

Table 39A-9-001. K₂ZnCl₄. Fractional coordinates [$\cdot 10^{-4}$] at $T = 180$ °C (phase II, average structure) and $T = 315$ °C (phase I) [90Qui1]. Neutron scattering. Model 1: Pmcn space group non-split model, model 2: Pmcn space group split model, model 3: P2₁cn space group.

180 °C					315 °C			
	Model	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	Model	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
K(1)	1	2500	4143(18)	6339(16)	1	2500	4114(12)	6355(11)
	2	2500	4145(7)	6327(7)	2	2500	4131(8)	6356(7)
	3	2874(26)	4161(17)	6354(15)				
K(2)	1	2500	8126(9)	4960(13)	1	2500	8129(6)	4942(10)
	2	2500	8126(4)	4949(6)	2	2500	8129(4)	4935(4)
	3	2462(52)	8125(9)	4951(13)				
Zn	1	2500	4188(5)	2190(6)	1	2500	4205(4)	2195(4)
	2	2500	4194(3)	2179(3)	2	2500	4206(2)	2194(3)
	3	2500	4191(5)	2191(6)				
Cl(1)	1	2500	4342(5)	9748(6)	2	2500	4288(4)	9768(4)
	2	3068(4)	4346(2)	9748(3)	2	2990(10)	4295(2)	9771(2)
	3	2606(60)	4348(5)	9749(5)				
Cl(2)	1	2500	5782(5)	3309(6)	1	2500	5797(4)	3231(4)
	2	1903(4)	5777(2)	3307(3)	2	2011(9)	5798(2)	3231(2)
	3	2535(63)	5782(4)	3310(6)				
Cl(3)	1	55(7)	3325(6)	3028(7)	1	55(5)	3368(6)	3063(4)
	2	184(11)	3064(4)	2753(6)	2	204(23)	3143(7)	2887(18)
	3	70(25)	3421(15)	3052(16)				
Cl(4)	2	5058(10)	3557(3)	3241(5)	2	5070(22)	3571(7)	3202(17)
	3	4840(25)	3238(16)	3014(19)				

Table 39A-9-002. K₂ZnCl₄. Crystal structure of phase III [79Mik]. Fractional coordinates [$\cdot 10^{-4}$] and isotropic temperature parameters [$\cdot 10^{-1} \text{ \AA}^2$]. *B* is defined by Eq. (e) in Introduction.

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>B</i>
K(1)	7866(9)	814(4)	433(1)	41(2)
K(2)	7638(9)	855(5)	3797(1)	49(2)
K(3)	7223(7)	833(4)	7106(1)	43(2)
K(4)	7219(6)	6875(3)	3319(1)	26(1)
K(5)	7388(6)	6863(3)	6660(1)	25(1)
K(6)	7932(6)	6883(3)	9986(1)	27(1)
Zn(1)	7500 *)	4194(1)	721(1)	19(1)
Zn(2)	7796(2)	4181(1)	4050(1)	17(1)
Zn(3)	7365(2)	4177(1)	7403(1)	19(1)
Cl(1)	6731(6)	4437(3)	9917(1)	25(1)
Cl(2)	8151(7)	5756(3)	1123(1)	27(1)
Cl(3)	9795(6)	3012(3)	844(1)	31(1)
Cl(4)	4910(6)	3560(4)	1111(1)	28(1)
Cl(5)	8129(7)	4366(3)	3229(1)	36(1)
Cl(6)	8132(9)	5782(4)	4439(2)	45(2)
Cl(7)	—4(7)	3072(5)	4353(2)	44(2)
Cl(8)	5110(6)	3480(4)	4306(2)	48(2)
Cl(9)	8044(7)	4358(3)	6591(1)	34(1)
Cl(10)	6660(8)	5760(4)	7794(1)	30(1)
Cl(11)	26(6)	3615(3)	7778(1)	32(1)
Cl(12)	5177(6)	2942(3)	7560(1)	35(1)

*) Value fixed during the refinements.

Table 39A-9-003. K₂ZnCl₄. Crystal structure of phase III [79Mik]. Interatomic distances [Å] and bond angles [°]. Standard deviations of all angles are 0.2°.

Zn(1)–Cl(1)	2.245(3)	K(3)–Cl(2)	3.357(5)	K(6)–Cl(1)	3.161(5)
–Cl(2)	2.265(4)	–Cl(4)	3.237(5)	–Cl(1)	3.217(6)
–Cl(3)	2.243(5)	–Cl(5)	3.089(5)	–Cl(2)	3.354(4)
–Cl(4)	2.289(4)	–Cl(10)	3.232(8)	–Cl(3)	3.184(5)
Zn(2)–Cl(5)	2.222(3)	–Cl(11)	3.194(7)	–Cl(4)	3.315(5)
–Cl(6)	2.256(5)	–Cl(12)	3.243(6)	–Cl(6)	3.248(5)
–Cl(7)	2.258(5)	K(4)–Cl(3)	3.178(5)	–Cl(7)	3.138(6)
–Cl(8)	2.242(5)	–Cl(4)	3.241(5)	–Cl(8)	3.164(6)
Zn(3)–Cl(9)	2.240(3)	–Cl(5)	3.190(5)	Cl(1)–Zn(1)–Cl(2)	113.1
–Cl(10)	2.284(5)	–Cl(6)	3.357(5)	Cl(1)–Zn(1)–Cl(3)	114.4
–Cl(11)	2.286(4)	–Cl(9)	3.402(6)	Cl(1)–Zn(1)–Cl(4)	106.2
–Cl(12)	2.246(5)	–Cl(10)	3.279(5)	Cl(2)–Zn(1)–Cl(3)	109.6
K(1)–Cl(3)	3.257(7)	–Cl(11)	3.396(5)	Cl(2)–Zn(1)–Cl(4)	104.4
–Cl(6)	3.452(9)	–Cl(12)	3.192(5)	Cl(3)–Zn(1)–Cl(4)	108.5
–Cl(6)	3.323(6)	K(5)–Cl(2)	3.330(5)	Cl(5)–Zn(2)–Cl(6)	110.7
–Cl(7)	3.560(6)	–Cl(5)	3.459(7)	Cl(5)–Zn(2)–Cl(7)	110.0
–Cl(8)	3.394(7)	–Cl(7)	3.220(5)	Cl(5)–Zn(2)–Cl(8)	116.0
–Cl(9)	3.109(4)	–Cl(8)	3.283(6)	Cl(6)–Zn(2)–Cl(7)	107.1
K(2)–Cl(1)	3.093(5)	–Cl(9)	3.149(5)	Cl(6)–Zn(2)–Cl(8)	107.1
–Cl(2)	3.266(8)	–Cl(10)	3.372(5)	Cl(7)–Zn(2)–Cl(8)	105.6
–Cl(4)	3.299(8)	–Cl(11)	3.149(5)	Cl(9)–Zn(3)–Cl(10)	114.1
–Cl(7)	3.563(8)	–Cl(12)	3.202(5)	Cl(9)–Zn(3)–Cl(11)	105.8
–Cl(10)	3.424(6)			Cl(9)–Zn(3)–Cl(12)	113.9
–Cl(11)	3.298(6)			Cl(10)–Zn(3)–Cl(11)	104.4
				Cl(10)–Zn(3)–Cl(12)	110.0
				Cl(11)–Zn(3)–Cl(12)	107.9

Table 39A-9-004. K₂ZnCl₄. Crystal structure of phase IV [93Mas]. Fractional coordinates and equivalent isotropic temperature parameters [$\cdot 10^{-2} \text{ \AA}^2$]. $T = 140 \text{ K}$. $U_{\text{eq}} = 1/3 \sum U_{ij} a_i^* a_j^* a_i a_j$, where U_{ij} is defined by Eq. (d) in Introduction.

Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U_{eq}	Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	U_{eq}
K(1 <i>a</i>)	0.1153 *)	0.0808(2)	0.2100 *)	2.04(12)	Cl(3 <i>d</i>)	0.0133(4)	0.4820(2)	0.2558(2)	1.78(13)
K(1 <i>b</i>)	0.1319(4)	0.0822(2)	0.5431(2)	2.38(13)	Cl(4 <i>d</i>)	0.2557(4)	0.4414(2)	0.2804(2)	1.78(12)
K(1 <i>c</i>)	0.1398(4)	0.0778(2)	0.8808(2)	2.92(16)	Zn(<i>e</i>)	0.1288(2)	0.4126(1)	0.5723(1)	0.91(5)
K(1 <i>d</i>)	0.1594(4)	0.4148(2)	0.0436(2)	2.59(13)	Cl(1 <i>e</i>)	0.0885(4)	0.4012(2)	0.4932(2)	1.29(11)
K(1 <i>e</i>)	0.1315(4)	0.4126(2)	0.3804(2)	2.24(13)	Cl(2 <i>e</i>)	0.1688(4)	0.3334(2)	0.6129(2)	1.68(13)
K(1 <i>f</i>)	0.1148(4)	0.4110(2)	0.7111(2)	1.82(11)	Cl(3 <i>e</i>)	−0.0005(3)	0.4422(2)	0.6130(2)	1.61(12)
K(1 <i>g</i>)	0.3685(4)	0.3319(2)	0.2905(2)	2.32(13)	Cl(4 <i>e</i>)	0.2431(4)	0.4740(2)	0.5851(2)	1.71(12)
K(1 <i>h</i>)	0.3959(4)	0.3391(2)	0.6197(2)	2.32(13)	Zn(<i>f</i>)	0.1476(2)	0.4170(1)	0.9042(1)	1.15(6)
K(1 <i>i</i>)	0.4092(4)	0.3310(2)	0.9564(2)	2.35(13)	Cl(1 <i>f</i>)	0.1663(4)	0.4046(2)	0.8214(2)	1.81(13)
K(1 <i>j</i>)	0.3843(4)	0.1721(2)	0.1206(2)	2.26(13)	Cl(2 <i>f</i>)	0.1837(4)	0.3379(2)	0.9473(2)	2.33(14)
K(1 <i>k</i>)	0.3822(4)	0.1604(2)	0.4573(2)	2.62(14)	Cl(3 <i>f</i>)	0.0047(4)	0.4447(2)	0.9290(2)	2.26(14)
K(1 <i>l</i>)	0.3556(4)	0.1659(2)	0.7918(2)	1.98(12)	Cl(4 <i>f</i>)	0.2461(4)	0.4823(2)	0.9327(2)	2.33(14)
K(2 <i>a</i>)	0.1126(3)	0.2822(2)	0.1682(2)	1.19(10)	Zn(<i>g</i>)	0.3905(2)	0.3327(1)	0.0958(1)	0.92(5)
K(2 <i>b</i>)	0.1532(3)	0.2805(2)	0.4983(2)	1.34(10)	Cl(1 <i>g</i>)	0.4207(4)	0.3466(2)	0.1766(2)	1.68(13)
K(2 <i>c</i>)	0.1123(4)	0.2812(2)	0.8344(2)	1.60(11)	Cl(2 <i>g</i>)	0.4023(4)	0.4119(2)	0.0534(2)	1.95(13)
K(2 <i>d</i>)	0.1505(3)	0.2194(2)	0.0002(2)	1.32(11)	Cl(3 <i>g</i>)	0.2544(4)	0.2949(2)	0.0779(2)	1.89(13)
K(2 <i>e</i>)	0.1113(3)	0.2188(2)	0.3304(2)	1.43(11)	Cl(4 <i>g</i>)	0.4997(4)	0.2753(2)	0.0646(2)	2.57(15)
K(2 <i>f</i>)	0.1284(4)	0.2166(2)	0.6650(2)	1.77(12)	Zn(<i>h</i>)	0.3822(2)	0.3316(1)	0.4277(1)	1.00(5)
K(2 <i>g</i>)	0.4071(3)	0.0288(2)	0.0018(2)	1.24(10)	Cl(1 <i>h</i>)	0.3374(4)	0.3483(2)	0.5092(2)	1.49(12)
K(2 <i>h</i>)	0.3738(3)	0.0347(2)	0.3334(2)	1.51(11)	Cl(2 <i>h</i>)	0.4242(4)	0.4082(2)	0.3862(2)	1.36(12)
K(2 <i>i</i>)	0.3678(3)	0.0305(2)	0.6677(2)	1.38(11)	Cl(3 <i>h</i>)	0.2492(4)	0.3024(2)	0.3884(2)	1.96(13)
K(2 <i>j</i>)	0.3607(3)	0.4685(2)	0.1697(2)	1.17(10)	Cl(4 <i>h</i>)	0.4922(4)	0.2671(2)	0.4224(2)	1.56(12)
K(2 <i>k</i>)	0.3992(3)	0.4678(2)	0.5001(2)	1.09(10)	Zn(<i>i</i>)	0.3707(2)	0.3355(1)	0.7603(1)	0.92(5)
K(2 <i>l</i>)	0.3701(3)	0.4703(2)	0.8344(2)	1.36(11)	Cl(1 <i>i</i>)	0.4105(4)	0.3455(2)	0.8412(2)	1.86(13)
Zn(<i>a</i>)	0.1318(2)	0.0817(1)	0.0704(1)	1.13(6)	Cl(2 <i>i</i>)	0.3305(4)	0.4140(2)	0.7204(2)	1.75(13)
Cl(1 <i>a</i>)	0.0881(4)	0.0970(2)	−0.0078(2)	1.40(11)	Cl(3 <i>i</i>)	0.2610(4)	0.2719(2)	0.7478(2)	1.61(12)
Cl(2 <i>a</i>)	0.1589(4)	0.1597(2)	0.1141(2)	1.28(11)	Cl(4 <i>i</i>)	0.5049(4)	0.3098(2)	0.7214(2)	1.49(12)
Cl(3 <i>a</i>)	0.0026(3)	0.0456(2)	0.1095(2)	1.11(11)	Zn(<i>j</i>)	0.3695(2)	0.1686(1)	0.2583(1)	1.09(6)
Cl(4 <i>a</i>)	0.2467(4)	0.0207(2)	0.0808(2)	2.08(14)	Cl(1 <i>j</i>)	0.4036(4)	0.1596(2)	0.3396(2)	1.74(12)
Zn(<i>b</i>)	0.1396(1)	0.0843(1)	0.4028(1)	0.73(5)	Cl(2 <i>j</i>)	0.3308(4)	0.0897(2)	0.2197(2)	1.65(13)
Cl(1 <i>b</i>)	0.1647(4)	0.0938(2)	0.3205(2)	1.88(13)	Cl(3 <i>j</i>)	0.2602(4)	0.2328(2)	0.2435(2)	1.84(13)
Cl(2 <i>b</i>)	0.1469(4)	0.1660(2)	0.4434(2)	1.87(12)	Cl(4 <i>j</i>)	0.5032(4)	0.1966(2)	0.2205(2)	1.69(13)
Cl(3 <i>b</i>)	0.0049(4)	0.0466(2)	0.4295(2)	2.60(14)	Zn(<i>k</i>)	0.3934(2)	0.1662(1)	0.5942(1)	1.03(6)
Cl(4 <i>b</i>)	0.2553(4)	0.0333(2)	0.4384(2)	2.14(13)	Cl(1 <i>k</i>)	0.4023(4)	0.1580(2)	0.6773(2)	1.42(11)
Zn(<i>c</i>)	0.1206(2)	0.0825(1)	0.7400(1)	0.95(6)	Cl(2 <i>k</i>)	0.4370(4)	0.0869(2)	0.5578(2)	1.99(13)
Cl(1 <i>c</i>)	0.1592(4)	0.0902(2)	0.6581(2)	1.85(13)	Cl(3 <i>k</i>)	0.2543(4)	0.1888(2)	0.5637(2)	1.91(12)
Cl(2 <i>c</i>)	0.0952(3)	0.1630(2)	0.7806(2)	1.06(11)	Cl(4 <i>k</i>)	0.4937(4)	0.2323(2)	0.5699(2)	1.91(13)
Cl(3 <i>c</i>)	0.0093(4)	0.0219(2)	0.7569(2)	1.41(12)	Zn(<i>l</i>)	0.3765(2)	0.1624(1)	0.9282(1)	0.82(5)
Cl(4 <i>c</i>)	0.2563(4)	0.0515(2)	0.7778(2)	1.47(12)	Cl(1 <i>l</i>)	0.3373(4)	0.1499(2)	1.0110(2)	1.44(11)
Zn(<i>d</i>)	0.1181(2)	0.4170(1)	0.2413(1)	0.94(6)	Cl(2 <i>l</i>)	0.4111(4)	0.0834(2)	0.8879(2)	1.73(13)
Cl(1 <i>d</i>)	0.1570(4)	0.4065(2)	0.1594(2)	1.91(13)	Cl(3 <i>l</i>)	0.2437(4)	0.1936(2)	0.8908(2)	1.59(12)
Cl(2 <i>d</i>)	0.0799(4)	0.3376(2)	0.2810(2)	1.37(11)	Cl(4 <i>l</i>)	0.4937(4)	0.2211(2)	0.9153(2)	1.52(12)

*) Coordinate fixed.

Table 39A-9-005. K₂ZnCl₄. Crystal structure of phase IV [93Mas]. Mean cation-chlorine distances [Å] and Cl-Zn-Cl bond angles [°] of ZnCl₄ groups. *T* = 140 K.

Site	K(1)–Cl	K(2)–Cl	Zn–Cl
(a)	3.168	3.223	2.257
(b)	3.278	3.193	2.266
(c)	3.286	3.272	2.274
(d)	3.262	3.206	2.273
(e)	3.235	3.246	2.256
(f)	3.165	3.260	2.271
(g)	3.196	3.200	2.240
(h)	3.238	3.229	2.279
(i)	3.263	3.268	2.261
(j)	3.262	3.251	2.258
(k)	3.290	3.196	2.246
(l)	3.204	3.234	2.278
Mean	3.237	3.231	2.263

Zn–Cl(1)	2.244	Cl(1)–Zn–Cl(2)	112.7
–Cl(2)	2.276	Cl(1)–Zn–Cl(3)	112.0
–Cl(3)	2.260	Cl(1)–Zn–Cl(4)	109.5
–Cl(4)	2.272	Cl(2)–Zn–Cl(3)	107.6
Mean	2.263	Cl(2)–Zn–Cl(4)	106.8
		Cl(3)–Zn–Cl(4)	107.6
		Mean	109.4

Table 39A-9-006. K₂ZnCl₄. Elastic compliances [89Tyl]. *T* = RT.

<i>s</i> ₁₁	<i>s</i> ₂₂	<i>s</i> ₃₃	<i>s</i> ₄₄ + 2 <i>s</i> ₂₃	<i>s</i> ₅₅ + 2 <i>s</i> ₁₃	<i>s</i> ₆₆ + 2 <i>s</i> ₁₂	Ref.
[10 ^{–11} m ² /N]						
4.80	6.93	6.37	17.3	14.5	15.1	88Qui
4.56	6.00	6.60	16.8	13.1	14.3	89Tyl

Table 39A-9-007. K₂ZnCl₄. Dispersion of refractive indices [90Rom].

λ [nm]	<i>n</i> _a	<i>n</i> _b	<i>n</i> _c	λ [nm]	<i>n</i> _a	<i>n</i> _b	<i>n</i> _c
250	1.69325	1.68820	1.69675	660	1.55665	1.55186	1.56050
300	1.63471	1.62791	1.69300	700	1.55465	1.55500	1.55868
340	1.60942	1.60335	1.61432	740	1.55320	1.54855	1.55727
380	1.59338	1.58795	1.59855	780	1.55212	1.54741	1.55622
420	1.58275	1.57745	1.58782	820	1.55125	1.54652	1.55542
460	1.57475	1.56992	1.57976	850	1.55075	1.54600	1.55494
500	1.56920	1.56432	1.57368	900	1.5500	1.5455	1.5545
540	1.56495	1.55985	1.56900	950	1.5490	1.5445	1.5545
580	1.56150	1.55658	1.56545	1000	1.5480	1.5445	1.5535
620	1.55878	1.55402	1.56258	1050	1.5480	1.5440	1.5530