

type is observed (Hohnke & Parthé, 1967). This structure type is also found with Ir₃S₈ and most probably with RhS_{~3} and IrSe_{~3}.

This study is a contribution of the Laboratory for Research on the Structure of Matter, University of Pennsylvania, supported by the Advanced Research Projects Agency, Office of the Secretary of Defense.

References

- BARRICELLI, L. B. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 75.
 BILTZ, W. (1937). *Z. anorg. Chem.* **233**, 288.
 BILTZ, W., LAAR, J., EHRLICH, P. & MEISEL, K. (1937). *Z. anorg. Chem.* **233**, 257.
 GANTZEL, P. K., SPARKS, R. A. & TRUEBLOOD, K. N. (1961). Univ. of California Program UCLA LS 1.
 GELLER, S. (1955). *J. Amer. Chem. Soc.* **77**, 2641.
 GELLER, S. (1962a). *Acta Cryst.* **15**, 713.
 GELLER, S. (1962b). *Acta Cryst.* **15**, 1198.
 GELLER, S. & CETLIN, B. B. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 272.
 GROENEVELD-MEIJER, W. O. J. (1955). *Amer. Min.* **40**, 646.
 GVILDYS, J. (1965). Argonne National Laboratory Program Library B106.

- HARALDSEN, H. (1957). *Experientia Suppl.* **7**, 165.
 HOCKINGS, E. F. & WHITE, J. G. (1960). *J. phys. Chem.* **64**, 1042.
 HOHNKE, D. & PARTHÉ, E. (1967). To appear in *Z. Kristallogr.*
 HULLIGER, F. (1964). *Nature, Lond.* **204**, 644.
International Tables for X-ray Crystallography (1959). Vol. II. Birmingham: Kynoch Press.
International Tables for X-ray Crystallography (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
 JEITSCHKO, W. & PARTHÉ, E. (1966). *A Fortran IV Program for the Intensity Calculation of Powder Patterns*. Report of the Laboratory for Research on the Structure of Matter, Univ. of Pennsylvania, Philadelphia, Pa. U.S.A.
 JUZA, R., HUELSMANN, O., MEISEL, K. & BILTZ, W. (1935). *Z. anorg. Chem.* **225**, 369.
 MUELLER, M. H., HEATON, L. & MILLER, K. T. (1960). *Acta Cryst.* **13**, 828.
 OKAYA, Y. (1962). *Private communication*.
 RUMMERY, T. E. & HEYDING, R. D. (1967). *Canad. J. Chem.* **45**, 131.
 SCHUBERT, K., BALK, M., BHAN, S., BREIMER, H., ESSLINGER, P. & STOLZ, E. (1959). *Naturwissenschaften*, **46**, 647.
 THOMASSEN, L. (1929). *Z. phys. Chem.* **B4**, 277.
 ZACHARIASEN, W. H. (1966). *Acta Cryst.* **20**, 334.

Acta Cryst. (1967). **23**, 840

Structures Cristallines des Composés DyAl et CeAl et des Autres Composés Equiatomiques de l'Aluminium avec les Métaux des Terres Rares*

PAR CHRISTIAN BÈCLE ET REMY LEMAIRE

Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal, C.N.R.S., Grenoble, France

(Reçu le 18 mai 1967)

The crystalline structures of the compounds TAl, where T is a rare earth element, are of two types. The first type, DyAl, crystallizes in space group *Pbcm*; the compounds of praseodymium to thulium, except europium, are isomorphous with DyAl. The second type, CeAl, crystallizes in space group *Cmcm*; LaAl is isomorphous with this type of structure. The compound PrAl can have either of these two structures, depending upon the thermal treatment. Both structures are formed from the same motifs, viz. chains of aluminum, trigonal prisms which present an analogy with a half-cell of CsCl. Only the arrangement of these motifs differs. The structure CeAl can be formed from the structure DyAl by sliding the atomic layers in a direction parallel to the *a* axis of DyAl.

Introduction

L'étude des alliages avec les métaux des terres rares a été longtemps retardée en raison des difficultés de préparation; il est en effet difficile de les fondre dans des creusets d'oxydes réfractaires sans les contaminer. Runnals & Lorimer (1965), en préparant un monocristal de samarium métallique dans un creuset d'alumine recristallisée, ont observé des cristaux en forme d'aiguilles sur la paroi du creuset; leur composition

étudiée à la sonde électronique était SmAl. Après analyse aux rayons X, ils ont attribué à ce composé une structure du type CsCl. Van Vucht (1957), Buschow (1965a,b), Buschow & van Vucht (1965, 1966) ont montré que les alliages de composition équiatomique avec l'aluminium cristallisent avec deux mailles orthorhombiques; l'une pour les composés avec le lanthane, le cérium et le praséodyme, l'autre pour les composés avec les éléments allant du praséodyme à l'erbium. Ils ont déterminé les paramètres de la maille et laissé le choix pour ces structures entre plusieurs groupes spatiaux. Avant d'entreprendre l'étude magnétique de ces composés, nous avons cherché à élucider leurs structures cristallines.

* Ce travail recouvre une partie de la thèse de Doctorat d'État ès-Sciences Physiques de M. Christian Bècle: Numéro d'enregistrement au Centre National de la Recherche Scientifique: A. O. 1417; à paraître.

Préparation et données expérimentales

La pureté des éléments de départ constituant les composés préparés était de 99,9% pour la terre rare et 99,99% pour l'aluminium. Nous avons réussi à préparer un monocristal du composé DyAl par le procédé suivant: les constituants sont fondus par haute fréquence sous atmosphère d'hélium, dans un creuset d'alumine recristallisée; à 1400°C, nous avons provoqué une détente de l'hélium et en même temps coupé l'alimentation du four; de petites cavités se forment dans l'alliage; à leur surface on observe des cristaux ayant la forme d'aiguilles.

Les échantillons polycristallins des différents composés étudiés ont été préparés par fusion des constituants dans un four haute fréquence à lévitation. L'alliage est trempé dans une lingotière en cuivre refroidie à l'eau, puis recuit sous vide à 900°C pendant une semaine. Les paramètres des mailles cristallines ont été déterminés sur clichés de poudre.

Le cristal de DyAl sélectionné pour l'étude aux rayons X a la forme d'un cylindre de 0,02 mm de diamètre et 0,07 mm de hauteur. Les paramètres de la maille cristalline ont été déterminés à partir des clichés de cristal tournant: $a = 5,80 \pm 0,01$, $b = 11,40 \pm 0,01$, $c = 5,62 \pm 0,01$ Å. La grande dimension des cristaux est parallèle à l'axe c . Nous avons étudié à l'aide d'une chambre de Weissenberg intégrante les taches de réflexion $hk0$ et $hk1$ de la radiation $K\alpha$ du molybdène, filtrée par un monochromateur. Les intensités de ces taches ont été mesurées avec un photomètre. Les corrections d'absorption ont été effectuées en assimilant le cristal à un cylindre (Bond, 1959); le coefficient d'absorption calculé est $\mu R = 0,6$.

Pour mesurer les intensités diffractées par les échantillons polycristallins nous avons utilisé un diffractomètre Philips; la radiation utilisée était celle du cuivre.

Les calculs nécessaires à l'établissement des projections et des sections de Patterson, des projections de densité électronique, et des affinements simultanés des positions atomiques et des facteurs d'agitation thermique individuels ont été effectués sur la machine CAE 510 du Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal, à l'aide de programmes établis par Bassi (1966). Nous avons utilisé les facteurs de diffusion atomique tabulés dans les *International Tables for X-ray Crystallography* (1962).

Détermination de la structure DyAl

Nous n'avons observé ni les taches $0kl$ avec $k = 2n + 1$, ni les taches $h0l$ avec $l = 2n + 1$. En raison de ces règles d'extinction la structure ne peut être décrite que dans les groupes $Pca2_1$ et $Pbcm$. Une projection de Patterson parallèlement à l'axe c nous a permis de déterminer les coordonnées approchées de huit atomes de dysprosium et celles de quatre atomes d'aluminium. À partir de ces résultats, nous avons pu déterminer les signes des facteurs de structure. Une projection de densité

électronique, suivant l'axe c (Fig.1), a situé quatre atomes d'aluminium. Des considérations d'encombrement limitent la structure à huit unités DyAl par maille. Elle est décrite dans le groupe $Pbcm$. Après affinement sur les facteurs de structure de 118 taches observées, le facteur de confiance $R = \sum |F_o - F_c| / \sum |F_o|$ est de 6,6%. Les paramètres de position et de vibrations thermiques des atomes sont indiqués dans le Tableau 1. Les distances interatomiques sont indiquées dans le Tableau 2. Le Tableau 3 donne la liste des valeurs des facteurs de structure observés et calculés après le dernier cycle d'affinement.

Tableau 1. Coordonnées atomiques et facteurs de température de la structure DyAl décrite dans le groupe d'espace $Pbcm^*$

Atomes	Positions	x	y	B
Dy(1)	4(d)	0,1604 (6)	0,0148 (4)	0,6 (0,1) Å ²
Dy(2)	4(d)	0,4015 (6)	0,3329 (4)	0,6 (0,1)
Al(1)	4(d)	0,6680 (26)	0,1022 (17)	1 (0,3)
Al(2)	4(c)	0,9309 (35)	$\frac{1}{2}$	1 (0,5)

* Les valeurs entre parenthèses représentent les écarts quadratiques moyens calculés par le programme d'affinement, en vraie valeur pour B , multipliées par 10^{-4} pour x et y .

Tableau 2. Distances interatomiques dans DyAl

Atomes	Voisins	Nombre de voisins	Distance
Dy(1)	Dy(1)	2	3,40 ± 0,01 Å
Dy(1)	Dy(2)	1	3,28 ± 0,01
Dy(1)	Dy(2)	2	3,60 ± 0,01
Dy(1)	Al(1)	1	3,02 ± 0,03
Dy(1)	Al(1)	1	3,11 ± 0,03
Dy(1)	Al(1)	2	3,28 ± 0,03
Dy(1)	Al(2)	2	3,31 ± 0,02
Dy(1)	Al(2)	2	3,37 ± 0,02
Dy(2)	Dy(2)	2	3,40 ± 0,01
Dy(2)	Al(1)	1	3,06 ± 0,03
Dy(2)	Al(1)	1	3,09 ± 0,03
Dy(2)	Al(1)	2	3,31 ± 0,03
Dy(2)	Al(2)	2	3,22 ± 0,02
Dy(2)	Al(2)	2	3,51 ± 0,02
Al(1)	Al(1)	2	4,19 ± 0,05
Al(1)	Al(2)	2	2,67 ± 0,04
Al(2)	Al(2)	2	2,82 ± 0,02

Cette nouvelle structure est celle du type que Buschow (1965a) avait appelé ErAl. Les intensités calculées pour le composé ErAl isotype de DyAl sont en bon accord avec celles observées par Buschow & van Vucht (1965); l'indexation qu'ils avaient donnée dans leur Tableau 3 correspond à l'arrangement $Pbcm$, bien que l'ordre des paramètres de mailles corresponde à l'arrangement $Pmca$.

Détermination de la structure de CeAl

La structure de CeAl a été étudiée à partir des intensités diffractées par un échantillon polycristallin. Les paramètres de la maille sont $a = 9,27 \pm 0,01$, $b = 7,68 \pm 0,01$, $c = 5,76 \pm 0,01$ Å; son volume est sensiblement identique à celui de la maille de DyAl. Nous avons observé

Tableau 3. Facteurs de structure observés et calculés de DyAl

h	k	l	F _o	F _c	h	k	l	F _o	F _c
0	0	0	133	101	6	1	0	49	- 48
0	0	6	308	296	6	2	0	182	- 183
0	0	8	71	71	6	3	0	n.o.	0
0	0	10	n.o.	14	6	4	0	118	124
0	0	12	0	199	189	6	5	0	73
0	0	14	0	65	- 52	6	6	0	0
1	4	0	240	237	6	7	0	45	- 40
1	5	0	45	- 36	6	8	0	100	106
1	6	0	90	- 83	6	9	0	n.o.	24
1	7	0	219	- 213	6	10	0	110	106
1	8	0	160	- 148	7	0	0	73	92
1	9	0	104	- 92	7	1	0	85	85
1	10	0	55	- 68	7	2	0	74	66
1	11	0	33	- 26	7	3	0	n.o.	- 10
1	12	0	65	- 56	7	4	0	57	42
1	13	0	130	- 125	7	5	0	116	- 107
1	14	0	52	- 50	7	6	0	109	104
1	15	0	86	- 81	7	7	0	290	- 282
2	1	0	157	- 169	0	6	1	86	- 77
2	2	0	146	- 151	0	8	1	47	51
2	3	0	108	- 106	0	10	1	226	- 234
2	4	0	71	- 74	0	12	1	174	- 179
2	5	0	204	- 202	0	1	2	174	- 164
2	6	0	n.o.	- 13	1	3	1	319	- 313
2	7	0	55	- 46	1	4	1	107	- 114
2	8	0	64	- 62	1	5	1	114	- 116
2	9	0	77	- 73	1	6	1	57	- 63
2	10	0	80	- 76	1	7	1	74	- 70
2	11	0	224	- 218	1	8	1	168	- 178
2	12	0	n.o.	- 24	1	9	1	142	- 149
2	13	0	n.o.	- 2	1	10	1	134	- 130
2	14	0	n.o.	- 28	2	1	1	302	- 314
2	15	0	94	- 88	2	2	1	91	91
3	0	0	53	- 95	2	3	1	n.o.	- 25
3	1	0	118	- 120	2	4	1	n.o.	- 14
3	2	0	196	- 208	2	5	1	213	- 207
3	3	0	34	- 34	2	6	1	36	- 30
3	4	0	191	- 203	2	7	1	195	- 183
3	5	0	150	- 154	2	8	1	68	74
3	6	0	108	- 111	2	9	1	40	33
3	7	0	153	- 158	2	10	1	n.o.	0
3	8	0	113	- 109	2	11	1	111	- 125
3	9	0	n.o.	- 8	2	12	1	59	52
3	10	0	88	- 76	3	1	1	67	65
3	11	0	52	- 66	3	2	1	46	51
3	12	0	n.o.	- 8	3	3	1	200	- 191
3	13	0	93	- 83	3	4	1	n.o.	4
4	0	0	242	- 253	3	5	1	68	62
4	1	0	123	- 138	3	6	1	90	79
4	2	0	35	- 35	3	7	1	58	54
4	3	0	n.o.	- 24	3	8	1	138	147
4	4	0	n.o.	- 25	3	9	1	126	- 135
4	5	0	n.o.	- 4	3	10	1	66	64
4	6	0	167	- 176	3	11	1	60	49
4	7	0	97	- 98	4	1	1	97	93
4	8	0	n.o.	- 14	4	2	1	72	- 78
4	9	0	73	- 76	4	3	1	193	202
4	10	0	n.o.	- 3	4	4	1	159	145
4	11	0	n.o.	- 10	4	5	1	n.o.	35
4	12	0	151	- 108	4	6	1	n.o.	39
4	13	0	135	- 134	4	7	1	n.o.	37
5	0	0	160	- 161	4	8	1	n.o.	38
5	1	0	n.o.	- 15	4	9	1	135	144
5	2	0	n.o.	- 18	4	10	1	129	135
5	3	0	n.o.	- 3	5	1	1	114	120
5	4	0	n.o.	- 30	5	2	1	122	121
5	5	0	67	- 75	5	3	1	134	125
5	6	0	173	- 173	5	4	1	132	- 124
5	7	0	80	- 66	5	5	1	135	- 125
5	8	0	n.o.	- 44	5	6	1	n.o.	- 24
5	9	0	96	- 93	5	7	1	73	83
5	10	0	n.o.	- 29	5	8	1	59	65
5	11	0	65	- 65	6	1	1	66	62
5	12	0	87	- 94	6	2	1	110	- 121
6	0	0	31	- 19	6	3	1	n.o.	- 36

les règles l'existence suivantes: pour les raies hkl , $h+k=2n$ et pour les raies $h0l$, $l=2n$; elles sont caractéristiques des groupes $Cmc2_1$, $Ama2$ et $Cmcm$. Malgré le faible nombre de réflexions observées au diffractomètre, des sections de Patterson-Harker pour les valeurs $w=0$, $w=0,25$, $w=0,50$ nous ont permis de positionner huit atomes de cérium qui se répartissent suivant des motifs semblables à ceux observés dans DyAl. À partir de cette analogie, nous avons déduit les meilleures coordonnées possibles des atomes d'aluminium. La structure ainsi déterminée est décrite dans le groupe $Cmcm$. L'affinement effectué sur les intensités observées aboutit aux paramètres consignés dans le Tableau 4. Le facteur de confiance obtenu est $R = \frac{\sum |I_o - I_c|}{\sum |I_c|} = 7,3\%$. Les distances interatomiques sont portées dans le Tableau 5. Le Tableau 6 donne la liste des intensités observées et calculées après le dernier cycle d'affinement.

Cette nouvelle structure est celle du type que Buschow (1965a) avait appelé CeAl.

Structures cristallines des autres composés équiatomiques TAl

La structure des composés TAl avec $T = Nd, Sm, Gd, Tb, Ho, Er, Tm$ est isomorphe de celle de DyAl; LaAl est isomorphe de CeAl. Le composé PrAl trempé à la structure DyAl tandis que recuit il cristallise avec la structure CeAl. Dans le Tableau 7 nous comparons les intensités diffractées par chacune des formes cristallines de ce composé. Le Tableau 8 donne la liste des

Tableau 4. Coordonnées atomiques et facteurs de température de la structure CeAl décrite dans le groupe d'espace $Cmcm^*$

Atomes	Positions	x	y	B
Ce	8(g)	0,179 (1)	0,161 (1)	0,6 (0,2) Å ²
Al(1)	4(c)	0	0,790 (4)	1 (0,5)
Al(2)	4(b)	0	$\frac{1}{2}$	1 (0,3)

* Les valeurs entre parenthèses représentent les écarts quadratiques moyens calculés par le programme d'affinement, en vraie valeur pour B, multipliées par 10^{-3} pour x et y.

Tableau 5. Distances interatomiques dans CeAl

Atomes	Voisins	Nombre de voisins	Distance
Ce	Ce	1	$3,32 \pm 0,02$ Å
Ce	Ce	2	$3,45 \pm 0,02$
Ce	Ce	2	$3,80 \pm 0,02$
Ce	Al(1)	1	$3,14 \pm 0,04$
Ce	Al(1)	1	$3,30 \pm 0,04$
Ce	Al(1)	2	$3,34 \pm 0,04$
Ce	Al(2)	2	$3,41 \pm 0,03$
Ce	Al(2)	2	$3,53 \pm 0,03$
Al(1)	Al(1)	2	$4,30 \pm 0,06$
Al(1)	Al(2)	2	$2,65 \pm 0,04$
Al(2)	Al(2)	2	$2,88 \pm 0,02$

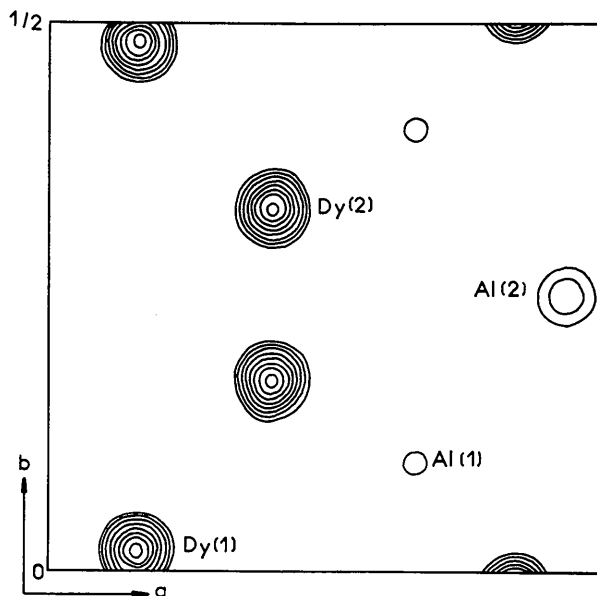


Fig. 1. Projection de densité électronique selon l'axe c de la structure DyAl.

paramètres des mailles des composés TAl déterminés précédemment par Buschow (1965a). Les paramètres que nous avons mesurés sont en parfait accord avec ceux-ci, à l'exception des paramètres de PrAl et DyAl. Nous avons en outre déterminé les paramètres du composé TmAl. Ces paramètres décroissent lorsque le numéro atomique de la terre rare alliée croît, en accord avec la propriété de contraction des lanthanides. La racine cubique du volume de la maille suit la même variation. On n'observe aucune anomalie (Fig.2) pour

le composé avec le cérium, qui doit donc conserver un électron sur la couche 4f.

Baenziger & Moriarty (1961), Runnals & Lorimer (1965) ont observé des composés TAl à structure CsCl. Quelque soit le traitement thermique, trempe brutale sur une lingotière en cuivre refroidie ou recuit prolongé avec refroidissement lent, nous n'avons jamais obtenu un composé TAl à structure CsCl; par contre lorsqu'on substitue 10% des atomes d'aluminium par des atomes d'argent, le composé formé a la structure CsCl.

Description et comparaison des structures

Les deux types de structures peuvent être décrits à partir de chaînes d'aluminium et de prismes trigonaux constitués par six atomes de terre rare et trois atomes d'aluminium; ces derniers sont disposés sur un plan médiateur du prisme et se projettent au centre des faces. Les prismes sont en fait analogues à des demi-mailles d'une structure CsCl, délimitées par un plan (110) et comprimées suivant la direction [001].

Les structures ne diffèrent l'une de l'autre que par l'arrangement des motifs (Fig.3). En outre on peut engendrer la structure CeAl à partir de la structure DyAl par des glissements de couches atomiques parallèlement à l'axe *a* de DyAl (Fig.3). Parthé (1967) a déjà montré que les structures FeB et CrB d'une part et AlB₂ et ThSi₂ d'autre part, structures que l'on rencontre souvent dans les composés intermétalliques avec les terres rares, se déduisent l'une de l'autre par des glissements de couches atomiques de même nature. Les relations géométriques entre les structures DyAl et CeAl sont du même type, cependant les couches atomiques qui subissent le glissement ne sont pas toutes de même nature.

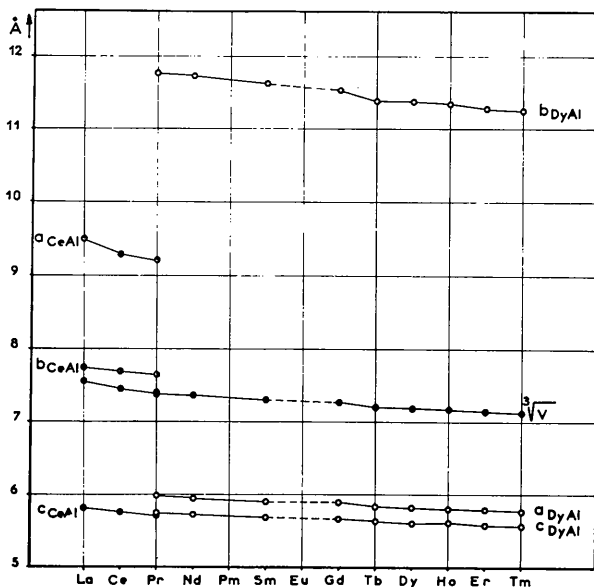


Fig.2. Paramètres des mailles des composés équiatomiques élément terre rare - aluminium.

Tableau 6. Intensités calculées et observées d'un échantillon polycristallin de CeAl (radiation du cuivre)

<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>I_c</i> *	<i>I_o</i>	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>I_c</i> *	<i>I_o</i>
1	1	0	17	15	2	4	0	8	7
2	0	0	38	31	5	1	1	15	16
1	1	1	45	45	0	2	3	17	16
0	2	0	23	21	2	4	1	16	16
0	2	1	119	119	3	3	2	39	36
2	2	0	11	14	2	2	3	14	12
3	1	0	43	115	3	1	3	31	28
0	0	2	61		104	6	0	0	10
2	2	1	71	70	5	1	2	9	9
3	1	1	151	186	1	5	0	0	n.o.
1	1	2	23		174	5	3	0	13
1	3	0	29	27	1	5	1	5	4
2	0	2	30	34	6	2	0	2	13
0	2	2	25	21	0	0	4	9	
2	2	2	4	n.o.	4	4	1	2	18
3	1	2	13	12	6	2	1	13	
3	3	0	24	27	1	1	4	5	8
4	2	1	4	12	6	0	2	8	
1	3	2	10		14	0	4	3	5
0	4	1	14	16	3	5	1	15	16
1	1	3	4		18	5	3	2	11
4	0	2	1	3					
5	1	0	3		4				

* $I_c = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} p|F|^2$ où *p* est la multiplicité et *F* le facteur de structure.

De ces considérations on déduit des relations entre les paramètres de chacune des mailles:

$$a_{\text{DyAl}} = \frac{\sqrt{a_{\text{CeAl}}^2 + b_{\text{CeAl}}^2}}{2},$$

$$b_{\text{DyAl}} = \frac{2a_{\text{CeAl}}b_{\text{CeAl}}}{\sqrt{a_{\text{CeAl}}^2 + b_{\text{CeAl}}^2}}, \quad c_{\text{DyAl}} = c_{\text{CeAl}}.$$

Nous vérifions bien ces relations avec le composé PrAl qui, suivant le traitement thermique présente les

deux formes; les paramètres qu'on déduit pour la structure du type DyAl en utilisant les relations précédentes sont: $a=5,98$, $b=11,76$, $c=5,71$ Å, valeurs très voisines de celles observées (Tableau 8). Les relations proposées par Buschow & van Vucht (1966) n'étaient que fortuites.

Nous remercions Messieurs les Professeurs Bertaut et Pauthenet pour les encouragements qu'ils nous ont prodigués au cours de cette étude. Nous adressons nos

Tableau 7. Intensités diffusées par un échantillon polycristallin PrAl (radiation du chrome)

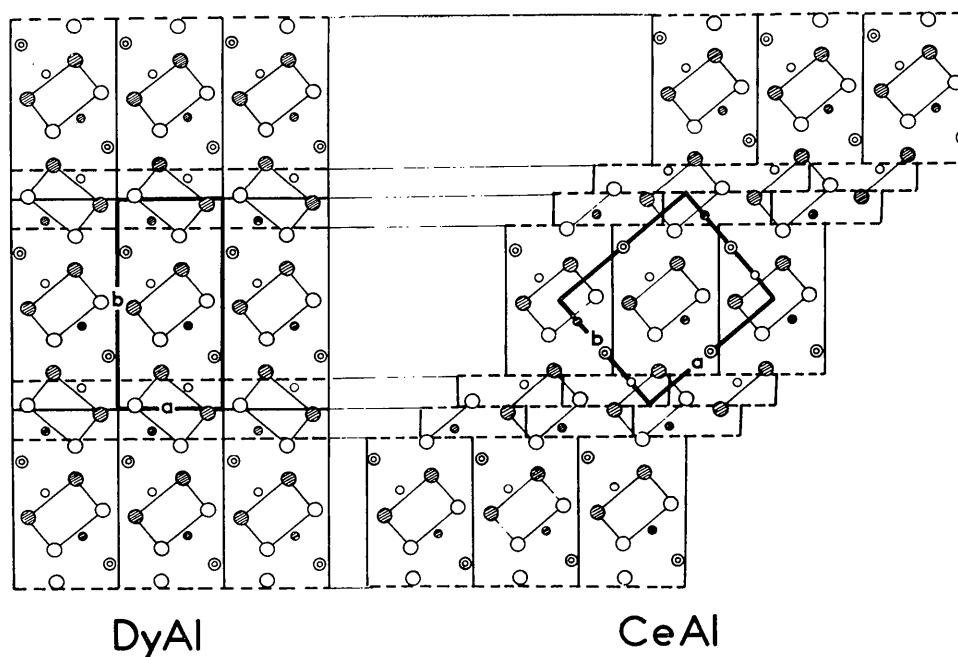
échantillon trempé structure type DyAl						échantillon recuit structure type CeAl					
$a = 5,97 \text{ \AA} \quad b = 11,77 \text{ \AA} \quad c = 5,73 \text{ \AA}$						$a = 9,22 \text{ \AA} \quad b = 7,63 \text{ \AA} \quad c = 5,71 \text{ \AA}$					
h	k	l	$10^4 \sin^2 \theta_c$	I_c	I_o	h	k	l	$10^4 \sin^2 \theta_c$	I_c	I_o
1	0	0	368	11	-	1	1	0	379	50	f
0	2	0	379	30	-	2	0	0	616	107	f
1	1	0	463	66	f	1	1	1	781	127	m
1	2	0	747	128	m	0	2	0	900	73	f
0	2	1	779	53	f	0	2	1	1302	340	F
1	1	1	863	65	f	2	2	0	1516	32	tf
1	2	1	1147	138	m	0	0	2	1608	174	F
1	3	0	1220	26	-	3	1	0	1611	128	F
2	0	0	1472	3	-	2	2	1	1670	242	F
0	4	0	1515	11	-	1	1	2	1987	71	TF
2	1	0	1567	58	F	3	1	1	2013	435	TF
0	0	2	1598	176	F	1	3	0	2179	84	f
1	3	1	1620	370	TF	2	0	2	2224	80	f
2	2	0	1851	41	tf	0	2	2	2508	75	f
1	4	0	1883	101	F	2	2	2	3124	0	-
0	4	1	1915	124	F	3	1	2	3219	28	tf
2	1	1	1935	306	TF	3	3	0	3411	56	f
1	0	2	1966	24	-	4	2	1	3766	11	tf
0	2	2	1975	40	tf	1	3	2	3787	26	tf
1	1	2	2061	37	tf	1	1	3	3997	9	f
2	2	1	2219	24	-	0	4	1	4002	35	f
1	4	1	2273	33	-	4	0	2	4072	3	-
2	3	0	2324	20	-	5	1	0	4075	7	-
1	2	2	2343	120	m	2	4	0	4216	22	tf
2	3	1	2724	2	-	5	1	1	4472	36	f
1	5	0	2735	2	-	0	2	3	4518	42	f
1	3	2	2818	1	-	2	4	1	4618	45	f
2	4	0	2987	3	-						
2	0	2	3070	4	-						
0	4	2	3113	0	-						
1	5	1	3133	27	tf						
2	1	2	3165	10	tf						
3	0	0	3313	1	-						
2	4	1	3387	0	-						
3	1	0	3408	9	-						
0	6	0	3409	24	f						
2	2	2	3449	10	-						
1	4	2	3481	30	tf						
3	2	0	3692	29	tf						
1	6	0	3777	5	-						
3	1	1	3808	5	-						
0	6	1	3809	3	-						
2	5	0	3839	21	tf						
2	3	2	3922	3	-						
0	2	3	3975	3	-						
3	2	1	4092	1	-						
1	1	3	4159	3	-						
3	3	0	4165	1	-						
1	6	1	4177	4	-						
2	5	1	4239	41	tf						
1	5	2	4333	0	-						
1	2	3	4343	20	-						

Tableau 8. Paramètres des mailles des composés TA1

Composés	Type CeAl Arrangement <i>Cmcm</i>			Type DyAl Arrangement <i>Pbcm</i>		
	<i>a</i> (Å)	<i>b</i> (Å)	<i>c</i> (Å)	<i>a</i> (Å)	<i>b</i> (Å)	<i>c</i> (Å)
LaAl	9,531	7,734	5,809			
CeAl	9,270	7,680	5,760			
PrAl	9,222*	7,641*	5,701*	5,964	11,777	5,745
	9,22†	7,63†	5,71†	5,97†	11,77†	5,73†
NdAl				5,940	11,728	5,729
SmAl				5,899	11,622	5,778
GdAl				5,888	11,527	5,656
TbAl				5,834	11,370	5,621
DyAl				5,822	11,369	5,604
				5,80†	11,44†	5,62†
HoAl				5,801	11,339	5,621
ErAl				5,801	11,272	5,570
TmAl				5,77†	11,24†	5,56†

* Valeurs déterminées par Buschow & van Vucht (1966).

† Valeurs déterminées par les auteurs, différentes de celles données par Buschow (1965a) ou nouvelles.

Fig. 3. Relation géométrique entre les projections selon l'axe *c* des structures de type DyAl et CeAl. Les grands cercles représentent les atomes de terres rares, les petits ceux d'aluminium, en cote 0,25 s'ils sont blancs, en 0,75 s'ils sont hachurés. Les deux cercles concentriques représentent deux atomes d'aluminium en cote 0 et 0,5.

vifs remerciements à Monsieur le Professeur Parthé pour ses conseils et les discussions fructueuses que nous avons eues avec lui.

Références

- BASSI, G. (1966). Thèse de 3e cycle, Grenoble.
 BAENZINGER, N. C. & MORIARTY, J. L. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 948.
 BOND, W. L. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 375.
 BUSCHOW, K. H. J. (1965a). *J. Less Common Metals*, **8**, 209.
 BUSCHOW, K. H. J. (1965b). *J. Less Common Metals*, **9**, 452.
 BUSCHOW, K. H. J. & VAN VUCHT, J. H. N. (1965). *Z. Metallk.* **56**, 9.
 BUSCHOW, K. H. J. & VAN VUCHT, J. H. N. (1966). *Z. Metallk.* **57**, 162.
International Tables for X-ray Crystallography, (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
 PARTHÉ, E. (1967). *Propriétés Thermodynamiques Physiques et Structurales des Dérivés Semi-Métalliques*, p. 195. Paris: Editions C.N.R.S.
 RUNNALS, O. J. C. & LORIMER, G. W. (1965). *J. Less Common Metals*, **8**, 75.
 VUCHT, J. H. N. VAN (1957). *Z. Metallk.* **98**, 252.