



Reçu le 2 février 2016

Accepté le 3 février 2016

Édité par A. Van der Lee, Université de
Montpellier II, France**Keywords:** crystal structure; mercury chalcogenide; coupled substitution; crankshaft-type.**CCDC reference:** 1451733**Supporting information:** this article has
supporting information at journals.iucr.org/e

Structure cristalline du composé $\text{Hg}_{3-x}\text{Sb}_x(\text{S}+\text{Se})_{2+x}\text{I}_{2-x}$ ($x \simeq 0.1$)

Mohammed Kars,^{a*} Adrian Gómez Herrero,^b Thierry Roisnel,^c Allaoua Rebbah^a et
L. Carlos Otero-Díaz^d

^aUniversité Houari-Boumediene, Faculté de Chimie, Laboratoire Sciences des Matériaux, BP 32 El-Alia 16111 Bab-Ezzouar, Algeria, ^bCentro de Microscopia Electrónica, Universidad Complutense, 28040 Madrid, Spain, ^cCentre de Diffractométrie X, Sciences Chimiques de Rennes, UMR 6226 CNRS Université de Rennes 1, Campus de Beaulieu, Avenue du Général Leclerc, France, et ^dDepartamento Inorgánica, Facultad C.C. Químicas, Universidad Complutense, 28040 Madrid, Spain. *Correspondence e-mail: mkarsdz@yahoo.fr

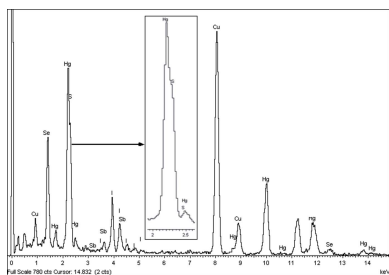
Single crystals of the mercury chalcogenide $\text{Hg}_{3-x}\text{Sb}_x(\text{S}+\text{Se})_{2+x}\text{I}_{2-x}$ ($x \simeq 0.1$) (mercury antimony sulfide selenide iodide), were grown by a chemical transport reaction. The structure contains three independent *A* (Hg/Sb) atoms; each atom is strongly covalently bonded with two *X* (Se/S) atoms to form approximately linear *X*–*A*–*X* units. The *X*–*A*–*X* units link to form A_4X_4 rings, which are combined into infinite crankshaft-type bands running along the [100] direction. Four equatorial *E* (*I/X* = Se/S) atoms at relatively long distances complete the distorted octahedral coordination of *A* (Hg/Sb). The crystal under investigation was twinned by non-merohedry with a refined twin domain fraction of 0.814 (6):0.186 (6). The structure is isotypic with $\text{Hg}_3\text{Se}_2\text{I}_2$ [Beck & Hedderich (2000). *J. Solid State Chem.* **151**, 73–76], but the current determination reveals a coupled substitution, with partial replacement of Hg^{+2} by Sb^{+3} , balanced by the equivalent substitution of I^{-1} by S^{-2} and Se^{-2} . Bond-valence calculations are consistent with this relative substitution model.

1. Contexte chimique

Les chalcogénohalides au mercure naturel ou synthétique de formulation $\text{Hg}_3X_2E_2$ ($X = \text{S, Se, Te}$ et $E = \text{F, Cl, Br, I}$) ont fait l'objet d'intensives investigations pour leur aptitude à former de nombreux polymorphes (Aurivillius, 1965; Puff *et al.*, 1966). La présence de chaînes linéaires *X*–Hg–*X* ainsi que des pyramides trigonales Hg_3X ($X = \text{S, Se, Te}$) en forme de parapluie leur confèrent des motifs de différentes dimensionnalité (Borisov *et al.*, 2001). Une classification de la plupart de ces composés a été reportée par Pervukhina *et al.* (2003). Le chalcogénide $\text{Hg}_3\text{Se}_2\text{I}_2$ a été synthétisé au préalable par Puff (1963), et sa structure établie après par Beck & Hedderich (2000).

2. Commentaire structurelle

Le composé $\text{Hg}_{3-x}\text{Sb}_x(\text{S}+\text{Se})_{2+x}\text{I}_{2-x}$ $x \simeq 0.1$ appartient à la famille des composés chalcogénides au mercure de formulation $\text{Hg}_3X_2E_2$ ($X = \text{S, Se}$ et $E = \text{I, Br, Cl}$). Comparé aux autres membres, c'est le seul chalcogénide qui présente une substitution couplée, avec un remplacement partiel de Hg^{+2} par Sb^{+3} , équilibré par une substitution équivalente de I^{-1} par S^{-2} et Se^{-2} . Cette substitution couplée a été déjà observée dans quelques composés minéraux comme la perroudite et la capgaronnite (Mumme & Nickel, 1987; Mason *et al.*, 1992). La structure a été décrite au préalable par Beck & Hedderich



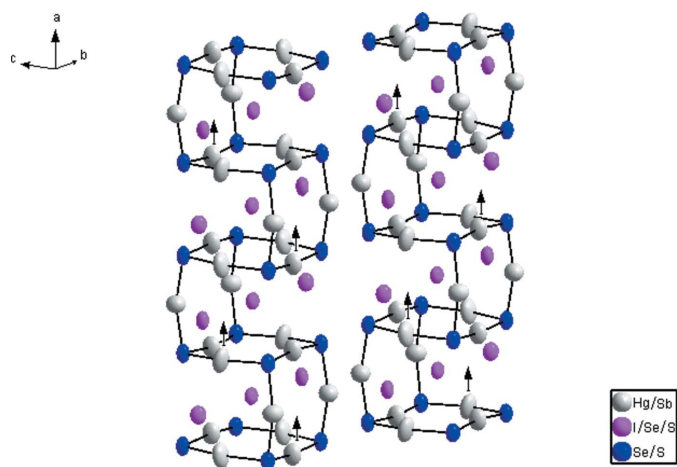


Figure 1
Représentation des liaisons $A-X$ ($X = \text{Se}, \text{S}$) agencées en double chaîne infinie en vilebrequin le long de la direction $[100]$, avec un déplacement des ellipsoïdes à 95% de probabilité. Les flèches indiquent le sens dominant de l'agitation thermique.

(2000), elle est caractérisée par de fortes liaisons covalentes $A-X$ ($A = \text{Hg/Sb}$, $X = \text{Se/S}$): 2.4988 (18)–2.5260 (17) Å légèrement inférieure à la somme des rayons covalents: $d(\text{Hg}-\text{Se}) = 2.63$ Å (Earley, 1950). Les angles de liaisons $X-A-X$ [160.15 (7)– 170.88 (6)°] dévient de la linéarité, ceci est typique des composés chalcogénides au mercure Hg^{+2} (Aurivillius *et al.*, 1965). Ces liaisons $X-A-X$ agencées en une double chaîne infinie en vilebrequin le long de la direction $[100]$ (Fig. 1) sont pontées par un autre atome $A(\text{Hg/Sb})$ engendrant ainsi des anneaux A_4X_4 . La coordination octaédrique distordue des atomes $A(\text{Hg/Sb})$ (Fig. 2) est complétée par de faibles liaisons avec les atomes $E = \text{I/X} = \text{Se}, \text{S}$ placés de part et d'autre de ces chaînes (Fig. 3). Les distances $A-E$ ($A = \text{Hg/Sb}$, $E = \text{I/X} = \text{Se}, \text{S}$): 3.0377 (19)–3.8824 (19) Å sont proches de la somme des rayons ioniques $d(\text{Hg}_2^{+2} + \text{I}^{-1}) = 3.16$ Å

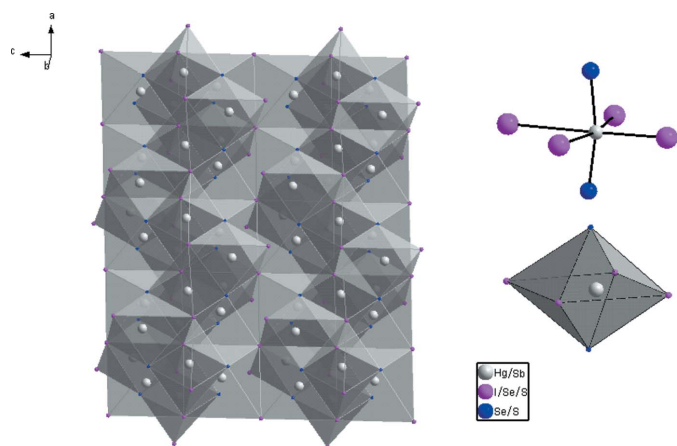


Figure 2
Structure de $\text{Hg}_{3-x}\text{Sb}_x(\text{S}+\text{Se})_{2+x}\text{I}_{2-x}$ $x \simeq 0.1$ montrant les chaînes en vilebrequin, d'octaèdres à faces communes des atomes A (Hg/Sb) (gauche). Environnement octaédrique distordu des atomes de A (Hg/Sb) (droite).

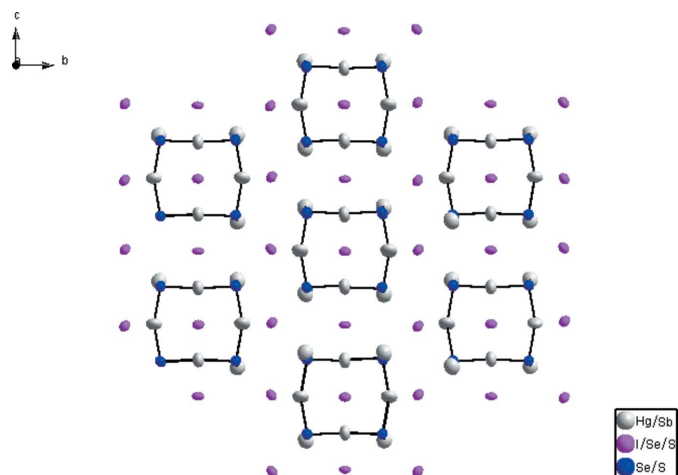


Figure 3
Projection de la structure de $\text{Hg}_{3-x}\text{Sb}_x(\text{S}+\text{Se})_{2+x}\text{I}_{2-x}$ ($x \simeq 0.1$) selon bc mettant en évidence la disposition des atomes E (I/Se/S), avec un déplacement des ellipsoïdes à 95% de probabilité

(Shannon & Prewitt, 1970), indiquant le caractère ionique de ces liaisons.

Chaque atome $X(\text{Se/S})$ se retrouve ainsi lié à trois atomes de A pour former des pyramides trigonales A_3X en forme de parapluie avec des angles de liaisons $A-X-A$ entre 96.39 (6)– 97.53 (6)° similaires à celles observées dans d'autres composés chalcogénides. Dans cette structure une forte agitation thermique (ADP's) des atomes A à l'exception de $A(\text{Hg})_3$ est observée approximativement le long de la direction $[100]$. En effet $U_{11}(A)$ qui est très prononcée comparé aux autres directions (U_{22} et U_{33}), est environ deux à trois (2–3) fois plus importante que celles observées pour d'autres atomes (X et E). Cette large ADP's des atomes A qui peut être attribuée simultanément à un effet de désordre statique et dynamique, semble orientée vers l'espace vacant formé par les anneaux A_4X_4 (flèches Fig. 1).

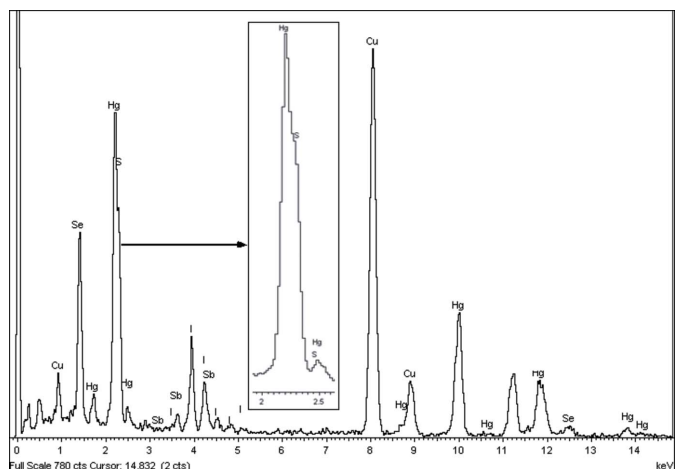


Figure 4
Spectre d'analyse par MET confirmant la présence des cinq éléments chimiques attendus (Hg , I , Sb , S et Se), avec un recouvrement partiel des peaks K-du soufre et M-du mercure.

Tableau 1
Détails expérimentaux.

Données cristallines	
Formule chimique	Hg _{2,899} Sb _{0,101} S _{0,054} Se _{2,038} I _{1,908}
M_r	998,6
Système cristallin, groupe d'espace	Orthorhombique, <i>Imma</i>
Température (K)	150
a, b, c (Å)	9,7258 (9), 19,3588 (9), 9,6125 (2)
V (Å ³)	1809,84 (19)
Z	8
Type de rayonnement	Mo $K\alpha$
μ (mm ⁻¹)	63,99
Crystal size (mm)	0,18 × 0,09 × 0,06
Collection de données	
Diffractomètre	Bruker APEXII
Correction d'absorption	Multi-scan (<i>TWINABS</i> ; Bruker, 2006)
T_{\min}, T_{\max}	0,006, 0,020
Nombre de réflexions mesurées, indépendantes et observées [$I > 2\sigma(I)$]	7021, 1628, 1031
R_{int}	0,069
$(\sin \theta/\lambda)_{\text{max}}$ (Å ⁻¹)	0,806
Affinement	
$R[F^2 > 3\sigma(F)], wR(F), S$	0,048, 0,064, 1,44
Nombre de réflexions	1628
Nombre de paramètres	48
$\Delta\rho_{\text{max}}, \Delta\rho_{\text{min}}$ (e Å ⁻³)	1,98, -2,65

Programmes informatiques: *APEX2*, *SAINT* et *CELL_NOW* (Bruker, 2006), *SIR97* (Altomare *et al.*, 1999), *JANA2006* (Petříček *et al.*, 2014) et *DIAMOND* (Brandenburg & Putz, 2009).

3. Synthèse et cristallisation

Les monocristaux ont été obtenus par transport en phase vapeur à partir d'un mélange approprié des éléments: HgI₂, I₂, Sb, S et Se. Le mélange broyé puis scellé dans un tube de quartz est porté à une température de 973 K. Des cristaux de couleur orange sont obtenus après un chauffage d'environ dix jours. L'analyse par MET de plusieurs cristaux qui sont pour la plupart maclés, confirme la présence des 5 éléments chimiques attendus (Hg, I, Sb, S et Se) (Fig. 4).

4. Affinement

Détails de données cristallines, collection de données et affinement sont résumés dans le tableau 1. La structure a été affinée par isotypie à celle de Beck & Hedderich (2000). Idéalement, et pour un équilibre des charges la substitution de

Sb⁺³ des sites Hg⁺² (à l'exception de Hg3 qui présente un un taux de substitution s.o.f inférieur à 1%) doit s'accompagner par une substitution équivalente de S⁻² et (ou) Se⁻² des sites I⁻¹. Le meilleur résultat est obtenu pour une distribution partagée des atomes S et Se sur les sites de I, conduisant à la formulation: Hg_{3-x}Sb_x(S+Se)_{2+x}I_{2-x} $x \simeq 0.1$. Mais les atomes S et Se sont probablement distribués de manière statistique sur les différents sites de l'iode. De plus, le calcul des valences de liaisons (BVS; Brown 2002; Brown & Altermatt, 1985; Brese & O'Keeffe, 1991) des sites A(Hg/Sb) en incluant le taux d'occupation et en utilisant le programme *Valence* (Hormillosa *et al.*, 1993), conduit à une valeur moyenne des charges de 2.25. Le cristal étudié correspond à une macle non-mériédrique, la fraction en volume des composants est de: 0.814 (6):0.186 (6), et la carte de densité électronique est de $\rho_{\text{max}} = 1.39 \text{ e \AA}^{-3}$ [localisée à 1.98 Å de A(Hg)3] et $\rho_{\text{min}} = -2.65 \text{ e \AA}^{-3}$ [localisée à 1.10 Å de E4].

Références

- Altomare, A., Burla, M. C., Camalli, M., Cascarano, G. L., Giacovazzo, C., Guagliardi, A., Moliterni, A. G. G., Polidori, G. & Spagna, R. (1999). *J. Appl. Cryst.* **32**, 115–119.
- Aurivillius, K. (1965). *Ark. Kemi*, **24**, 151–187.
- Beck, J. & Hedderich, S. (2000). *J. Solid State Chem.* **151**, 73–76.
- Borisov, S. V., Magarill, S. A. & Pervukhina, N. V. (2001). *J. Solid State Chem.* **42**, 516–523.
- Brandenburg, K. & Putz, H. (2009). *DIAMOND*. Crystal Impact GbR, Bonn, Allemagne.
- Brese, N. E. & O'Keeffe, M. (1991). *Acta Cryst.* **B47**, 192–197.
- Brown, I. D. (2002). In *The Chemical Bonds in Inorganic Chemistry*. Oxford University Press.
- Brown, I. D. & Altermatt, D. (1985). *Acta Cryst.* **B41**, 244–247.
- Bruker (2006). *APEX2*, *SAINT*, *CELL_NOW* and *TWINABS*. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, EU.
- Earley, J. W. (1950). *Am. Mineral.* **35**, 337–364.
- Hormillosa, C., Healy, S., Stephen, T. & Brown, I. D. (1993). *Bond Valence Calculator*. McMaster University, Canada. <http://CCP14.ac.uk> and http://www.CCP14.ac.uk/solution/bond_valence/
- Mason, B., Mumme, W. G. & Sarp, H. (1992). *Am. Mineral.* **77**, 197–200.
- Mumme, W. G. & Nickel, E. H. (1987). *Am. Mineral.* **72**, 1257–1262.
- Pervukhina, N. V., Vasil'ev, V. I., Borisov, S. V., Magarill, S. A. & Naumov, D. Y. (2003). *Can. Mineral.* **41**, 1445–1453.
- Petříček, V., Dušek, M. & Palatinus, L. (2014). *Z. Kristallogr.* **229**, 345–352.
- Puff, H. (1963). *Angew. Chem.* **75**, 681.
- Puff, H., Harpain, A. & Hoop, K. P. (1966). *Naturwissenschaften*, **53**, 274.
- Shannon, R. D. & Prewitt, C. T. (1970). *Acta Cryst.* **B26**, 1046–1048.

supporting information

Acta Cryst. (2016). E72, 304-306 [doi:10.1107/S2056989016002127]

Structure cristalline du composé $\text{Hg}_{3-x}\text{Sb}_x(\text{S}+\text{Se})_{2+x}\text{I}_{2-x}$ ($x \approx 0.1$)

Mohammed Kars, Adrian Gómez Herrero, Thierry Roisnel, Allaoua Rebbah et L. Carlos Otero-Díaz

Computing details

Data collection: *APEX2* (Bruker, 2006); cell refinement: *SAINTE* (Bruker, 2006); data reduction: *SAINTE* (Bruker, 2006) and *CELL_NOW* (Bruker, 2006); program(s) used to solve structure: *SIR97* (Altomare *et al.*, 1999); program(s) used to refine structure: *JANA2006* (Petříček *et al.*, 2014); molecular graphics: *DIAMOND* (Brandenburg & Putz, 2009); software used to prepare material for publication: *JANA2006* (Petříček *et al.*, 2014).

Mercury antimony sulfide selenide iodide

Crystal data

$\text{Hg}_{2.899}\text{Sb}_{0.101}\text{S}_{0.054}\text{Se}_{2.038}\text{I}_{1.908}$

$M_r = 998.6$

Orthorhombic, *Imma*

Hall symbol: -I 2b 2

$a = 9.7258$ (9) Å

$b = 19.3588$ (9) Å

$c = 9.6125$ (2) Å

$V = 1809.84$ (19) Å³

$Z = 8$

$F(000) = 3267$

$D_x = 7.327$ Mg m⁻³

Mo $K\alpha$ radiation, $\lambda = 0.71073$ Å

Cell parameters from 1893 reflections

$\theta = 3.0\text{--}33.8^\circ$

$\mu = 63.99$ mm⁻¹

$T = 150$ K

Block, orange

$0.18 \times 0.09 \times 0.06$ mm

Data collection

Bruker APEXII

diffractometer

Radiation source: X-ray tube

Graphite monochromator

CCD rotation images, thin slices scans

Absorption correction: multi-scan

(*TWINABS*; Bruker, 2006)

$T_{\min} = 0.006$, $T_{\max} = 0.020$

7021 measured reflections

1628 independent reflections

1031 reflections with $I > 3\sigma(I)$

$R_{\text{int}} = 0.069$

$\theta_{\max} = 35.0^\circ$, $\theta_{\min} = 2.1^\circ$

$h = -14 \rightarrow 15$

$k = -31 \rightarrow 27$

$l = -15 \rightarrow 12$

Refinement

Refinement on F

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.048$

$wR(F^2) = 0.064$

$S = 1.44$

1628 reflections

48 parameters

0 restraints

34 constraints

Weighting scheme based on measured s.u.'s $w =$

$1/(\sigma^2(F) + 0.0001F^2)$

$(\Delta/\sigma)_{\max} = 0.0001$

$\Delta\rho_{\max} = 1.98$ e Å⁻³

$\Delta\rho_{\min} = -2.65$ e Å⁻³

Special details

Refinement. The refinement was carried out against all reflections. The conventional R -factor is always based on F . The goodness of fit as well as the weighted R -factor are based on F and F^2 for refinement carried out on F and F^2 , respectively. The threshold expression is used only for calculating R -factors *etc.* and it is not relevant to the choice of reflections for refinement. The crystal studied was twinned with a refined twin domain fraction of 0.814 (6):0.186 (6). The overlaps of reflection between the twin domains were calculated by Jana2006 software using the twinning matrix and user- defined threshold 0.1° for full overlap and 0.3° for full separation. Due to no support for twinning in the official CIF dictionary the twinning matrix has been saved in the CIF file using special `_jana_cell_twin_matrix` keyword. The program used for refinement, *Jana2006*, uses the weighting scheme based on the experimental expectations, see `_refine_ls_weighting_details`, that does not force S to be one. Therefore the values of S are usually larger than the ones from the *SHELX* program.

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (\AA^2)

	x	y	z	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$	Occ. (<1)
Hg1	0.22648 (9)	0.25	-0.00243 (7)	0.0283 (3)	0.935 (14)
Sb1	0.22648 (9)	0.25	-0.00243 (7)	0.0283 (3)	0.065 (14)
Hg2	0.25	0.09884 (5)	-0.25	0.0347 (3)	0.964 (13)
Sb2	0.25	0.09884 (5)	-0.25	0.0347 (3)	0.036 (13)
Hg3	0.5	0.11573 (5)	0.04687 (10)	0.0312 (2)	
Se1	0.24364 (14)	0.12133 (9)	0.00877 (18)	0.0211 (6)	0.98 (2)
S1	0.24364 (14)	0.12133 (9)	0.00877 (18)	0.0211 (6)	0.02 (2)
I1	0	0.25	0.7532 (2)	0.0181 (7)	0.91 (3)
Se2	0	0.25	0.7532 (2)	0.0181 (7)	0.09 (3)
I2	0	0.25	0.2488 (2)	0.0187 (7)	0.94 (3)
Se3	0	0.25	0.2488 (2)	0.0187 (7)	0.06 (3)
I3	0	0.00089 (5)	0.2378 (2)	0.0207 (6)	0.983 (12)
S2	0	0.00089 (5)	0.2378 (2)	0.0207 (6)	0.017 (12)

Atomic displacement parameters (\AA^2)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Hg1	0.0400 (5)	0.0168 (4)	0.0282 (5)	0	0.0001 (3)	0
Sb1	0.0400 (5)	0.0168 (4)	0.0282 (5)	0	0.0001 (3)	0
Hg2	0.0522 (5)	0.0349 (5)	0.0169 (4)	0	-0.0065 (3)	0
Sb2	0.0522 (5)	0.0349 (5)	0.0169 (4)	0	-0.0065 (3)	0
Hg3	0.0271 (3)	0.0329 (4)	0.0335 (5)	0	0	0.0027 (3)
Se1	0.0304 (10)	0.0166 (11)	0.0164 (11)	-0.0007 (8)	0.0001 (4)	0.0013 (4)
S1	0.0304 (10)	0.0166 (11)	0.0164 (11)	-0.0007 (8)	0.0001 (4)	0.0013 (4)
I1	0.0230 (9)	0.0195 (15)	0.0118 (11)	0	0	0
Se2	0.0230 (9)	0.0195 (15)	0.0118 (11)	0	0	0
I2	0.0275 (9)	0.0203 (15)	0.0082 (10)	0	0	0
Se3	0.0275 (9)	0.0203 (15)	0.0082 (10)	0	0	0
I3	0.0284 (8)	0.0160 (13)	0.0175 (11)	0	0	-0.0039 (3)
S2	0.0284 (8)	0.0160 (13)	0.0175 (11)	0	0	-0.0039 (3)

Bond lengths (Å)

Hg1—Sb1	0	Hg2—S1 ^{vi}	2.5260 (17)
Hg1—Hg2	3.7788 (8)	Hg2—I1 ^{iv}	3.8048 (8)
Hg1—Hg2 ⁱ	3.7788 (8)	Hg2—I1 ^v	3.8048 (8)
Hg1—Sb2	3.7788 (8)	Hg2—Se2 ^{iv}	3.8048 (8)
Hg1—Sb2 ⁱ	3.7788 (8)	Hg2—Se2 ^v	3.8048 (8)
Hg1—Hg3	3.7493 (10)	Hg2—I3 ^{vii}	3.1069 (9)
Hg1—Hg3 ⁱⁱ	3.7493 (10)	Hg2—I3 ^{viii}	3.1069 (9)
Hg1—Se1	2.4988 (18)	Hg2—S2 ^{vii}	3.1069 (9)
Hg1—Se1 ⁱⁱⁱ	2.4988 (18)	Hg2—S2 ^{viii}	3.1069 (9)
Hg1—S1	2.4988 (18)	Sb2—Hg3	3.7633 (8)
Hg1—S1 ⁱⁱⁱ	2.4988 (18)	Sb2—Hg3 ^{vi}	3.7633 (8)
Hg1—I1 ^{iv}	3.2206 (19)	Sb2—Se1	2.5260 (17)
Hg1—I1 ^v	3.5896 (18)	Sb2—Se1 ^{vi}	2.5260 (17)
Hg1—Se2 ^{iv}	3.2206 (19)	Sb2—S1	2.5260 (17)
Hg1—Se2 ^v	3.5896 (18)	Sb2—S1 ^{vi}	2.5260 (17)
Hg1—I2	3.2686 (18)	Sb2—I1 ^{iv}	3.8048 (8)
Hg1—I2 ^v	3.6084 (17)	Sb2—I1 ^v	3.8048 (8)
Hg1—Se3	3.2686 (18)	Sb2—Se2 ^{iv}	3.8048 (8)
Hg1—Se3 ^v	3.6084 (17)	Sb2—Se2 ^v	3.8048 (8)
Sb1—Hg2	3.7788 (8)	Sb2—I3 ^{vii}	3.1069 (9)
Sb1—Hg2 ⁱ	3.7788 (8)	Sb2—I3 ^{viii}	3.1069 (9)
Sb1—Sb2	3.7788 (8)	Sb2—S2 ^{vii}	3.1069 (9)
Sb1—Sb2 ⁱ	3.7788 (8)	Sb2—S2 ^{viii}	3.1069 (9)
Sb1—Hg3	3.7493 (10)	Hg3—Se1	2.5224 (14)
Sb1—Hg3 ⁱⁱ	3.7493 (10)	Hg3—Se1 ^{ix}	2.5224 (14)
Sb1—Se1	2.4988 (18)	Hg3—S1	2.5224 (14)
Sb1—Se1 ⁱⁱⁱ	2.4988 (18)	Hg3—S1 ^{ix}	2.5224 (14)
Sb1—S1	2.4988 (18)	Hg3—I1 ^v	3.8824 (19)
Sb1—S1 ⁱⁱⁱ	2.4988 (18)	Hg3—Se2 ^v	3.8824 (19)
Sb1—I1 ^{iv}	3.2206 (19)	Hg3—I2 ^v	3.2579 (16)
Sb1—I1 ^v	3.5896 (18)	Hg3—Se3 ^v	3.2579 (16)
Sb1—Se2 ^{iv}	3.2206 (19)	Hg3—I3 ^{vii}	3.731 (2)
Sb1—Se2 ^v	3.5896 (18)	Hg3—I3 ^v	3.0377 (19)
Sb1—I2	3.2686 (18)	Hg3—S2 ^{vii}	3.731 (2)
Sb1—I2 ^v	3.6084 (17)	Hg3—S2 ^v	3.0377 (19)
Sb1—Se3	3.2686 (18)	Se1—S1	0
Sb1—Se3 ^v	3.6084 (17)	Se1—I3	3.987 (2)
Hg2—Sb2	0	Se1—S2	3.987 (2)
Hg2—Hg3	3.7633 (8)	S1—I3	3.987 (2)
Hg2—Hg3 ^{vi}	3.7633 (8)	S1—S2	3.987 (2)
Hg2—Se1	2.5260 (17)	I1—Se2	0
Hg2—Se1 ^{vi}	2.5260 (17)	I2—Se3	0
Hg2—S1	2.5260 (17)	I3—S2	0

Symmetry codes: (i) $-x+1/2, -y+1/2, -z-1/2$; (ii) $-x+1, -y+1/2, z$; (iii) $x, -y+1/2, z$; (iv) $x, y, z-1$; (v) $-x+1/2, y, -z+1/2$; (vi) $-x+1/2, y, -z-1/2$; (vii) $-x+1/2, -y, z-1/2$; (viii) $x, -y, -z$; (ix) $-x+1, y, z$.