

Sitzung der mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse
vom 24. Oktober 1973

Sonderabdruck aus dem Anzeiger der math.-naturw. Klasse der
Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Jahrgang 1973, Nr. 10

(Seite 129)

Das wirkl. Mitglied Josef Zemann übersendet eine kurze
Mitteilung:

„Ein neuer Strukturtyp bei Sulfaten dreiwertiger
Metalle.“ Von K. Mereiter. (Aus dem Institut für Mineralogie
und Kristallographie der Universität Wien.)

Röntgenographische Untersuchungen haben gezeigt, daß
das Eisensulfat mit der formalen Zusammensetzung $\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot$
 $\cdot 4\text{SO}_3 \cdot 9 \text{H}_2\text{O}$ (als Mineral: Rhomboklas) nach der Kristall-
strukturbestimmung als $[\text{H}_5\text{O}_2]^+ \{\text{Fe}[\text{SO}_4]_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}\}^-$ mit Schicht-
struktur zu formulieren ist. Es liegt also kein saures Fe^{3+} -Sulfat,
sondern ein Sulfat von Fe^{3+} und $[\text{H}_5\text{O}_2]^+$ vor. Nach Einkristall-
aufnahmen sind die entsprechenden Ga^{3+} -, In^{3+} -, Tl^{3+} -Ver-
bindungen isotyp zur Fe^{3+} -Verbindung. Die Struktur von
 $[\text{H}_5\text{O}_2]^+ \{\text{Fe}[\text{SO}_4]_2 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}\}^-$ (für Gitterkonstanten und Aus-
lösungen vgl. Becherer, 1970) wurde aus dreidimensionalen
Röntgendaten für 705 Reflexe auf $R = 0,03$ verfeinert.

In den SO_4 -Tetraedern messen die S—O-Abstände 1,49
($2 \times$), 1,45 und 1,46 Å, wobei die Sauerstoffe der beiden längeren
S—O-Abstände gemeinsame Ecken zwischen den SO_4 -Tetraedern
und FeO_6 -Oktaedern bilden. Die Sauerstoffe der beiden kürzeren
S—O-Bindungen sind Akzeptoren von Wasserstoffbrücken der
 $[\text{H}_5\text{O}_2]^+$ -Gruppe (O—O-Abstand der Brücken 2,76 Å ($2 \times$)
und 2,65 Å ($2 \times$)). Der O—O-Abstand innerhalb der $[\text{H}_5\text{O}_2]^+$ -
Gruppe beträgt 2,44 Å. Die Fe—O-Abstände variieren zwischen
1,96 und 2,06 Å, der Mittelwert ist 1,998 Å. Die Standardabweichungen
der angegebenen Bindungslängen überschreiten nicht
0,01 Å.

Die Tatsache, daß die S—O-Abstände der nicht an Fe gebundenen Sulfatsauerstoffe kleiner als 1,47 Å sind, zeigt, daß keine saure SO_4 -Gruppe vorliegen kann, was auch mit den anderen kristallchemischen Zügen der Struktur in Übereinstimmung steht.

Die ausführliche Veröffentlichung der Struktur von Rhomboklas wird in „Tschermaks Mineralogische und Petrographische Mitteilungen“ erfolgen.

Literatur

K. Becherer: Tschermaks Mineral. Petrogr. Mitt. 14, 155—157 (1970).
