

Sitzung der mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse
vom 7. Oktober 1971

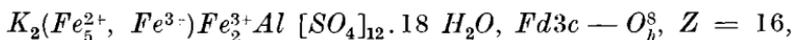
Sonderabdruck aus dem Anzeiger der math.-naturw. Klasse der
Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Jahrgang 1971, Nr. 11

(Seite 147 bis 148)

Das korr. Mitglied Josef Zemann legt eine kurze Mitteilung vor, betitelt:

„Orientierungsunordnung der $\text{Al}(\text{OH}_2)_6$ -Oktaeder in Voltait.“ Von K. Mereiter. (Aus dem Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien.)

Bei der Aufklärung des Strukturtyps der Voltait wurde eine Orientierungsunordnung des Koordinationspolyeders $\text{Al}^{3+}(\text{OH}_2)_6$ im Thallium-Cadmium-Eisen-Voltait wahrscheinlich gemacht (Mereiter, 1970). Dies konnte nun durch eine Strukturverfeinerung von synthetischem Kalium-Eisen-Aluminium-Voltait,



bestätigt und genauer untersucht werden.

In der Elementarzelle treten 96 der H_2O -Moleküle als Liganden für 16 Aluminium auf. Eine 3-dimensionale Fouriersynthese und anschließende Strukturfaktorrechnungen zeigten, daß diese 96 Sauerstoffatome statistisch auf zwei 192-zählige Punktlagen verteilt sind [Punktlage (h) 192; Koordinaten x, y, z für Aufstellung mit S. Z. in 0, 0, 0:

$$O(\text{W}_1) 0.090, 0.145, 0(.070; O\text{W}_2) 0.069, 0.089, 0.103].$$

Jedes Al wird von 2×12 Atomlagen, die beide laut Verfeinerung mit der Methode der kleinsten Quadrate zu einem Viertel mit H_2O besetzt sind, je im Abstand von etwa 1,9 Å umgeben.

Da für H_2O - H_2O -Abstände im Koordinationspolyeder um Al Werte $\geq 2,5$ Å zu erwarten sind, ist nur eine Interpretation sinnvoll, in der 2×3 der zur Verfügung stehenden 2×12 H_2O -

Lagen so besetzt werden, daß ein kaum verzerrtes Koordinationsoktaeder entsteht (vier Orientierungen). Jede der beiden Sauerstoffarten ist etwa 2,6 Å von zwei Sulfatsauerstoffen entfernt. Diese kurzen O-O-Abstände und die kleine formale Bindungsstärke der Sulfat-O-Atome weisen auf eine Wasserstoffbrückenbindung hin. Eine Strukturfaktorrechnung mit dieser statistischen Verteilung der Polyederorientierungen ergab $R \approx 0,08$ für 630 beobachtete Reflexe.

Die ausführliche Veröffentlichung ist in „Tschermaks Mineralogische und Petrographische Mitteilungen“ vorgesehen.

Literatur

Mereiter, K., 1970: Der Strukturtyp der Voltaite. *Naturwiss.* 57, 670.
