

## CsNaSe – das erste Interalkalimetallchalkogenid mit Cäsium

CsNaSe –  
the First Inter Alkali Metal Chalkogenide  
with Cesium

Horst Sabrowsky\*, Volker Winter,  
Elisabeth Feldbaum-Möller, Petra Vogt

Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für  
Anorganische Chemie I, Festkörperchemie,  
Universitätsstraße 150, D-44801 Bochum

Z. Naturforsch. **48b**, 1837–1838 (1993);  
eingegangen am 26. Juli 1993

Cesium, X-Ray, Inter Alkali Metal Chalkogenide

The grey compound CsNaSe has been prepared. The characterization by X-ray powder methods leads to a tetragonal lattice (P 4/nmm) with  $a = 499,0(1)$ ,  $c = 808,7(2)$  pm and  $Z = 2$ . The structure is related to the PbFCl structure type.

### Einleitung

Bei unseren Untersuchungen zur Existenz von Interalkalimetallchalkogeniden der Zusammensetzung  $MM'X$  ( $M, M' =$  verschiedene Alkalimetalle,  $X =$  Chalkogen) konnten wir eine Fülle von Verbindungen mit  $M, M' = Li, Na, K, Rb$  [1–3] darstellen und strukturell charakterisieren. Die Verbindungen treten mit Ausnahme von  $KLiO$  im PbFCl- oder  $PbCl_2$ -Strukturtyp auf. In Weiterführung dieser Arbeiten war die Darstellung von ternären Chalkogeniden mit Cäsium von großem Interesse. Als ersten Vertreter erhielten wir nun CsNaSe, über dessen Darstellung und röntgenographische Charakterisierung hier berichtet wird.

### Experimenteller Teil

Die Darstellung von CsNaSe gelang durch dreitägiges Tempern äquimolarer Gemenge aus  $Na_2Se$  und  $Cs_2Se$  bei 870 K in verschlossenen Silbertiegeln, die sich unter Argon in abgeschmolzenen Quarzglasampullen befanden. Die Verbindung fällt als graue, polykristalline, sehr hygroskopische Spezies mit typisch neuer Reflexabfolge ihrer Guinier-Aufnahmen an. Geeignete Einkristalle zur Strukturklärung konnten bislang noch nicht erhalten werden. Unter der Annahme, daß es sich bei der neuen Verbindung um einen Vertreter des PbFCl-

Typs handelt, wurde eine Intensitätsrechnung in der Raumgruppe P 4/nmm mit abgeschätzten  $z$ -Parametern für Cäsium und Selen durchgeführt (Tab. I).

Tab. I. Tetragonale Indizierung und beobachtete Reflexintensitäten ( $I_o$ ) einer repräsentativen Guinier-Aufnahme ( $CuK_{\alpha 1}$ ) von CsNaSe. Für die Intensitätsrechnung ( $I_c$ ) wurden in der Raumgruppe P 4/nmm die Punktlagen folgendermaßen belegt: 2  $Na^+$  in 2a; 2  $Cs^+$  in 2c mit  $z = 0,65$ ; 2  $Se^{2-}$  in 2c mit  $z = 0,21$ ;  $a = 499,0(1)$ ,  $c = 808,7(2)$  pm.

$h$	$k$	$l$	$\sin^2\theta_o \cdot 10^5$	$\sin^2\theta_c \cdot 10^5$	$I_o$	$I_c$
0	0	2	3618	3626	2	1,25
1	1	0	4739	4766	9	8,62
1	1	1	5628	5642	3	2,74
1	0	2	5981	6009	10	10,00
0	0	3	8127	8159	1	0,56
1	1	2	8382	8393	5	4,31
2	0	0	9483	9530	7	5,54
2	0	1	10429	10437	1	0,19
2	1	2	15528	15541	6	5,41
1	0	4	16855	16888	2	1,87
2	0	3	17673	17690	1	0,77
2	2	0	19033	19061	2	2,08
1	1	4	19304	19279	1	0,62
2	2	1	19978	19969	1	0,08
2	2	2	22691	22689	3	0,42
3	1	0	23641	23689	2	1,94
3	0	2	25030	25047	3	1,41
2	1	4	26425	26419	2	2,05
1	1	5	27401	27430	1	0,12
3	2	2	34621	34603	3	1,97
3	0	4	35988	35951	1	0,73
1	1	6	37398	37402	1	0,24

### Ergebnisse und Diskussion

CsNaSe stellt das erste Interalkalimetallchalkogenid mit Cäsium dar. Die Guinier-Aufnahme der neuen Phase läßt sich vollständig tetragonal mit  $a = 499,0(1)$ ,  $c = 808,7(2)$  pm ( $Z = 2$ ) indizieren. Das Molvolumen ( $V_M = 60,63$  cm<sup>3</sup>) stimmt gut mit dem für CsNaSe aus den Biltzschens Volumeninkrementen zu  $V_B = 64,5$  cm<sup>3</sup> und dem aus der Summe der Molvolumina der binären Komponenten ( $V_K = 62,96$  cm<sup>3</sup>) gemittelten überein. Die unter Annahme des PbFCl-Typs mit geschätzten Parametern durchgeführte Intensitätsrechnung korrespondiert gut mit den aus Pulveraufnahmen ermittelten Reflexintensitäten. Somit schließt sich CsNaSe strukturell den Homologen  $KLiSe$  und  $RbNaSe$  an [4]. Mit der Präparation von Einkristallen und mit der Darstellung weiterer Cäsiumverbindungen sind wir beschäftigt.

\* Sonderdruckeranforderungen an Prof. Dr. H. Sabrowsky.  
Verlag der Zeitschrift für Naturforschung,  
D-72072 Tübingen  
0932-0776/93/1200-1837/\$ 01.00/0



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

- 
- [1] H. Sabrowsky, A. Thimm, P. Mertens, Z. Naturforsch. **40b**, 733 (1985).  
[2] R.-D. Hitzbleck, P. Vogt, H. Sabrowsky, Z. Naturforsch. **44b**, 1602 (1989).

- [3] H. Sabrowsky, P. Vogt, Z. Anorg. Allg. Chem. **553**, 226 (1987).  
[4] K. Hippler, P. Vogt, R. Wortmann, H. Sabrowsky, Z. Naturforsch. **44b**, 1607 (1989).