

Structure Data of New Intermetallic Compounds

The following compounds have been structurally analyzed in our laboratory:

- ScMg: CsCl type, a = 3.597 Å¹).
- ScAl: CsCl type, a = 3.450 Å¹).
- ScGa: CrB type, a = 4.022 Å, b = 10.205 Å, c = 3.895 Å¹).
- ScIn₃: Cu₃Au type, a = 4.477 Å.
- ScSi: CrB type, a = 3.988 Å, b = 9.882 Å, c = 3.659 Å¹).
- ScGe: CrB type, a = 4.007 Å, b = 10.06 Å, c = 3.762 Å¹).
- YGa: CrB type, a = 4.302 Å, b = 10.86 Å, c = 4.073 Å¹).
- YGe: CrB type, a = 4.262 Å, b = 10.694 Å, c = 3.941 Å¹).
- LaGa: CrB type, a = 4.50 Å, b = 11.39 Å, c = 4.23 Å.
- LaSi: FeB type, a = 8.404 Å, b = 4.010 Å, c = 6.059 Å.
- LaGe: FeB type, a = 8.486 Å, b = 4.134 Å, c = 6.119 Å.
- CeSi: FeB type, a = 8.306 Å, b = 3.967 Å, c = 5.978 Å.
- CeGe: FeB type, a = 8.354 Å, b = 4.082 Å, c = 6.033 Å.
- PrSi: FeB type, a = 8.240 Å, b = 3.941 Å, c = 5.920 Å.
- NdSi: FeB type, a = 8.156 Å, b = 3.920 Å, c = 5.881 Å.
- SmSi: FeB type, a = 8.055 Å, b = 3.888 Å, c = 5.804 Å.
- GdSi: FeB type, a = 7.996 Å, b = 3.859 Å, c = 5.724 Å.
- GdGe: CrB type, a = 4.327 Å, b = 10.77 Å, c = 3.954 Å.
- DySi*): (l) CrB type, a = 4.237 Å, b = 10.494 Å, c = 3.818 Å.
(h) FeB type, a = 7.844 Å, b = 3.820 Å, c = 5.668 Å.
- DyGe: CrB type, a = 4.263 Å, b = 10.675 Å, c = 3.924 Å.
- HoSi*): (l) CrB type, a = 4.228 Å, b = 10.429 Å, c = 3.801 Å.
(h) FeB type, a = 7.808 Å, b = 3.801 Å, c = 5.633 Å.
- ErSi*): (l) CrB type, a = 4.197 Å, b = 10.382 Å, c = 3.791 Å.
(h) FeB type, a = 7.772 Å, b = 3.785 Å, c = 5.599 Å.

A detailed report on these structures will appear elsewhere. This study was supported by the Advanced Research Projects Agency, Office of the Secretary of Defense.

Metallurgy Department, Laboratory for Research on the Structure of Matter, University of Pennsylvania in Philadelphia

E. PARTHÉ, D. HOHNKE, W. JEITSCHKO and O. SCHOB

Eingegangen am 8. Dezember 1964

*) (l) low-temperature modification; (h) high temperature modification.

¹) SCHOB, O., and E. PARTHÉ: Acta Cryst. to be published.

Neubestimmung der Kristallstruktur von Tellurit (= rhombisches TeO₂)

Eine Neubearbeitung der Kristallstruktur von Tellurit (= rhombisches TeO₂) hat ergeben, daß die Lagenparameter nach ITO und SAWADA¹⁾ nur für die Te-Atome im wesentlichen richtig sind; für die Sauerstoffe erhielten wir gegenüber den Angaben dieser Autoren so große Verschiebungen, daß dadurch ein neuer Strukturtyp entsteht.

Aus photometrierten *h**k*0- und 0*h**l*-Reflexen und qualitativen *1h**l*-Daten ergab sich [Aufstellung wie in ¹⁾]:

Raumgruppe: *P cab* - *D*_{2h}¹⁵,
Gitterkonstanten: *a*₀ = 5,44 Å, *b*₀ = 12,02 Å, *c*₀ = 5,59 Å,
Parameter [Werte nach ¹⁾ in Klammern]:

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Te	.0252 (.0275)	.1181 (.1183)	-.1222 (-.1156)
O _I	.366 (.240)	-.028 (-.022)	.329 (.235)
O _{II}	.221 (.164)	.168 (.174)	.581 (.535)

Mit diesen Parametern und geeigneten isotropen Temperaturfaktoren erhält man in beiden Projektionen (bis $\sin \theta / \lambda = 1,0 \text{ \AA}^{-1}$; insgesamt ~150 beobachtete und ~50 nicht beobachtete Reflexe) für die vorhandenen Reflexe *R* ~ 0,07 und unter Einschluß auch der zu Null beobachteten Reflexe *R'* ~ 0,09.

Die Atomanordnung stellt nicht, wie von den früheren Autoren¹⁾ angegeben, einen verzerrten Brookit-Typ dar, sondern eine kovalente Schichtstruktur. Jedes Te ist wie im tetragonalen TeO₂^{2),3)} von vier Sauerstoffen in einem mittleren Abstand von 1,98 Å umgeben. Koordinationsfigur ist gleichsam eine etwas verzerrte trigonale Dipyramide, von der man ein Basisatom entfernt hat. Je zwei solcher TeO₄-Gruppen verknüpfen sich ähnlich wie in Denningit⁴⁾ über eine Kante zu Te₂O₆-Baueinheiten und diese über die vier „freien“ Sauerstoff-Ecken zu ²Te⁽⁴⁾O₂⁽²⁾-Schichten parallel (010).

Zur genaueren Bestimmung der interatomaren Abstände wird eine 3-dimensionale Verfeinerung durchgeführt. Herrn

Dr. J. A. MANDARINO, Ontario, danken wir für das Untersuchungsmaterial.

Mineralogisch-Kristallographisches Institut der Universität, Göttingen, Lotzestraße 16—18

H. BEYER, K. SAHL und J. ZEMANN

Eingegangen am 23. Februar 1965

¹⁾ ITO, T., u. H. SAWADA: Z. Krist. 102, 13 (1939). — ²⁾ STEHLIK, B., u. L. BALAK: Chem. Zvesti 2, 6, 23, 69 (1948). — ³⁾ LECIEJEWICZ, J.: Z. Krist. 116, 345 (1961). — ⁴⁾ WALITZI, E. M.: Naturwissenschaften 51, 334 (1964).

Epitaxie von linearen Makromolekeln auf Quarz

Es wurden Modellversuche unternommen, die über das Verhalten von Makromolekeln im Grenzgebiet Fest-Flüssig Auskunft geben sollten. Dabei werden in erster Linie ebene Kristalloberflächen mit ihrer definierten periodischen Struktur der Bausteine geeignet sein, Auskünfte zu vermitteln, da sie den Makromolekeln strukturanaloge Muster in der Dimensionierung der Abstände aktiver Gruppen anbieten könnten [Matrizenprinzip¹⁾]. Die Problemstellung ist nach unserer Auffassung wichtig für die Grundlagenforschung der Silikose.

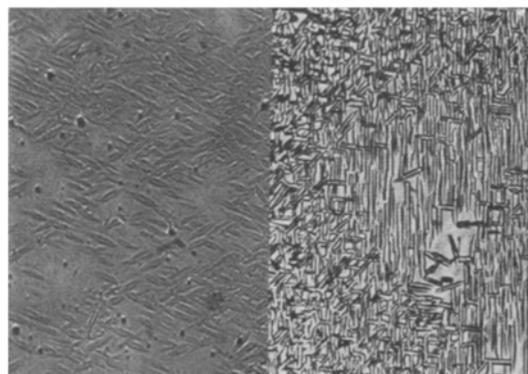


Fig. 1. Orientierte Aufwachsung von Nylon 8 auf einer Prismenfläche von L-Quarz. † [c]-Träger. (Auflicht). Vergr. 525 ×

Fig. 2. Epitaxie von Pentachlorphenol auf einer von einer Prismenfläche von R-Quarz abgehobenen Folie von Polyacrylnitril. † [c]-Quarz. Vergr. 250 ×

In der früher mitgeteilten Weise²⁾ wurden auf aktivierten, kristallonomisch definierten Oberflächen von Quarzkristallen synthetische Hochpolymere auf Epitaxie getestet. Eine erste Gruppe betraf Polyamide vom Nylontypus, und zwar Nylon 6,6, Nylon 6,10 und Nylon 8. Sie wurden aus verdünnten Lösungen zur Abscheidung gebracht. Von Nylon 8 seien hier nur wenige μ lange, spindelförmige Faseraggregate (Fig. 1) gezeigt. Die Begründung der beobachteten Epitaxien kann in der selektiven orientierten Adsorption und anschließender Keimbildung gesehen und auf Grund der nachfolgend verzeichneten eindimensionalen Strukturanalogien von Faserachsenperioden der Hochpolymeren und Gittervektoren der (1010)-Strukturfläche des Quarzes formal beschrieben werden:

Nylon 6,6⁴⁾: $d_{\{001\}} = 17,20 \text{ \AA} (7,05 + 10,15) \sim \text{Quarz}$:
 $d_{\{1\bar{1}18\}} = 7,29 \text{ \AA}$
 Nylon 6,10⁴⁾: $d_{\{001\}} = 22,4 \text{ \AA} (10,15 + 12,25) \sim \text{Quarz}$:
 $3d_{\{1\bar{1}18\}} = 21,87 \text{ \AA}$
 Nylon 8⁵⁾: $d_{\{010\}} = 22,4 \text{ \AA} (10,15 + 12,25) \sim \text{Quarz}$:
 $d_{\{2\bar{2}3\}} = 11,18 \text{ \AA}$.

Die in Klammern gesetzten Zahlenwerte geben die unsymmetrische Aufteilung der Perioden der Faserachsen durch die in cis-Stellung gelegenen aktiven Gruppen an. — Die Interpretation der analogen Epitaxien auf Rhomboederflächen von Quarz ist noch nicht abgeschlossen.

Ein weiteres Beispiel stellt Polyacrylnitril (PAN) dar. Hier wurde die epitaktische Ausrichtung des Hochpolymeren auf Prismen- und Rhomboederflächen des Quarzes nach einem von J. WILLEMS³⁾ angegebenen Abdruckverfahren erbracht. Es wurden Folien von PAN auf den Quarzoberflächen hergestellt, sie wurden abgehoben, und auf der Gegenfläche zur Trägerfläche wurde durch Bedampfung mit geeigneten Substanzen (z. B. Pentachlorphenol) die epitaktische Ausrichtung