

Acta Cryst. (1966). **21**, 451

Die Phase NbCd₃. Von H. HOLLECK, *Institut für Material- und Festkörperforschung des Kernforschungszentrums Karlsruhe, 75 Karlsruhe, Postfach 947, Deutschland*

(Eingegangen am 23 April 1966)

Im Rahmen von Untersuchungen an Legierungen von hochschmelzenden Übergangsmetallen mit sehr niedrigschmelzenden B-Metallen wurden 10 Proben im System Niob-Kadmium hergestellt und untersucht. Über dieses System lagen keine Literaturangaben vor. Die pulverförmigen Komponenten wurden in Quarzampullen eingeschlossen und 400 Stunden bei 650°C gegläht. Die Untersuchung erfolgte röntgenographisch (Pulver- und Goniometeraufnahmen) und metallographisch.

Wie zu erwarten verlief die Gleichgewichtseinstellung in diesem System äusserst träge. Trotz der langen Glühdauer, war die Reaktion, die über die Dampfphase des Kadmiums erfolgte, nicht vollständig. Als einzige intermetallische Phase konnte bei den gegebenen Glühbedingungen NbCd₃ hergestellt werden. Nennenswerte Löslichkeiten wurden nicht beobachtet.

NbCd₃ kristallisiert im Cu₃Au-Typ (Strukturbericht Typ L1₂), Raumgruppe *Pm3m* (*O_h*) mit einer Gitterkonstanten von $a = 4,215 \text{ \AA}$. Die Elementarzelle enthält 4 Atome: 1 Nb in (0,0,0) 3 Cd in $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$; als Röntgengedichte ergibt sich $\rho = 9,577 \text{ g.cm}^{-3}$.

In Systemen der Übergangsmetalle mit Zink sind die im Cu₃Au-Typ kristallisierenden Phasen TiZn₃, VZn₃ und NbZn₃ bekannt (Rossteutscher & Schubert, 1965). NbCd₃ ist die erste Phase im Cu₃Au-Typ an der Kadmium beteiligt ist. Es besteht bei den dicht-gepackten Strukturen der Zusammensetzung AB₃ offensichtlich eine Konkurrenz zwischen den Typen AuCu₃, TiNi₃, MgCd₃, PuAl₃, TiCu₃ und TiAl₃, die sich nur in der Abfolge der dichtgepackten Schichten unterscheiden.

Literatur

ROSSTEUTSCHER, W. & SCHUBERT, K. (1965). *Z. Metallk.* **56**, 730.

Tabelle 1. *Auswertung einer Pulveraufnahme (114,6 mm Ø Debye-Scherrer Kamera) von NbCd₃ mit Cu Kα-Strahlung*

<i>hkl</i>	10 ³ · sin ² θ ber.	10 ³ · sin ² θ gef.	Inten- sität ber.	Inten- sität gef.	Bemerkung
100	33,4	32,6	32	<i>m</i>	
110	66,8	66,1	24	<i>m</i>	
111	100,0	99,6	3365	<i>st</i>	
200	133,5	133,1	1739	<i>st</i>	
210	167,0	166,7	18	<i>s</i>	
211	200,0	200,0	11	<i>s</i>	
220	267,0	266,8	1050	<i>st</i>	
300	301,0	301,4	6	<i>ss</i>	
221					
310	334,0	334,0	4	<i>ss</i>	
311	368,0	367,2	1192	<i>st</i>	
222	401,5	401,2	355	<i>mst</i>	
320	434,5	434,0	2	<i>m</i>	K, Nb 220
321	468,0	466,9	5	<i>ss</i>	
400	534,0	534,8	181	<i>s</i>	
410	569,0	569,0	5	<i>ss</i>	
322					
411	603,0	604,0	3	<i>ss</i>	
330					
331	635,5	636,1	589	<i>mst</i>	
420	669,0	669,4	589	<i>mst</i>	
421	700,5	700,0	4	<i>ss</i>	
332	736,0	737,0	2	<i>ss</i>	
422	802,5	802,3	787	<i>mst</i>	
430	834,5	834,0	4	<i>sss</i>	
500					
431	870,0	870,0	11	<i>m</i>	K, Nb 400
510					
333	903,5	903,5	1528	<i>st</i>	
511					

K = Koinzidenz

Acta Cryst. (1966). **21**, 451

Crystallographic data for *s*-diphenylthiourea. By PAUL CHERIN, *Solid State Research Department, Fundamental Research Laboratory, Xerox Corporation, Webster, N.Y., U.S.A.*

(Received 18 May 1966)

Crystals of *s*-diphenylthiourea in the form of prisms (1 × 2 × 0.1 mm) were grown from a hot ethyl acetate solution. Oscillation, Weissenberg and precession photographs (Cu Kα, Ni filter) indicated that the crystals were orthorhombic. The cell dimensions which have been refined from powder data (Cu Kα, Ni filter) are as follows: $a = 7.94 \pm 0.02$, $b = 25.58 \pm 0.04$, $c = 5.70 \pm 0.02 \text{ \AA}$.

Systematic absences of *hk0* for *h* odd, *0kl* for *k+l* odd, indicate that the space group is either *Pnma* or *Pn2₁a*. Piezoelectric studies were negative, suggesting that the space group *Pnma* is more probable. The experimental density

is 1.32 g.cm⁻³. The calculated density for four molecules per unit cell is 1.34 g.cm⁻³. If the centrosymmetric space group is correct, then the molecule must lie on the mirror plane, which requires no additional systematic extinctions.

The powder pattern of *s*-diphenylthiourea was obtained on a Philips diffractometer and Debye-Scherrer camera. The intensities observed on the photograph were in agreement with those found with the diffractometer. Therefore, there was probably no preferred orientation. The powder diffraction data obtained are listed in Table 1.

No further work on this compound is contemplated.