

Fig. 1. The Pu(1) and Pt polyhedra in Pu<sub>2</sub>Pt. View is approximately along *x*. The origin is at the lower left rear. Pu(1) is at 0.847,  $\frac{1}{4}$ , 0.079 and the Pt is at 0.741,  $\frac{1}{4}$ , 0.900.

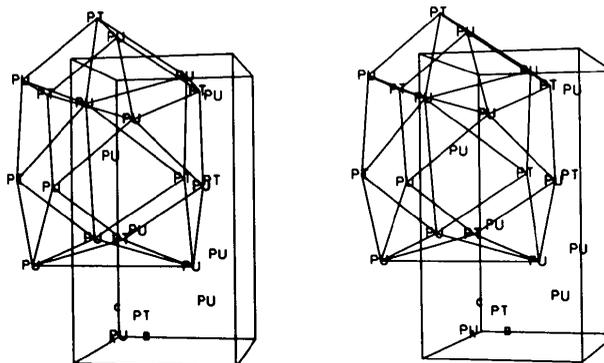
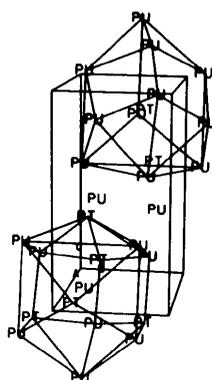


Fig. 2. The Pu(2) polyhedron in Pu<sub>2</sub>Pt. Pu(2) is at 0.984,  $\frac{1}{4}$ , 0.678.

polyhedra and the number of neighbors for each of the atoms can vary considerably for compounds nominally of the same structure type.

The neighbors and polyhedra were determined as described by Cromer & Larson (1977). The resulting interatomic distances are given in Table 3. These distances are similar to those found in other Pu–Pt compounds. Pu(1) has five Pt and eight Pu neighbors. There are five neighbors in the mirror plane and four on either side of this plane. Pu(2) has six Pt neighbors and ten Pu neighbors with six neighbors in the mirror plane and five on either side. The Pt atom has 11 neighbors, all Pu. There are five neighbors in the mirror plane and three on either side. Stereo drawings of these polyhedra are shown in Figs. 1 and 2.

Thanks are due to R. E. Tate for preparation of the alloy. All calculations were done on a CDC-7600 computer using the *LASL* system of crystallographic programs developed primarily by A. C. Larson.

## References

- CROMER, D. T. & LARSON, A. C. (1975). *Acta Cryst.* **B31**, 1758–1759.  
 CROMER, D. T. & LARSON, A. C. (1977). *Acta Cryst.* **B33**, 2620–2627.  
 CROMER, D. T. & LIBERMAN, D. (1970). *J. Chem. Phys.* **53**, 1891–1898.  
 CROMER, D. T. & WABER, J. T. (1974). *International Tables for X-ray Crystallography*. Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.  
 FURNAS, T. C. (1957). *Single Crystal Orienter Instruction Manual*. Milwaukee: General Electric Company.  
 KUTAITSEV, V. I., CHEBOTAREV, N. T., LEBEDEV, I. G., ANDRIANOV, M. A., KONEV, V. N. & MENSHIKOVA, T. S. (1965). *Plutonium 1965*, edited by A. E. KAY & M. B. WALDRON, pp. 420–449. London: Chapman & Hall.  
 LAND, C. C., PETERSON, D. E. & ROOF, R. B. (1978). *J. Nucl. Mater.* To be published.  
 PEARSON, W. B. (1967). *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*, pp. 11–12. Oxford: Pergamon Press.

*Acta Cryst.* (1978). **B34**, 2610–2612

## Oxysulfure de Gallium et de Lanthane LaGaOS<sub>2</sub>

PAR S. JAULMES

Laboratoire de Physique (Laboratoire de Chimie Minérale Structurale associé au CNRS n° 200),  
 Faculté des Sciences Pharmaceutiques et Biologiques de Paris-Luxembourg, 4 avenue de l'Observatoire,  
 75270 Paris CEDEX 06, France

(Reçu le 10 février 1978, accepté le 11 avril 1978)

**Abstract.** Orthorhombic, space group *Pmca*,  $a = 5.5419$  (9),  $b = 5.767$  (1),  $c = 11.443$  (1) Å,  $Z = 4$ .  $\mu = 203$  cm<sup>-1</sup>. The structure was solved from single-crystal data. With anisotropic thermal parameters, the

final  $R$  value is 0.033. This structure is compact and all non-metal atoms are simultaneously bonded to the two metal atoms.

**Introduction.** Au cours de l'étude du diagramme de phase du système  $\text{La}_2\text{O}_3\text{S}-\text{Ga}_2\text{S}_3$  (Guittard, Pardo & Loireau-Lozac'h, 1977), trois combinaisons intermédiaires ont été mises en évidence:  $(\text{LaO})_4\text{Ga}_{8/3}\text{S}_6$ ,  $\text{LaGaOS}_2$  et  $\text{LaGa}_3\text{OS}_5$ . La structure de la première présente l'alternance de feuillets (LaO) et de couches de gallium et de soufre, et l'on pouvait imaginer une structure semblable en couches pour la seconde, d'après sa formule et ses paramètres cristallins.

Le monocristal utilisé pour cette étude est suffisamment petit ( $20 \times 50 \times 70 \mu\text{m}$ ) pour que l'on puisse négliger l'absorption des rayons X. Les extinctions systématiques observées pour les réflexions  $h0l$  obéissent à la condition  $l = 2n + 1$  et pour les réflexions  $hk0$  à la condition  $h = 2n + 1$ , ce qui conduit à deux groupes d'espace possibles:  $P2_1ca$  et  $Pmca$ . C'est la répartition statistique des facteurs de structure normalisée en fonction de leur intensité qui montre que le groupe d'espace est centrosymétrique. Les intensités des réflexions ont été enregistrées à l'aide d'un diffractomètre Nonius CAD-4 avec le rayonnement  $\text{Mo K}\alpha$ . Pour les mesures nous avons effectué un balayage  $\omega-2\theta$  dont l'amplitude en degrés était  $\delta = 1,0 + 0,3 \text{ tg } \theta$ ,  $\theta$  varie de 1 à 40°. Trois réflexions de contrôle (400, 040 et 008) ont été utilisées et mesurées toutes les cent réflexions. L'écart type calculé sur les mesures répétées de ces trois réflexions est de 1,01%. Les intensités de 1211 réflexions indépendantes par symétrie ont été conservées pour lesquelles  $I$  est supérieur à  $2\sigma(I)$ , l'écart type  $\sigma(I)$  sur la mesure étant déduit des taux de comptage effectués par l'appareil.

La structure a été résolue par la méthode de l'atome lourd. L'interprétation de la fonction de Patterson donne les coordonnées  $x$ ,  $y$  et  $z$  de l'atome de lanthane. La densité électronique calculée avec les phases de cet atome permet de déterminer progressivement la

position du gallium et des atomes de soufre et finalement celle de l'atome d'oxygène. Les facteurs de structure sont calculés à partir des facteurs de diffusion donnés par *International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Après plusieurs cycles d'affinement nous introduisons des facteurs d'agitation thermique anisotrope pour tous les atomes. Ceux-ci convergent bien mais les réflexions de forte intensité, à faible  $\sin \theta/\lambda$  restent entachées d'une erreur systématique ( $F_o < F_c$ ) qui est beaucoup plus grande que celle qui atteint les autres réflexions. Nous effectuons alors trois cycles d'affinement avec le programme *ORXFLS* (Busing, 1971) où l'on introduit une correction de l'extinction secondaire dans le cristal selon une méthode simplifiée qui dérive de la formulation de Zachariasen (Coppens & Hamilton, 1970). Le facteur  $R$  s'abaisse alors de 0,041 à 0,033 pour les 1211 réflexions indépendantes.\*

**Discussion.** La Fig. 1 donne une projection de la structure parallèlement à la direction  $a$ . Dans le Tableau 1 on trouve les coordonnées atomiques. Dans le Tableau 2 ont été relevées les distances interatomiques. Chaque atome de gallium est entouré par deux atomes d'oxygène et deux atomes de soufre formant un tétraèdre déformé dont l'arête O—O est parallèle à l'axe  $Ox$ . Les deux tétraèdres formés par deux atomes de gallium voisins en projection sont décalés de  $a/2$  le long de  $Ox$  et partagent l'atome d'oxygène de l'un des sommets. Ainsi, le long de la file d'atomes d'oxygène, parallèle à  $Ox$  se construit une rangée de tétraèdres ( $\text{GaO}_2\text{S}_2$ ), alternativement situés de part et d'autre de cette file et se déduisant l'une de l'autre par le plan de glissement en  $z = \frac{1}{4}$ . Les assemblages unidimensionnels font intervenir tous les atomes de soufre et d'oxygène. Ils enserrant les atomes de lanthane qui assurent leur cohésion. Chaque atome de lanthane est lié à deux atomes d'oxygène et huit atomes de soufre; coordinence particulièrement élevée qui explique que cette phase ne soit connue qu'avec les deux premiers éléments de la famille des lanthanides. Quatre atomes de soufre sont situés dans le même plan

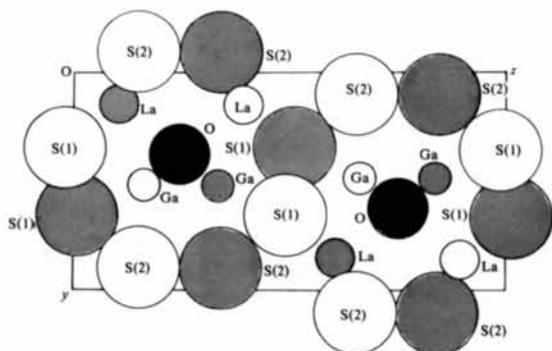


Fig. 1. Projection de la maille parallèlement à la direction  $a$ . Les atomes de cote  $\frac{1}{4}$  sont en gris clair, ceux de cote  $\frac{1}{2}$  sont laissés en blanc. Les atomes d'oxygène sont en noir.

\* Les listes des facteurs de structure et des facteurs d'agitation thermique anisotrope ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 33538: 23 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. Coordonnées atomiques avec leurs écarts types entre parenthèses

		$x$	$y$	$z$
La	4(d)	0,25	0,14976 (7)	0,10759 (4)
Ga	4(d)	0,25	0,5200 (1)	0,33565 (7)
S(1)	4(d)	0,25	0,6567 (3)	0,0112 (2)
S(2)	4(d)	0,25	0,0971 (3)	0,8449 (2)
O	4(c)	0	0,3771 (8)	0,25

Tableau 2. Distances interatomiques (Å) et écarts types

Ga—O	1,887 (2) × 2	La—S(1)	3,049 (2)
Ga—S(2)	2,210 (2)	La—S(2)	3,067 (2)
Ga—S(1)	2,253 (2)	La—S(1)	3,125 (2)
La—O	2,509 (3) × 2	La—S(2)	3,162 (1) × 2
La—S(2)	3,020 (2)	La—S(1)	3,282 (1) × 2

que l'atome de lanthane (plan parallèle au plan de projection). De part et d'autre de ce plan et symétriquement sont disposés quatre autres atomes de soufre (à une distance de  $a/2$  du plan S<sub>4</sub>La) qui forment un rectangle, l'atome de lanthane est à peu de distance en avant du centre de ce rectangle. Enfin de part et d'autre de ce plan S<sub>4</sub>La, se trouvent les deux atomes d'oxygène (à une distance de  $a/4$  de ce plan S<sub>4</sub>La).

L'atome d'oxygène est à l'intérieur d'un tétraèdre déformé constitué par deux atomes de lanthane et deux atomes de gallium, avec des liaisons Ga—O et La—O de longueurs normales.

Il faut essentiellement retenir de cette structure que les atomes non métalliques sont liés aux deux atomes

métalliques, sans liaison préférentielle. Ce caractère distingue fondamentalement cette structure de celle de (LaO)<sub>4</sub>Ga<sub>8/3</sub>S<sub>6</sub>, dans laquelle l'oxygène n'est lié qu'au lanthane, et le gallium n'est lié qu'au soufre. Il n'existe pas dans LaGaOS<sub>2</sub> à l'inverse du composé précédent de feuillets (LaO)<sub>n</sub>.

Nous remercions M le Professeur R. Chevalier pour l'aide qu'il nous a apportée lors des mesures.

Le cristal utilisé pour cette étude a été préparé par Mlle M. Guittard à qui nous exprimons notre grande reconnaissance.

#### Références

- BUSING, W. R. (1971). *Acta Cryst.* **A27**, 683–684.  
 COPPENS, P. & HAMILTON, W. C. (1970). *Acta Cryst.* **A26**, 71–83.  
 GUITTARD, M., PARDO, A.-M. & LOIREAU-LOZAC'H, A. M. (1977). *C. R. Acad. Sci.* **284**, 37–39.  
*International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV, pp. 71–98. Birmingham: Kynoch Press.

*Acta Cryst.* (1978). **B34**, 2612–2614

## Structure du Sulfure Mixte d'Uranium et de Scandium UScS<sub>3</sub>

PAR RENÉ JULIEN

*Laboratoire de Chimie minérale, Faculté des Sciences pharmaceutiques, 3 place Dewailly, 80000 Amiens, France*

NOËL RODIER

*Laboratoire de Chimie minérale, Faculté des Sciences pharmaceutiques et biologiques, rue J.-B. Clément, 92290 Châtenay-Malabry, France*

ET VOVAN TIEN

*Laboratoire de Chimie minérale, Faculté des Sciences pharmaceutiques et biologiques, 4 avenue de l'Observatoire, 75006 Paris, France*

(Reçu le 28 mars 1978, accepté le 11 avril 1978)

**Abstract.** Orthorhombic, space group *Cmcm*,  $a = 3.765$  (2),  $b = 12.134$  (6),  $c = 9.176$  (5) Å.  $Z = 4$ . The crystal structure was determined from single-crystal Enraf–Nonius CAD-4 diffractometer data by the heavy-atom method.  $R = 0.034$ . The U atom is eight-coordinated and the Sc atom has an octahedral environment.

**Introduction.** Le sulfure mixte d'uranium et de scandium UScS<sub>3</sub> a été préparé par action du sulfure d'hydrogène sur le mélange 2UO<sub>2</sub>–Sc<sub>2</sub>O<sub>3</sub> chauffé à 1350°C. Afin d'obtenir des monocristaux, la pré-

paration a été fondue dans une atmosphère d'argon en élevant sa température jusqu'à 1800°C. Un monocristal, de forme approximativement parallélépipédique, mesurant environ 40 × 50 × 120 μm, a été prélevé dans le produit ainsi obtenu et grossièrement écrasé.

Les diagrammes de cristal tournant et de Weissenberg révèlent un réseau de symétrie orthorhombique.

Les extinctions systématiques autorisent les trois groupes spatiaux *Cmc2*<sub>1</sub>, *C2cm* (symbole standard *Ama2*) et *Cmcm*, désignés respectivement par les numéros 36, 40 et 63 dans *International Tables for X-ray Crystallography* (1969). Dans les trois groupes