

Sitzung der mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse
vom 15. Dezember 1976

Sonderabdruck aus dem Anzeiger der math.-naturw. Klasse der
Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Jahrgang 1977, Nr. 12

(Seite 209 bis 211)

3

3
3

2. „Der Strukturtyp von Finnemanit, $Pb_5Cl(AsO_3)_3$.“

Von Herta Effenberger und Franz Pertlik (Aus dem Institut
für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien).

Im Rahmen von Arbeiten über die Kristallchemie der Arsenite erschien auch eine Neubearbeitung der Struktur des Finnemanits angezeigt, da die Strukturbestimmung durch Gabrielson (1955) nach der "trial and error" — Methode große Diskrepanzen in den beobachteten und berechneten Intensitäten zeigt.

Das für diese Stukturanalyse verwendete Material stammt von einer Mineralstufe aus Långban, Schweden (A. Roebing Collection No. R 5754, U. S. National Museum Washington), auf der Finnemanit in kleinen Kristallen mit Trigonit vergesellschaftet vorkommt. Eine qualitative Mikrosondenanalyse zeigt, daß die untersuchte Probe aus Blei, Arsen und Chlor besteht, mit geringem Gehalt (je $\sim 0,1\%$) an Silber und Antimon. Die Identität des hier vorliegenden Materials mit dem von Gabrielson (1955) verwendeten scheint aufgrund des Vergleichs von Gitterkonstanten, systematischer Auslöschung und qualitativer chemischer Analyse weitgehend gesichert. Es ergeben sich die folgenden Gitterparameter: $a_0 = 10,322 \text{ \AA}$, $c_0 = 7,055 \text{ \AA}$ mit zwei Formeleinheiten pro Elementarzelle; Raumgruppe: $P 6_3/m - C_6^2h$.

Die Reflexdaten wurden auf einem automatischen Zweikreis-diffraktometer (Mok α -Strahlung; Graphit—Monochromator) von einer geschliffenen Kugel (Durchmesser: 0,15 mm) gesammelt

und in üblicher Weise für Lorentz- und Polarisierungseffekte korrigiert. Weiters wurde eine Absorptionskorrektur der Daten, entsprechend der Kugelgestalt des Kristalls durchgeführt.

Da der Strukturvorschlag von Gabrielson (1955) mit den neu bestimmten Intensitäten nicht in Übereinstimmung zu bringen war, wurden die Schweratomparameter in einer Pattersonsynthese neu bestimmt. Daran anschließend gerechnete Fouriersumationen ermöglichten die Festlegung der Positionen von Chlor und der Sauerstoffe. Die Verfeinerung der Atomparameter und der anisotropen Temperaturparameter aller Atome nach der Methode der kleinsten Quadrate ergibt für die 542 als beobachtet gewerteten Reflexe einen R-Wert von 0,086. Während Gabrielson (1955) die Strukturbestimmung aufgrund kristallchemischer Überlegungen in der Raumgruppe $P 6_3 - C_6$ durchführte, zeigt die Neubearbeitung dieser Struktur, deren Ergebnis grundsätzlich verschieden ist von der ersten Bearbeitung, keinen Anhaltspunkt für eine Symmetrierniedrigung. In Tabelle 1 sind die Atomparameter und die mittleren isotropen Temperaturparameter von Finnemanit bezogen auf die Raumgruppe $P 6_3/m - C_6$ angeführt. Einige wichtige interatomare Abstände und Winkel werden in Tabelle 2 angegeben. Bei der Struktur von Finnemanit handelt es sich um ein Gerüst bestehend aus $[AsO_3]$ -Pyramiden und Blei-Sauerstoff-Polyedern. Erwähnenswert kurz ist ein Abstand $Pb(1) - Pb(1) = 3,38 \text{ \AA}$, der auf eine chemische Wechselwirkung zwischen diesen beiden Atomen hinweist.

Eine ausführliche Veröffentlichung ist in Tschermaks Mineralogisch Petrographischen Mitteilungen vorgesehen.

Tabelle 1

Atomparameter (x, y, z) und mittlere isotrope Temperaturparameter (\bar{B}) von Finnemanit. In Klammern sind die Standardabweichungen in Einheiten der letzten Stelle angegeben. Ursprung der Elementarzelle in $\bar{1}$

Atom	Punktlage	x	y	z	\bar{B}
Pb (1)	4 (f)	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	0,9898 (4)	1,78
Pb (2)	6 (h)	0,2644 (2)	0,0363 (2)	$\frac{1}{4}$	1,09
As	6 (h)	0,4136 (6)	0,4007 (6)	$\frac{1}{4}$	0,87
O (1)	6 (h)	0,620 (4)	0,468 (4)	$\frac{1}{4}$	0,87
O (2)	12 (i)	0,368 (3)	0,278 (3)	0,063 (4)	1,11
Cl	2 (b)	0,0	0,0	0,0	0,94

Tabelle 2

Einige interatomare Abstände und Winkel im Finnemanit.
Die Standardabweichungen betragen für die $Pb-O$ -Abstände
0,03 Å, für die $As-O$ -Bindungslängen 0,05 Å

$$Pb(1) - O(1) = 2,39 \text{ \AA} (3 \times)$$

$$Pb(1) - O(2) = 2,87 \text{ \AA} (3 \times)$$

$$Pb(2) - O(1) = 2,40 \text{ \AA}$$

$$Pb(2) - O(2) = 2,54 \text{ \AA} (2 \times)$$

$$Pb(2) - O(2') = 2,60 \text{ \AA} (2 \times)$$

$$Pb(2) - Cl = 3,11 \text{ \AA} (2 \times)$$

$$As - O(1) = 1,88 \text{ \AA}$$

$$As - O(2) = 1,72 \text{ \AA} (2 \times)$$

$$O(1) - As - O(2) = 96,6^\circ (2 \times)$$

$$O(2) - As - O(2) = 99,8^\circ$$

Literatur

Gabrielson, O., 1955: The crystal structure of finnemanite $Pb_2Cl(AsO_3)_3$.
Ark. Min. Geol. 2, 1-8.
