

Tabelle 1. Piezoelektrische Konstanten d_{ij} (20°C), elastische Konstanten c_{ij} (20°C), thermoelastische Konstanten T_{ij} (0°C), Koeffizienten der thermischen Ausdehnung α_i (10°C) von HIO₃ und DIO₃Einheiten: d_{ij} : 10⁻⁸e.s.u.dyn⁻¹; c_{ij} : 10¹¹ dyn.cm⁻²; T_{ij} : 10⁻³ °C⁻¹; α_i : 10⁻⁶ °C⁻¹.

	d_{14}	d_{25}	d_{36}	c_{11}	c_{22}	c_{33}
HIO ₃	-80	-56	+86	3,012	5,805	4,286
DIO ₃	-76	-58	+88	3,009	5,800	4,281
	c_{12}	c_{13}	c_{23}	c_{44}	c_{55}	c_{66}
HIO ₃	1,608	1,106	0,796	1,688	2,065	1,582
DIO ₃	1,598	1,098	0,801	1,692	2,064	1,594
	T_{11}	T_{22}	T_{33}	T_{12}	T_{13}	T_{23}
HIO ₃	-0,79	-0,62	-0,64	-0,75	-0,44	-0,50
DIO ₃	-0,83	-0,63	-0,66	-0,76	-0,43	-0,53
	T_{44}	T_{55}	T_{66}	α_1	α_2	α_3
HIO ₃	-0,85	-0,75	-0,66	38,3	30,3	51,3
DIO ₃	-0,85	-0,76	-0,67	38,8	30,5	54

durch O-I-O-Bindungen als auch durch O-H-O-Brücken verknüpft sind. Das könnte den hohen Wert von c_{22} erklären. Allerdings lassen sich auch schwächer gebundene HIO₃-Ketten längs [001] ohne O-H-O-Brücken in der Struktur erkennen. Die Abweichungen von den Cauchy-Relationen, die bei rhombischen Kristallen die Gestalt $g_{kk} = c_{ij} - c_{9-i-j, 9-i-j}$ annehmen ($i \neq j \neq k \neq i$), $i, j, k: 1, 2, 3$, weisen eine starke Anisotropie auf: schwach positives g_{33} , stark negative g_{11} und g_{22} . Nach den bisherigen Erfahrungen (Haussühl, 1967) muss diese Anisotropie so gedeutet werden: In der Ebene (001) überlappen sich die Elektronenhüllen schwächer als senkrecht dazu. Das heisst, die Struktur besitzt bevorzugt in Richtung [001] starke Überlappungen oder gerichtete kovalente Bindungsanteile. Die daraus entspringende erhöhte Anharmonizität kommt auch unmittelbar im ausgeprägten Maximum der thermischen Ausdehnung für die Richtung [001] zum Ausdruck. Damit ist auch erwiesen, dass in HIO₃ keine Baueinheiten vom Typ IO₆ auftreten. Solche Bausteine lassen nach den bisherigen Erfahrungen keine derartige Anisotropie zu.

Literatur

- BECHMANN, R. (1966). *Elastische, piezoelektrische, piezooptische und elektrooptische Konstanten von Kristallen*. Landolt-Börnstein. Gruppe III, Band 1. Berlin, Heidelberg, New York: Springer.
- GROTH, P. (1906). *Chemische Kristallographie*. I. Leipzig: Wilhelm Engelmann.
- HAUSSÜHL, S. (1961). *Z. Kristallogr.* **116**, 371.
- HAUSSÜHL, S. (1967). *Phys. kondens. Materie*, **6**, 181.
- HAUSSÜHL, S. (1968). Eigene unveröffentlichte Werte.
- JONA, F. & SHIRANE, G. (1962). *Ferroelectric Crystals*. Oxford, London, New York, Paris: Pergamon Press.
- MASON, W. P. (1950). *Piezoelectric Crystals and Their Application to Ultrasonics*. Princeton, New Jersey, New York: D. van Nostrand Co.
- REZ, J. S. (1967). *Kristalle mit nichtlinearer Polarisierbarkeit* (russ.). *Usp. physik. Nauk*, **93**, 633.
- ROGER, M. T. & HELMHOLZ, L. (1941). *J. Amer. Chem. Soc.* **63**, 278.
- WELLS, A. F. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 128.

Acta Cryst. (1968). **A24**, 698

Fehler in den International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. I. Von ERNST SCHULTZE-RHONHOF, *Anorganisch-Chemisches Institut der Universität, 53 Bonn, Meckenheimer Allee 168, Deutschland*

(Eingegangen am 6. Mai 1968)

Three errors of structure factor calculations for space groups 88, 97, 134 are given.

1. Zu S. 423, Raumgruppe $I4_1/a$ (Nr. 88)

Die Formeln zu Beginn der Seite müssen heissen:

$$A = G \cos 2\pi \frac{2k+l}{8}; B = G \sin 2\pi \frac{2k+l}{8}, \dots$$

$h+k+l=n$ muss heissen: $h+k+l=2n$.

2. Zu S. 430, Raumgruppe $I422$ (Nr. 97)

1. Zeile muss heissen:

$$(0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) +$$

$$|x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, z; \bar{x}, y, \bar{z}; x, \bar{y}, \bar{z}; y, x, \bar{z}; y, \bar{x}, z; \bar{y}, x, z|.$$

3. Zu S. 453, Raumgruppe $P4_2/nmm$ (Nr. 134) (1. Aufstellung)

Die Formeln für B (an zwei Stellen) müssen lauten:

$$B = -8 \dots [\dots + \dots].$$

Literatur

International Tables for X-ray Crystallography (1952). Vol. I. S. 423; 430; 453. Birmingham: Kynoch Press.