

Acta Cryst. (1965). **19**, 485

Zur Kristallstruktur des Laueits, $\text{Fe}_2\text{Mn}[\text{PO}_4/\text{OH}]_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. Von K. PLIETH, G. RUBAN und H.-G. SMOLCZYK*,
Technische Universität, Lehrstuhl für Spezielle Physikalische Chemie und Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin, Deutschland

(Eingegangen am 12. Februar 1965)

Das reziproke Gitter wird mittels Drehkristall- und Weissenberg-Aufnahmen um die Richtungen [100] und [001] erhalten. Die von H. Strunz (1954) aufgefundene triklinische Zelle mit den Gitterkonstanten $a = 5,28$, $b = 10,66$, $c = 7,14$ Å, $\alpha = 107,92^\circ$, $\beta = 110,98^\circ$, $\gamma = 71,12^\circ$ wird bestätigt. Die Elementarzelle enthält eine Formeleinheit. Die wahrscheinliche Raumgruppe ist $P\bar{1}$.

Zur Berechnung von Patterson- und Fouriersynthesen wurden die Intensitäten aus integrierten Weissenberg-Äquator-Aufnahmen photometrisch bestimmt und mit den entsprechenden Korrekturfaktoren versehen. Die für die Aufnahmen in Richtung [100] verwendeten Kristalle wurden nach dem Verfahren von Bond (1951) geschliffen. Sie lieferten angenäherte Ellipsoide, deren Absorption nach Weber (1963) durch Interpolation der tabellierten Werte (*International Tables for X-ray Crystallography*, 1962) berechnet wurde.

Tabelle 1. Tabelle der Atomparameter

Atom	Punktlage	x	y	z
Fe(1)	1(a)	0	0	0
Fe(2)	1(b)	0	0	0,500
Mn	1(g)	0	0,500	0,500
P	2(i)	0,342	0,169	0,422
O(1)	2(i)	0,276	0,318	0,440
O(2)	2(i)	0,644	0,135	0,535
O(3)	2(i)	0,285	0,085	0,227
O(4)	2(i)	0,183	0,166	0,557
O(5)	2(i)	0,762	0,188	0,950
O(6)	2(i)	0,755	0,490	0,179
O(7)	2(i)	0,793	0,386	0,490
O(8)	2(i)	0,272	0,297	0,997
O(9)	2(i)	0,195	0,002	0,819

* z. Zt. Rheinhausen, Hüttenwerke.

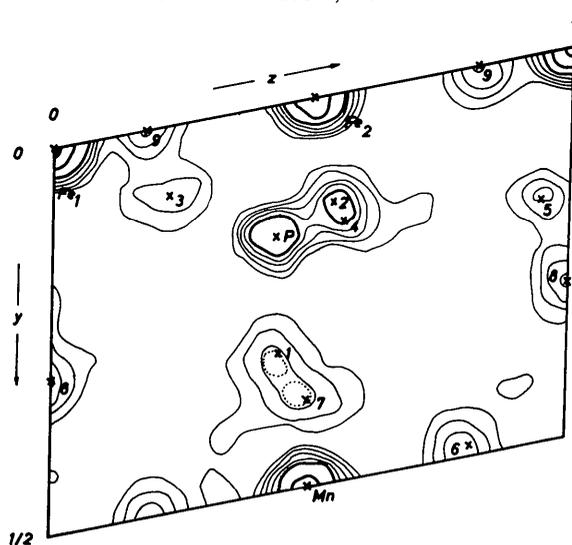


Fig. 1. Elektronendichte-Projektion auf (100).

Aus den Patterson-Projektionen $P(u, v)$ und $P(v, w)$ konnten die Lagen der Metallatome einwandfrei entnommen werden. Die ersten Elektronendichteprojektionen, die mit Hilfe der Vorzeichensätze aufgrund der Koordinaten der Metallatome berechnet wurden, lieferten dazu die Lagen der Phosphor- und einiger Sauerstoffatome. Durch sukzessive Verfeinerungszyklen konnten schliesslich sämtliche Sauerstoffatome lokalisiert werden.

Die Fourier-Diagramme sind in Fig. 1 und 2 wiedergegeben. Hiernach ist das Phosphoratom tetraedisch von vier Sauerstoffatomen [O(1) bis O(4)] umgeben. Mit Ausnahme der Sauerstoffatome O(2), O(4) in der einen Projektion und O(1), O(8) in der anderen Projektion erscheinen sämtliche Atome aufgelöst. In der nachstehenden Tabelle sind die Atomparameter zusammengefasst. Die erreichten Zuverlässigkeitsindizes sind: $R(hk0) = 0,16$ bzw. $R(0kl) = 0,24$ bei 78 bzw. 137 beobachteten Reflexen.

Herrn Prof. Dr H. Strunz danken wir für die freundliche Überlassung der Kristalle.

Literatur

- BOND, W. L. (1951). *Rev. Sci. Instrum.* **22**, 344.
International Tables for X-Ray Crystallography (1962). Vol. III. Birmingham: Kynoch Press.
 STRUNZ, H. (1954). *Naturwissenschaften*, **11**, 256.
 WEBER, K. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 535.

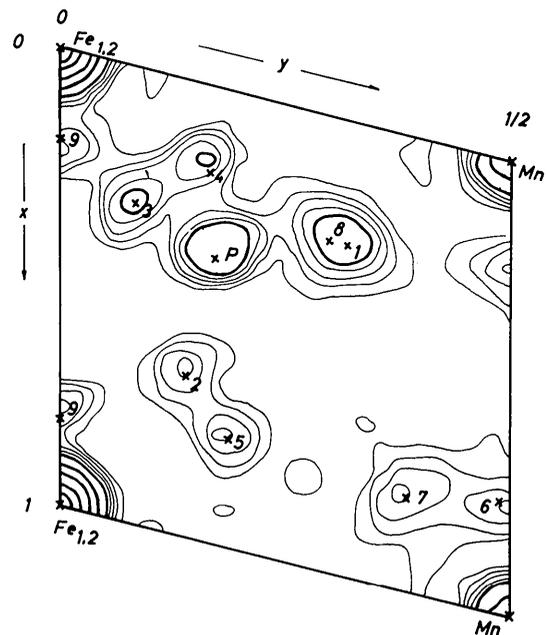


Fig. 2. Elektronendichte-Projektion auf (001).