

**LiZnSb, eine weitere ternäre Phase mit
Wurtzitgerüst**

LiZnSb, an Additional Ternary Phase
with a Wurtzit-type Lattice

GERHARD SCHROEDER und HANS-UWE SCHUSTER
Institut für Anorganische Chemie der Universität zu
Köln

(Z. Naturforsch. **30b**, 978-979 [1975]; eingegangen am 26. Mai 1975)

Ternary Lithium Compounds, Crystal Data

X-ray investigations on the ternary phase
LiZnSb showed that this phase crystallizes in
a Wurtzit-type lattice with an ordered ar-
rangement of the positions of Zn and Sb.

Mit der Phase LiGaGe¹ hatten wir in der Vielzahl von ternären Verbindungen des Lithiums mit Elementen der 4. bzw. 5. Hauptgruppe, die in einer modifizierten Zinkblendestruktur kristallisieren², einen ersten Vertreter gefunden, der ein Wurtzitgerüst aus den schweren Atomen aufbaut, in dem die Lithium-Atome die Oktaederlücken besetzen. Die Frage nach einer geordneten oder statistischen Verteilung der Ga- bzw. Ge-Atome konnte wegen der fast gleich großen Atomformfaktoren dieser Elemente nur aufgrund von sehr geringen Höhenunterschieden bei den Maxima einer *a*,*c*-FOURIER-Projektion zugunsten der geordneten Verteilung entschieden werden³.

Über die Darstellung und Eigenschaften des LiZnSb sowie über die Indizierung des Pulverdiagramms haben wir bereits berichtet⁴. Danach ist für das LiZnSb Isotypie mit dem LiGaGe zu erwarten. Wegen der erheblich größeren Unterschiede in den Atomformfaktoren sollte sich die Annahme einer geordneten Verteilung der Zn- und Sb-Atome auf die Punktlagen des Wurtzitgitters besser beweisen lassen als an der Phase LiGaGe. Allerdings war wegen der relativ großen Empfindlichkeit des LiZnSb gegen mechanische Beanspruchung die Isolierung eines brauchbaren Einkristalls schwierig. Aus mehreren hundert Bruchstücken konnte schließlich ein Kristall selektiert werden, der für eine Strukturbestimmung geeignet war. Der Vergleich der Drehkristall- und Pulveraufnahmen bewies die Identität des Kristalls mit dem Pulver der gesamten Probe.

Die Auswertung der WEISSENBERG- und Präzessionsaufnahmen der hexagonal kristallisierenden Phase, deren Elementarzelle 2 Formeleinheiten enthält, führt zur Laue-Klasse 6/*mm*. Es gelten die folgenden Auslöschungsgesetze:

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H.-U. SCHUSTER, Institut für Anorganische Chemie der Universität D-5000 Köln 41, Greinstr. 6, BRD.

hkl : für $h-k=3n$: $l=2n$

(hhl : $l=2n$)

($00l$: $l=2n$).

Die Messung der Intensitäten erfolgte auf einem halbautomatischen Einkristalldiffraktometer Stadi-2 (Fabr. Stoe), die Strukturrechnungen wurden mit dem X-Ray-Programm 72 im Rechenzentrum der Universität zu Köln durchgeführt.

Eine 3-dimensionale PATTERSON-Synthese ließ sich unter der Annahme deuten, daß die Zn- und Sb-Atome in geordneter Verteilung eine Wurtzitstruktur aufbauen, während die Li-Atome die Oktaederlücken besetzen, und führte zur Raumgruppe $P6_3mc-C_{6v}^4$ (Nr. 186). Für diese Anordnung wurde ein Zuverlässigkeitsfaktor von $R_F=0,093$ erhalten. Die Struktur ist also mit der des LiGaGe isotyp.

Im Gegensatz zum LiGaGe ist beim LiZnSb die geordnete Verteilung der Zn- und Sb-Atome in der 3-dimensionalen FOURIER-Synthese erwartungsgemäß deutlich zu erkennen; das Intensitätsverhältnis der Maxima ergab sich zu 28:51. Strukturrechnungen mit der Annahme einer statistischen Verteilung beider Atomsorten führten zu einem R_F -Wert von über 0,3.

In der folgenden Tab. I sind die Ergebnisse der Kristallstrukturbestimmung zusammengefaßt.

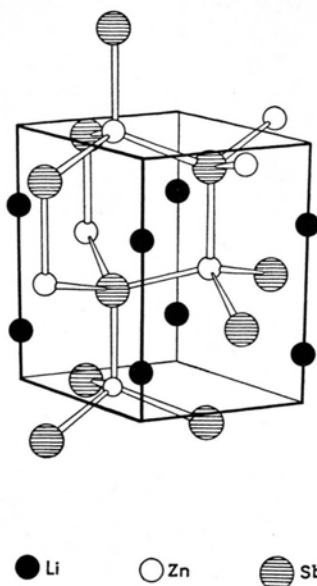
Tab. I. Kristallographische Daten der Verbindung
LiZnSb.

Kristallsystem	hexagonal	
Gitterkonstanten [Å]	$a = 4,43_1$	$c = 7,15_7$
	$c/a = 1,61$	
Dichte		
exp.	$D_4^{25} = 5,22_2$	
theor. [g/cm ³]	$DR_0 = 5,29_4$	
Zahl der Formeleinheiten in der Elementarzelle	$Z = 2$	
Raumgruppe	$P6_3mc - C_{6v}^4$ (Nr. 186)	
Atomlagen	2 Sb in (b) $\frac{1}{3} \frac{2}{3} z$ $z = 0,385$	
	2 Zn in (b) $\frac{1}{3} \frac{2}{3} z$ $z = 0,0$	
	2 Li in (a) $0 \ 0 \ z$ $z = 0,196$	
Zuverlässigkeitsfaktor	$R_F = 0,093$	
Atomabstände [Å]		
Zn-Sb	2,69, 2,75	
Li-Sb	2,89, 3,39	
Li-Zn	2,92, 3,36	

Abb. 1 zeigt die Struktur der Verbindung. Zur Verdeutlichung der tetraedrischen Verknüpfung des Zn-Sb-Gerüsts sind einige Atome der angrenzenden Elementarzellen zusätzlich eingezeichnet.

Die Vorlage für die Abb. 1 wurde im Institut für Anorganische Chemie der Universität Bonn auf dem Rechner WANG 2200 B errechnet und mit Plotter gezeichnet. Herrn Dr. HUNDT danken wir für die Einweisung in das von ihm erstellte Programm.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Verband der Chemischen Industrie danken wir für die Förderung unserer Arbeiten.



- ¹ W. BOCKELMANN, H. JACOBS u. H.-U. SCHUSTER, Z. Naturforsch. **25b**, 1305 [1970].
- ² W. BOCKELMANN u. H.-U. SCHUSTER, Z. Anorg. Allg. Chem. **410**, 241 [1974].
- ³ W. BOCKELMANN u. H.-U. SCHUSTER, Z. Anorg. Allg. Chem. **410**, 233 [1974].
- ⁴ H.-U. SCHUSTER u. G. SCHROEDER, Z. Naturforsch. **27b**, 81 [1972].

Abb. 1. Gitter des LiZnSb, dargestellt an einer Elementarzelle mit angrenzenden Atomen des ZnSb-Gerüsts.