SiO₄ par un polyèdre plus dilaté (OH)₄ se fait dans la seule direction [001]. Ces deux faits permettent d'expliquer que cet hydrogrenat cristallise dans le système quadratique.

VII. — REMERCIEMENTS.

Nous adressons nos remerciements à M. F. Permingeat, Directeur de recherche au C. N. R. S. qui nous a procuré les échantillons d'henritermiérite nécessaires à cette étude et à M. le professeur Legras, dont l'obligeance nous a permis de réaliser les calculs cristallographiques sur l'ordinateur du Centre de calcul automatique de la Faculté des sciences de Nancy.

Manuscrit reçu le 16 octobre 1968.

BIBLIOGRAPHIE

- COHEN-ADDAD, C., DUCROS, P. et BERTAUT, E. F., (1967). — *Acta crystallogr. Danem.*, 23, 220-30.
- GAUDEFOY, C., ORLIAC, M., PERMINGEAT, F., PARFENOFF, A. — *Bull. Soc. fr. Minéral. crystallogr.* (à paraître dans le même bulletin).
- WOOLFSON, M. M. (1956). — *Acta crystallogr. Danem.*, 9, 804.