

Synthesen und Kristallstrukturen azentrischer TlMP_2Q_6 -Verbindungen

Stefan Seidlmayer, Stephan Eckl, Arno Pfitzner*

Institut für Anorganische Chemie, Universität Regensburg,
Universitätsstraße 31, D-93040 Regensburg
E-mail: arno.pfitzner@chemie.uni-regensburg.de

Keywords: hexachalcogenohypodiphosphate, thallium, metal, non-centrosymmetric structure

Es gelang die Synthese und Kristallstrukturbestimmung von acht isotypen Thalliumverbindungen TlMP_2Q_6 des β - KSbP_2Se_6 -Typs, sowie des von Gave et al. 2007 parallel zu uns untersuchten TlBiP_2S_6 [1, 2], mit $M = \text{In, Sb, Bi}$ für $Q = \text{S}$ sowie $M = \text{Sb, Dy, Er, Sm, Tb}$ für $Q = \text{Se}$. Alle Verbindungen kristallisieren azentrisch in der Raumgruppe $P 2_1$ (Nr. 4) mit ähnlichen Gitterkonstanten wie z.B. $\text{TlSbP}_2\text{Se}_6$ mit $a = 6,843(1) \text{ \AA}$, $b = 7,841(1) \text{ \AA}$, $c = 9,985(2) \text{ \AA}$, $\beta = 90,77(2)^\circ$ und $Z = 2$. Die Lösung dieser Kristallstruktur und anschließende Verfeinerung konvergierte für 1966 unabhängige Reflexe und 93 Parameter zu den Gütefaktoren $R_1(\text{alle}) = 0,0523$ und $wR_2(\text{alle}) = 0,1063$. Die Synthesen erfolgten in evakuierten Quarzampullen aus den Elementen durch mehrtägiges Tempern bei 600°C . Die Baueinheiten in $\text{TlSbP}_2\text{Se}_6$ sind ethanalog aufgebaute komplexe Anionen $[\text{P}_2\text{Se}_6]^{4-}$ mit einer zentralen P_2 -Hantel und gestaffelt angeordneten Se-Atomen. Diese sind zusammen mit quadratisch-pyramidal gebauten SbSe_5 - und dreifach überkappten trigonal-prismatischen TlSe_9 -Einheiten entlang $[101]$ in Schichten angeordnet, welche über lange M -Se Bindungen zu einem dreidimensionalen Netzwerk verknüpft werden.

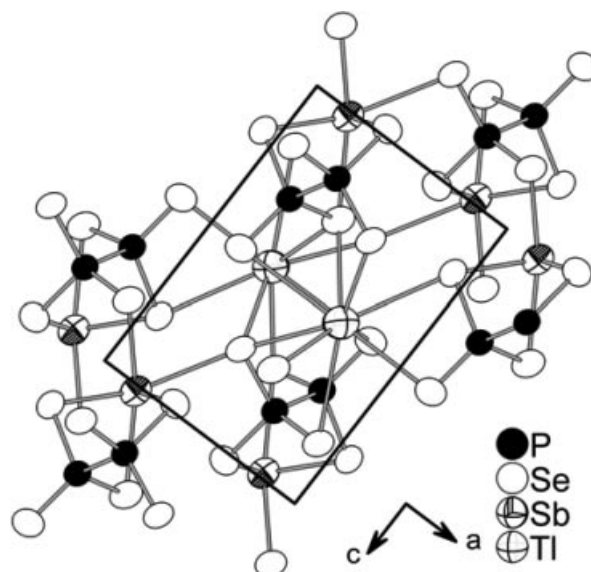


Abbildung 1 Ausschnitt aus der Struktur von $\text{TlSbP}_2\text{Se}_6$, Blickrichtung entlang $[010]$. Ellipsoide dargestellt mit 90%.

- [1] J. D. Breshears, M. G. Kanatzidis, *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, *122*, 7839.
[2] M. A. Gave, C. D. Malliakas, D. P. Weliky, M. G. Kanatzidis, *Inorg. Chem.* **2007**, *46*, 3632.