

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

**Groupe d'espace du tungstate de cadmium, CdWO<sub>4</sub>.** 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 CdWO<sub>4</sub>*  
(Co  $K\alpha_1$ ,  $\lambda=1,78892 \text{ \AA}$ )

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

\* Raies non signalées par Sharp.

Tableau 2. *Mailles des tungstates du type MgWO<sub>4</sub>*

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

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

**Comments on the structures of 1,2-dichloroethane and of N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.** 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 CdWO<sub>4</sub> 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). CdWO<sub>4</sub> 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,