1317 Notizen

## NOTIZEN

## $AB_2X_2$ -Verbindungen im CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>-Typ, VIII [1]

 $AB_2X_2$  Compounds with the CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> Structure, VIII [1]

Peter Klüfers, Hermann Neumann, Albrecht Mewis und Hans-Uwe Schuster Institut für Anorganische Chemie der Universität zu Köln, Greinstraße 6, D-5000 Köln 41

Z. Naturforsch. 35b, 1317-1318 (1980); eingegangen am 12. Mai 1980

2a- and 2b-Elements, Yttrium, Copper, Rare Earth Elements, Pnictides

Thirteen new compounds were synthesized. They are supposed to crystallize with the CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> type of structure (space group P3m1) with the following constants:

```
SrZn_2P_2
               a = 410.0(0) \text{ pm}, c = 710.1(1) \text{ pm},
               a = 433.8(0) pm, c = 726.9(1) pm,
SrCd_2P_2
               a = 440.2(0) pm, c = 755.7(1) pm,
BaCd_2P_2
BaCd<sub>2</sub>As<sub>2</sub>
               a = 451.6(0) pm, c = 769.3(1) pm,
BaMg_2P_2
               a = 436.7(1) \text{ pm}, c = 758.0(3) \text{ pm},
               a = 408.7(1) pm, c = 701.0(1) pm,
EuZn_2P_2
               a = 421.1(1) pm, c = 718.1(1) pm,
EuZn<sub>2</sub>As<sub>2</sub>
EuZn_2Sb_2
               a = 448.9(1) \text{ pm}, c = 760.9(1) \text{ pm},
              a = 416.0(1) \text{ pm}, c = 696.1(1) \text{ pm},

a = 444.4(1) \text{ pm}, c = 742.4(1) \text{ pm},
YbZn_2As_2
YbZn_2Sb_2
LuZnCuAs_2 a = 407.1(1) pm, c = 663.4(1) pm,
YZnCuP_2
              a = 398.3(1) \text{ pm}, c = 652.3(1) \text{ pm},
YZnCuAs_2 a = 410.4(1) pm, c = 669.2(1) pm.
```

Ternäre  $AB_2X_2$ -Verbindungen (A, B = Metalle,davon A = 2a-Element oder Lanthanoid, X =4b- oder 5b-Element) können nur unter bestimmten Voraussetzungen in der trigonalen CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>-Struktur kristallisieren, wie wir anhand einer Reihe von Arbeiten zeigen konnten [1-4]. Der Wunsch, die Grenzen dieser Voraussetzungen abzustecken und gleichzeitig Aussagen über den Einfluß der Größe der Atome auf die Strukturparameter machen zu können, führten zur Darstellung der hier beschriebenen Verbindungen.

Zur Präparation von SrZn<sub>2</sub>P<sub>2</sub>, SrCd<sub>2</sub>P<sub>2</sub>, BaCd<sub>2</sub>P<sub>2</sub>, BaCd<sub>2</sub>As<sub>2</sub> und BaMg<sub>2</sub>P<sub>2</sub> wurden die Elementgemenge in Korundtiegeln unter Argon als Schutzgas

Die Verbindungen sind nach Einkristalluntersuchungen isotyp, ihre Röntgenpulverdiagramme lassen sich in Analogie zu den bereits bearbeiteten Verbindungen mit CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>-Struktur (Raumgruppe P3m1) hexagonal indizieren. Die Gitterkonstanten wurden aus Guinieraufnahmen ermittelt, die Dichtewerte nach der Pyknometermethode bestimmt. Die Ergebnisse sind in Tab. I zusammengefaßt

(() = Standardabweichung).

Tab. I. Gitterkonstanten [pm] und Dichtewerte der Strontium- und Bariumverbindungen.

	a	c	c/a	$\mathbf{D}_4^{25}$	${ m D_{R\"o}[g/cm^3]}$
$SrZn_2P_2$	410,0(0)	710,1(1)	1,732	4,40	4,503
$SrCd_2P_2$		726,9(1)			
$\mathrm{BaCd_2P_2}$					
$BaCd_2As_2$					
$BaMg_2P_2$	436,7(1)	758,0(3)	1,736	3,31	3,288

Mit YbZn<sub>2</sub>P<sub>2</sub>, YbZnCuP<sub>2</sub> [4] und YbMnCuP<sub>2</sub> [1] konnten wir inzwischen auch Verbindungen dieses Strukturtyps vorstellen, bei denen ein Seltenerd-metall die Position des A-Elementes einnimmt, und

dabei am Beispiel von Yb $ZnCuP_2$  zeigen, daß hier auch ein formal dreiwertiges Element eingesetzt werden kann, wenn gleichzeitig die Hälfte des Zinks durch Kupfer ersetzt wird. In Analogie zu diesen Arbeiten gelang jetzt die Darstellung von EuZn<sub>2</sub>P<sub>2</sub>, EuZn<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, EuZn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>, YbZn<sub>2</sub>As<sub>2</sub>, YbZn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>, LuZnCuAs2, YZnCuP2 und YZnCuAs2. Dazu wurden die jeweiligen Elementgemenge in Korundtiegeln unter Argon auf 1000 °C erhitzt – die Reaktionszeiten lagen zwischen 4 und 24 h - und nach sorgfältigem Zerreiben noch einmal 4 bis 48 h bei 900–1000 °C bzw. 1200 °C ( $EuZn_2P_2$ ) getempert. Während YbZn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub> als harter, silbrig glänzender Regulus erhalten wurde, fielen die übrigen Verbindungen als spröde, metallisch grauglänzende Pulver

umgesetzt, wobei die Proben nach 4-6-stündigem Erhitzen auf 900-1100 °C fein zerrieben und anschließend für 2-4 h auf 1000-1200 °C erhitzt wurden. SrCd<sub>2</sub>P<sub>2</sub>, BaCd<sub>2</sub>P<sub>2</sub> und BaCd<sub>2</sub>As<sub>2</sub> sind grauglänzende, spröde Pulver, SrZn<sub>2</sub>P<sub>2</sub> ist rotstichig grauglänzend und BaMg<sub>2</sub>P<sub>2</sub> von rotbrauner Farbe. Während die Zink- und Cadmiumverbindungen von Luft und Feuchtigkeit nicht angegriffen werden, ist BaMg<sub>2</sub>P<sub>2</sub> äußerst hydrolyseempfindlich.

<sup>\*</sup> Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H.-U. Schu-

<sup>0340-5087/80/1000-1317/\$ 01.00/0</sup> 

Tab. II. Gitterkonstanten [pm] (Standardabweichung 0,1 pm) und Dichtewerte der Seltenerd- und Yttriumverbindungen.

	a	c	c/a	$\mathrm{D}_4^{25}$	$\mathrm{D_{R\ddot{o}}}\left[\mathrm{g/cm^3}\right]$		
$\mathrm{EuZn_2P_2}$	408,7	701,0	1,715	5,47	5,643		
$EuZn_2As_2$	421,1	718,1	1,705	6,70	6,512		
$EuZn_2Sb_2$	448,9	760,9	1,695	6,56	6,579		
$YbZn_2As_2$	416,0	696,1	1,673	7,15	7,219		
$YbZn_2Sb_2$	444,4	742,4	1,671	7,05	7,156		
$LuZnCuAs_2$	407,1	663,4	1,630	7,78	7,912		
$YZnCuP_2$	398,3	652,3	1,638	5,24	5,183		
$YZnCuAs_2$	410,4	669,2	1,631	6,16	6,254		

an, die luft- und feuchtigkeitsunempfindlich sind. Nach Pulveraufnahmen beurteilt kristallisieren sie in der CaAl<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>-Struktur. Gitterkonstanten (aus Guinieraufnahmen) und Dichtewerte (Pyknometermethode) werden in Tab. II wiedergegeben.

Über die Strukturparameter sämtlicher Verbindungen, deren Zusammensetzung analytisch gesichert wurde, sowie über magnetische Untersuchungen an den Seltenerdverbindungen werden wir in Kürze berichten.

Wir danken dem Herrn Minister für Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen für die Unterstützung mit Personal- und Sachmitteln.

<sup>[1] 7.</sup> Mitteilung: A. Mewis, Z. Naturforsch. 35b, 939 (1980).

<sup>[2]</sup> P. Klüfers und A. Mewis, Z. Naturforsch. 32b, 753 (1977).

<sup>[3]</sup> A. Mewis, Z. Naturforsch. 33b, 606 (1978).

<sup>[4]</sup> P. Klüfers, A. Mewis und H.-U. Schuster, Z. Kristallogr. 149, 211 (1979).