

Thanks are due to Dr. GEORGE TUNELL for his comments and suggestions. The calculation of crystal data and refinement of cell constants were accomplished with the aid of programs designed for the IBM 7090 computer by W. E. SHARP, Institute of Geophysics, U. C. L. A., to whom our thanks are also due for his advice and suggestions.

We wish to thank the U. C. L. A. Computing Facility for use of their IBM 7090 computer which greatly facilitated the computations involved in the study.

References

- L. V. AZAROFF and M. J. BUERGER (1958), The powder method in x-ray crystallography. McGraw-Hill Book Co., Inc., New York, 83-87.
- J. C. BELL and A. E. AUSTIN, Battelle indexing charts for diffraction patterns of tetragonal, hexagonal and orthorhombic crystals. Battelle Memorial Institute, Columbus, Ohio.
- P. W. BRIDGMAN (1916), Polymorphic changes under pressure of the univalent nitrates. Proc. Amer. Acad. Arts Sci. 51, 581-625.
- P. W. BRIDGMAN (1935), Effects of high shearing stress combined with high hydrostatic pressure. Physic. Review 48, 825-847.
- JOHN C. JAMIESON (1956), Some x-ray diffraction data on KNO_3 IV, a high pressure phase. Z. Kristallogr. 107, 65-71.
- A. W. LAWSON and TING-YUAN TANG (1950), A diamond bomb for obtaining powder pictures at high pressures. Rev. Sci. 21, 815.
- L. PAULING and J. SHERMAN, Note on the crystal structure of rubidium nitrate. Z. Kristallogr. 84, 213-216.

The crystal structure of potassium hexatitanate $\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$

By HILDA CID-DRESDNER and M. J. BUERGER

Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts

With 11 figures

(Received July 12, 1962)

Auszug

Die Struktur von Kaliumhexatitanat wurde neu bestimmt. Die Raumgruppe ist $C2/m$. Die Elementarzelle mit $a = 15,582 \pm 0,006 \text{ \AA}$, $b = 3,82 \pm 0,01 \text{ \AA}$, $c = 9,112 \pm 0,001 \text{ \AA}$, $\beta = 99,764^\circ \pm 0,008^\circ$ enthält $2(\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13})$. Dreidimensionale Interferenzdaten wurden mit einem Zählrohr-Diffraktometer gewonnen und für Absorption und mit dem Lorentz-Polarisations-Faktor korrigiert. Im späteren Stadium der Untersuchung wurde auch eine Korrektur für anomale Streuung der Ti-Atome angebracht.

Eine dreidimensionale Patterson-Synthese deutet eine Struktur an, die sich aus Ti-Oktaedern aufbaut, deren eine Hauptachse der 2-zähligen Achse parallel ist. Ein Strukturmodell, das die richtige Zahl der O-Atome ergab, wurde mittels der Minimumfunktion bestätigt.

In dieser Struktur sind die Ti-Oktaeder durch Kanten und Ecken zu Ketten verknüpft, mit Zwischenräumen für die K-Ionen. Sie wurde zuerst durch dreidimensionale Fourier-Synthesen und schließlich nach der Ausgleichsmethode verfeinert, bis zum Endwert $R = 12,4\%$ für alle Interferenzen. Individuelle Temperaturfaktoren und Atomabstände stimmen mit Literaturdaten überein.

Abstract

The crystal structure of potassium hexatitanate has been determined. The space group is $C2/m$ and the cell dimensions are $a = 15.582 \pm 0.006 \text{ \AA}$, $b = 3.82 \pm 0.01 \text{ \AA}$, $c = 9.112 \pm 0.001 \text{ \AA}$, $\beta = 99.764 \pm 0.008^\circ$. This unit cell contains $2(\text{K}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13})$.

Three-dimensional intensity data were collected by means of a single-crystal Geiger-counter diffractometer and the intensities were corrected for Lorentz-polarization factors and absorption. In later stages of the structure determination the three Ti were corrected for anomalous scattering.

A three-dimensional Patterson synthesis suggested a structure based on Ti octahedra with their axes parallel to the 2-fold axis. A model structure which gave the correct number of oxygens in this symmetry was confirmed by means