

# DIE KRISTALLSTRUKTUR DER TELLURIDE VON ZINK, CADMIUM UND QUECKSILBER

VON  
WILLIAM ZACHARIASEN

Die vorliegende Mitteilung enthält die Ergebnisse einer Untersuchung über die Kristallstruktur von Tellurzink, Tellurcadmium und Tellurquecksilber, die nach einem Vorschlag des Herrn Prof. Dr. V. M. GOLDSCHMIDT im Mineralogischen Institut der Universität Oslo ausgeführt wurde.

Es wurde die Strukturermittlung mittels Pulverphotogrammen vorgenommen. Die benutzten DEBYE-SCHERRER-Kameras waren durch zahlreiche Aufnahmen von Steinsalz genau geeicht worden. Als Strahlenquelle diente die Eisen- oder Kupferantikathode einer modifizierten HADDING-SIEGBAHN-Metallröntgenröhre.

Die Telluride wurden nach einem Vorschlag von V. M. GOLDSCHMIDT dargestellt durch Erhitzen der Komponenten bis Reaktion unter Feuerscheinung eintrat.

Bei Berechnung der Sinusquadrate wurden zwei Korrekturen angebracht. Betreffend die Bestimmung dieser Korrekturen vergleiche V. M. GOLDSCHMIDT u. L. THOMASSEN: Die Kristallstruktur natürlicher und synthetischer Oxyde von Uran, Thorium und Cerium. Vid.-Selsk. Skr. I. M.-N. Kl. 1923. No. 3, p. 7.

Sämtliche in den Filmen auftretende Linien ließen sich restlos durch reguläre quadratische Form identifizieren. Die Ergebnisse der Ausmessung und Berechnung sind in den Tabellen 1, 2 und 3 mitgeteilt.

Tabelle 1. Linienverzeichnis ( $\alpha$ -Linien) für Zn Te.

2d in mm.	$\frac{\vartheta}{2}$ 0,20°	$\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$	q · X	h k l
33,6	15,96	0,0756	3 × 0,02520	111
55,3	26,76	0,2027	8 × 0,02534	220
65,5	31,83	0,2782	11 × 0,02530	311
81,0	39,54	0,4053	16 × 0,02533	400
89,9	43,97	0,4821	19 × 0,02537	331
104,6	51,28	0,6088	24 × 0,02537	422
113,7	55,80	0,6841	27 × 0,02434	511,333

Effektiver Kameradurchmesser 57,60 mm

$$\text{Fe K}\alpha = 1,934 \text{ \AA. } \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 0,02534 (h^2 + k^2 + l^2)$$

Tabelle 2. Linienverzeichnis ( $\alpha$ -Linien) für Cd Te.

2d in mm.	$\frac{\vartheta}{2}$ 0,50°	$\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$	q · X	h k l
32,4	15,12	0,0681	3 × 0,02270	111
52,9	25,34	0,1832	8 × 0,02290	220
62,4	30,08	0,2512	11 × 0,02284	311
76,6	37,17	0,3649	16 × 0,02281	400
84,4	41,06	0,4315	19 × 0,02271	331
96,6	47,69	0,5468	24 × 0,02278	422
105,4	51,54	0,6132	27 × 0,02271	511,333

Effektiver Kameradurchmesser 57,45 mm

$$\text{Fe K}\alpha = 1,934 \text{ \AA. } \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 0,02277 (h^2 + k^2 + l^2)$$

Tabelle 3. Linienverzeichnis ( $\alpha$ -Linien) für Hg Te.

2d in mm.	$\frac{\vartheta}{2}$ 0,50°	$\sin^2 \frac{\vartheta}{2}$	q · X	h k l
26,3	12,07	0,0438	3 × 0,01460	111
42,3	20,05	0,1175	8 × 0,01469	220
49,6	23,70	0,1615	11 × 0,01468	311
60,0	28,89	0,2325	16 × 0,01453	400
66,2	31,98	0,2805	19 × 0,01476	331
75,0	36,37	0,3516	24 × 0,01465	422
80,3	39,01	0,3962	27 × 0,01467	511,333
88,8	43,25	0,4694	32 × 0,01467	440
93,5	45,60	0,5105	35 × 0,01459	531
101,8	49,74	0,5824	40 × 0,01456	620

Effektiver Kameradurchmesser 57,45 mm

$$\text{Cu K}\alpha = 1,539 \text{ \AA. } \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = 0,01463 (h^2 + k^2 + l^2)$$

Es entsprechen den Konstanten der gefundenen quadratischen Formen die folgenden Kantenlängen der Elementarwürfel:  
 $\text{Zn Te } a_{\text{,,}} = 6,07 \text{ \AA}$ ,  $\text{Cd Te } a_{\text{,,}} = 6,41 \text{ \AA}$  und  $\text{Hg Te } a_{\text{,,}} = 6,36 \text{ \AA}$ .

Da der Debye-Film von Cd Te für eine einigermassen genaue Bestimmung der Gitterkonstanten nicht geeignet war, wegen etwas konischer statt cylindrischer Position während der Aufnahme, wurde die Gitterkonstante des Cd Te später mittels einer Präzisionsaufnahme (Mischung mit Na Cl) kontrolliert.

Es ergab sich:

$$\text{Cd Te } a_{\text{,,}} = 6,444 \text{ \AA}$$

In der Literatur werden die folgenden Dichten angegeben: für Zn Te 5,54<sup>1</sup> und 6,34,<sup>2</sup> für Cd Te 6,20<sup>3</sup> und für Hg Te (Coloradoit) 8,63.<sup>4</sup>

Die Molekülanzahl in der Elementarzelle berechnet man mittels diesen Zahlen, für Zn Te zu 3,87 bzw. 4,43, für Cd Te zu 4,16 und für Hg Te zu 4,10. Es wird demnach angenommen, daß der Elementarwürfel 4 Moleküle RTe enthält. Dieser Wert entspricht den Dichten 5,72 für Zn Te, 6,06 für Cd Te und 8,42 für Hg Te.

Die Millerschen Indices der reflektierenden Flächen zeigen das typische Bild eines flächenzentrierten Raumgitters, indem nur ungemischte Indicestripel vorkommen. Mit dieser Voraussetzung gibt die Raumgruppentheorie die folgenden Möglichkeiten für die Atomanordnung an:

$$\text{I Zn, Cd oder Hg in } \left[ (000) \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right) \left( \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \right) \left( 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) \right],$$

$$\text{Te in } \left[ \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) \left( \frac{1}{2} 00 \right) \left( 0 \frac{1}{2} 0 \right) \left( 00 \frac{1}{2} \right) \right]$$

<sup>1</sup> KOBAYASHI, Int. Zs. Metall. 2, 66, 1912.

<sup>2</sup> MARGOTTET, Compt. rend. 84, 1293, 1877.

<sup>3</sup> MARGOTTET, Compt. rend. 85, 1142, 1877.

<sup>4</sup> C. HINTZE, Handbuch der Mineralogie. Erster Band, erste Abteilung, 1904. Seite 710.

$$\text{II Zn, Cd oder Hg in } \left[ (000) \left( \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \right) \left( \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} \right) \left( 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right) \right],$$

$$\text{Te in } \left[ \left( \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4} \right) \left( \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4} \right) \left( \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4} \right) \left( \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4} \right) \right]$$

Es entspricht Fall I eine Struktur vom Steinsalztypus, während Fall II zu einer Zinkblendeanordnung führt.

Die Schwärzung habe ich mittels der üblichen Formel

$$I \sim \frac{A^2 + B^2}{h^2 + k^2 + l^2} s$$

berechnet, wo  $A + iB$  die Strukturamplitude ist und  $s$  die Häufigkeit der reflektierenden Fläche. Das Reflexionsvermögen ist für Zn gleich 28, für Cd gleich 46, für Te gleich 54 und für Hg gleich 78 gesetzt, entsprechend den Elektronenzahlen von  $\text{Zn}^{++}$ ,  $\text{Cd}^{++}$ ,  $\text{Te}^{++}$  und  $\text{Hg}^{++}$ . Die Ergebnisse der Intensitätsberechnungen sind in der Tabelle 4 zusammengestellt.

Tabelle 4.

h k l	Zn Te			Cd Te			Hg Te		
	Steinsalz-anordnung	Zink-blende anordnung	Intensität beobachtet	Steinsalz-anordnung	Zink-blende anordnung	Intensität beobachtet	Steinsalz-anordnung	Zink-blende anordnung	Intensität beobachtet
111	0,9	5,0	3	0	4,5	4	0,3	4,6	4
200	5,0	0,5	0	5	0	0	5,0	0,2	0
220	5,0	5,0	5	5	5	5	5,0	5,0	5
311	0,7	4,0	4	0	3,6	4	0,2	3,8	3 <sup>1,2</sup>
222	2,2	0,2	0	2,2	0	0	2,2	0,1	0
400	1,25	1,25	1	1,25	1,25	1	1,25	1,25	1 <sup>1,2</sup>
331	0,4	2,35	2	0	2,1	2	0,1	2,2	2 <sup>1,2</sup>
420	4,0	0,4	0	4,0	0	0	4,0	0,1	0
422	3,3	3,3	3	3,3	3,3	3	3,3	3,3	3
511\									
333f	0,4	2,2	2	0	3,2	2	0,1	2,0	2
440	-	-	-	-	-	-	1,25	1,25	1 <sup>1,2</sup>
531	-	-	-	-	-	-	0,1	2,4	2 <sup>1,2</sup>
442\									
600f	-	-	-	-	-	-	2,8	0,1	0
620	-	-	-	-	-	-	2,0	2,0	1 <sup>1,2</sup>

Die obige Tabelle zeigt mit großer Deutlichkeit, daß nur die Zinkblendeanordnung mit den beobachteten Schwärzungen übereinstimmt.

Dem Direktor des Mineralogischen Instituts Herrn Prof. Dr. V. M. GOLDSCHMIDT spreche ich für seine wertvolle Unterstützung meinen besten Dank aus. Den Herren cand. real. T. BARTH und Dr. G. LUNDE bin ich für die Aufnahme der Diagramme und die Darstellung der Präparate ebenfalls zu Dank verpflichtet.

Oslo, Mineralogisches Institut der Universität  
19. März 1926.

---