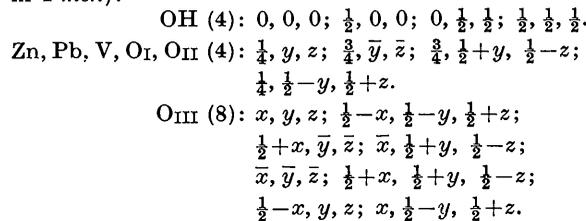


Acta Cryst. (1953). 6, 102

Die Kristallstruktur des Descloizit. Von H. G. BACHMANN, *Mineralogisch-petrographisches Institut der Universität Bonn, Deutschland*

(Eingegangen am 20. Oktober 1952)

Die röntgenographische Untersuchung der Verbindung $\text{Pb}(\text{Zn}, \text{Cu})[(\text{OH})\text{VO}_4]$ wurde (a) an einem Kristall von Lake Valley, New Mexico, U.S.A. (Weissenberggoniometeraufnahmen um a -, b - und c -Achse der 0. Ordnung) und (b) an Pulverpräparaten von Descloizit aus dem Otavibergland, Südwestafrika (Debye-Scherrer- und Zählrohrspektrometer-Diagramme) ausgeführt. Bei der Achsenaufstellung nach Strunz (1939) ($a_0 = 6,05$, $b_0 = 9,39$, $c_0 = 7,65$ Å) ergaben sich alle Auslöschungen der schon von Bannister (1933) vorgeschlagenen Raumgruppe $D_{2h}^{16}-Pmcn$, sowie die der Untergruppe D_2^4 . Um die Berechnung der Intensitäten zu vereinfachen, wurde die chemische Formel der Verbindung 'idealisiert', d. h. Kupfer blieb unberücksichtigt, da es meist nur in geringen Mengen neben Zink vorhanden ist und auch fast denselben Atomstreuquerschnitt wie dieses hat. Die Elementarzelle enthält 4 Formeleinheiten. Die Gitterpartikel sind (unter Berücksichtigung der Achsen in $Pmcn$):



Die unbestimmten Parameter x , y und z wurden angenommen mit:

	x	y	z
Zn	—	0	0,125
Pb	—	0,663	0,118
V	—	0,250	0,250
O _I	—	0,125	0,375
O _{II}	—	0,375	0,375
O _{III}	0,450	0,250	0,125

Zur Begründung dieser Werte sei angeführt, dass Barnes & Qurashi (1952) auf Grund reflexstatistischer Überlegungen für die Bleiatomlagen im Descloizit und dem vermutlich analog gebauten Pyrobelonit $\text{PbMn}[(\text{OH})\text{VO}_4]$ näherungsweise die Parameter $y = \frac{1}{8}$ und $z = \frac{1}{8}$ — umgerechnet auf $Pmcn$ — als wahrscheinlich angenommen. Diese Werte entsprechen den oben angegebenen, wenn man den y -Parameter der genannten Autoren mit einer Zusatzkomponente $\pm \frac{1}{2}$ versieht. Aus der Lage der VO_4 -Gruppen, bei denen Tetraederkonfiguration vorausgesetzt wurde, in jeweils zwei übereinanderliegenden Achtelwürfeln der rhombischen Elementarzelle, ergibt sich der um $+\frac{1}{2}$ grössere y -Parameter des Bleis. Weitere Parameterangaben wurden von Barnes & Qurashi (1952) nicht gemacht. Es bestehen innerhalb des Gitters folgende Abstände:

Pb-OH = 3,60 Å	Zn-O _{II} = 1,96 Å
Pb-Zn = 3,76	V-O _I = 1,51
Zn-OH = 1,88	V-O _{II} = 1,51
Pb-O _I = 5,40	V-O _{III} = 1,54

Die Berechnung der Intensitäten wurde unter Berücksichtigung von Atomfaktoren, Polarisations- und Lorentzfaktoren mit folgendem Strukturfaktor für $Pmcn$ durchgeführt:

$$\begin{aligned} A &= 8 \cos 2\pi\{hx + \frac{1}{4}h\} \\ &\quad \times \cos 2\pi\{ky + \frac{1}{4}(k+l)\} \cdot \cos 2\pi\{lz - \frac{1}{4}(h+k+l)\}, \\ B &= 0. \end{aligned}$$

Die Aufnahme der Weissenberg- und Debye-Scherrer-Diagramme erfolgte mit $\text{Cu } K\alpha$ - und die des Zählrohrspektrometerdiagramms mit $\text{Fe } K\alpha, \beta$ -Strahlung. Zwischen geschätzten bzw. gemessenen und berechneten Intensitäten herrscht befriedigende Übereinstimmung.

Im Descloizit bilden die OH-Ionen in Richtung der a -Achse Reihen. Je zwei OH-Ionen werden von einem Zn-Ion koordiniert, sodass eine planare Anordnung entsteht. Die VO_4 -Tetraeder reihen sich in Richtung der c -Achse aneinander, ohne jedoch miteinander verbunden zu sein, und umschliessen so röhrenähnliche, dem Blei vorbehaltene Gitterräume. Da den 4 Bleiionen des Elementarbereiches der gleiche Raum zur Verfügung steht wie den 4 Vanadatgruppen, wird die Elementarzelle nicht voll ausgefüllt. Die Raumverhältnisse des Gitters gestatten durchaus den zusätzlichen Einbau gittereigenen Wassers, was auch durch fast alle Analysen bestätigt wird. Die Bleiionen sind von Sauerstoff- und Hydroxylionen 10-fach koordiniert. Jedes Bleiion ist umgeben von einem Sechsering aus vier Sauerstoff und zwei Hydroxyl. Je zwei Sauerstoff liegen auf der Ober- und Unterseite dieses Ringes und bilden um das Blei im Zentrum ein rhombisches Bisphenoid. Die 10-er Koordination des Bleis wiederholt sich bei der anders gebauten Verbindung des rhomboedrisch-skalaenoedrischen 3:1-Bleiorthovanadats, $\text{Pb}_3(\text{VO}_4)_2$, dessen strukturelle Bearbeitung und Isotypiebeziehungen an anderer Stelle veröffentlicht werden.

Eine morphologische Bestimmung der Raumgruppe nach der Methode von Donnay lieferte für den Descloizit das Ergebnis $D_{2h}^{16}-Pccn$. Die Morphologie des Pyrobelonits steht dagegen in Übereinstimmung mit der röntgenographisch ermittelten Raumgruppe $D_{2h}^{16}-Pmcn$ (Achsenaufstellung der des Descloizits angepasst).

Die ausführliche Veröffentlichung der Untersuchungen ist für die Monatshefte des *Neuen Jahrbuchs für Mineralogie, Geologie und Paläontologie* vorgesehen.

Grosszügige apparative Unterstützung wurde von der Notgemeinschaft der Deutschen Wissenschaften gewährt. Herrn Prof. Dr W. Kleber möchte ich für sein ständiges Interesse und für seine wertvolle Hilfe herzlich danken.

Schrifttum

- BANNISTER, F. A. (1933). *Miner. Mag.* **23**, 376.
 BARNES, W. H. & QURASHI, M. M. (1952). *Amer. Min.* **37**, 407.
 STRUNZ, H. (1939). *Z. Kristallogr.* **101**, 496.