

## Nachtrag zur Arbeit Die Kristallstruktur von Zinkhydroxychlorid II, $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot 1\text{H}_2\text{O}^*$

Von WERNER NOWACKI und JEREMIAH N. SILVERMAN\*\*

(Eingegangen am 14. Februar 1962)

Kürzlich publizierten W. NOWACKI und J. N. SILVERMAN<sup>1</sup> die Ergebnisse einer vollständigen röntgenographischen Kristallstrukturbestimmung von Zinkhydroxychlorid II,  $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot 1\text{H}_2\text{O}$  (im folgenden mit  $B_{II}$  abgekürzt). Da in der letzten Zeit genauere Daten zugänglich geworden sind, wurden einige der ursprünglichen Berechnungen revidiert; sie werden in dieser Notiz veröffentlicht.

Die Berechnungen (in den Tabellen 5 und 6, Abschnitt 6, der Originalarbeit<sup>1</sup> enthalten) waren mittels Gitterkonstanten der in Frage stehenden

Tabelle 1. Vergleich der Anionenpackungsdichte einiger Hydroxyde des C6-Typs mit derjenigen von  $B_{II}$

$\text{Mg}(\text{OH})_2$	0,565	}	Mittel	0,549
$\text{Mn}(\text{OH})_2$	0,510			
$\text{Co}(\text{OH})_2$	0,568			
$\text{Fe}(\text{OH})_2$	0,543			
$[\text{Zn}(\text{OH})_2]$	0,561]	}	$B_{II}$	0,534

Tabelle 2. Beobachtete und berechnete  $c_H$ -Werte für einige C6-Hydroxyde (in Å)

Hydroxyd	$R_{Me^{++}}$ (okt.)	$a_H$ (beob.)	$d_{\text{OHMeOH}}$ (okt.)	$d_{\text{OHOH}}$	$c_H$ (ber.)	$c_H$ (beob.)
$\text{Mn}(\text{OH})_2$	0,80	3,31 <sub>6</sub>	2,44	2,23	4,67	4,73 <sub>2</sub>
$\text{Fe}(\text{OH})_2$	0,75	3,26 <sub>2</sub>	2,35	2,26	4,61	4,59 <sub>6</sub>
$\text{Cd}(\text{OH})_2$	0,97	3,49 <sub>9</sub>	2,74	2,14	4,88	4,70 <sub>1</sub>

\* Mitt. Nr. 91a, Abteilung für Kristallographie und Strukturlehre, Mineralogisches Institut, Universität Bern.

\*\* Jetzige Adresse: National Bureau of Standards, U. S. Department of Commerce, Washington 25, D. C., U. S. A.

<sup>1</sup> W. NOWACKI und J. N. SILVERMAN, Die Kristallstruktur von Zinkhydroxychlorid II,  $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot 1\text{H}_2\text{O}$ . Z. Kristallogr. **115** (1961) 21–51.

Tabelle 3. Vergleich der experimentell bestimmten Parameter von  $B_{11}$ , Raumgruppe  $D_{3d}^5 - R\bar{3}m$ , Zelle  $H_R$

Atom	Lage	Experimentelle Parameter				Endgültige Werte mit Abschätzung des maximalen Fehlers
		Pattersonprojektion // $a_P$ mit Absorptions-Korrektur	Erste Fourierprojektion // $a_P$ mit Absorptions-Korrektur	Zweite Fourierprojektion // $a_P$ mit Absorptionskorrektur	Zweite Fourierprojektion // $a_P$ ohne Absorptionskorrektur	
ZnI	9e	$y = 0,00; 0,50$ $z = 0,00$	$y = 0,00$ $z = 0,00$	$y = 0,00$ $z = 0,00$	$y = 0,00$ $z = 0,00$	$\frac{1}{2} 0 0, 0 \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$
ZnII	6c	$y = 0,00$ $z = 0,072$	$y = -0,0006$ $z = 0,0721$	$y = 0,0005$ $z = 0,0720$	$y = 0,0010$ $z = 0,0721$	$\pm (00z) \quad z = 0,0721 \pm 0,0004$
Cl	6c	$y = 0,00$ $z = 0,172$	$y = 0,0046$ $z = 0,1708$	$y = 0,0056$ $z = 0,1702$	$y = 0,0069$ $z = 0,1704$	$\pm (00z) \quad z = 0,1708 \pm 0,0013$
OI	18h	$\bar{x} = 0,167$ $z = 0,050$	$\bar{x} = 0,1791$ $z = 0,0532$	$\bar{x} = 0,1843$ $z = 0,0543$	$\bar{x} = 0,1847$ $z = 0,0552$	$\pm (x\bar{x}z, \dots) \quad \bar{x} = 0,179 \pm 0,005$ $z = 0,0532 \pm 0,0013$
OII (von OI überlappt)	6c	$y = 0,667$ $z = 0,050$	$y = 0,6577$ (idealer Wert = $2a_H/3$ ) $z = 0,0487$ (trial and error)	$z' = 0,3820$ (= $0,0487 - \frac{2}{3}$ ) (trial and error)	$z' = 0,3820$ (trial and error)	$\pm (00z') \quad z' = 0,3820 \pm 0,0013$ (trial and error) (= $\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{2}{3} + z'$ = $0,3333, 0,6667, 0,0487$ )
OIII	3b		$y = 0,00$ $z = 0,50$	$y = 0,00$ $z = 0,50$	$y = 0,00$ $z = 0,50$	$0 0 \frac{1}{2}$ $R_1(0\bar{k}\bar{l}) = 0,154 \quad R_1(hk\bar{i}0) = 0,123$

Kurze Originalmitteilungen

Hydroxyde des C6-Typs aus einem Übersichtsartikel von W. FEITKNECHT<sup>2</sup> gewonnen worden. Die entsprechenden, auf Grund neuerer Gitterkonstantenwerte von H. R. OSWALD<sup>3</sup> revidierten Berechnungen sind in den jetzigen Tabellen 1 und 2 enthalten.

Außerdem wurden die experimentell bestimmten  $B_{11}$ -Parameter neu berechnet und in einigen Fällen leicht abgeändert. Diese revidierten Parameter sind in Tabelle 3 enthalten, die eine korrigierte Fassung der Tabelle 9 der Originalmitteilung<sup>1</sup> darstellt. Als eine Folge dieser Änderungen wird die Änderung im  $z$ -Parameter von  $Zn^{II}$  wegen der Absorptionskorrektur gleich  $\Delta z = +0,003$  statt  $+0,002$  [wie ursprünglich angegeben<sup>1</sup>; S. 37, letzte Zeile].

Schließlich sollten in den „Berichtigungen“<sup>4</sup> folgende drei Irrtümer korrigiert werden:

S. 30, 7. Zeile:  $R_{OH'}$  statt  $R_{OH}$

Tab. 7:  $d_{OH\ Cl\ OH}$  statt  $d_{OH\ Cl\ OH=}$

S. 39, 29. Zeile:  $[Zn^{II}_3(OH)_8]^{-2} \cdot [(Zn^{II}Cl)_2]^{+2} \cdot H_2O$   
statt  $[Zn^{II}_3(OH)_8]^{-2} \cdot [Zn^{II}Cl]_2 \cdot H_2O$ .

Wegen aller Details muß auf die Originalarbeit<sup>1</sup> verwiesen werden.

<sup>2</sup> W. FEITKNECHT, Die festen Hydroxysalze zweiwertiger Metalle. Fortschr. chem. Forsch. **2** (1953) 670–757.

<sup>3</sup> H. R. OSWALD, Vergleichende Untersuchung der Hydroxide, Chloride und Hydroxidchloride zweiwertiger Metalle. Inauguraldissertation Universität Bern, 1960.

<sup>4</sup> Z. Kristallogr. **115** (1961) 476.