

**Résonance magnétique nucléaire de  $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot \text{NaHCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (Trona).** Par MAURICE VAN MEERSSCHE, JEAN MARIE DEREPPÉ\* et PEDRO W. LOBO (h)†, Laboratoire de Chimie Physique, Université de Louvain, 39 rue des Moutons, Louvain, Belgique

(Reçu le 17 juillet 1962)

La structure du Trona a été déterminée par diffraction de Rayons X par Brown (1949). Les cristaux sont monocliniques, de groupe spatial  $C2/c$ . La maille contient quatre molécules et a pour paramètres:

$$a = 20,41, b = 3,49, c = 10,31 \text{ \AA}; \beta = 106^\circ 20'.$$

La position des protons n'a pas été déterminée par diffraction des Rayons X, cependant la molécule d'eau est située entre deux ions  $\text{CO}_3^{2-}$  de telle façon qu'il est logique d'admettre l'existence de deux liaisons hydrogène de longueurs 2,72 et 2,77 Å.

La structure du Trona a été précisée par diffraction de neutrons (Bacon & Curry, 1956). Cette étude effectuée en deux dimensions a confirmé la position des atomes lourds et déterminé les coordonnées  $x$  et  $z$  des atomes d'hydrogène. Les positions des atomes d'hydrogène sont données au Tableau 1.

Tableau 1. Positions des atomes d'hydrogène

	$x/a$	$y/b$	$z/c$
$\text{H}_1$	0.192	—	0.259
$\text{H}_2$	0.240	—	0.137

La distance moyenne O-H a été évaluée à  $1,01 \pm 0,03$  Å

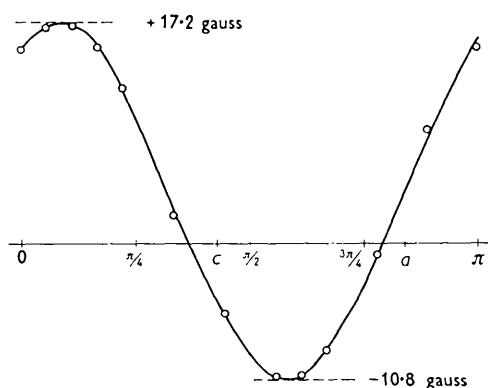


Fig. 1. Courbe de Pake pour une rotation autour de l'axe [010].

\* Aspirant au Fonds National Belge de la Recherche Scientifique.

† Boursier de l'Université Nationale de Tucumán. (Rep. Arg.).

par Bacon & Curry (1956), en faisant l'hypothèse que les atomes d'hydrogène sont dans le plan formé par l'oxygène de la molécule d'eau et les oxygènes liés par des ponts d'hydrogène.

Les spectres de résonance magnétique nucléaire du proton interprétés par la méthode de Pake (1948) ont permis de déterminer l'orientation et la longueur du vecteur proton-proton (cfr. Fig. 1).

La rotation d'un monocristal autour de l'axe [010] donne pour le vecteur  $p-p$  une longueur de 1,58 Å et une inclinaison de  $22^\circ$  par rapport au plan (010). L'angle entre l'axe [100] et la projection du vecteur  $p-p$  sur le plan (010) vaut  $44^\circ$ . D'autre part la fréquence de vibration longitudinale du groupement O-H dans l'infrarouge ( $3500 \text{ cm}^{-1}$ ) correspond à une distance O-H de 0,986 Å d'après la relation de Pimentel & McClellan (1960). En admettant que la bissectrice de l'angle au sommet de la molécule d'eau coïncide avec la bissectrice de l'angle  $\text{Oco}_3-\text{OH}_2\text{O}-\text{Oco}_3$ , comme on l'admet généralement (Van Meerssche, Dereppe & Lobo, 1961), on détermine les coordonnées des atomes d'hydrogène (Tableau 2).

Tableau 2. Coordonnées des atomes d'hydrogène

	$x/a$	$y/b$	$z/c$
$\text{H}_1$	0.192	0.576	0.259
$\text{H}_2$	0.240	0.221	0.137

Les coordonnées  $x$  et  $z$  trouvées par R.M.N. coïncident avec celles obtenues par diffraction de neutrons. L'angle au sommet de la molécule d'eau est de  $106^\circ$ . Comme l'angle entre l'oxygène de la molécule d'eau et les oxygènes liés vaut  $114^\circ$ , l'écart par rapport à la linéarité des liaisons hydrogène est de  $4^\circ$ .

Nous remercions le Dr. P. Tarte qui a pris le spectre infrarouge et le Dr. G. E. Bacon qui nous a fourni le monocristal de Trona.

#### Bibliographie

- BACON, G. E. & CURRY, N. A. (1956). *Acta Cryst.* **9**, 82.  
 BROWN, C. J. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 167.  
 PAKE, G. E. (1948). *J. Chem. Phys.* **16**, 327.  
 PIMENTEL, G. C. & McCLELLAN, A. L. (1960). *The Hydrogen Bond*. New York: Freeman.  
 VAN MEERSSCHE, M., DEREPPÉ, J. M. & LOBO(h), P. W. *Bull. Soc. Chim. Franç.*, p. 2217.