

Acta Cryst. (1962). **15**, 615

Berichtigung zu den Kristalldaten von Stickstoffselenid (NSe)_x. Von HARTMUT BÄRNIGHAUSEN, TASSILO VON VOLKMANN und JOCHEN JANDER, *Anorganische Abteilung des Chemischen Laboratoriums der Universität Freiburg i.Br., Deutschland*

(Eingegangen am 5. Januar 1962)

In einer vorläufigen Mitteilung (1961) haben wir die Elementarzelle von Stickstoffselenid (NSe)_x triklin beschrieben mit den Gitterkonstanten

$$a_0 = 6,47, b_0 = 6,85, c_0 = 6,85 \text{ \AA}; \\ \alpha_0 = 90,5^\circ, \beta_0 = 100,4^\circ, \gamma_0 = 100,4^\circ.$$

Bei der Auswertung der Reflexintensitäten zeigte sich aber, dass Stickstoffselenid monokline Symmetrie besitzt. Dementsprechend ist die numerische Übereinstimmung von b_0 und c_0 sowie von β_0 und γ_0 kein Zufall, sondern folgt zwangsläufig aus der höheren Symmetrie des Gitters.

Die Transformation von der ursprünglichen Aufstellung in die monokline Elementarzelle, deren Fläche (001) zentriert ist, wird durch die Vektorgleichungen

$$\mathbf{a} = \mathbf{b}_0 + \mathbf{c}_0, \quad \mathbf{b} = -\mathbf{b}_0 + \mathbf{c}_0, \quad \mathbf{c} = \mathbf{a}_0$$

beschrieben. Für die monoklinen Gitterkonstanten leiten sich daraus folgende Werte ab:

$$a = 2b_0 \cos \frac{1}{2}\alpha_0 = 9,65 \pm 0,02, \quad b = 2b_0 \sin \frac{1}{2}\alpha_0 = 9,73 \pm 0,02, \\ c = a_0 = 6,47 \pm 0,01 \text{ \AA}; \\ \cos \beta = \cos \beta_0 / \cos \frac{1}{2}\alpha_0; \quad \beta = 104,9 \pm 0,1^\circ.$$

Gegenüber der primitiven triklinen Zelle ist das Volumen der monoklin flächenzentrierten Elementarzelle verdoppelt ($V = 586 \text{ \AA}^3$) und enthält 16 Formeleinheiten (NSe), wahrscheinlich in Form von 4 Molekülen 'N₄Se₄'. Als Raumgruppen kommen Cc und $C2/c$ in Frage, da die Indizesstatistik neben der durch die Flächenzentrierung bedingten integralen Auslöschung aller Interferenzen (hkl) mit $h+k=2n+1$ noch die zonale Auslöschung der Reflexe ($h0l$) mit $l=2n+1$ aufweist.

Literatur

BÄRNIGHAUSEN, H., v. VOLKMANN, T. & JANDER, J. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 1079.

Acta Cryst. (1962). **15**, 615

Preliminary observations of mixed oxide compounds containing BeO. By L. A. HARRIS, R. A. POTTER, and H. L. YAKEL, *Metallurgy Division, Oak Ridge National Laboratory,* Oak Ridge, Tennessee, U.S.A.*

(Received 24 August 1961 and in revised form 27 November 1961 and 31 January 1962)

In the course of a survey of phase formation in mixed oxide systems containing BeO, the compounds 2CaO.3BeO, 2SrO.3BeO, and Y₂O₃.2BeO have been synthesized and

* Operated for the U.S. Atomic Energy Commission by the Union Carbide Corporation.

studied by optical and single-crystal X-ray diffraction methods. Optical and powder diffraction data, in agreement with the results presented here, have been reported previously for the calcium compound (Ader & Bingle, 1956) and for the yttrium compound (Weir & Van Valkenburg, 1960).

Table 1. *Optical and X-ray diffraction data for compounds*

	2 CaO.3 BeO	2 SrO.3 BeO	Y ₂ O ₃ .2 BeO
Optical data			
Morphology	Equiaxial blocks	Needle-like laths or fibers; laths Needle axis [001]	$L_1 \parallel [100] \gg$ $L_2 \parallel [011] \gg$ $L_3 \parallel [?]$
Appearance in polarized light	Isotropic	Birefringent	Birefringent
Indices of refraction	$n = 1.638 \pm 0.003$	$n \parallel [001] = 1.724 \pm 0.003$ (probably n_γ) $n \perp [001]$ (average) = 1.709 ± 0.003 $\gtrsim 0^\circ$ (biaxial)	$n \parallel [100] = 1.855 \pm 0.005$ $n \parallel [011] = 1.840 \pm 0.005$ $\sim 90^\circ$ (biaxial)
2V(est.)	—		
X-ray diffraction data			
Crystal system	Cubic	Orthorhombic	Orthorhombic
Lattice parameters	$a_0 = 14.00 \pm 0.01 \text{ \AA}$	$a_0 = 7.13 \pm 0.01 \text{ \AA}$ $b_0 = 9.01 \pm 0.01 \text{ \AA}$ $c_0 = 18.5 \pm 0.1 \text{ \AA}$ (See text)	$a_0 = 3.51 \pm 0.01 \text{ \AA}$ $b_0 = 9.88 \pm 0.01 \text{ \AA}$ $c_0 = 10.36 \pm 0.02 \text{ \AA}$
Test for pyroelectricity	Negative	Negative	Negative
Probable space group	$Fm\bar{3}m, O_h^5$?	$Pm\bar{c}n, D_{2h}^{16}$
Z (form. wt./cell)	24	10	4
ρ_o (g.cm. ⁻³)	2.70 ± 0.10	3.84 ± 0.05	5.1 ± 0.02
$\rho_{X\text{-ray}}$ (g.cm. ⁻³)	2.71 ± 0.01	3.94 ± 0.04	5.10 ± 0.03