

SHORT-FORMAT PAPERS

Contributions intended for publication under this heading should follow the format given in the Checklist for Authors [*Acta Cryst.* (1985). C41, 1–4].

Acta Cryst. (1991). C47, 1300–1301

Structure de Tl_2SnTe_3

PAR V. AGAFONOV, B. LEGENDRE ET N. RODIER

Laboratoire de Chimie Minérale et de Cristallographie, Faculté de Pharmacie, 5 rue J.-B. Clément,
92296 Châtenay-Malabry CEDEX, France

J. M. CENSE

Laboratoire d'Informatique Chimique, ENSCP, 11 rue P. et M. Curie, 75005, Paris, France

ET E. DICI ET G. KRA

Laboratoire de Chimie Minérale, Faculté des Sciences et Techniques, 22 BP 582 Abidjan 22,
République de Côte d'Ivoire

(Reçu le 20 septembre 1990, accepté le 22 novembre 1990)

Abstract. Tl_2SnTe_3 , $M_r = 910.2$, orthorhombic, *Pnma*, $a = 8.410(1)$, $b = 22.251(6)$, $c = 8.499(4)$ Å, $V = 1590(1)$ Å³, $Z = 8$, $D_x = 7.60$ Mg m⁻³, $\lambda(\text{Mo } K\alpha) = 0.7107$ Å, $\mu = 54.71$ mm⁻¹, $F(000) = 2944$, $T = 296$ K, final $R = 0.035$ for 1045 independent observed reflections. The structure consists of layers of atoms along the b axis, the sequence and the composition of which are as follows: {Te}, {Sn, Tl}, {Te}, {Sn, Tl}, {Te}, {Tl}.... It can be regarded as constituted of double sheets of SnTe_4 tetrahedra and TlTe_8 square antiprisms alternating with layers of Tl atoms. In each sheet a TlTe_8 antiprism is surrounded by four SnTe_4 tetrahedra and *vice versa*. A double sheet is formed by pairs of tetrahedra linked by a common edge and by pairs of antiprisms which have a common base. The Tl atoms of the layers build up a two-dimensional network of irregular quadrilaterals. Each of them has one Tl and five Te atom neighbours.

Partie expérimentale. Des monocristaux de Tl_2SnTe_3 ont été préparés par recuit prolongé à 543 K à partir d'un mélange stoechiométrique de Tl, Sn et Te préalablement fondu. Cristal en forme de plaquette (0,120 × 0,120 × 0,020 mm). Diffractomètre Enraf-Nonius CAD-4. Dimensions de la maille déterminées avec 25 réflexions telles que: $5,70 \leq \theta \leq 18,12^\circ$. Balayage $\theta-2\theta$ d'amplitude $s = (0,90 + 0,35\text{tg}\theta)^\circ$; $0,039 \leq (\sin\theta)/\lambda \leq 0,617$ Å⁻¹; $0 \leq h \leq 10$, $0 \leq k \leq 27$, $-10 \leq l \leq 0$. Pas de diminution significative de

l'intensité au cours des mesures. 1604 réflexions indépendantes mesurées, 559 réflexions inobservées [$I < 3\sigma(I)$]. Réflexions de contrôle de l'intensité: 2,12, $\bar{2}$, 400 et 0,12,0, $\sigma(I)/I(\text{contrôle}) = 0,007$. Correction d'absorption: programme *ABSCOR* (Coppens, Leiserowitz & Rabinovich, 1965). Valeurs maximale et minimale du coefficient de transmission: 0,28 et 0,03. Méthodes directes, programme *MULTAN11/82* (Main, Fiske, Hull, Lessinger, Germain, Declercq & Woolfson, 1982). Affinement basé sur les F , programme à matrice complète. Paramètres affinés: x , y , z et β_{ij} . $R = 0,035$, $wR = 0,038$, $w = 1/\sigma^2(F)$, $S = 1,18$; $(\Delta/\sigma)_{\text{max}} = 0,02$; $\Delta\rho_{\text{max}} = 2,4(4)$, $\Delta\rho_{\text{min}} = -2,0(4)$ e Å⁻³. Facteurs de diffusion de *International Tables for X-ray Crystallography* (1974, Tome IV, pp. 99 et 149). Programmes de calcul du système *SDP* (B. A. Frenz & Associates, Inc., 1982). Ordinateur DEC VAX3100. Les coordonnées atomiques relatives et les facteurs de température isotropes équivalents sont rapportés dans le Tableau 1, les longueurs et les angles des liaisons dans le Tableau 2.* Les Fig. 1 et 2 ont été réalisées avec le programme *MOLDRAW* (Cense, 1989). La première représente une vue stéréoscopique de la structure. La

* Les listes des facteurs de structure et des facteurs d'agitation thermique anisotrope ont été déposées aux archives de la British Library Document Supply Centre (Supplementary Publication No. SUP 53783: 10 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Technical Editor, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. *Coordonnées atomiques relatives* ($\times 10^4$), *facteurs de température isotropes équivalents* et *écarts-type*

$$B_{\text{eq}} = (4/3)[a^2\beta_{11} + b^2\beta_{22} + c^2\beta_{33} + (abc\cos\gamma)\beta_{12} + (accos\beta)\beta_{13} + (bccos\alpha)\beta_{23}].$$

	x	y	z	$B_{\text{eq}}(\text{\AA}^2)$
Tl(1)	2705 (1)	105.8 (4)	9651 (1)	3,00 (2)
Tl(2)	2990,6 (9)	1688,6 (3)	99 (1)	2,33 (2)
Sn	1975 (1)	6639,4 (5)	37 (2)	1,48 (2)
Te(1)	3695 (2)	$\frac{3}{4}$	8281 (2)	1,44 (3)
Te(2)	9762 (2)	$\frac{1}{4}$	8259 (2)	1,51 (3)
Te(3)	968 (1)	1015,0 (5)	6934 (2)	1,52 (2)
Te(4)	179 (1)	5892,2 (5)	8154 (2)	1,71 (2)

 Tableau 2. *Principales distances interatomiques* (\AA), *angles Te—Sn—Te* ($^\circ$) *avec écarts-type*

Tl(1)—Tl(2)	3,550 (1)	Tl(2)—Tl(2 ^{''})	3,611 (1)
Tl(1)—Te(3)	3,400 (2)	Tl(2)—Te(1 ^{''''})	3,595 (2)
Tl(1)—Te(3 ^{''})	3,351 (2)	Tl(2)—Te(1 ^{''''})	3,547 (2)
Tl(1)—Te(3 ^{'''})	3,665 (1)	Tl(2)—Te(2 ^{''''})	3,616 (2)
Tl(1)—Te(4 ^{''})	3,525 (2)	Tl(2)—Te(2 ^{''})	3,691 (2)
Tl(1)—Te(4 ['])	3,326 (1)	Tl(2)—Te(3 ['])	3,518 (2)
Sn—Te(1 ['])	2,826 (2)	Tl(2)—Te(3 ^{''})	3,391 (1)
Sn—Te(2 ^{''})	2,811 (2)	Tl(2)—Te(4 ^{''''})	3,529 (1)
Sn—Te(3 ^{''''})	2,742 (2)	Tl(2)—Te(4 ['])	3,500 (2)
Sn—Te(4 ['])	2,759 (2)		
Te(1 ['])—Sn—Te(3 ^{''''})	109,32 (5)	Te(1 ['])—Sn—Te(2 ^{''})	94,39 (5)
Te(1 ['])—Sn—Te(4 ['])	112,46 (6)	Te(2 ^{''})—Sn—Te(3 ^{''''})	111,74 (6)
Te(2 ^{''})—Sn—Te(4 ['])	115,15 (6)	Te(3 ^{''''})—Sn—Te(4 ['])	112,41 (5)

Code de symétrie: (i) $x, y, 1+z$; (ii) $\frac{1}{2}-x, -y, \frac{1}{2}+z$; (iii) $\frac{1}{2}+x, y, \frac{3}{2}-z$; (iv) $-x, -\frac{1}{2}+y, 2-z$; (v) $x, \frac{1}{2}-y, z$; (vi) $1-x, 1-y, 1-z$; (vii) $\frac{1}{2}-x, -\frac{1}{2}+y, -\frac{1}{2}+z$; (viii) $1-x, y, -1+z$; (ix) $-\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-z$; (x) $x, y, -1+z$; (xi) $\frac{1}{2}+x, y, \frac{1}{2}-z$; (xii) $-x, -\frac{1}{2}+y, 1-z$; (xiii) $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, -\frac{1}{2}+z$.

deuxième montre, vus selon l'axe **b**, une double couche d'antiprismes TlTe_8 et de tétraèdres SnTe_4 (Fig. 2a) et un feuillet d'atomes de thallium (Fig. 2b).

Les atomes d'étain et de tellure ne peuvent être distingués à partir du spectre de diffraction des rayons X. Toutefois, le polyèdre entourant l'un des sites est un tétraèdre, ce qui est l'environnement habituel des atomes d'étain, par exemple dans $\text{Sn-}\alpha$ et dans Tl_2SnSe_3 (Jaulmes & Houenou, 1980). La distance moyenne entre le centre et les sommets du tétraèdre est égale à 2,785 (2) \AA et correspond approximativement à la somme des rayons ioniques de Sn^{4+} et de Te^{2-} (Shannon, 1976).

Littérature associée. Structure cristalline de Tl_2GeTe_5 (Touré, Kra, Eholié, Olivier-Fourcade, Jumas & Maurin, 1990; Marsh, 1990). Structure cristalline de Tl_2SnTe_5 (Agafonov, Legendre, Rodier, Cense, Dichi & Kra, 1991). Étude des composés du thallium (I) et de l'indium (I) (Janiak & Hoffmann, 1990).

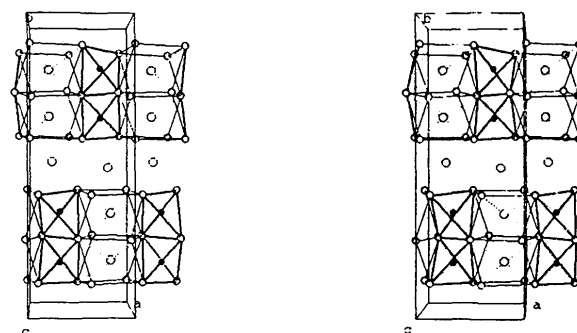
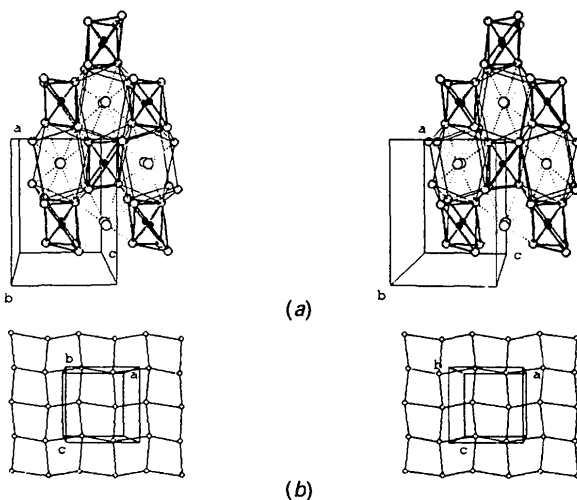


Fig. 1. Vue stéréoscopique de la structure.


 Fig. 2. Vue, selon l'axe **b**, d'une double couche d'antiprismes TlTe_8 et de tétraèdres SnTe_4 (a) et d'un feuillet d'atomes de thallium (b).

Références

- AGAFONOV, V., LEGENDRE, B., RODIER, N., CENSE, J. M., DICHI, E. & KRA, G. (1991). A paraître.
- B. A. FRENZ & ASSOCIATES, INC. (1982). *SDP Structure Determination Package*. College Station, Texas, EU.
- CENSE, J. M. (1989). *Tetrahedron Comput. Methodol.* **2**, 65–71.
- COPPENS, P., LEISEROWITZ, L. & RABINOVICH, D. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 1035–1038.
- JANIAK, C. & HOFFMANN, R. (1990). *J. Am. Chem. Soc.* **112**, 5924–5946.
- JAULMES, S. & HOUENOU, P. (1980). *Mat. Res. Bull.* **15**, 911–914.
- MAIN, P., FISKE, S. J., HULL, S. E., LESSINGER, L., GERMAIN, G., DECLERCQ, J.-P. & WOOLFSON, M. M. (1982). *MULTAN11/82. A System of Computer Programs for the Automatic Solution of Crystal Structures from X-ray Diffraction Data*. Univ. de York, Angleterre, et de Louvain, Belgique.
- MARSH, R. E. (1990). *J. Solid. State Chem.* **87**, 467–469.
- SHANNON, R. D. (1976). *Acta Cryst.* **A32**, 751–756.
- TOURÉ, A. A., KRA, G., EHOLIÉ, R., OLIVIER-FOURCADE, J., JUMAS, J.-C. & MAURIN, M. (1990). *J. Solid. State Chem.* **84**, 245–252.