

Über die Strukturzelle von Chrysotilasbest

VON N. N. PADUROW

(13a) Fladungen 41, Bayern, Deutschland

(Eingegangen am 26. Mai 1949 und wiedereingereicht am 10. September 1949)

Fibre and powder photographs of chrysotile asbestos (from Canada) have been indexed and evaluated by means of the affine lattice constants described by the author. As a result this asbestos is found to be triclinic, the deviations from monoclinic symmetry being slight but definite.

Es wurden Proben eines Chrysotilasbests aus Quebeck (Kanada), mit Hilfe der Faser- und Pulveraufnahmen untersucht (Kameradurchmesser 57,3 mm.: Cu $K\alpha$ Strahlung). Außerdem wurde ein Teil der Pulveraufnahmen mit Mo $K\alpha$ Strahlen aufgenommen.

Bei der Indizierung und Berechnung der Filme wurde eine neue, sich auf die Anwendung der Positionswinkel (ϕ, ρ) und der affinen Gitterkonstanten (Padurow, 1950) gründende Methode erprobt. Bei dieser Untersuchung ergab sich, daß der Chrysotilasbest der triklinen Syngonie angehört.

Äquatorschichtlinie

Die Ergebnisse der Äquatorvermessung sind in Tabelle 1 zusammengestellt; $2y$ ist der Abstand zwischen den symmetrischen Flecken.

Tabelle 1. Äquatorschichtlinie: Indizes und experimentelle θ -Werte

Nr.	$I \dagger$	$2y$ (mm.)	θ°	sin θ		(hk0)	
1	s.st.	11,8	5° 54'	1 × 0,103		100	
2	m.	19,56	9° 48'		2 × 0,085		020
3	s.st.	24,05	12° 2'	2 × 0,104		200	
4	sch.	36,6	18° 18'	3 × 0,105		300	
5	sch.	49,55	24° 47'	4 × 0,105		400	
6	m.	59,96	30°		6 × 0,083		060
7	sch.	63,25	31° 37'	5 × 0,105		500	
8	s.sch.	78,06	39° 2'	6 × 0,105		600	
9	s.s.sch.	94,5	47° 15'		9 × 0,082		090
10	s.s.sch.	114,4	57° 12'	8 × 0,105		800	

\dagger st. = stark, m. = mittel, sch. = schwach, s. = sehr.

Als Mittelwert finden wir:

$$\theta_{100} = 0,10482 \text{ und } \sin \theta_{010} = 0,08311.$$

Daraus berechnen wir

$$d_{100} = 7,345 \text{ \AA. und } d_{010} = 9,251 \text{ \AA.}$$

Die Winkel $\gamma^* = (100) : (010)$ und $\Delta_\gamma = \gamma^* - 90^\circ$ werden gewöhnlich aus den Reflexen ($hk0$) der Äquatorschichtlinie gefunden. Chrysotilasbest zeigt nur die Reflexe ($h00$) und ($0k0$), entsprechend dem vorläufigen Wert $\gamma^* = 90^\circ$ und $\Delta_\gamma = 0$. Hiernach finden wir (Padurow, 1950) aus der Äquatorschichtlinie:

$$a_0 = d_{100} = 7,345 \text{ \AA; } b_0 = d_{010} = 9,251 \text{ \AA; } t_2 = b_0/a_0 = 1,259;$$

und
$$\phi_{110} = 51^\circ 33'.$$

Berechnung der c -Achse

Die zwei höheren Schichtlinien des Faserdiagramms liegen im Abstand vom Äquator $z_1 = 8,65$ mm. und $z_2 = 20,2$ mm. Die Winkel μ sind entsprechend $\mu_1 = 16^\circ 46'$ und $\mu_2 = 35^\circ 15'$ und genügen hinreichend genau dem Verhältnis $\sin \mu_1 : \sin \mu_2 = 1 : 2$. Aus $c = l\lambda / \sin \mu$ folgt

$$c = 5,33 \text{ \AA.}$$

Hauptausdehnung

Der Hauptausdehnungskoeffizient (Padurow, 1950) ist $t = c/a_0$. Mit den von uns gefundenen c - und a_0 -Werten ist für Asbest:

$$t = 0,726.$$

Berechnung der ρ -Werte

In Tabelle 2 und 3 sind die Ergebnisse der Messung der höheren Schichtlinien gegeben. Hier ist $2y$ der

Abstand zwischen zwei symmetrischen Flecken. Zur Auffindung der Winkel ξ und θ dienen die Gleichungen $\xi^\circ = 2y$ mm. und $\cos 2\theta = \cos \xi \cos \mu$.

Tabelle 2. Erste Schichtlinie: experimentelle ρ -Werte
 $\mu_1 = 16^\circ 46'$

Nr.	I	$2y$ (mm.)	ξ	θ	ρ	$\text{tg } \rho$
1	m.	9,95	9° 58'	9° 43'	31° 13'	0,606
2	m.	30,42	30° 25'	17° 10'	60° 44'	1,784
3	m.	33,0	33°	18° 18'	62° 39'	1,933
4	s.s.sch.	38,3	38° 18'	20° 39'	65° 51'	2,230
5	s.sch.	51,2	51° 12'	26° 34'	71° 11'	2,935

Die Errechnung der ρ -Werte kann nach zwei Verfahren durchgeführt werden: entweder aus

$$\cos \rho = \sin \mu / 2 \sin \theta,$$

oder $\text{tg}^2 \rho = A - B \cos \xi$. Hier sind A und B Koeffizienten, deren Größe nur vom Winkel μ abhängt. Mit anderen Worten, die Koeffizienten A und B sind für alle Reflexe ein und derselben Schichtlinie gleich. Zu ihrer Berechnung dienen die Gleichungen:

$$A = \frac{2}{\sin^2 \mu} - 1 \text{ und } B = \frac{2}{\sin^2 \mu} \cos \mu.$$

Danach ist für die zweite Schichtlinie des Asbests $A = 5,0043$ und $\lg B = 0,69049$.

Tabelle 3. Zweite Schichtlinie: experimentelle ρ -Werte

$\mu_2 = 35^\circ 15'$						
Nr.	I	$2y$ (mm.)	ξ	θ	ρ	$\text{tg} \rho$
1	s.st.	9,95	9° 57'	18° 13'	22° 40'	0,418
2	sch.	19,30	19° 18'	19° 47'	31° 32'	0,614
3	s.s.sch.	21,87	21° 52'	20° 22'	33° 59'	0,674
4	m.	26,50	26° 30'	21° 31'	38° 7'	0,785
5	s.s.sch.	36,7	36° 42'	24° 33'	46° 1'	1,036
6	sch.	41,27	41° 16'	26° 4'	48° 57'	1,148
7	s.sch.	51,57	51° 34'	29° 45'	54° 26'	1,398
8	s.s.sch.	56,42	56° 25'	31° 34'	56° 33'	1,514
9	sch.	67,40	67° 24'	35° 46'	60° 25'	1,762

Die Möglichkeit des Auffindens der ρ -Werte nach verschiedenen Verfahren gestattet eine Nachprüfung der Berechnungen. Im Falle gut ausgebildeter Kristalle können diese Winkel mit Hilfe zweikreisiger Reflexionsgoniometer unmittelbar gemessen werden. Für Asbest besteht diese Möglichkeit nicht.

Anwendung der gnomonischen Projektion

Beim Indizieren der höheren Schichtlinien monokliner und trikliner Kristalle führt die gnomonische Projektion zu einer guten graphischen Lösung. Dabei haben wir auch die Möglichkeit, die erforderlichen Größen mit einer beliebigen Genauigkeit zu berechnen.

Die Konstruktion basiert auf der Eigenschaft der gnomonischen Projektion, daß bei Schiebung alle ihre Punkte in parallelen Richtungen die gleichen Strecken zurücklegen. Das graphische Verfahren† besteht aus zwei aufeinanderfolgenden Manipulationen: (1) dem Konstruieren eines gnomonischen Netzes für den Hilfskristall mit der isotropen‡ Kante $[001]$, und (2) der Bestimmung der Richtung und der Größe der Schiebung.

Bei der Indizierung der Äquatorschichtlinie (Padurow, 1950) haben wir a_0, b_0 und $\gamma^* = \phi_{100}$ errechnet. Außerdem ist uns die c -Achse bekannt. Diese Angaben genügen zum Konstruieren gnomonischer Netze für die Reflexe einer beliebigen Schichtlinie.

Zur Berechnung der Winkel ρ , die von der isotropen Kante aus gemessen werden, dienen folgende Gleichungen:

$$\text{tg} \rho_{10l} = t/l \sin \gamma^* \text{ und } \text{tg} \rho_{01l} = t/lt_2.$$

† Eine ausführlichere Beschreibung der angewandten Methode wurde ausgelassen, da analoge Methoden schon in der englischen (Bunn, 1945) und amerikanischen (Buerger, 1942) Literatur beschrieben worden sein sollen (die Arbeiten selbst sind dem Verfasser z.Zt. nicht zugänglich).

‡ Die Kante ist nach Fedorow geometrisch isotrop, wenn diese Kante mit der Normalen der gleichindizierten Fläche zusammenfällt. Die isotropen Kanten werden mittels doppelter Klammern bezeichnet.

Für Chrysotilasbest ist:

$$t = 0,726, \gamma^* = 90^\circ \text{ und } t_2 = 1,259.$$

Daraus finden wir für die erste Schichtlinie

$$a'_1 = t = 0,726 \text{ und } a''_1 = 0,576.$$

Analog erhalten wir für die zweite Schichtlinie

$$a'_2 = t/2 = 0,363 \text{ und } a''_2 = 0,288.$$

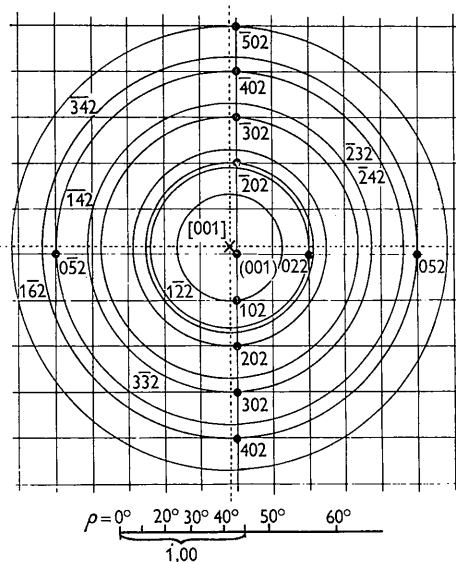


Fig. 1. Gnomonische Projektion für die zweite Schichtlinie.

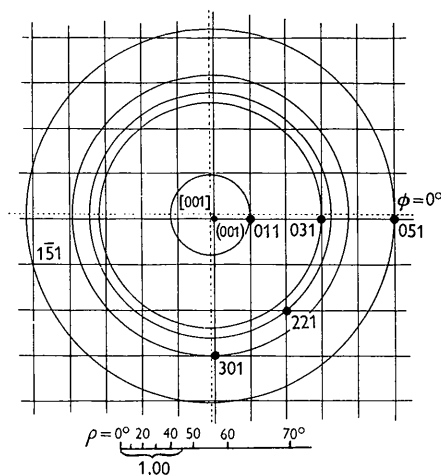


Fig. 2. Gnomonische Projektion für die erste Schichtlinie.

Beim Konstruieren der Diagramme (Fig. 2) für die erste Schichtlinie wurde ein Maßstab, in dem $\text{tg} 45^\circ = 25/3$ mm. ist, angenommen. Analog wurde für die zweite Schichtlinie (Fig. 1) $\text{tg} 45^\circ = 50/3$ mm. angenommen.

Für jeden der Reflexe der höheren Schichtlinien sind uns die Winkel ρ (Tabelle 2 und 3), die von der anisotropen $[001]$ -Achse aus gemessen sind, bekannt. Vermerken wir nun auf dem Pausblatt den Punkt $[001]$ und nehmen wir ihn als Mittelpunkt konzentrischer

Kreise, deren Halbmesser gleich $tg\rho$ sind. Diese Kreise sind geometrische Orte für die gnomonischen Projektionen der reflektierenden Flächen.

Durch Übereinanderlegen der beiden Konstruktionen ist es nicht schwer zu erreichen, daß auf jeder Kreislinie wenigstens eine Parallelogrammecke liegt. Sodann wird die Messung der Schiebungsgröße (t_β und t_α) und die Auffindung der Indizes für alle Reflexe durchgeführt.

Die rechnerischen Methoden basieren darauf, daß wir für jeden beliebigen Punkt $A = (hkl)$ (Fig. 3): (1) die experimentell gefundene Größe $S_{hkl} = CA = tg\rho$, und (2) die als Funktion von a' , a'' und γ^* theoretisch errechnete Größe des Vektors $R_{hkl} = C'A$ kennen.

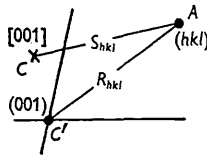


Fig. 3. Gnomonische Projektion; $S_{hkl} = tg\rho$.

Graphische Indizierung der ersten und zweiten Schichtlinien

Die Konstruktion des konzentrischen Netzes für die zweite Schichtlinie ist mit Hilfe der in Tabelle 3 angegebenen $tg\rho$ -Werte durchgeführt worden (Fig. 1). Analog finden wir für die erste Schichtlinie (Fig. 2) die Längen der Halbmesser in Tabelle 2. Die Indizierungsergebnisse sind in den Tabellen 4 und 5 angeführt.

Tabelle 4. Indizierungsergebnisse der ersten Schichtlinie

Nr.	(hkl)
1	011
2	031
3	221,131
4	301
5	051

Tabelle 5. Indizierungsergebnisse der zweiten Schichtlinie

Nr.	(hk2)
1	102
2	022
3	202
4	202
5	302
6	302
7	402,052
8	402,052
9	502

Graphisch wurden die die Schiebungsgröße kennzeichnenden affinen Gitterkonstanten (Padurow, 1950) gefunden. Sie sind

für die erste Schichtlinie: $\Delta_\beta = +4^\circ$ und $\Delta_\alpha = -3^\circ$
 für die zweite Schichtlinie: $\Delta_\beta = +3^\circ$ und $\Delta_\alpha = -3,5^\circ$.

Berechnung des Winkels Δ_β

Diese Berechnung kann besonders bequem nach der zweiten Schichtlinie (Fig. 1), wo es acht Reflexe ($h02$) gibt, durchgeführt werden. In Tabelle 6 sind die Ergebnisse der mit Hilfe der Gleichung $t_\beta = |S_{h02} - R_{h02}|$ durchgeführten Rechnung angegeben. Dabei wird angenommen, daß $\Delta_\alpha = 0$, d.h. daß Chrysotilasbest ein monoklines Mineral ist.

Die so errechnete Größe t_β muß für monokline Kristalle, für die positiven Flächen ($h02$) die gleiche sein, wie für die negativen Flächen ($\bar{h}02$). Für Asbest haben wir eine Differenz von 0,006, die die Fehlergrenze überschreitet.

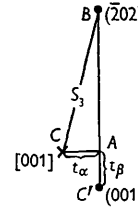


Fig. 4. Gnomonische Projektion; Anorthogonalitäten t_β und t_α .

In der letzten Spalte der Tabelle 6 sind die t_β -Werte (t_β korrigiert) angeführt; bei ihrer Berechnung wurde angenommen, daß Chrysotilasbest ein triklin Mineral und der Winkel $\Delta_\alpha = -3,5^\circ$ ist. Die Berechnung wurde auf folgende Weise ausgeführt.

In Fig. 4 ist die relative Anordnung der gnomonischen Projektionen ($\bar{2}02$) = B, [001] = C und (001) = C' schematisch dargestellt. Die Hypotenuse $BC = S_3 = 0,674$; die Kathete $AC = t_\alpha = tg 3,5^\circ = 0,061$; $BC' = 2a' = 0,726$. Aus dem rechtwinkligen Dreieck ABC finden wir: $(AB)^2 = (S_3 + t_\alpha)(S_3 - t_\alpha)$. Daraus ist $AB = 0,671$. Da $t_\beta = AC' = BC' - AB$ ist, so ist $t_\beta = 0,055$ und $\Delta_\beta = 3^\circ 9'$. Nach Durchführung analoger Berechnungen für die anderen Reflexe finden wir also Mittelwert $t_\beta = 0,0557$ und

$$\Delta_\beta = 3^\circ 11' \pm 5'$$

Berechnung des Winkels Δ_α

Ebenso wie bei der Berechnung der Winkel Δ_β , besteht die Aufgabe in dem Auffinden der rechtwinkligen Dreiecke.

Diese Dreiecke können in jedem einzelnen Falle mit Hilfe der Fig. 1 und 2 leicht gewählt werden. Bei diesen Berechnungen wurde angenommen, daß $t_\beta = 0,0557$.

Tabelle 6. Experimentelle Δ_β -Werte

Nr.	(h02)		$S_{h02} = tg\rho$	R_{h02}	t_β		t_β korrigiert
1	102		0,418	$a' = 0,363$	0,055		0,052
3		$\bar{2}02$	0,674	$2a' = 0,726$	0,059	0,052	0,055
4	202		0,785				0,057
5		$\bar{3}02$	1,036	$3a' = 1,089$	0,059	0,053	0,055
6	302		1,148				0,057
7		$\bar{4}02$	1,399	$4a' = 1,452$	0,062	0,053	0,055
8	402		1,514				0,061
9		$\bar{5}02$	1,762	$5a' = 1,815$		0,053	0,054
				Mittelwert	0,059	0,053	0,0557

Die Berechnungsergebnisse für sieben Reflexe sind in Tabelle 7 angeführt. Daraus finden wir als Mittelwert $t_\alpha = -0,0495$ und

$$\Delta_\alpha = -2^\circ 50' \pm 15'.$$

Tabelle 7. Experimentelle Δ_α -Werte

(hkl)	t_α
011	-0,027
031	-0,056
051	-0,055
221	-0,057
022	-0,036
052	-0,072
052	-0,043
Mittelwert	-0,0495

Berechnung des Winkels Δ_γ

Zur Berechnung des Winkels Δ_γ muss man auf Reflexe (hkl) zurückgehen, in denen weder h noch k null ist. Bei der Indizierung der Äquatorschichtlinie (Tabelle 1) sind solche Reflexe nicht festgestellt worden. Ebenso haben wir auf der zweiten Schichtlinie (Fig. 1) keinen einzigen solchen Reflex, dem man nicht das Symbol (h02) oder das Symbol (0k2) zuschreiben könnte. Nur auf der ersten Schichtlinie (Fig. 2) haben wir einen solchen Reflex und zwar (221). Wir wollen uns seiner für die Nachprüfung des von uns angenommenen Winkels γ^* ($\Delta_\gamma = 0$) bedienen und zwar auf folgende Weise.

In Fig. 2 haben wir ein Netz von Parallelogrammen, für das $a' = 0,726$, $a'' = 0,576$ und $\gamma^* = 90^\circ$ ist. In diesem Falle finden wir theoretisch für den Reflex (221) $\rho_{221} = 62^\circ 35'$.

Wir wollen ein anderes Netz von Parallelogrammen konstruieren, wo a' und a'' dieselben Größen haben und der Winkel $\gamma^* = 100^\circ$ ist. Mit Hilfe dieses neuen Netzes ist es nicht schwer, eine neue, der Fig. 2 analoge Konstruktion zu erhalten und aus ihr $\rho_{221} = 59^\circ 41'$ zu errechnen.

Nachdem wir für die Winkel $\gamma^* = 95^\circ$, 85° und 80° analoge Konstruktionen und Berechnungen durchgeführt haben, finden wir verschiedene theoretische, in Tabelle 8 angeführte Winkel ρ_{221} .

Tabelle 8. Die bei Annahme verschiedener γ^* -Winkel errechneten ρ_{221} -Werte

γ^*	Δ_γ	ρ_{221}
100°	+ 10°	59° 41'
95°	+ 5°	61° 34'
90°	0°	62° 35'
85°	- 5°	63° 30'
80°	- 10°	64° 18'

Für die Reflexe (221) wurde aus dem Film (Tabelle 2) der Winkel $\rho_{221} = 62^\circ 39'$ gefunden. Dieser Winkel ist sehr nahe dem Winkel $62^\circ 35'$, der in Tabelle 8 vorhanden ist. Daraus folgern wir, daß bei Chrysotilasbest der Winkel Δ_γ entweder sehr klein oder genau gleich 0 ist.

Zusammenfassung

In Tabelle 9 sind die von uns gefundenen affinen Gitterkonstanten, denjenigen von Warren & Bragg (1931) und von Warren & Hering (1942) gegenübergestellt.

Tabelle 9. Affine Gitterkonstanten von Asbest

Affine Gitterkonstanten		Warren & Bragg	Warren & Hering	Padurow
a_0 (A.)	Gittermaßstab	14,636	7,318	7,345
$t = c : a_0$	Hauptausdehnungskoeffizient	0,364	0,728	0,726
$t_2 = b_0 : a_0$	zweiter Ausdehnungskoeffizient	1,264	1,263	1,259
Δ_β	monokline Anorthogonalität	+ 3° 16'	+ 3° 16'	+ 3° 11'
Δ_α	} triklinen Anorthogonalität	{ 0°	0°	- 2° 50'
Δ_γ				

Aus Tabelle 10 sehen wir, daß die von uns gefundenen Werte der Achsen a , b , c sich von denen, die in der Arbeit von Warren & Hering angeführt sind, wenig unterscheiden. Der Hauptunterschied besteht in der Neigung des dritten Pinakoids (001). Nach diesen Ausführungen gehört Chrysotilasbest der triklinen Syngonie an, seine Strukturzelle ist pseudorhombisch.

Tabelle 10. Röntgenometrische Gitterkonstanten von Asbest

Röntgenometrische Gitterkonstanten	Warren & Bragg	Warren & Hering	Padurow
a (A.)	14,66	7,33	7,36
b (A.)	18,5	9,24	9,26
c (A.)	5,33	5,33	5,33
α	90°	90°	92° 50'
β	93° 16'	93° 16'	93° 11'
γ	90°	90°	89° 50'

Die Feststellung der triklinen Symmetrie beim Chrysotilasbest gibt neue Möglichkeiten zum Verständnis dieses Minerals. Am wahrscheinlichsten ist der micellare Bau seiner Fasern (O'Daniel & Kedesdy, 1947) und die Anordnung der Ketten in der Ebene (010). Wegen der Pseudosymmetrie der Strukturzelle sind verschiedene Mikrozwillinge möglich. Von diesem Gesichtspunkte aus ist bei Asbest eine ebensolche Pseudopolymorphie zu erwarten, wie bei Wollastonit (Köppen, 1945-8) und bei vielen anderen Silikaten.

Das Faserdiagramm von Chrysotilasbest weist verschiedene Störungen in seiner Struktur auf, besonders bedeutend sind sie längs der Achse b . In diesem Sinne haben wir beim Asbest ein 'eindimensionales fehlgeordnetes Kristallgitter' (Jagodzinski & Laves, 1948).

Die Erforschung der Struktur des Asbests stellt noch in mancher Hinsicht ein interessantes Problem dar; leider besteht für den Verfasser, wegen Arbeitslosigkeit, kaum eine Aussicht, die begonnene Arbeit zu Ende zu führen.

Für die bei der Arbeit geleistete Hilfe und für die zu meiner Verfügung gestellten mineralogischen Proben bin ich Frau Dr. F. Oberlies zu Dank verpflichtet.

Schrifttum

- BUERGER, M. J. (1942). *X-ray Crystallography*. New York: Wiley.
 BUNN, C. W. (1945). *Chemical Crystallography*. Oxford: Clarendon Press.
 JAGODZINSKI, H. & LAVES, F. (1948). *Schweiz. min. petrogr. Mitt.* **28**, 456.

- KÖPPEN, N. (1945–8). *N. Jb. Min. Geol. Paläont. A. Monatshefte*, S. 136.
 O'DANIEL, H. & KEDESZY, H. (1947). *Naturwissenschaften*, **34**, 55.
 PADUROW, N. N. (1950). *Acta Cryst.* **3**, 200.
 WARREN, E. & BRAGG, W. L. (1931). *Z. Kristallogr.* **76**, 201.
 WARREN, E. & HERING, K. W. (1942). *Phys. Ber.* **23**, 308.

Acta Cryst. (1950). **3**, 208

The Structure of Fluorborite

BY Y. TAKÉUCHI

Mineralogical Institute, Science Department, University of Tokyo, Japan

(Received 22 October 1949)

The crystal structure of fluorborite, $3\text{Mg}(\text{OH}, \text{F})\cdot\text{BO}_3$, has been analysed using the Weissenberg-Buerger method ($\text{MoK}\alpha$, $\lambda = 0.710 \text{ \AA}$). The unit cell has the dimensions: $a = 9.06 \pm 0.02$, $c = 3.06 \pm 0.01 \text{ \AA}$, with two molecules per cell. The space group has been assumed to be $C_{6h}^2-C6_3/m$. The structure is composed of linked octahedra of oxygen atoms and OH (or F) groups around magnesium, boron atoms being in the middle of oxygen triangles.

Fluorborite is a rather rare boron-bearing mineral. The result of our recent study of three of its kindred minerals, warwickite, ludwigite and pinakiolite, between which a strikingly close structural relationship has been found (Takéuchi, Watanabé & Ito, 1950), has led us to inquire if the crystal structure of fluorborite may not be worked out on similar lines.

Material

The specimen used in the investigation came from Tallgruvan, Sweden, and was kindly placed at our disposal by Dr Takéo Watanabé, who had obtained a slender prismatic crystal about 1.5 mm. in length and 0.3 mm. in width by separating it from the matrix of dolomite, ludwigite and magnetite. A chemical composition of the mineral may be expressed by the formula $3\text{Mg}(\text{OH}, \text{F})\cdot\text{BO}_3$, with $\text{OH}:\text{F} = 12:5$ (Geijer, 1926).

Unit cell and space group

The hexagonal unit cell has the dimensions,

$$(\text{Mo } K\alpha, \lambda = 0.710 \text{ \AA})$$

$$a = 9.06 \pm 0.02, \quad c = 3.06 \pm 0.01 \text{ \AA},$$

giving $c/a = 0.337$ in agreement with the value given by Aminoff (Geijer, 1926). The a dimension was determined from Weissenberg and the c dimension from rotation photographs, using $\text{Mo } K\alpha$ radiation ($\lambda = 0.710 \text{ \AA}$) in both cases. There are two molecules of $3\text{Mg}(\text{OH}, \text{F})\cdot\text{BO}_3$ in the cell. The Laue symmetry being C_{6h} , deduced from the Weissenberg photographs, the space group is either C_6^2 or C_{6h}^2 , since there is no observed rule governing the absent reflexions excepting the $(00l)$ spectra which occur only when l is even. We could not, however, decide between these groups before we started the analysis owing to the lack of morphological or other evidence.

Analysis

The zero-level and 2nd-level Weissenberg-Buerger photographs about the c axis are virtually identical. We may conclude, considering the structure amplitudes for C_6^2 and C_{6h}^2 , that this can take place only when all the atoms in the cell are at $z = \frac{1}{4}$ or $\frac{3}{4}$, regardless of the choice

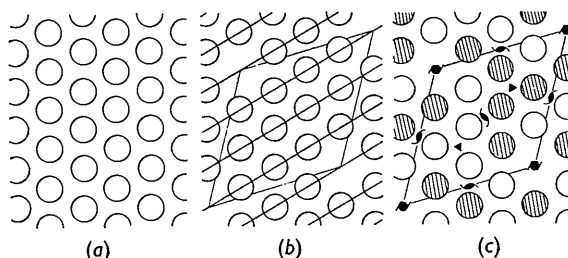


Fig. 1. The way in which the scheme underlying the structure of fluorborite is derived from the hexagonal close-packed layer of oxygen atoms. (a) The hexagonal close-packed layer. (b) The unit cell of fluorborite placed on to the layer so as to make (13^*0) reflexion strong. An oxygen atom is subtracted to give twelve (instead of thirteen) oxygen atoms per cell. The traces of (13^*0) are shown as a system of parallel full lines. (Projection on (00^*1) .) (c) The height of oxygen atoms in the layer readjusted to conform to the requirements of the space group assumed. Open circles represent oxygen atoms at $\frac{1}{4}$ and shaded circles those at $\frac{3}{4}$ of the c length. (Projection on (00^*1) .)

of C_{6h}^2 or C_6^2 as the space group of fluorborite. Atoms placed in such positions will automatically give rise to the reflexion planes, which go through these points and are parallel to (00^*1) . We prefer, therefore, $C_{6h}^2-C6_3/m$ to $C_6^2-C6_3$ as the space group. The possibility of C_6^2 should not be entirely set aside because we are basing our argument on the intensity and not on the absence of reflexions.

In view of the dimensions of the cell, we began the analysis by trying to place in it a hexagonal close-