

## NOTIZEN

**SrSb<sub>2</sub>, eine neue Zintlphase**On the New Intermetallic Compound SrSb<sub>2</sub>

KLAUS DELLER und BRIGITTE EISENMANN  
Abteilung II für Anorganische Chemie  
Eduard-Zintl-Institut  
der Technischen Hochschule Darmstadt

(Z. Naturforsch. **31b**, 1146–1147 [1976]; eingegangen am 17. Mai 1976)

## Intermetallic Compounds, Crystal Structure

The new intermetallic compound SrSb<sub>2</sub> has been prepared and its crystal structure determined. The "anionic" part of the structure consists of (Sb<sup>-</sup>)-zigzag-chains, so the compound belongs to the "Zintl-phases".

Im System Sr–Sb sind bisher die Verbindungen Sr<sub>2</sub>Sb<sup>1</sup> und Sr<sub>5</sub>Sb<sub>3</sub><sup>2</sup> durch vollständige röntgenographische Strukturbestimmungen charakterisiert. Für das strontiumärmere Gebiet Sr–Sb ≤ 1:1 werden aus thermochemischen und metallographischen Untersuchungen die Verbindungen SrSb und SrSb<sub>3</sub> abgeleitet<sup>3</sup>. In diesem Bereich konnten wir nun Einkristalle der Verbindung SrSb<sub>2</sub> darstellen und durch vollständige röntgenographische Strukturbestimmung charakterisieren.

Die Verbindung SrSb<sub>2</sub> erhielten wir aus stöchiometrischen Ansätzen der Elemente in Korundtieglern unter Argon bei ca. 1000 °C. Die erhaltenen Reguli

Sonderdruckanforderungen an Dr. BRIGITTE EISENMANN, Eduard-Zintl-Institut der Technischen Hochschule Darmstadt, Abt. Anorg. Chemie II, Hochschulstraße 4, D-6100 Darmstadt.

hatten ein metallisch glänzendes, graues Aussehen mit einem grobkristallinen, blättrigen Bruch. An feuchter Luft bildete sich auf der Kristallfläche rasch ein matter dunkler Belag von Zersetzungsprodukten. Die Substanz wurde daher unter trockenem Paraffinöl gehandhabt. Es gelang aus lunkerförmigen Einschlüssen plättchenförmige Einkristalle loszubereiten, sie wurden zur röntgenographischen Untersuchung in Markröhrchen eingeschmolzen. Nach Precession- und Weissenbergaufnahmen (MoK $\alpha$ - bzw. CuK $\alpha$ -Strahlung) kristallisiert SrSb<sub>2</sub> monoklin. Es liegt ein primitives Gitter mit einer zweizähligen Schraubachse vor. Zur genauen Bestimmung der Gitterkonstanten (Tab. I) und Atomparameter wurde ein leistenförmig gebrochener Einkristall in einem automatischen Zweikreisdiffraktometer vermessen (Stoe-Stadi 2,  $\omega$ -scan, Graphitmonochromator, Drehachse  $b$ , 8 Schichtlinien). Die Intensitäten wurden bezüglich der Absorption nach der Kristallgestalt korrigiert. Symmetrie, Gitterkonstanten und Intensitätsverlauf der Reflexe wiesen auf Isotypie zu dem kürzlich

Tab. I. Kristallographische Daten der Verbindung SrSb<sub>2</sub>.

Kristallsystem:	Monoklin
Raumgruppe:	P 2 <sub>1</sub> /m
Achsen [Å]	$a = 4,887(5) \text{ \AA}$ $b = 4,280(10) \text{ \AA}$ $c = 9,177(5) \text{ \AA}$ $\beta = 101,68(6)^\circ$
Volumen der Elementarzelle [Å <sup>3</sup> ]	V = 187,97
Zahl der Formeleinheiten in der EZ	Z = 2
Dichte röntg. [g/cm <sup>3</sup> ]	$\rho_{\text{r6}} = 5,85$

Tab. II. Atomparameter der Verbindung SrSb<sub>2</sub> (Standardabweichungen in Klammern). Der anisotrope Temperaturfaktor ist definiert als:

$$\exp [-2 \pi^2 (h^2 a^{*2} U_{11} + k^2 b^{*2} U_{22} + l^2 c^{*2} U_{33} + 2 h k a^* b^* U_{12} + 2 h l a^* c^* U_{13} + 2 k l b^* c^* U_{23})].$$

	$x$	$y$	$z$	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
Sr auf 2e	0,4072(1)	0,2500	0,2860(1)	0,0133(3)	0,0126(3)	0,0149(3)	0,0000	0,0021(2)	0,0000
Sb <sub>I</sub> auf 2e	0,8112(1)	0,2500	0,0190(1)	0,0157(2)	0,0120(3)	0,0141(2)	0,0000	0,0038(2)	0,0000
Sb <sub>II</sub> auf 2e	0,0535(1)	0,2500	0,6105(1)	0,0119(2)	0,0122(3)	0,0292(3)	0,0000	0,0049(2)	0,0000

Tab. III. Atomabstände in Å (maximale Standardabweichung 0,002 Å) in der Verbindung SrSb<sub>2</sub>.

Sr - Sb <sub>II</sub>	3,379 (2×)	Sb <sub>I</sub> - Sb <sub>I</sub>	2,895 (2×)	Sb <sub>II</sub> - Sb <sub>II</sub>	2,919 (2×)
Sr - Sb <sub>II</sub>	3,379 (2×)	Sb <sub>I</sub> - Sr	3,406 (1×)	Sb <sub>II</sub> - Sr	3,379 (2×)
Sr - Sb <sub>I</sub>	3,406 (1×)	Sb <sub>I</sub> - Sr	3,444 (1×)	Sb <sub>II</sub> - Sr	3,379 (2×)
Sr - Sb <sub>I</sub>	3,444 (1×)	Sb <sub>I</sub> - Sr	3,514 (2×)	Sb <sub>II</sub> - Sr	3,731 (1×)
Sr - Sb <sub>I</sub>	3,514 (2×)	Sb <sub>I</sub> - Sb <sub>I</sub>	3,675 (2×)	Sb <sub>II</sub> - Sr	3,877 (1×)
Sr - Sb <sub>II</sub>	3,731 (1×)			Sb <sub>II</sub> - Sb <sub>I</sub>	3,960 (2×)
Sr - Sr	4,280 (2×)				
Sr - Sr	4,402 (2×)				
Sr - Sb <sub>II</sub>	3,877 (1×)				
Bindungswinkel in den Sb-Ketten:		a) Sb <sub>I</sub> - Sb <sub>I</sub> - Sb <sub>I</sub>	95,35(6)°		
		b) Sb <sub>II</sub> - Sb <sub>II</sub> - Sb <sub>II</sub>	94,28(6)°		

aufgeklärten CaSb<sub>2</sub><sup>4</sup> hin. Dementsprechend wurden die Atomparameter, ausgehend von den Werten des CaSb<sub>2</sub>, über least-squares-Cyclen verfeinert und eine anisotrope Temperaturkorrektur durchgeführt<sup>5</sup>. Als konventioneller *R*-Wert ergab sich 0,051 (1204 symmetrieunabhängige Reflexe). Die Atomparameter sind in Tab. II, die Atomabstände in Tab. III zusammengestellt.

Abb. 1 zeigt die Atomanordnung. Als „Anionenteilstruktur“ sind Sb-Sb-Zickzack-Ketten mit

Sb-Sb-Abständen von 2,90 bzw. 2,92 Å ausgebildet (Sb-Sb innerhalb der Schichten im Element 2,908 Å<sup>6</sup>). Damit ist SrSb<sub>2</sub> die erste Verbindung im System Sr-Sb, die dem Konzept von ZINTL, KLEMM und BUSMANN folgt.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danken wir für die finanzielle Unterstützung dieser Untersuchungen. Herrn Prof. Dr. H. SCHÄFER danken wir für kritische und anregende Diskussionen.

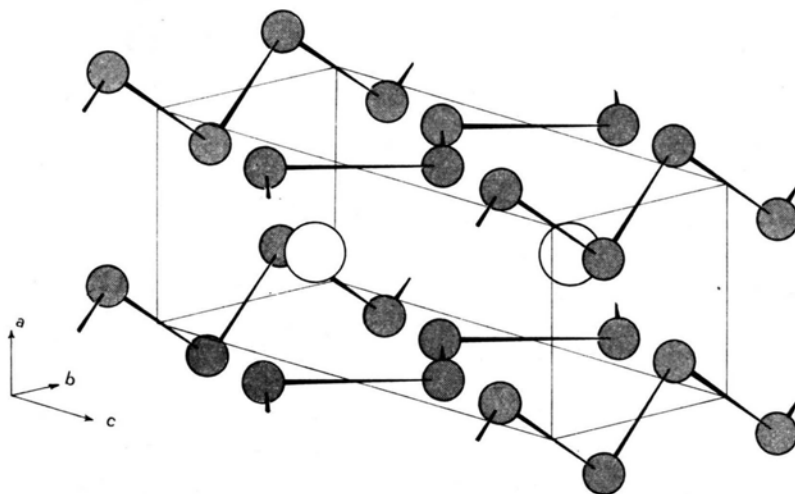


Abb. 1. Die Elementarzelle des SrSb<sub>2</sub>; (ausgefüllte Kreise  $\triangleq$  Sb-Atome, unausgefüllte Kreise  $\triangleq$  Sr-Atome).

<sup>1</sup> M. MARTINEZ-RIPOLL, A. HAASE u. G. BRAUER, Acta Crystallogr. **B 29**, 1715 [1973].

<sup>2</sup> M. MARTINEZ-RIPOLL u. G. BRAUER, Acta Crystallogr. **B 29**, 2717 [1973].

<sup>3</sup> R. P. ELLIOT, Constitution of Binary Alloys, S. 802, First Supplement, McGraw-Hill 1965.

<sup>4</sup> K. DELLER und B. EISENMANN, Z. Anorg. Allg. Chem., im Druck.

<sup>5</sup> G. SHELDRIK, Programmsystem SHEL-X 76, unveröffentlicht.

<sup>6</sup> J. DONOHUE, The Structures of the Elements, S. 309, J. Wiley, New York 1974.