

Sitzung der mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse vom 15. Juni 1950

Sonderabdruck aus dem Anzeiger der math.-naturw. Klasse der
Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Jahrgang 1950, Nr. 9

(Seite 200 und 201)

Das wirkl. Mitglied F. Machatschki übersendet eine kurze Mitteilung, und zwar:

„Formel und Kristallstruktur des Schafarzikits.“
Von J. Zemann.

Das Mineral Schafarzikit wurde erstmalig von J. A. Krenner (1) als Seltenheit vom Antimonitbergbau Pernek (Slowakei) beschrieben. Nach seinem Befund sind die Kristalle tetragonal mit einem Achsenverhältnis $a : c = 1 : 0.9787$. L. Tokody (2) gab einige physikalische Eigenschaften an (so z. B. die Dichte $\zeta = 4.3 \text{ g/ccm}$) und änderte das Achsenverhältnis auf $1 : 0.95381$. Die einzige chemische Bearbeitung, eine Mikroanalyse H. Huebers (3), führte auf die Formel $\text{Fe}_5\text{Sb}_4\text{O}_{11}$.

Die röntgenographische Untersuchung von Schafarzikit ergab aus Drehkristall- und Pulveraufnahmen $a = 8.59$ und $c = 5.92 \pm 0.02 \text{ \AA}$. Stärkere Reflexe treten nur mit $h+k+l = 2n$ auf. Mit obiger Formel und Dichte ist keine Struktur in diese Zelle einzubauen.

Die Deutung der Diagramme gelingt hingegen unter Änderung der Formel auf FeSb_2O_4 und Annahme von vier Formeleinheiten in der Elementarzelle. Wählt man dafür dieselbe Struktur wie sie S. Stâhl (4) für ZnSb_2O_4 bestimmt hat — das durch Tempern synthetisierte FeSb_2O_4 ist nach ihm mit ZnSb_2O_4 isomorph —, so erhält man gute Übereinstimmung zwischen berechneten und beobachteten Intensitäten. Die von mir für Schafarzikit bestimmten Gitterkonstanten sind innerhalb der Fehlergrenze dieselben wie Stahls Werte für FeSb_2O_4 ($a = 8.592$; $c = 5.905 \text{ \AA}$).

Trotzdem diese Formeländerung gewaltsam erscheint, ist nach obigem nicht zu zweifeln, daß sie zu Recht besteht. Ein isomorpher Ersatz von Sb durch Fe kommt kaum in Frage.

Für Schafarzikit gilt:

Formel: FeSb_2O_4 ; röntgenograph. Dichte: $\rho = 5.49 \text{ g/ccm}$; Kristallklasse: Tetragonal holoedrisch; $a : c = 1 : 0.689$ (Die Aufstellung nach Krenner und Tokody ist um 45° zu verdrehen; Krenners Achsenverhältnis entspricht dann $1 : 0.692$; Tokodys $1 : 0.674$).

Raumgruppe: $D_{4h}^{13} - P 4/mbc$.

Gitterkonstanten: $a = 8.59 \pm 0.02 \text{ \AA}$; $c = 5.92 \pm 0.20 \text{ \AA}$.

Punktlagen:

4 Zn in 4(d) : o $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{4}$ usw.

8 Sb in 8(h) : xyo usw.

$x = 0.175$; $y = 0.167$

8 O in 8(g) : x $\frac{1}{2} + x$ $\frac{1}{4}$ usw.

$x = 0.669$

8 O in 8(h) : xyo usw.

$x = 0.114$; $y = 0.614$.

Die Struktur steht mit den morphologischen Eigenschaften in Übereinstimmung. Aufbaubestimmend sind SbO_2^1 — Ketten in Richtung der c-Achse, die durch 6-koordiniertes Eisen miteinander verbunden sind. In der Schreibweise F. Machatschkis lautet die Formel des Schafarzikits: $\frac{1}{\infty} \text{Fe}^{[6]} \text{Sb}_2^{[3]} \text{O}_4 \text{ t}$.

Literatur:

(1) Krenner J., Schafarzikit, ein neues Mineral. Z. Krist., 56 (1921), 198.

(2) Tokody L., Beiträge zur Kenntnis der kristallographischen und physikalischen Eigenschaften des Schafarzikits. Z. Krist., 62 (1925), 123.

(3) Hueber H., Über die Anwendung von Mikromethoden in der Mineralanalyse. Zentr. Min. A. 1932, 337.

(4) Ståhl S., The Crystal Structure of ZnSb_2O_4 and Isomorphous Compounds. Arkiv för Kemi etc. 17 B (1943), Nr. 5.

(5) Machatschki F., Konstitutionsformeln für den festen Zustand. Monatshefte f. Chem., 77 (1947), 333.