

*Acta Cryst.* (1961). **14**, 1289

**Mischkristalle des Systems  $\text{ZnSnAs}_2$ -InAs und des Systems  $\text{ZnGeAs}_2$ -InAs.** Von G. GIESECKE und H. PFISTER, *Forschungslaboratorium der Siemens-Schuckertwerke AG, Erlangen*

(Eingegangen am 4. Mai 1961)

Die Halbleiter  $\text{ZnSnAs}_2$  und  $\text{ZnGeAs}_2$  gehören zu den Verbindungen der allgemeinen Art  $A^{\text{II}}B^{\text{IV}}C_2^{\text{V}}$ , die man als ternäre Nachbildungen der  $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ -Verbindungen auffassen kann, wobei die Zahl der Valenzelektronen pro Atom im Mittel unverändert gleich vier bleibt (Folberth & Pfister, 1956). Über die Struktur dieser Verbindungen ist bereits berichtet worden (Pfister, 1958; Folberth & Pfister, 1960).  $\text{ZnGeAs}_2$  hat die tetragonale Chalkopyrit-Struktur (E-1, Typ),  $\text{ZnSnAs}_2$  dagegen eine ungeordnete Zinkblende-Struktur, bei der die Zn- und Sn-Atome statistisch über das eine kubisch flächenzentrierte Teilgitter verteilt sind. Es existieren Mischkristalle dieser ternären Verbindungen mit der  $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ -Verbindung InAs (Folberth, 1959). Die Kristallstruktur dieser Mischkristalle wurde nach dem normalen Debye-Scherrer-Verfahren untersucht (Cu  $K\alpha$ -Strahlung). In Fig. 1 sind die Gitterkonstanten der Mischkristalle des Systems  $\text{ZnSnAs}_2$ -InAs (Zinkblende-Struktur) aufgetragen. Für die Zusammensetzung der Proben sind jeweils die Werte der Einwaage angegeben, wobei die geringfügigen Verdampfungsverluste berücksichtigt wurden. Es besteht eine lückenlose Mischkristallreihe. Die Gitterkonstante ändert sich linear mit der Zusammensetzung der Mischkristalle, d.h. die Vegard'sche Additivitätsregel ist erfüllt. In Fig. 2 sind die Gitterkonstanten der Mischkristalle des Systems  $\text{ZnGeAs}_2$ -InAs (Zinkblende- bzw. Chalkopyrit-Struktur) aufgetragen. Es

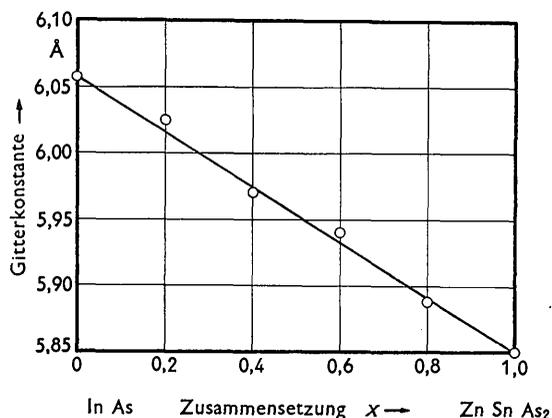


Fig. 1. Gitterkonstanten der Mischkristalle  $(\text{Zn}_{x/2}\text{In}_{1-x}\text{Sn}_{x/2})\text{As}$   $x = \text{Molenbruch } (\text{Zn}_{0,5}, \text{Sn}_{0,5})\text{As}$ .

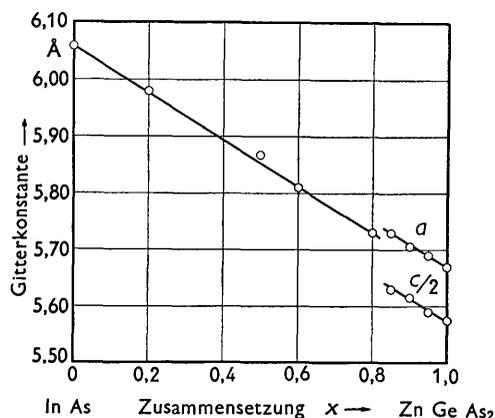


Fig. 2. Gitterkonstanten der Mischkristalle  $(\text{Zn}_{x/2}\text{In}_{1-x}\text{Ge}_{x/2})\text{As}$  mit Zinkblende- bzw. Chalkopyrit-Struktur.

besteht auch hier eine lückenlose Mischkristallreihe, wobei nun aber die Mischkristalle je nach Zusammensetzung entweder die Zinkblende-Struktur oder die Chalkopyrit-Struktur haben. Die Zinkblende-Struktur erstreckt sich bemerkenswerterweise über einen sehr weiten Bereich. Der Umschlag zur Chalkopyrit-Struktur erfolgt erst, wenn im Kationenteilgitter der Anteil der In-Atome kleiner als ein Fünftel wird. In Fig. 2 ist in dem Bereich der Mischkristallreihe, in dem die tetragonale Chalkopyrit-Struktur auftritt, neben der Gitterkonstanten  $a$  auch die halbe Gitterkonstante in der  $c$ -Richtung aufgetragen. Vom Strukturumschlag abgesehen, ändert sich auch in diesem System die Gitterkonstante der Mischkristalle linear mit der Zusammensetzung.

Für die Überlassung der Proben sind wir Herrn Dr. O. G. Folberth zu Dank verpflichtet.

#### Litteratur

- PFISTER, H. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 221.  
 FOLBERTH, O. G. (1959). *Z. Naturforsch.* **14** a, 94.  
 FOLBERTH, O. G. & PFISTER, H. (1956). Vortrag am Int. Coll. Über 'Halbleiter und Phosphore', S. 474. Braunschweig: Vieweg.  
 FOLBERTH, O. G. & PFISTER, H. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 199.

*Acta Cryst.* (1961). **14**, 1289

**The crystal structure of  $\text{NbZn}_2$ .** By C. L. VOLD, *U. S. Naval Research Laboratory, Washington 25, D. C., U. S. A.*

(Received 7 July 1961)

Recent investigations by Meussner & Goode (1960a, b) have established that four niobium-zinc compounds exist above 600 °C.:  $\text{NbZn}$ ,  $\text{Nb}_2\text{Zn}_3$ ,  $\text{NbZn}_2$ , and  $\text{NbZn}_3$ .  $\text{NbZn}_3$  has been shown to be isostructural with ordered  $\text{AuCu}_3$  (Vold, 1960). The structure of the remaining

compounds are under investigation. This communication reports on the structure obtained for  $\text{NbZn}_2$ .

Crystals of  $\text{NbZn}_2$  were prepared by heating  $\text{NbZn}_3$  in an evacuated silica capsule at 1045 °C. for  $3\frac{1}{2}$  hours (within the liquid  $\text{Zn} + \text{NbZn}_2$  phase field) and rapidly