



Fig. 2. The angular dependences of the second moment as a function of angle Φ between H_0 and the a axis (for H_0 in ab plane), and between H_0 and the c axis (for H_0 in bc plane). The solid and dotted curves correspond to theoretical and experimental results respectively.

Acta Cryst. (1972). B28, 327.

Die Kristallstrukturen des LiCu_2P_2 und des $\text{Li}_{1.75}\text{Cu}_{1.25}\text{P}_2$. Von H. SCHLENGER UND H. JACOBS, *Institut für Anorganische Chemie der Universität, Kiel, Deutschland (BRD)*

(Eingegangen am 25. Mai 1971)

The lattice parameters, space groups and the atomic positions for the crystal structures of LiCu_2P_2 and $\text{Li}_{1.75}\text{Cu}_{1.25}\text{P}_2$ are given.

Das ternäre System Li–Cu–P ist von uns phasenanalytisch untersucht worden.

Über die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden wir demnächst berichten (Schlenger, Jacobs & Juza, 1971). Hier sollen die Kristallstrukturdaten zweier mit Hilfe von Einkristallen bestimmter Strukturen mitgeteilt werden. Es sind dies die des LiCu_2P_2 und des $\text{Li}_{1.75}\text{Cu}_{1.25}\text{P}_2$.

LiCu_2P_2 kristallisiert tetragonal mit:

$$a = 3,887, c = 9,55 \text{ \AA} \text{ und } c/a = 2,46$$

und zwei Formeleinheiten in der Elementarzelle ($d_4^{25} = 4,52$ und $Z = 2,03$). Die Strukturbestimmung führte zum $D1_3$ -Typ. Die Raumgruppe ist $I4/mmm-D_{4h}^{17}$. Mit Hilfe der 53 symmetrieunabhängigen, aus integrierten Weissenberg-Aufnahmen (Mehrfilmtechnik) photometrierten Intensitäten (Drehung um $[100]$) ergab sich folgende Verteilung der Atome:

| | | | |
|-----------------------|---|---------------|----------------|
| 4 Cu in 4(<i>d</i>) | 0 | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{4}$ |
| 4 P in 4(<i>e</i>) | 0 | 0 | $z, z = 0,388$ |
| 2 Li in 2(<i>a</i>) | 0 | 0 | 0 |

mit einem R_F -Wert von 13,4%. Die Struktur enthält P_2 -Gruppen längs $[001]$.

Das lithiumreichere $\text{Li}_{1.75}\text{Cu}_{1.25}\text{P}_2$ wurde ebenfalls mit Einkristallmethoden untersucht. Es kristallisiert orthorhombisch mit:

$$a = 3,874, b = 12,67 \text{ und } c = 8,74 \text{ \AA},$$

mit sechs Formeleinheiten in der Elementarzelle ($d_4^{25} = 3,62$ und $Z = 5,98$). Die Raumgruppe ist $Immm-D_{2h}^{25}$. Die Reflex-

The authors wish to thank Professor S. Fujiwara for his support in this work and Professor T. Sudo for his helpful information about the sample used.

References

- ABRAGAM, A. (1961). *The Principles of Nuclear Magnetism*, Chap. 4. Oxford: Clarendon Press.
 ITO, T. & MORI, H. (1953). *Acta Cryst.* **6**, 24.
 NEWTON, D. C., TYRRELL, A. C. & SANDERS, J. (1959). *Nature, Lond.* **184**, 185.
 PANT, A. K. & CRUICKSHANK, D. W. J. (1967). *Z. Kristallogr.* **125**, 286.
 PAVLOV, P. V. & BELOV, N. V. (1960). *Sov. Phys. Crystallogr.* **4**, 300.
 SAHL, K. (1966). *Neues Jb. Miner. Mh.* p. 45.
 ZACHARIASEN, W. H. (1954). *Acta Cryst.* **7**, 305.
 ZACHARIASEN, W. H. & PLETTINGER, H. A. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 376.

intensitäten von 220 Reflexen ergaben sich ebenfalls aus photometrierten Weissenberg-Aufnahmen (Mehrfilmtechnik) um $[100]$ und $[001]$. (In beiden Fällen wurde auf die Anwendung von Absorptions- und Temperaturfaktoren bei der Verfeinerung verzichtet.)

Die Anordnung der Atome in der Elementarzelle ist folgende:

| | | | |
|--------------------------|-----|-------|-------|
| 7,5 Cu in 8(<i>l</i>) | 0 | 0,172 | 0,267 |
| 8 P(1) in 8(<i>l</i>) | 0 | 0,352 | 0,377 |
| 4 P(2) in 4(<i>h</i>) | 0 | 0,085 | 0,5 |
| 2 Li(1) in 2(<i>a</i>) | 0 | 0 | 0 |
| 4 Li(2) in 4(<i>g</i>) | 0 | 0,27 | 0 |
| 4 Li(3) in 4(<i>j</i>) | 0,5 | 0 | 0,33 |

Die Strukturrechnung konnte bis zu einem R_F -Wert von 11,5% angenähert werden. Auch in dem $\text{Li}_{1.75}\text{Cu}_{1.25}\text{P}_2$ liegen P_2 -Gruppen vor, jedoch in zwei Richtungen $[001]$ und $[010]$.

Beide Verbindungen sind demnach als ternäre Polyphosphide anzusehen; sie weichen in dieser Hinsicht von den anderen im System Li–Cu–P untersuchten Phasen ab.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danken wir für die Unterstützung dieser Arbeit.

Literatur

- SCHLENGER, H., JACOBS, H. & JUZA, R. (1971). *Z. anorg. allgem. Chem.* Im Druck.