

## NOTIZEN

**Erste Interalkalimetalltelluride:****NaLiTe, KLiTe, KNaTe**

First Inter Alkali Metal Tellurides:  
NaLiTe, KLiTe, KNaTe

Rolf-D. Hitzbleck, Petra Vogt und  
Horst Sabrowsky\*

Ruhr-Universität Bochum, Anorganische Chemie I,  
Arbeitsgruppe Festkörperchemie,  
Universitätsstraße 150, D-4630 Bochum 1

Z. Naturforsch. **44b**, 1602–1604 (1989);  
eingegangen am 14. August 1989

First Inter Alkali Metal Tellurides:  
NaLiTe, KLiTe, KNaTe, X-Ray, Lattice Constants

The dark grey compounds NaLiTe, KLiTe and KNaTe have been prepared and characterized by X-ray powder diffraction. NaLiTe and KNaTe are isotypic and crystallize in the orthorhombic space group Pnma with  $Z = 4$  formula units in the unit cell. The lattice constants are  $a = 774.0(1)$ ,  $b = 462.4(2)$  and  $c = 840.6(1)$  pm for NaLiTe and  $a = 852.1(1)$ ,  $b = 513.4(2)$  and  $c = 926.5(1)$  pm for KNaTe. KLiTe crystallizes in the tetragonal space group P4/nmm with  $a = 483.9(2)$  and  $c = 771.7(1)$  pm and  $Z = 2$ .

**Einleitung**

In Fortführung unserer Untersuchungen über ternäre Interalkalimetallchalkogenide [1] konnten wir nun die ersten Telluride NaLiTe, KLiTe und KNaTe darstellen. Sie schließen sich strukturell den homologen Selenverbindungen an. Über die Darstellung dieser neuen Tellurverbindungen und ihre Charakterisierung anhand von Guinieraufnahmen wird hier berichtet.

**Experimenteller Teil**

Zur Darstellung von NaLiTe, KLiTe und KNaTe wurden ihrer Zusammensetzung entsprechend äquimolare Mengen der binären Verbindungen ( $\text{Li}_2\text{Te}$ ,  $\text{Na}_2\text{Te}$ ,  $\text{K}_2\text{Te}$ ) in verschlossenen Korund- und Silberriegeln in Duran- bzw. Quarzglasampullen unter Argon zwischen 673 und 773 K zwei bis sieben Tage getempert. Bei dieser Präparation fallen die Verbindungen als anthrazitfarbene, polykristalline, sehr hygroskopische Proben mit typisch neuer Reflexabfolge ihrer Guinieraufnahmen an.

Teils lagen auch Einkristalle von den Verbindungen vor. Ihre Qualität reichte jedoch für Strukturver-

feinerungen mittels der Reflexdaten eines Vierkreisdiffraktometers nicht aus. Unter der Annahme, daß es sich bei den Verbindungen um Vertreter des  $\text{PbCl}_2$ - bzw.  $\text{PbFCl}$ -Typs handelt, wurden Intensitätsrechnungen in der Raumgruppe Pnma für KNaTe und NaLiTe sowie für KLiTe in der Raumgruppe P4/nmm mit abgeschätzten Parametern durchgeführt (Tab.

Tab. I. Orthorhombische Indizierung, Intensitätsrechnung ( $I_c$ ) und visuell geschätzte Reflexintensitäten ( $I_o$ ) für NaLiTe:  $a = 774.0$  pm,  $b = 462.4$  pm,  $c = 840.6$  pm,  $Z = 4$ ,  $\lambda = 154.056$  pm, Raumgruppe Pnma.  
4  $\text{Na}^+$  in 4a mit  $x = 0.0134$ ,  $z = 0.1947$ ; 4  $\text{Te}^{2-}$  in 4a mit  $x = 0.2486$ ,  $z = 0.8934$ ; 4  $\text{Li}^+$  in 4a mit  $x = 0.1567$ ,  $z = 0.5751$ .

| $h\ k\ l$ | $\sin^2\theta \times 10^5$ | $\sin^2\theta \times 10^5$ | $I_o$ | $I_c$  |
|-----------|----------------------------|----------------------------|-------|--------|
| 1 0 1     | —                          | 1830                       | —     | 7.8    |
| 0 0 2     | —                          | 3359                       | —     | 6.8    |
| 0 1 1     | 3591                       | 3615                       | 300   | 242.3  |
| 2 0 0     | 3951                       | 3962                       | 500   | 353.4  |
| 1 0 2     | 4325                       | 4349                       | 900   | 815.8  |
| 1 1 1     | 4595                       | 4605                       | 1000  | 1000.0 |
| 2 0 1     | —                          | 4801                       | —     | 0.0    |
| 2 1 0     | —                          | 6737                       | —     | 4.3    |
| 1 1 2     | 7098                       | 7124                       | 200   | 18.9   |
| 2 0 2     | 7300                       | 7320                       | 100   | 71.9   |
| 2 1 1     | 7568                       | 7576                       | 800   | 596.7  |
| 1 0 3     | —                          | 8548                       | —     | 12.5   |
| 3 0 1     | 9717                       | 9753                       | 200   | 2.2    |
| 2 1 2     | —                          | 10095                      | —     | 0.0    |
| 0 1 3     | 10298                      | 10332                      | 500   | 324.2  |
| 0 2 0     | 11069                      | 11100                      | 400   | 206.1  |
| 1 1 3     | 11288                      | 11323                      | 300   | 103.0  |
| 2 0 3     | —                          | 11519                      | —     | 1.3    |
| 3 0 2     | 12253                      | 12272                      | 500   | 238.4  |
| 3 1 1     | 12523                      | 12528                      | 500   | 271.7  |
| 1 2 1     | —                          | 12930                      | —     | 1.2    |
| 0 0 4     | 13406                      | 13435                      | 300   | 78.4   |
| 2 1 3     | 14286                      | 14294                      | 400   | 256.8  |
| 1 0 4     | —                          | 14425                      | —     | 34.3   |
| 0 2 2     | —                          | 14459                      | —     | 2.1    |
| 3 1 2     | —                          | 15047                      | —     | 4.5    |
| 2 2 0     | 15053                      | 15062                      | 500   | 119.6  |
| 1 2 2     | 15434                      | 15449                      | 700   | 296.2  |
| 4 0 0     | 15860                      | 15847                      | 200   | 108.8  |
| 2 2 1     | —                          | 15901                      | —     | 0.0    |
| 3 0 3     | —                          | 16471                      | —     | 3.3    |
| 4 0 1     | —                          | 16686                      | —     | 1.4    |
| 1 1 4     | —                          | 17200                      | —     | 8.7    |
| 2 0 4     | 17376                      | 17397                      | 500   | 125.4  |
| 2 2 2     | —                          | 18420                      | —     | 39.2   |
| 4 1 0     | 18637                      | 18622                      | 200   | 0.0    |
| 4 0 2     | —                          | 19205                      | —     | 0.8    |
| 3 1 3     | 19260                      | 19246                      | 100   | 36.6   |
| 4 1 1     | 19466                      | 19461                      | 100   | 47.8   |
| 1 2 3     | —                          | 19648                      | —     | 7.3    |

\* Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H. Sabrowsky.  
Verlag der Zeitschrift für Naturforschung, D-7400 Tübingen  
0932-0776/89/1200-1602/\$ 01.00/0

Tab. II. Tetragonale Indizierung, Intensitätsrechnung ( $I_c$ ) und visuell geschätzte Reflexintensitäten ( $I_o$ ) für KLiTe:  $a = 483,9$  pm,  $c = 771,7$  pm,  $Z = 2$ ,  $\lambda = 154,056$  pm, Raumgruppe  $P4/nmm$  (Ursprung in 2/m).  $2 K^+$  in 2c mit  $z = 0,6700$ ;  $2 Te^{2-}$  in 2c mit  $z = 0,2056$ ;  $2 Li^+$  in 2a.

| $h k l$ | $\sin^2\theta \times 10^5$ | $\sin^2\theta \times 10^5$ | $I_o$ | $I_c$  |
|---------|----------------------------|----------------------------|-------|--------|
| 0 0 1   | 975                        | 996                        | 100   | 46,2   |
| 1 0 1   | 3487                       | 3530                       | 800   | 827,2  |
| 0 0 2   | 3995                       | 3985                       | 500   | 395,7  |
| 1 1 0   | 5059                       | 5068                       | 1000  | 1000,0 |
| 1 1 1   | —                          | 6064                       | —     | 5,8    |
| 1 0 2   | 6524                       | 6519                       | 700   | 564,2  |
| 0 0 3   | —                          | 8967                       | —     | 19,9   |
| 1 1 2   | 9036                       | 9053                       | 500   | 624,2  |
| 2 0 0   | 10117                      | 10136                      | 500   | 440,0  |
| 2 0 1   | —                          | 11132                      | —     | 11,0   |
| 1 0 3   | 11449                      | 11501                      | 300   | 166,9  |
| 2 1 1   | 13641                      | 13666                      | 300   | 293,7  |
| 1 1 3   | —                          | 14035                      | —     | 67,2   |
| 2 0 2   | 14056                      | 14121                      | 300   | 282,7  |
| 0 0 4   | —                          | 15941                      | —     | 7,7    |
| 2 1 2   | 16625                      | 16655                      | 400   | 295,7  |
| 1 0 4   | 18469                      | 18475                      | 300   | 282,7  |
| 2 0 3   | 19086                      | 19102                      | 100   | 31,9   |
| 2 2 0   | 20248                      | 20271                      | 200   | 163,0  |

Tab. III. Orthorhombische Indizierung, Intensitätsrechnung ( $I_c$ ) und visuell geschätzte Reflexintensitäten ( $I_o$ ) für KNaTe:  $a = 852,1$  pm,  $b = 513,4$  pm,  $c = 926,5$  pm,  $Z = 4$ ,  $\lambda = 154,056$  pm, Raumgruppe  $Pnma$ .  $4 K^+$  in 4a mit  $x = 0,0133$ ,  $z = 0,1847$ ;  $4 Te^{2-}$  in 4a mit  $x = 0,2886$ ,  $z = 0,8934$ ;  $4 Na^+$  in 4a mit  $x = 0,1470$ ,  $z = 0,5751$ .

| $h k l$ | $\sin^2\theta \times 10^5$ | $\sin^2\theta \times 10^5$ | $I_o$ | $I_c$  |
|---------|----------------------------|----------------------------|-------|--------|
| 1 0 1   | —                          | 1508                       | —     | 90,1   |
| 0 0 2   | —                          | 2765                       | —     | 11,4   |
| 0 1 1   | 2951                       | 2942                       | 300   | 264,9  |
| 2 0 0   | 3274                       | 3269                       | 300   | 267,3  |
| 1 0 2   | 3600                       | 3582                       | 700   | 833,2  |
| 1 1 1   | 3768                       | 3759                       | 800   | 987,2  |
| 2 0 1   | —                          | 3960                       | —     | 75,2   |
| 2 1 0   | —                          | 5520                       | —     | 37,1   |
| 1 1 2   | 5858                       | 5833                       | 500   | 470,7  |
| 2 0 2   | 6060                       | 6034                       | 100   | 143,6  |
| 2 1 1   | 6210                       | 6211                       | 1000  | 1000,6 |
| 1 0 3   | —                          | 7038                       | —     | 30,2   |
| 3 0 1   | 8051                       | 8046                       | 300   | 305,1  |
| 2 1 2   | —                          | 8285                       | —     | 1,0    |
| 0 1 3   | 8468                       | 8472                       | 700   | 629,1  |
| 0 2 0   | 8974                       | 9004                       | 700   | 460,1  |
| 1 1 3   | 9295                       | 9289                       | 200   | 161,5  |
| 2 0 3   | —                          | 9490                       | —     | 17,4   |
| 3 0 2   | 10128                      | 10119                      | 300   | 239,2  |
| 3 1 1   | 10257                      | 10297                      | 300   | 249,9  |
| 1 2 1   | —                          | 10513                      | —     | 17,6   |
| 0 0 4   | 11049                      | 11059                      | 200   | 142,5  |
| 2 1 3   | 11736                      | 11741                      | 400   | 306,9  |
| 0 2 2   | —                          | 11769                      | —     | 4,4    |
| 1 0 4   | —                          | 11876                      | —     | 26,0   |
| 2 2 0   | 12284                      | 12273                      | 100   | 100,7  |
| 3 1 2   | —                          | 12370                      | —     | 165,5  |
| 1 2 2   | 12561                      | 12586                      | 400   | 317,2  |
| 2 2 1   | —                          | 12964                      | —     | 30,3   |
| 4 0 0   | 13041                      | 13075                      | 100   | 57,4   |
| 3 0 3   | —                          | 13575                      | —     | 66,1   |
| 4 0 1   | —                          | 13766                      | —     | 30,3   |
| 1 1 4   | —                          | 14127                      | —     | 4,1    |
| 2 0 4   | 14297                      | 14328                      | 300   | 128,4  |
| 2 2 2   | 15033                      | 15038                      | 100   | 76,9   |
| 4 1 0   | 15366                      | 15326                      | 200   | 128,7  |
| 3 1 3   | —                          | 15826                      | —     | 19,8   |
| 4 0 2   | —                          | 15840                      | —     | 5,4    |
| 4 1 1   | —                          | 16017                      | —     | 1,2    |
| 1 2 3   | —                          | 16042                      | —     | 16,1   |
| 2 1 4   | —                          | 16579                      | —     | 43,0   |
| 3 2 1   | 17059                      | 17050                      | 200   | 209,2  |
| 4 1 2   | —                          | 18091                      | —     | 1,3    |
| 1 0 5   | —                          | 18097                      | —     | 52,1   |
| 3 0 4   | —                          | 18414                      | —     | 15,4   |
| 2 2 3   | —                          | 18494                      | —     | 15,0   |
| 3 2 2   | 19088                      | 19124                      | 300   | 195,4  |
| 4 0 3   | —                          | 19296                      | —     | 63,9   |
| 0 1 5   | —                          | 19531                      | —     | 0,9    |

I–III); aus Platzgründen sind nur die  $\sin^2\theta \times 10^5$ -Werte bis 20000 aufgeführt. Die Rechnungen zeigen gute Übereinstimmungen mit den beobachteten Intensitäten.

### Ergebnisse und Diskussion

NaLiTe, KLiTe und KNaTe stellen die ersten Telluride in der Klasse der Interalkalimetallchalkogenide vom Formeltyp ABX (A, B = verschiedene Alkalimetalle, X = Chalkogen) dar. Die Intensitätsrechnungen (Tab. I–III) lassen erkennen, daß NaLiTe und KNaTe orthorhombisch im  $PbCl_2$ -Typ und KLiTe tetragonal im  $PbFCl$ -Typ kristallisieren. Damit schließen sich diese drei Verbindungen den homologen Sulfiden [3, 4] und Seleniden [1] mit Ausnahme von NaLiS strukturell an. Die Oxide [2] hingegen bilden zum Teil völlig neue Strukturen aus.

Im Vergleich zur Summe der Molvolumina der binären Chalkogenide als Ausgangskomponenten bilden sich die Telluride wie auch alle bisher bekannten Interalkalimetallchalkogenide [1] unter Volumenkontraktion von 0,5% bis zu 14%.

Die Ergebnisse unserer bisherigen Untersuchungen gestatten keine Vorhersage, welcher Strukturtyp bei den noch fehlenden ABX-Spezies auftritt. Unsere Arbeiten konzentrieren sich deshalb darauf, durch die Darstellung und strukturelle Charakterisierung der noch fehlenden Vertreter eine Struktursystematik zu erkennen.

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft und dem Fonds der Chemischen Industrie für die Unterstützung mit Sach- und Personalmitteln.

- [1] K. Hippler, P. Vogt, R. Wortmann und H. Sabrowsky, Z. Naturforsch., eingereicht.
- [2] H. Sabrowsky, P. Mertens und A. Thimm, Z. Kristallogr. **171**, 1 (1985).
- [3] H. Sabrowsky, A. Thimm und P. Mertens, Z. Naturforsch. **40b**, 733 (1985).
- [4] H. Sabrowsky, A. Thimm und P. Vogt, Z. Anorg. Allg. Chem. **546**, 169 (1987).