

Acta Cryst. (1961). **14**, 1100

Groupe d'espace du tungstate de cadmium, CdWO₄. Par JEAN COING-BOYAT, *Laboratoire d'Electrostatique et de Physique du Métal, Institut Fourier, Place du Doyen Gosse, Grenoble (Isère), France*

(Reçu le 20 avril 1961)

Le tungstate de cadmium, sous forme de poudre cristalline a été étudié aux rayons X (radiation $K\alpha$ du fer), au moyen d'un diffractomètre 'Norelco', par Sharp (1960) qui a déterminé les dimensions de la maille monoclinique et proposé le groupe d'espace $P2_1/c(C_{2h}^5)$.

Les réflexions de type $h0l$ n'existent que si $l=2n$ ce qui conduit aux groupes possibles

$$P2_1/c(C_{2h}^5); P2/c(C_{2h}^4) \text{ et } Pc(C_s^2).$$

De plus, Sharp, n'ayant observé aucune raie $(0k0)$ dont k soit impair, en a conclu au groupe $P2_1/c$.

Or, bien que faibles, les raies (010) et (030) existent:

Tableau 1. *Diagramme de poudre de CdWO₄*
(Co $K\alpha_1$, $\lambda=1,78892 \text{ \AA}$)

hkl	d_o	d_c	I_o	I_o (orient.)
010*	5,85 ₅ Å	5,85 ₃ Å	7	30
100	5,02 ₇	5,02 ₃	9	
011*	3,83 ₄₃	3,83 ₁₅	10	
110	3,80 ₆₆	3,81 ₁₅	33	
$\bar{1}11$	3,07 ₆₈	3,07 ₅₄	100	100
111	3,01 ₈₈	3,01 ₈₀	87	
020	2,92 ₇₅	2,92 ₆₄	26	120
021\}	2,53 ₃₉	2,53 ₄₄	59	
002f		2,53 ₃₉		
200	2,51 ₁₉	2,51 ₁₆	28	
210*	2,30 ₉₁	2,30 ₈₂	1	
$\bar{1}02^*$	2,28 ₆₈	2,28 ₆₃	4	
121	2,25 ₁₃	2,25 ₀₉	7	
$\bar{1}12^*$	2,12 ₉₆	2,12 ₉₆	6	
112*	2,09 ₀₂	2,09 ₁₄	8	
030*	1,95 ₀₅	1,95 ₁₀	2	9
022	1,91 ₅₉	1,91 ₅₆	22	
220	1,90 ₆₂	1,90 ₆₀	19	
130	1,81 ₈₆	1,81 ₈₇	24	
$\bar{2}02$	1,80 ₈₀	1,80 ₇₄	21	
$\bar{2}21$	1,79 ₆₂	1,79 ₅₇	14	
221	1,772 ₃	1,772 ₅	17	
202	1,761 ₀	1,761 ₁	16	
$\bar{1}31$	1,716 ₇	1,716 ₉	5	
131*	1,706 ₈	1,706 ₇	2	

* Raies non signalées par Sharp.

Tableau 2. *Mailles des tungstates du type MgWO₄*

	a	b	c	β	
MgWO ₄	4,69 Å	5,68 Å	4,92 Å	89° 40'	(Swanson)
FeWO ₄	4,70 kX.	5,69 kX.	4,93 kX.	90°	(Broch)
MnWO ₄	4,84 kX.	5,76 kX.	4,97 kX.	89° 07'	(Broch)
CdWO ₄	5,02 ₆ Å	5,85 ₄ Å	5,07 ₀ Å	91° 29'	(d'après le présent travail)

Acta Cryst. (1961). **14**, 1100

Comments on the structures of 1,2-dichloroethane and of N₂O₂. By WILLIAM N. LIPSCOMB and FREDERICK E. WANG, *Department of Chemistry, Harvard University, Cambridge 38, Massachusetts* and WALTER R. MAY and E. L. LIPPERT, JR., *Department of Chemistry, Vanderbilt University, Nashville 5, Tennessee.*

(Received 27 March 1961)

The discovery of an error of 0.09 Å in the computation of the C-Cl distance from the final parameters (Reed & Lipscomb, 1953), has led to a least-squares refinement of

on peut les observer sur des clichés de chambre à focalisation et sur des diffractogrammes obtenus à la radiation $K\alpha$ du cobalt (Tableau 1).

Ces raies sont visibles grâce au niveau très faible du fond continu que l'on obtient avec des appareils équipés de monochromateurs: chambre à focalisation type Guinier, diffractomètre C.G.R. (équipé d'un monochromateur modèle Guinier et d'un goniomètre modèle Berthold).

Autre facteur favorable: le tungstate de cadmium était très bien cristallisé; le début de sa préparation était identique à celle de Sharp, mais le précipité blanc, séché, a été ensuite chauffé jusqu'à 900 °C.

Des échantillons pour diffractométrie par réflexion, préparés avec un tel tungstate présentent très facilement un effet d'orientation: les micro-cristaux tendent à se placer de telle sorte que leurs plans réticulaires $(0k0)$ soient parallèles au plan de l'échantillon; les raies $(0k0)$ sont alors considérablement renforcées, et en particulier, les raies (010) et (030) ressortent très bien (Tableau 1). Ce phénomène met donc en relief les raies $(0k0)$ dont k est impair, mais, même en l'absence de tout effet d'orientation, la raie (010) est bien visible.

Le groupe $P2_1/c$ étant ainsi exclu, le groupe d'espace de CdWO₄ est soit $P2/c$, soit Pc .

$P2/c(C_{2h}^4)$ est le groupe le plus probable car c'est justement celui auquel appartient, suivant Broch (1929), les autres tungstates de métaux divalents dont les dimensions de mailles peuvent être comparées à celles du tungstate de Cadmium (Tableau 2). CdWO₄ est donc très probablement isotype de ces autres tungstates.

Je remercie, pour ses conseils, Monsieur Bertaut, Directeur de Recherches au C.N.R.S.

Références

- BROCH, E. K. (1929). *Skr. norske Vidensk. Akad. Math. Nat. Klasse*, **8**, 26.
SHARP, W. E. (1960). *Z. Kristallogr.* **114**, 151.
SWANSON, E. & TATGE, E. (1953). *N.B.S. Circular* **539**, **1**, 84.

the published data for the structure of 1,2-dichloroethane at -140 °C., and to the revised parameters,