

Acta Cryst. (1961). 14, 1298

Die Kristallstruktur des wasserhaltigen Bariumsilikats $\text{BaO} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Von E. HÖHNE und K. DORNBERGER-SCHIFF, Deutsche Akademie der Wissenschaften zu Berlin, Institut für Strukturforchung, Berlin-Adlershof, Deutschland

(Eingegangen am 3 März 1961 und wiedereingereicht am 1 Juli 1961)

Die Substanz bildet trübweisse schuppenförmige Kristalle. Röntgenaufnahmen mit Cu-Strahlung wurden von kugelig geschliffenen Einkristallen ($\varnothing \approx 50\mu$) hergestellt, die in eine Polyesteroltschutzschicht eingeschlossen waren. Der Kristall besitzt die nichtzentrosymmetrische Raumgruppe $P2_1cn$ mit den Gitterkonstanten

$$a = 8,43, b = 12,96, c = 15,01 \text{ \AA}.$$

In der Elementarzelle befinden sich 8 Formeleinheiten $\text{BaO} \cdot \text{SiO}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

Tabelle 1. Atomparameter

Atom	x	y	z
Ba ₁	0,250	0,109	0,241
Ba ₂	0,750	0,234	0,248
Si ₁	0,16	0,434	0,065
Si ₂	0,34	0,434	0,456
O ₁	0,34	0,435	0,051
O ₂	0,10	0,398	0,154
O ₃	0,17	0,166	0,482
O ₄	0,65	0,043	0,487
O ₅	0,16	0,430	0,440
O ₆	0,42	0,426	0,364
O ₇	0,34	0,160	0,041
O ₈	0,85	0,044	0,018
O ₉ (L)	0,73	0,436	0,143
O ₁₀ (K)	0,77	0,422	0,354
O ₁₁ (G)	0,42	0,298	0,216
O ₁₂ (H)	0,08	0,298	0,287
O ₁₃ (A)	0,58	0,047	0,207
O ₁₄ (B)	0,92	0,033	0,271
O ₁₅ (C)	0,00	0,180	0,121
O ₁₆ (D)	0,50	0,179	0,369
O ₁₇ (E)	0,67	0,185	0,062
O ₁₈ (F)	0,83	0,193	0,433

Die ungefähren Koordinaten der beiden symmetrieunabhängigen Ba-Atome konnten direkt aus den Pattersonprojektionen $P_0(v, w)$ und $P_0(u, w)$ entnommen werden (Liebsch & Dornberger-Schiff, 1958). Infolge der besonderen Parameterwerte der beiden Ba-Lagen gelang eine Lösung der Struktur allein mithilfe von Projektionen und verallgemeinerten Projektionen nicht. Erst aus der dreidimensionalen Pattersonfunktion $P(u, v, w)$ konnten angenäherte Koordinaten aller übrigen Atome erschlossen werden. Die weitere Verfeinerung erbrachte nur für die von Null verschiedenen $F(0kl)$ einen R -Wert von 0,135 und plausible Atomabstände.

Diskussion der Ergebnisse

Die Substanz ist ein Orthosilikat. Über die Rolle des Wassers in der Struktur kann noch keine Aussage gemacht werden, da es bei dem Stand der Arbeit nicht möglich ist, zwischen O, OH und H_2O zu unterscheiden. Fig. 1 zeigt die Projektion der Struktur auf die bc -Ebene.

Das Koordinationspolyeder P_1 um Ba₁ besteht aus 8 Sauerstoffatomen (bzw. OH oder H_2O). Das Koordinationspolyeder P_2 um Ba₂ wird von 10 Sauerstoffatomen (bzw. OH oder H_2O) gebildet. Die Ba-O Abstände liegen zwischen 2,83 und 3,0 Å. Beide Koordinationspolyeder haben in der x -Richtung nach oben und unten

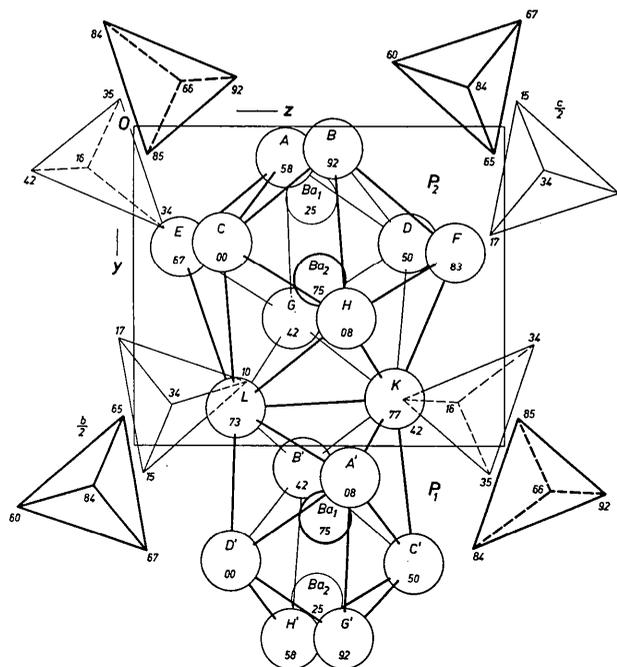


Fig. 1. Projektion der Struktur auf die bc -Ebene. Die grossen Kreise stellen O, OH bzw. H_2O dar. Die beiden symmetrieunabhängigen Bariumatome sind durch Ba₁ und Ba₂ gekennzeichnet. Die entsprechenden Sauerstoffpolyeder um Ba₁ bzw. Ba₂ sind mit P_1 bzw. P_2 markiert. Die SiO_4 -Tetraeder sind nur durch ihre Kanten charakterisiert. Die nicht eingezeichneten Si-Lagen befinden sich etwa in den Schwerpunkten der SiO_4 -Tetraeder. Die in den Kreisen und an den Tetraederecken angegebenen Zahlen sind die x -Koordinaten in Hundertstel der Gitterkonstante. Innerhalb des eingezeichneten Rechtecks $b/2 \times c/2$ befindet sich der asymmetrische Teil der Struktur; die n -Gleitspiegelebene liegt in $z = \frac{1}{2}$, die c -Gleitspiegelebene in $y = \frac{1}{2}$, die 2_1 -Achsen in $(0, 0)$ etc.

jeweils eine Dreieckfläche gemeinsam und zwar abwechselnd $BCH-B'C'H'$ und $ADG-A'D'G'$. In der y -Richtung sind die beiden Polyeder nur durch eine gemeinsame Kante ($L-K$) verbunden. Längs der z -Richtung gibt es keine Verknüpfung.

Bemerkenswert ist die Tatsache, dass die Koordinationspolyeder um die Bariumatome mit den SiO_4 -Tetraedern keine Ecken gemeinsam haben, während letztere selbst völlig isoliert sind. Die Si-O Abstände liegen bei etwa 1,6 Å. Über den Bindungsmechanismus, der die SiO_4 -Tetraeder miteinander und diese an die Ba-O Koordinationspolyeder knüpft, kann zur Zeit keine Aussage gemacht werden. An der dreidimensionalen Verfeinerung wird weitergearbeitet.

Literatur

LIEBSCH, H. & DORNBERGER-SCHIFF, K. (1958). *Acta Cryst.* 11, 371.