

SHORT COMMUNICATION

Contributions intended for publication under this heading should be expressly so marked; they should not exceed about 1000 words; they should be forwarded in the usual way to the appropriate Co-editor; they will be published as speedily as possible. Publication will be quicker if the contributions are without illustrations.

Acta Cryst. (1973). **B29**, 2032

Spectre de Raman et structure du chlorure d'uranyle trihydraté. Par CHRISTIAN CAVILLE et HENRI POULET.
Departement de Recherches Physiques, associé au C.N.R.S., Université de Paris VI, 4 place Jussieu, 75230 Paris Cedex 05, France

(Reçu le 21 mars 1973, accepté le 4 mai 1973)

Raman spectra of $\text{UO}_2\text{Cl}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ single crystals cannot be understood if they belong to space group $Pnma$. These crystals show piezoelectricity and pyroelectricity. It is suggested that the space group may be $Pn2_1a$ without an inversion centre.

Dans une étude radiocristallographique des divers hydrates du chlorure d'uranyle, Debets (1968) a attribué au composé $\text{UO}_2\text{Cl}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ la symétrie orthorhombique et le groupe d'espace $Pnma$. Nous avons préparé ce composé par évaporation à température ordinaire de solutions chlorhydriques. Les cristaux déliquescents, volumineux, ont un faciès orthorhombique; mais ils sont nettement pyroélectriques et fortement piézoélectriques: leur groupe spatial ne peut pas admettre de centre de symétrie.

L'interprétation du spectre de diffusion Raman et du spectre d'absorption infrarouge soulèverait également des difficultés si l'on admettait un groupe orthorhombique centré. La vibration de tension ν_3 antisymétrique de l'ion uranyle, située vers 930 cm^{-1} pour l'ion en solution, doit donner par corrélation dans le cristal (dont la maille contient $Z=4$ unités formulaires) quatre vibrations, appartenant aux représentations irréductibles $A_g, B_{2g}, B_{1u}, B_{3u}$ dans le groupe facteur D_{2h} du groupe $Pnma$. Les deux premières sont actives en diffusion, les deux dernières en absorption.

Or, on trouve bien deux fortes bandes d'absorption à 950 et 955 cm^{-1} , mais le spectre de Raman contient trois raies; l'une de type B_{2g} à 955 cm^{-1} est permise (la raie A_g également permise n'est pas observée); les deux autres de types B_{1g} à 955 cm^{-1} et B_{3g} à 950 cm^{-1} ne sont pas prévues théoriquement. Les fréquences et les intensités de ces deux dernières raies, comparées à l'intensité de la raie B_{2g} , ne permettent pas de penser qu'elles sont dues à des imperfections de polarisation.

Dans le système orthorhombique, seule la classe cristalline C_{2v} admet la pyroélectricité. Le groupe d'espace pourrait alors être $Pn2_1a$ (C_{2v}^9) dont les conditions de réflexions des rayons X sont très voisines de celle du groupe $Pnma$. Les distinctions entre types de vibrations u et g n'ont plus alors de signification et les raies interdites dans le cristal $Pnma$ cessent de l'être.

Référence

DEBETS, P. C. (1968). *Acta Cryst.* **B24**, 400–402.

Notes and News

Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. The notes (in duplicate) should be sent to the Executive Secretary of the International Union of Crystallography (J. N. King, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, England).

Hamilton Scholarships in Crystallography

The Walter C. Hamilton Memorial Fund, established under the auspices of Associated Universities, Inc., will be used to provide financial assistance each year to one or more graduate or advanced undergraduate students for work on crystallographic problems at Brookhaven National Laboratory, particularly with neutron diffraction techniques. Students will be selected for these awards on the basis of the scientific merits and feasibility of their research proposals, educational background and experience, and letters of reference. U.S. citizenship is not a requirement. It is expected that each student will spend one to two months at Brookhaven collecting and analysing neutron diffraction data under the guidance of a BNL crystallographer. Computational and other facilities of the Laboratory will be

made fully available. The individual stipends, intended to cover travel and housing expenses, will generally be in the range of 300 to 600 dollars. The students selected will be designated as Walter C. Hamilton Scholars.

It is anticipated that the first award will be for the academic year 1974–75. The deadline for applications will be March 1, 1974. Applicants should submit the following material to the Chairman, Chemistry Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY 11973, U.S.A.

(1) Description of the proposed problem (not to exceed 5 double-spaced pages).

(2) Educational background and experience (which must include some acquaintance with diffraction techniques).

(3) Three letters of reference, including one from the sponsoring professor.