

Fig. 4. Schematic representation of Bi-S bonds within a single sheet parallel to (010). Each sheet is linked to its neighbours through the Pb atoms and by bonds between Bi_{III} and S_{IV} (not shown).

computer. The present investigation has been supported by a grant from the Swiss National Science Foundation.

References

- BERRY, L. G. (1940). *Amer. Min.* **25**, 726.
 BOND, W. L. (1951). *Rev. Sci. Instrum.* **22**, 344.
 BUERGER, M. J. & HAHN, T. (1955). *Amer. Min.* **40**, 226.
 FORSYTH, J. B. & WELLS, M. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 412.
 HOFFMANN, W. (1933). *Z. Kristallogr.* **86**, 225.

- JAMES, R. W. & BRINDLEY, G. W. (1931). *Phil. Mag.* (7), **12**, 81.
 LEINWEBER, G. (1956). *Z. Kristallogr.* **108**, 161.
 NIZEKI, N. & BUERGER, M. J. (1957). *Z. Kristallogr.* **109**, 161.
 NOWACKI, W., IITAKA, Y., BÜRKI, H. & KUNZ, V. (1961). *Schweiz. miner. petrogr. Mitt.* **41**, 103.
 VIERVOLL, H. & ØGRIM, O. (1949). *Acta Cryst.* **2**, 211.
 WEITZ, G. & HELLNER, E. (1960). *Z. Kristallogr.* **113**, 385.
 WICKMAN, F. E. (1951). *Ark. Min.* **1**, No. 9, 219.

Acta Cryst. (1962). **15**, 698

Die Kristallstruktur von Teineit. Ein Beispiel für die Korrektur einer chemischen Formel auf Grund der Strukturbestimmung

VON ANNA ZEMANN UND J. ZEMANN

Mineralogisch-Kristallographisches Institut der Universität, Göttingen, Lotzestr. 16-18, Deutschland

(Eingegangen am 10. August 1961)

The only existing chemical analysis of the rare secondary copper mineral teineite led to the composition $10 \text{CuTeO}_4 \cdot 3 \text{CuSO}_4 \cdot 26 \text{H}_2\text{O}$. Determination of the crystal structure and comparison with $\text{CuSeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ showed, that the chemical composition should be $\text{CuTeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$, at least to a very good approximation. The atomic parameters have been refined in two projections. The shape of the TeO_3 group is within the limits of accuracy a trigonal pyramid with an angle $\text{O}-\text{Te}-\text{O} \sim 100^\circ$ and distances $\text{Te}-\text{O} = 1.88 \pm 0.05 \text{ \AA}$. Copper has a (4 + 1) coordination.

Vor kurzem konnten wir (Zemann & Zemann, 1960) zeigen, dass das seltene Mineral Teineit, welchem bisher die Formel $10 \text{CuTeO}_4 \cdot 3 \text{CuSO}_4 \cdot 26 \text{H}_2\text{O}$ (Yosi-

mura, 1939) oder vielleicht auch $\text{Cu}(\text{Te,S})\text{O}_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ (*Dana's System of Mineralogy*, Vol. 2, 1951) zugeschrieben wurde, nach Gitterkonstanten und Raum-

gruppe so enge Beziehungen zu Chalkomenit, $\text{CuSeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ besitzt, dass man mit grosser Wahrscheinlichkeit schliessen konnte, dass es in Wirklichkeit das zu Chalkomenit isotype $\text{CuTeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ ist. Die vorliegende Arbeit soll dafür den Beweis durch die vollständige Strukturbestimmung bringen. Dieser Weg der Korrektur der chemischen Formel musste beschränkt werden, da uns nur Bruchteile eines Milligramms Teineit zur Verfügung standen. Es handelt sich um einen Teil des Originalmaterials, so dass an der Identität unseres Untersuchungsmaterials mit dem Original-Teineit keinerlei Zweifel herrschen kann. Die einzige sonstige Möglichkeit zur Überprüfung der chemischen Zusammensetzung lag in der qualitativen Untersuchung im Röntgenfluoreszenzspektroskop. Dabei ergab sich, dass von den Elementen mit der Ordnungszahl 25 bis 53 nur Cu und Te als Hauptbestandteile vorhanden sind — insbesondere ist Selen höchstens in wenigen Gewichtsprozenten vorhanden.

Gang der Strukturbestimmung

Nach Weissenberg- und Precessionaufnahmen kristallisiert Teineit ebenso wie $\text{CuSeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ (Gattow, 1958) in Raumgruppe $P2_12_12_1$; die Gitterkonstanten sind

$$a = 6,63_0, \quad b = 9,61_5, \quad c = 7,43_3 \text{ \AA}.$$

Die experimentelle Dichte ($d_{\text{exp.}} = 3,80 \text{ g.cm}^{-3}$, Yoshimura, 1939) steht mit der röntgenographischen Dichte in befriedigender Übereinstimmung, wenn man annimmt, dass die Elementarzelle vier Formeleinheiten $\text{CuTeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ enthält; dann gilt $d_{\text{röntg.}} = 3,85 \text{ g.cm}^{-3}$. Mit den oben angegebenen Gitterkonstanten folgen wir der Aufstellung von Gattow (1958) für Chalkomenit, um einen einfachen Vergleich der beiden Arbeiten zu ermöglichen.

Zur Strukturbestimmung wurden Serien von integrierten Weissenberg-Aufnahmen (Äquator um [001], Mo-Strlg., Zr-Folie) und integrierten Precession-Aufnahmen (Äquator um [100], Ag-Strlg., Pd-Folie) photometriert. Es wurde ein Kristallsplitter, dessen grösste Dimension wenige Zehntel Millimeter misst verwendet; dadurch konnte bei der verwendeten kurzwelligen Strahlung die Absorption ohne allzu grosse Fehler vernachlässigt werden. Der Bereich der erfassten Reflexe geht in der Zone [001] bis $\sin \theta/\lambda = 0,99$, in der Zone [100] bis $\sin \theta/\lambda = 0,88 \text{ \AA}^{-1}$.

Die Patterson-Projektionen ergaben sofort recht genau die Lagen der Te-Atome und auch sehr gute Anhaltspunkte für die Lage der Cu-Atome. Zur Sicherheit wurde jedoch zunächst nur von den Te-Lagen ausgegangen und eine Elektronendichte-Projektion mit jenen Reflexen gerechnet, deren Vorzeichen allein durch die Te-Lagen weitgehend gesichert sind. Damit ergaben sich eindeutig die Cu-Lagen (ein Cu pro Te). Weitere Elektronendichte-Projektionen ergaben, dass die Struktur fünf Sauerstoffe pro Telluratome enthält. Die Atomanordnung

wurde durch mehrere ($F_o - F_c$)-Synthesen verfeinert. Die schliesslich erhaltenen R -Werte sind: $R_{hk0} = 0,10_3$, $R_{0kl} = 0,08_4$ (unter Vernachlässigung der nicht beobachteten Reflexe); $R'_{hk0} = 0,13_0$, $R'_{0kl} = 0,14_9$ (mit allen Reflexen).

Tabelle 1. Parameter

	x	y	z
Cu	0,530 ₅	0,156 ₀	0,201 ₀
Te	0,710 ₀	0,388 ₆	0,476 ₃
O(1)	0,254	0,214	0,736
O(2)	0,962	0,375	0,570
O(3)	0,283	0,065	0,133
O(4)(H ₂ O)	0,072	0,286	0,051
O(5)(H ₂ O)	0,289	0,446	0,324

Tabelle 1 bringt die Positionsparameter der Atome; in der Numerierung der Sauerstoffe folgen wir dabei der Arbeit von Gattow (1958) über die Struktur von $\text{CuSeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$. Die Tabellen 2 und 3 geben den Vergleich zwischen beobachteten und berechneten Strukturamplituden. Die B -Werte der 'Temperaturfaktoren' wurden im Laufe der Verfeinerungen für beide Zonen unabhängig voneinander ermittelt. Die F_c der Tabelle 2 wurden mit folgenden Werten gerechnet: $B_{\text{Te}} = 0,9$, $B_{\text{Cu}} = 0,8$, $B_{\text{O}} = 1,4$, $B_{\text{H}_2\text{O}} = 1,4$; die F_c der Tabelle 3 mit folgenden Werten: $B_{\text{Te}} = 1,8$, $B_{\text{Cu}} = 1,4$, $B_{\text{O}} = 1,2$, $B_{\text{H}_2\text{O}} = 1,7$. Wir messen den 'Temperaturfaktoren' in unserem Falle nur den Wert von Korrekturfunktionen bei. In der Tat ist für die $hk0$ -Reflexe, welche mit Mo-Strahlung auf der Weissenbergkamera gesammelt wurden, B_{Te} nur halb so gross wie bei den $0kl$ -Reflexen, zu deren Ermittlung Ag-Strahlung und die Precessionkamera benützt wurden.

Fig. 1 gibt die endgültigen Elektronendichte-Projektionen wieder. Man ersieht daraus, dass die Güte der Intensitäten und der Grad der Verfeinerung ausreichen, um die Lokalisation von Sauerstoffatomen neben Tellur eindeutig zu gestatten. Ein Auslassen aller fünf Sauerstoffe bei der Berechnung der Strukturamplituden erhöht R_{hk0} auf 0,15₆ und R_{0kl} auf 0,16₆. Der 'mittlere Fehler' für die Lokalisation der gut aufgelösten Atome beträgt 0,003 \AA für Te, 0,007 \AA für Cu und 0,04 \AA für O. Bei den Sauerstoffatomen, die in Projektionen nahe schweren Atomen zu liegen kommen, kann der Fehler in der Lokalisation sicher 0,1 \AA überschreiten — er sollte jedoch nicht 0,2 \AA erreichen.

Diskussion

Auf eine zeichnerische Wiedergabe der Struktur kann verzichtet werden, da die Atomanordnung im Prinzip völlig analog wie in Chalkomenit, $\text{CuSeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ ist; man benütze zur Orientierung Fig. 2 der Arbeit von Gattow (1958). Die wesentlichen Bauelemente sind pyramidale TeO_3^2- -Gruppen mit einem mittleren O-Te-O-Winkel von 99° . Die Te-O-Abstände sind nicht mit Sicherheit verschieden, am besten belegt ist der Abstand Te-O(1), da O(1) in beiden Projektionen gut aufgelöst ist; er misst $1,88 \pm 0,05 \text{ \AA}$. Ein weiteres wichtiges Bauelement sind $\text{CuO}_3(\text{H}_2\text{O})-$

Tabelle 2. Vergleich zwischen F_o und F_c der $hk0$ -Reflexe

h, k	$ F_o $	F_c	h, k	$ F_o $	F_c	h, k	$ F_o $	F_c	h, k	$ F_o $	F_c
2, 0	75	91	5, 4	52	53	4, 8	36	36	8, 12	(13)	12
4, 0	129	162	6, 4	12	16	5, 8	72	-75	9, 12	19	26
6, 0	(8)	3	7, 4	25	26	6, 8	(10)	-1	10, 12	(13)	17
8, 0	27	-36	8, 4	31	30	7, 8	32	-31	1, 13	66	-65
10, 0	38	-38	9, 4	(11)	11	8, 8	16	-20	2, 13	(11)	13
12, 0	56	-56	10, 4	42	37	9, 8	17	-24	3, 13	16	-25
1, 1	110	136	11, 4	(13)	11	10, 8	18	-26	4, 13	28	19
2, 1	89	86	12, 4	49	49	11, 8	(13)	-18	5, 13	40	-35
3, 1	95	110	1, 5	140	-131	1, 9	114	115	6, 13	28	24
4, 1	17	20	2, 5	62	-52	2, 9	(8)	7	7, 13	38	28
5, 1	(7)	10	3, 5	67	-57	3, 9	60	59	8, 13	(13)	10
6, 1	86	102	4, 5	(7)	-19	4, 9	13	-7	9, 13	(13)	9
7, 1	(9)	8	5, 5	46	-44	5, 9	53	51	0, 14	42	-38
8, 1	14	21	6, 5	77	-76	6, 9	(10)	14	1, 14	31	-25
9, 1	40	-44	7, 5	29	28	7, 9	34	-33	2, 14	55	-54
10, 1	39	35	8, 5	(11)	-2	8, 9	(11)	-10	3, 14	(11)	0
11, 1	28	-27	9, 5	32	36	9, 9	(12)	-12	4, 14	17	-18
12, 1	(13)	-5	10, 5	37	-33	10, 9	(13)	10	5, 14	36	-28
13, 1	33	-32	11, 5	45	44	11, 9	47	-48	6, 14	(13)	-1
0, 2	23	-18	12, 5	(13)	8	0, 10	36	31	7, 14	(13)	-13
1, 2	98	-85	0, 6	35	-22	1, 10	26	21	8, 14	(13)	16
2, 2	86	79	1, 6	(6)	1	2, 10	92	88	1, 15	17	-21
3, 2	156	178	2, 6	133	-126	3, 10	37	34	2, 15	(12)	-12
4, 2	(6)	-4	3, 6	93	-95	4, 10	(10)	7	3, 15	17	-23
5, 2	61	81	4, 6	(8)	-3	5, 10	54	55	4, 15	50	-49
6, 2	(8)	-2	5, 6	56	-65	6, 10	(11)	17	5, 15	(13)	3
7, 2	86	94	6, 6	27	-21	7, 10	40	36	6, 15	18	-22
8, 2	(10)	-8	7, 6	67	-72	8, 10	17	-17	7, 15	(13)	-5
9, 2	53	57	8, 6	15	16	9, 10	36	27	8, 15	36	-39
10, 2	17	-16	9, 6	41	-40	10, 10	19	-28	0, 16	(12)	-7
11, 2	(12)	7	10, 6	28	28	11, 10	(13)	12	1, 16	(12)	-14
12, 2	(13)	-8	11, 6	(13)	-9	1, 11	13	14	2, 16	28	26
13, 2	(13)	6	12, 6	(13)	11	2, 11	35	31	3, 16	35	-32
1, 3	92	-78	1, 7	(7)	6	3, 11	(10)	4	4, 16	(13)	-5
2, 3	48	35	2, 7	51	-46	4, 11	85	86	5, 16	32	-41
3, 3	106	-107	3, 7	24	17	5, 11	(11)	6	6, 16	(13)	4
4, 3	75	83	4, 7	108	-116	6, 11	43	43	7, 16	36	-37
5, 3	26	20	5, 7	33	-22	7, 11	(12)	-6	1, 17	39	36
6, 3	69	78	6, 7	62	-65	8, 11	70	69	2, 17	18	-20
7, 3	32	-28	7, 7	14	15	9, 11	(13)	-5	3, 17	19	16
8, 3	44	47	8, 7	74	-77	10, 11	(13)	10	4, 17	(13)	-11
9, 3	44	42	9, 7	32	-29	0, 12	31	-31	5, 17	19	17
10, 3	28	29	10, 7	17	-19	1, 12	47	40	6, 17	37	-34
11, 3	(12)	9	11, 7	(13)	3	2, 12	56	-52	0, 18	50	50
12, 3	(13)	0	12, 7	(13)	-11	3, 12	31	23	1, 18	(13)	13
0, 4	205	-201	0, 8	79	79	4, 12	(11)	-10	2, 18	36	32
1, 4	96	87	1, 8	72	-63	5, 12	59	60	3, 18	(13)	-10
2, 4	51	-44	2, 8	56	54	6, 12	17	-13	4, 18	30	25
3, 4	12	-14	3, 8	(8)	-5	7, 12	45	41	1, 19	19	23
4, 4	89	-96									

Quadrate. Diese sind über die Sauerstoffe mit den Telluritpyramiden verknüpft, wodurch ein Gerüst ${}^3\text{Cu}^{[3\text{O}+\text{H}_2\text{O}]\text{Te}^{[3]}\text{O}_8 \cdot \text{H}_2\text{O}$ entsteht. Das zweite Wasser O(5) ergänzt die planare Cu-Koordination zu

einer (4+1)-Koordination, wie man sie nun schon aus einer Reihe von Cu(II)-Salzen kennt (vgl. Zemann, 1961). Zwischen verschiedenen Cu-Koordinationspolyedern liegen z.T. verhältnismässig kurze O-H₂O

Tabelle 3. Vergleich zwischen F_o und F_c der Okl-Reflexe

k,l	F _o	F _c	k,l	F _o	F _c	k,l	F _o	F _c	k,l	F _o	F _c
2, 0	18	19	4, 3	19	-21	15, 5	20	-26	13, 8	32	-29
4, 0	189	-194	5, 3	88	98	0, 6	58	70	1, 9	(13)	-3
6, 0	19	21	6, 3	55	52	1, 6	72	79	2, 9	77	-77
8, 0	52	66	7, 3	66	-72	2, 6	26	-23	3, 9	(12)	-3
10, 0	31	-21	8, 3	(12)	4	3, 6	77	79	4, 9	(12)	-8
12, 0	20	-24	9, 3	(13)	-18	4, 6	61	-60	5, 9	(11)	-5
14, 0	(13)	19	10, 3	(13)	-8	5, 6	51	-51	6, 9	48	49
16, 0	(11)	-5	11, 3	24	26	6, 6	(13)	17	7, 9	(13)	-13
1, 1	88	-81	12, 3	(12)	12	7, 6	41	-41	8, 9	(11)	-10
2, 1	55	58	13, 3	15	-17	8, 6	(13)	22	9, 9	(12)	6
3, 1	152	155	14, 3	(12)	-8	9, 6	25	22	10, 9	(11)	-21
4, 1	42	46	15, 3	(12)	-15	10, 6	(12)	-10	11, 9	(11)	14
5, 1	38	43	16, 3	(10)	-11	11, 6	(8)	-3	12, 9	25	14
6, 1	26	-36	0, 4	128	131	12, 6	(12)	-3	0, 10	(11)	16
7, 1	112	-123	1, 4	(10)	-16	13, 6	(12)	-10	1, 10	38	39
8, 1	59	-64	2, 4	22	21	14, 6	(11)	16	2, 10	(10)	3
9, 1	(12)	-5	3, 4	38	-41	15, 6	(7)	17	3, 10	30	28
10, 1	23	-26	4, 4	96	-94	1, 7	50	-49	4, 10	(8)	-19
11, 1	67	73	5, 4	71	-70	2, 7	51	-56	5, 10	38	-37
12, 1	25	22	6, 4	20	20	3, 7	28	31	6, 10	(12)	-16
13, 1	(10)	-14	7, 4	(12)	15	4, 7	46	45	7, 10	(12)	-6
14, 1	(12)	17	8, 4	55	57	5, 7	43	40	8, 10	(12)	3
15, 1	24	-36	9, 4	59	61	6, 7	38	37	9, 10	37	31
16, 1	(11)	-4	10, 4	37	-37	7, 7	(13)	-14	10, 10	(10)	11
0, 2	83	78	11, 4	(12)	-19	8, 7	42	-41	1, 11	(13)	3
1, 2	106	96	12, 4	19	-18	9, 7	22	-10	2, 11	(12)	-21
2, 2	51	-47	13, 4	36	-35	10, 7	25	-25	3, 11	(12)	3
3, 2	44	39	14, 4	(12)	22	11, 7	(11)	5	4, 11	30	22
4, 2	98	-94	15, 4	(11)	5	12, 7	(12)	27	5, 11	(12)	-8
5, 2	36	-33	16, 4	(8)	-5	13, 7	(11)	-10	6, 11	30	27
6, 2	92	97	1, 5	(11)	-9	14, 7	16	15	7, 11	(11)	2
7, 2	(12)	-15	2, 5	77	-77	0, 8	(13)	-5	8, 11	29	-26
8, 2	66	81	3, 5	60	62	1, 8	46	43	9, 11	(7)	2
9, 2	(12)	-12	4, 5	(12)	13	2, 8	(13)	-14	0, 12	29	-17
10, 2	67	-79	5, 5	42	-38	3, 8	(13)	7	1, 12	(12)	27
11, 2	(13)	1	6, 5	36	32	4, 8	(13)	-1	2, 12	(11)	-3
12, 2	38	-40	7, 5	69	-72	5, 8	62	-62	3, 12	(11)	21
13, 2	(10)	3	8, 5	48	-44	6, 8	30	30	4, 12	30	12
14, 2	53	40	9, 5	21	21	7, 8	(12)	1	5, 12	26	-24
15, 2	(12)	7	10, 5	22	-24	8, 8	(10)	8	6, 12	(8)	5
16, 2	(11)	17	11, 5	55	52	9, 8	38	42	1, 13	(8)	-6
1, 3	135	-131	12, 5	15	20	10, 8	(12)	-23	2, 13	41	-31
2, 3	84	-77	13, 5	(12)	-2	11, 8	(12)	-6			
3, 3	130	132	14, 5	(11)	5	12, 8	(11)	-9			

— bzw. H_2O-H_2O — Abstände, welche wohl als Wasserstoffbrücken zu deuten sind. Tabelle 4 bringt eine Zusammenfassung der wichtigsten interatomaren Abstände.

Die Frage nach der prinzipiellen Zulässigkeit der hier aus der Strukturbestimmung vorgenommenen Formeländerung für Teineit bedarf noch einer Erläuterung. Im Zusammenhang mit dem röntgenspektrographischen Befund, dass von den Elementen

der Ordnungszahlen 25 bis 53 nur Cu und Te Hauptkomponenten sind, und den Fouriersynthesen um beide Zonen folgt zwingend, dass die Atome der fünf Maxima, die von uns als Sauerstoffe gedeutet wurden eine Ordnungszahl um 8 haben müssen — dass es sich wirklich um O und H_2O (und nicht z.B. teilweise um Fluor) handelt, folgt aus der Analogie zu $CuSeO_3 \cdot 2 H_2O$. Die pyramidale Sauerstoffkoordination um Tellur belegt mit Sicherheit, dass es sich

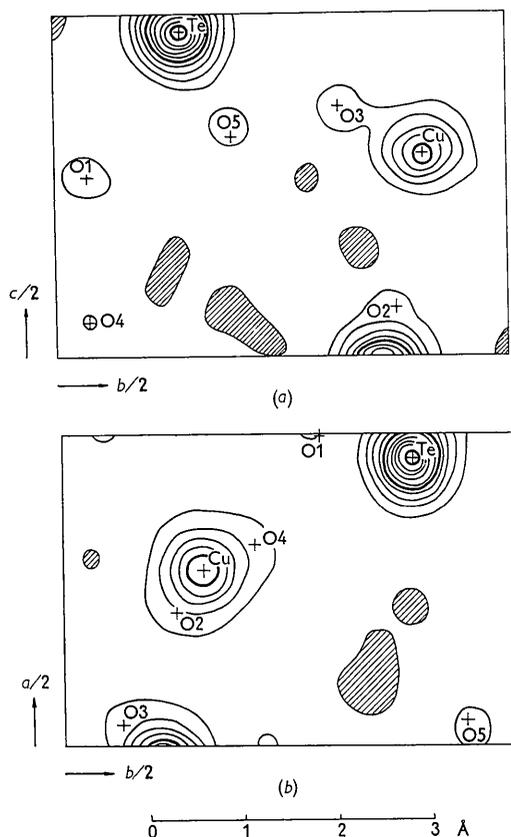


Fig. 1. Absolute Fourierprojektion (a) parallel [100] und (b) parallel [001]. Die Höhenschichtlinien sind dünn von 10 zu 10 e.Å⁻² und stark von 50 zu 50 e.Å⁻² gezeichnet. Gebiete scheinbar negativer Elektronendichte sind schraffiert. F_{000} ist theoretisch eingeführt. Der Konvergenzfaktor für die F_o in der Projektion parallel [100] beträgt $\exp -2,0(\sin \theta/\lambda)^2$, in der Projektion parallel [001] jedoch $\exp -3,0(\sin \theta/\lambda)^2$, um die Unterschiede in den scheinbaren 'Temperaturfaktoren' auszugleichen und Abbruchsringe zu vermeiden. Die Kreuze geben die Atomlagen nach der Verfeinerung durch $(F_o - F_c)$ -Synthesen an. Man beachte, dass in bezug auf die gesamte Zelle der Ursprung von (a) in $\frac{1}{2}0$, der von (b) in $\frac{1}{2}0$ liegt.

um eine Te(IV)-Verbindung handelt, da für sechswertiges Tellur eine oktaedrische Sechskoordination zu erwarten ist. — Zu diskutieren bleibt noch, dass nach der einzigen existierenden Analyse von Teineit (Yosimura, 1939) molekular drei Dreizehntel der Telluratome durch Schwefel ersetzt sein sollen. Wir haben folglich auch Intensitäten gerechnet, welche einer solchen Mischung von Te und S entsprechen. Trotz optimaler Änderung der 'Temperaturfaktoren' blieb dabei der R -Wert immer um etwa 5% höher als bei der Benützung der reinen Te-Streukurven. Die $(F_o - F_c)$ -Synthesen zeigten zugleich deutlich, dass an die Stellen des Tellurs ein 'Atom' mit einer zu geringen Elektronenzahl gelegt wurde. Mit dem von uns benützten Bereich des reziproken Gitters werden in den Elektronendichte-Projektionen die Maxima von Cu, Te und S etwa doppelt so hoch wie die Ordnungszahl des entsprechenden Atoms. Da die Ordnungszahl von

Tabelle 4. Wichtige interatomare Abstände (Å)

TeO ₃ -Gruppe	
Te-O(1)	1,88
Te-O(2)	1,81
Te-O(3)	1,88
O(1)-O(2)	2,79
O(2)-O(3)	2,87
O(3)-O(1)	2,80
Koordination um Cu	
Cu-O(1)	1,99
Cu-O(2)	1,79
Cu-O(3)	1,93
Cu-O(4)(H ₂ O)	1,97
Cu-O(5)(H ₂ O)	2,35
Cu-O(5)(H ₂ O)	3,34
O(1)-O(2)	2,77
O(2)-O(3)	2,57
O(3)-O(4)(H ₂ O)	2,76
O(4)(H ₂ O)-O(1)	2,64

Kurze Abstände zwischen verschiedenen Cu-Koordinationspolyedern (vermutlich H-Brücken)

O(4)(H ₂ O)-O(1)	2,64
O(4)(H ₂ O)-O(3)	2,62
O(5)(H ₂ O)-O(2)	2,92
O(5)(H ₂ O)-O(4)(H ₂ O)	2,92

Tellur gleich 52 und die eines 'Atoms' aus einer Mischung Te:S=10:3 gleich 44 ist, so müsste der Unterschied der Elektronendichte-Maxima etwa 16 e.Å⁻² sein. In unseren letzten $(F_o - F_c)$ -Projektionen unter Verwendung der Formel $\text{CuTeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ beträgt die Abweichung vom Nullwert in beiden Zonen im Mittel nur ungefähr 1,5 e.Å⁻². Natürlich ist noch zu berücksichtigen, dass bei der Angleichung der F_o an die F_c der Elektronenzahl des schwersten Atoms nachgegeben wird. Wenn man jedoch selbst annimmt, dass dadurch der Unterschied in den Elektronendichtemaxima von Te und einem 'Atom' mit Te:S=10:3 auf 8 e.Å⁻² sinkt — was schon ungünstig geschätzt ist —, so ist diese Differenz noch immer mehr als fünfmal so gross wie der mittlere Fehler aus unseren letzten $(F_o - F_c)$ -Synthesen. Man muss daraus schliessen, dass die Formel des Teineits im wesentlichen $\text{CuTeO}_3 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ ist.

Herrn Prof. Dr. Cl. Frondel, Harvard-University, U.S.A., danken wir herzlichst für die Überlassung des Untersuchungsmaterials. Der Deutschen Forschungsgemeinschaft schulden wir vielen Dank für die Unterstützung dieser Strukturbestimmung.

Literatur

- DANA's *System of Mineralogy* (1951), 7th ed., Vol. 2. New York, London: Wiley.
 GATTOW, G. (1958). *Acta Cryst.* **11**, 377.
 YOSIMURA, T. (1939). *J. Fac. Sci. Hokkaido Univ.* IV, **4**, 465.
 ZEMANN, A. & ZEMANN, J. (1960). *Beitr. Min. Petr.* **7**, 436.
 ZEMANN, J. (1961). *Fortschr. Min.* **39**, 59.