

## Strukturverfeinerung am Talk $\text{Mg}_3[(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}]$

B. Perdikatsis

Institute for Geological and Mining Research, Messogion 70, Athens, Greece

H. Burzlaff

Institut für Angewandte Physik, Lehrstuhl für Kristallographie,  
Loewenichstr. 22, 8520 Erlangen, Bundesrepublik Deutschland

Eingegangen am 22. April 1980

**Abstract.** Because of discrepancies in the literature a redetermination of the structure of talc  $\text{Mg}_3[(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}]$  is reported. Space group of talc is  $P\bar{1}$  with lattice parameters  $a_0 = 529.1(3)$  pm,  $b_0 = 946.0(5)$  pm,  $c_0 = 529.0(3)$  pm,  $\alpha = 98.68(5)^\circ$ ,  $\beta = 119.90(5)^\circ$  and  $\gamma = 85.27(5)^\circ$ ,  $Z = 2$ . Transformation by  $a' = -c$ ,  $b' = 2a + c$ ,  $c' = -b$  leads to a pseudomonoclinic  $C$ -centred unit cell with layers of connected  $[\text{SiO}_4]$ -tetrahedra parallel to (001). Two layers with opposite orientation provide for octahedral coordination polyhedra around Mg atoms.

### 1. Bisherige Untersuchungen über den Talk

Pauling (1930) wies in einer Arbeit über Glimmer auf die Strukturverwandtschaft zwischen Talk und Pyrophyllit hin. J. W. Gruner (1934) führte die ersten röntgenographischen Strukturuntersuchungen durch, als Untersuchungsmaterial lagen Talkproben von Harford County (Maryland) und Vorwald (Steirmark) vor. Die beiden Proben waren auf Grund von Pulveraufnahmen nicht zu unterscheiden, sie erschienen monoklin. Eine Strukturauflklärung wurde mit Hilfe von Debye-Scherrer-Aufnahmen versucht. Danach ist die Struktur des Talkes aus Schichten der Zusammensetzung  $\text{Mg}_3[(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}]$  aufgebaut, die parallel (001) liegen. Jede einzelne Schicht besteht aus Mg-Netzen, die zwischen zwei  $\text{SiO}_4$ -Tetraedernetzen liegen, so daß die Mg-Atome durch die eingelagerten Hydroxylgruppen eine oktaedrische (O,OH) Umgebung erhalten. Auf Grund geometrischer Überlegungen wurden Strukturmodelle in den Raumgruppen  $C2/m$  und  $C2/c$  berechnet. Bessere Übereinstimmung wurde für  $C2/c$  erhalten.

S. B. Hendricks unternahm 1938 erneut eine Strukturbestimmung des Talkes mit Einkristallaufnahmen. Verwendet wurde Material vom gleichen Fundort wie bei J. W. Gruner von Harford Country (Maryland). Die Struktur wurde mit Hilfe von Weissenberg-Aufnahmen um [010] untersucht.

**Tabelle 1.** Die kristallographischen Daten von Talk in der Literatur  
(a) Gitterkonstanten

| $a_0$<br>(pm) | $b_0$<br>(pm) | $c_0$<br>(pm) | $\alpha$<br>(°) | $\beta$<br>(°) | $\gamma$<br>(°) | R.G.       | Literatur        |
|---------------|---------------|---------------|-----------------|----------------|-----------------|------------|------------------|
| 526           | 910           | 1881          | 90              | 100,00         | 90              | $C2/c$     | J. W. Gruner     |
| 527           | 913           | 1888          | 90              | 100,25         | 90              | $Cc$       | St. B. Hendricks |
| 529,3         | 917,9         | 946,3         | 90,58           | 98,91          | 90,03           | $C\bar{1}$ | Rayner und Brown |
| 529,0         | 917,3         | 946,0         | 90,46           | 98,68          | 90,09           | $C\bar{1}$ | B. Perdikatsis   |
| 532           | 917           | 946           | 82,3            | 94,0           | 90,5            | $P1$       | W. Lindemann     |

## (b) Koordinaten

| Atom |   | Rayner<br>und Brown | Perdikatsis | Atom | Rayner<br>und Brown | Perdikatsis |        |
|------|---|---------------------|-------------|------|---------------------|-------------|--------|
| Mg   | x | 0,0000              | 0,0000      | O    | x                   | 0,7016      |        |
|      | y | 0,0000              | 0,0000      |      | y                   | 0,0014      | 0,5011 |
|      | z | 0,0000              | 0,0000      |      | z                   | 0,1171      | 0,1171 |
| Mg   | x | 0,9995              | 0,5002      | O    | x                   | 0,7022      |        |
|      | y | 0,3329              | 0,8334      |      | y                   | 0,3356      | 0,8340 |
|      | z | 0,0000              | 0,0000      |      | z                   | 0,1190      | 0,1170 |
| Si   | x | 0,7471              | 0,2452      | O    | x                   | 0,7442      |        |
|      | y | 0,0030              | 0,5029      |      | y                   | 0,1699      | 0,6701 |
|      | z | 0,2910              | 0,2911      |      | z                   | 0,3484      | 0,3481 |
| Si   | x | 0,7480              | 0,2455      | O    | x                   | 0,5225      |        |
|      | y | 0,3366              | 0,8361      |      | y                   | 0,4293      | 0,9251 |
|      | z | 0,2920              | 0,2910      |      | z                   | 0,3479      | 0,3477 |
| OH   | x | 0,1981              | 0,6974      | O    | x                   | 0,0209      |        |
|      | y | 0,1673              | 0,6676      |      | y                   | 0,4122      | 0,9106 |
|      | z | 0,1130              | 0,1116      |      | z                   | 0,3490      | 0,3491 |

## Lindemann, Wörgerbauer, Christenn

| Atom | x      | y      | z      | Atom | x      | y      | z      |
|------|--------|--------|--------|------|--------|--------|--------|
| Mg   | 0,0219 | 0,0035 | 0,9999 | O    | 0,8718 | 0,4950 | 0,1237 |
| Mg   | 0,0245 | 0,3382 | 0,0013 | O    | 0,0931 | 0,0494 | 0,6604 |
| Mg   | 0,0227 | 0,6702 | 0,0006 | O    | 0,3950 | 0,2908 | 0,6540 |
| Si   | 0,1436 | 0,2101 | 0,7110 | O    | 0,9055 | 0,3062 | 0,6545 |
| Si   | 0,6357 | 0,3762 | 0,7084 | O    | 0,1357 | 0,3595 | 0,3448 |
| Si   | 0,3810 | 0,2901 | 0,2895 | O    | 0,3956 | 0,1198 | 0,3544 |
| Si   | 0,8807 | 0,4624 | 0,2904 | O    | 0,6150 | 0,3870 | 0,3482 |
| O    | 0,1819 | 0,1942 | 0,8847 | OH   | 0,1889 | 0,5103 | 0,8846 |
| O    | 0,6559 | 0,3554 | 0,8795 | OH   | 0,3884 | 0,6602 | 0,1142 |
| O    | 0,3598 | 0,3223 | 0,1169 |      |        |        |        |

Die Aufnahmen zeigen stark verbreiterte Reflexe und zeugen für einen aufgeblättern Kristall; es ist kaum möglich, eventuelle kleine Abweichungen von monokliner Symmetrie festzustellen. Es wurden verschiedene (OH)-Anordnungen diskutiert, die auf eine oktaedrische Umgebung für das Mg führen. Da kein Vorschlag eine gute Übereinstimmung zwischen beobachteten und gemessenen Intensitäten ergab, kam Hendricks zu dem Schluß, daß die wirkliche Struktur aus einer statistischen Stapelung der Schichten in  $b$ -Richtung gebildet wird. Die Verschiebung längs der  $b$ -Achse beträgt  $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$  oder  $\frac{1}{3}b_0$ . Die meisten Schichten haben jedoch die gleiche Lagerung zueinander wie zwei Schichten in der Raumgruppe  $Cc$ .

1966 berichten J. H. Rayner und G. Brown in einer Kurzveröffentlichung über eine trikline Struktur von Talk. Verwendet wurde das gleiche Material wie von S. B. Hendricks. Von mehreren untersuchten Kristallen ist keiner mit monokliner Symmetrie gefunden worden. Die Gitterkonstanten, bezogen auf eine pseudomonokline Zelle, sind in Tabelle 1 aufgeführt. Die Struktur wurde mit Hilfe geometrischer Überlegungen gelöst. Gefunden wurde die Raumgruppe  $P\bar{1}$ , die in der  $C$ -Aufstellung verwendet wird. Insgesamt wurden 384 Reflexe in den Weissenberg-Aufnahmen ( $0kl$ ), ( $1kl$ ) und ( $2kl$ ) gemessen; der  $R$ -Wert beträgt 14,1%, die Parameter sind in Tabelle 1 angegeben<sup>1</sup>.

Eine Bestätigung der von Rayner und Brown ermittelten Struktur wurde 1972 von B. Perdikatsis im Rahmen von Untersuchungen zu strukturellen Beziehungen zwischen Talk und Protoenstatit vorgenommen. Die Struktur wurde mit direkten Methoden und Patterson-Verfahren neu bestimmt und bis zu einem  $R$ -Wert von 10,4% verfeinert. Im Jahre 1975 wurden eine Verfeinerung der Talkstruktur von W. Lindemann und Mitarbeitern vorgenommen. Sie geben als Raumgruppen  $P1$  an und verfeinern die Struktur bis zu einem  $R$ -Wert von 8,1%. Ihre Ergebnisse sind ebenfalls in Tabelle 1 zu finden. Wegen der Diskrepanz mit den Ergebnissen von Rayner und Brown und Perdikatsis wurden die Rechnungen unter Verwendung der alten Meßdaten wieder aufgenommen, um die Frage der Symmetrie zu klären.

## 2. Strukturbestimmung und erste Verfeinerung am Talk

Als Untersuchungsmaterial für die Strukturbestimmung im Jahre 1972 lagen große Talkspaltstücke aus dem Zillertal vor. Die chemische Analyse der Probe ergab folgende Zusammensetzung<sup>2</sup>:

|                  |       |                                |       |                                 |       |
|------------------|-------|--------------------------------|-------|---------------------------------|-------|
| SiO <sub>2</sub> | 62,7% | Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 0,13% | Na <sub>2</sub> O               | 0,06% |
| MgO              | 30,9% | Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1,4%  | K <sub>2</sub> O                | 0,02% |
| H <sub>2</sub> O | 4,8%  | CaO                            | 0,05% | (H <sub>2</sub> O) <sup>-</sup> | 0,03% |

<sup>1</sup> Persönliche Mitteilung von Rayner und Brown

<sup>2</sup> Die chemische Analyse wurde auf Veranlassung von Herrn Prof. Dr. K. H. Schüller, Zentral-Laboratorium der Firma „Steatit Magnesia AG“, Lauf durchgeführt

Die untersuchten Talkproben sind von hellgrüner Farbe, der optische Befund ergibt keine Inhomogenitäten.

Der für die Strukturbestimmung verwendete Kristall hatte die Form eines fast rhombischen Prismas mit den Abmessungen  $0,35 \times 0,2 \times 0,05$  mm.

Aus Präzessionsaufnahmen ergab sich für  $\alpha^*$  und  $\gamma^*$  eine deutliche Abweichung von  $90^\circ$ . Die genaue Gitterkonstantenbestimmung auf dem Einkristalldiffraktometer führt auf die Endwerte der Tabelle 1. Daraus folgt für die Anzahl der Moleküle in der Elementarzelle  $Z = 2$  und für das Volumen  $V = 453 \text{ \AA}^3$ , die Röntgendichte beträgt  $D_{R\ddot{o}} = 2,80 \text{ g/cm}^3$ . Auf Grund der Intensitätsverhältnisse und der Metrik mußte der Kristall als triklin angesehen werden, als Raumgruppe folgte  $P1$  oder  $P\bar{1}$ . Für die Strukturbestimmung wurde die pseudomonokline  $C$ -Aufstellung beibehalten. Die Intensitäten wurden mit einem automatischen Vierkreisdiffraktometer gemessen, im Bereich  $0^\circ \leq \vartheta \leq 23,5^\circ$  waren ca. 2300 Reflexe mit Zr-gefilterter  $\text{MoK}\alpha$ -Strahlung meßbar.

Die Strukturbestimmung und eine erste Verfeinerung führte bei einem  $R$ -Wert von 10,4% auf die Koordinaten der Tabelle 1.

### 3. Zweite Strukturverfeinerung

Nach der Publikation von W. Lindemann und Mitarbeitern (1975) erschien es erforderlich, zur endgültigen Klärung der Struktur die Verfeinerung in der vorliegenden Arbeit erneut zu versuchen. Eine Überprüfung ergab, daß der erste Ansatz mit einem fehlerhaften Exemplar eines selbstgeschriebenen Least-squares-Programms durchgeführt worden war und sich daher nicht unter einen  $R$ -Wert von 10,4% verfeinern ließ. Für die neuen Rechnungen wurde das Programmsystem CRYSTAN (1977) auf einer Anlage PDP 11/45 verwendet. Der gleiche Datensatz konnte ohne Schwierigkeiten auf einen endgültigen  $R$ -Wert unter Einschluß aller Reflexe von 5,0% ungewichtet bzw. 4,2% gewichtet verfeinert werden; die endgültigen Parameter, die Winkel und Abstände sind in den Tabellen 2 bzw. 3 zusammengestellt. Außerdem wird für die Basis und die Koordinaten eine Transformation auf eine primitive Zelle entsprechend den Regeln aus Crystal Data (1973) angegeben. An der Richtigkeit des Strukturvorschlags von Rayner und Brown ist nicht zu zweifeln.

Zum Abschluß der Verfeinerung wurde eine Differenzenfouriersynthese gerechnet, die drei bemerkenswerte Eigentümlichkeiten zeigt:

a) Die größten Maxima ( $0,4 - 0,5$  Elektronen/ $\text{\AA}^3$ ) liegen auf der Mitte der Verbindungslinien zwischen Si und Spitzensauerstoffatomen. Die Maxima auf der Linie Si-Netzsaurestoffatome zeigen Werte von  $0,3$  Elektronen/ $\text{\AA}^3$ .

b) Die in den Abständen erkennbare Asymmetrie im O-Netz Si(1)–O(6): 162,5 pm, Si(2)–O(6): 162,2 pm ist auch in der Differenzenfouriersynthese deutlich.

**Tabelle 2.** Parameter der Talkstruktur  
(a) Gitterkonstanten

| $C\bar{1}$                | $P\bar{1}$                | Transformation                          |
|---------------------------|---------------------------|---|
| $a_0 = 529,0(3)$ pm       | $a_0 = 529,1(3)$ pm       | $a_p = \frac{1}{2}a_c + \frac{1}{2}b_c$ |
| $b_0 = 917,3(5)$ pm       | $b_0 = 946,0(5)$ pm       | $b_p = -c_c$                            |
| $c_0 = 946,0(5)$ pm       | $c_0 = 529,0(3)$ pm       | $c_p = -a_c$                            |
| $\alpha = 90,46(5)^\circ$ | $\alpha = 98,68(5)^\circ$ |   |
| $\beta = 98,68(5)^\circ$  | $\beta = 119,90(5)^\circ$ |   |
| $\gamma = 90,09(5)^\circ$ | $\gamma = 85,27(5)^\circ$ |   |

(b) Koordination

|       | $C\bar{1}$ |            |            | $P\bar{1}$ |            |            |
|-------|------------|------------|------------|------------|------------|------------|
|       | x          | y          | z          | x          | y          | z          |
| Si(1) | 0,24527(7) | 0,50259(4) | 0,29093(3) | 0,00518(8) | 0,70927(3) | 0,25732(7) |
| Si(2) | 0,24590(7) | 0,83587(4) | 0,29108(3) | 0,6714(8)  | 0,70892(3) | 0,58997(7) |
| Mg(1) | 0,00000(0) | 0,0000(0)  | 0,0000(0)  | 0,00000(0) | 0,00000(0) | 0,00000(0) |
| Mg(2) | 0,50012(8) | 0,83332(5) | 0,99994(4) | 0,66664(9) | 0,00006(4) | 0,33320(8) |
| O(1)  | 0,1991(2)  | 0,8344(1)  | 0,1176(1)  | 0,6688(2)  | 0,8824(1)  | 0,6453(2)  |
| O(2)  | 0,6970(2)  | 0,6674(1)  | 0,1126(1)  | 0,3348(2)  | 0,8874(1)  | 0,9704(2)  |
| O(3)  | 0,1980(2)  | 0,5012(1)  | 0,1176(1)  | 0,0024(2)  | 0,8824(1)  | 0,3032(2)  |
| O(4)  | 0,0199(1)  | 0,9287(1)  | 0,3481(1)  | 0,8574(2)  | 0,6519(1)  | 0,9088(2)  |
| O(5)  | 0,5202(2)  | 0,9109(1)  | 0,3494(1)  | 0,8218(2)  | 0,6506(1)  | 0,3907(2)  |
| O(6)  | 0,2429(2)  | 0,6699(1)  | 0,3484(1)  | 0,3398(2)  | 0,6516(1)  | 0,4270(2)  |
| H     | 0,719(4)   | 0,669(3)   | 0,203(2)   | 0,338(6)   | 0,797(2)   | 0,950(5)   |

(c) Temperaturfaktoren für die  $C\bar{1}$ -Aufstellung in (pm)<sup>2</sup>

|       | $U_{11}$ | $U_{22}$ | $U_{33}$ | $U_{23}$ | $U_{13}$ | $U_{12}$ | $U = u^{-2}$ |
|-------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|--------------|
| Si(1) | 87(2)    | 74(2)    | 95(2)    | 0(2)     | 14(1)    | 2(1)     | 85           |
| Si(2) | 86(2)    | 74(2)    | 97(2)    | -3(2)    | 19(1)    | 3(1)     | 85           |
| Mg(1) | 76(4)    | 69(4)    | 97(3)    | -1(2)    | 17(2)    | 1(2)     | 80           |
| Mg(2) | 78(2)    | 69(4)    | 101(2)   | -4(2)    | 15(2)    | 0(2)     | 82           |
| O(1)  | 100(4)   | 94(5)    | 106(4)   | -1(3)    | 17(3)    | 0(3)     | 100          |
| O(2)  | 121(5)   | 102(5)   | 110(4)   | -1(3)    | 17(3)    | 5(3)     | 111          |
| O(3)  | 103(4)   | 94(5)    | 97(4)    | 0(3)     | 12(3)    | 0(3)     | 98           |
| O(4)  | 104(4)   | 136(5)   | 133(4)   | -10(3)   | 15(3)    | 44(3)    | 123          |
| O(5)  | 112(5)   | 141(5)   | 124(4)   | 0(3)     | 22(3)    | -32(3)   | 125          |
| O(6)  | 162(5)   | 85(5)    | 120(4)   | 2(3)     | 24(3)    | 2(3)     | 118          |
| H     | -        | -        | -        | -        | -        | -        | 76           |

Als Temperaturfaktor wurde  $\exp. [-2\pi^2 (U_{11}h^2a^{*2} + U_{22}k^2b^{*2} + U_{33}l^2c^{*2} + 2U_{12}hka^*b^* + 2U_{13}hla^*c^* + 2U_{23}klb^*c^*)]$  verwendet

c) In der unmittelbaren Umgebung der Mg-Atome finden sich Maxima von etwa 0,3 Elektronen/Å<sup>3</sup>, die hantelförmig senkrecht auf der Schichtebene stehen.

**Tabelle 3.** Abstände und Winkel in der Talkstruktur (trikline Elementarzelle)

|            |          |                    |         |                     |         |
|------------|----------|--------------------|---------|---------------------|---------|
| Mg(1)–O(2) | 205,2 pm | ↔ O(1)–Mg(1)–O(3)  | 85,22°  | ↔ O(1)–Mg(1)–O(2)′  | 95,31°  |
| –O(1)      | 208,1 pm | ↔ O(1)–Mg(1)–O(3)′ | 94,77°  | ↔ O(3)–Mg(1)–O(2)   | 95,25°  |
| –O(3)      | 208,0 pm | ↔ O(1)–Mg(1)–O(2)  | 84,69°  | ↔ O(3)–Mg(1)–O(2)′  | 84,75°  |
| Mg(2)–O(2) | 205,7 pm | ↔ O(1)–Mg(2)–O(1)′ | 85,42°  | ↔ O(1)′–Mg(2)–O(3)′ | 94,61°  |
| –O(2)′     | 205,4 pm | –O(2)              | 95,32°  | OH–Mg(2)–O(2)′      | 83,97°  |
| –O(1)      | 207,6 pm | –O(3)              | 94,40°  | –O(3)               | 95,50°  |
| –O(1)      | 208,0 pm | –O(3)′             | 85,41°  | OH′–Mg(2)–O(3)      | 84,76°  |
| –O(3)      | 207,9 pm | ↔ O(1)′–Mg(2)–O(2) | 84,60°  | –O(3)′              | 95,32°  |
| –O(3)′     | 207,8 pm | –O(2)′             | 95,43°  | O(3)–Mg(2)–O(3)′    | 85,29°  |
| Si(1)–O(3) | 162,1 pm | ↔ O(3)–Si(1)–O(4)  | 109,29° | O(4)–Si(1)–O(5)     | 109,42° |
| –O(4)      | 162,4 pm | –O(5)              | 109,58° | –O(6)               | 109,75° |
| –O(5)      | 162,3 pm | –O(6)              | 109,41° | O(5)–Si(1)–O(6)     | 109,37° |
| –O(6)      | 162,5 pm |                    |         |                     |         |
| Si(2)–O(1) | 162,2 pm | ↔ O(1)–Si(2)–O(4)  | 109,17° | O(4)–Si(2)–O(5)     | 109,45° |
| –O(4)      | 162,3 pm | –O(5)              | 109,62° | –O(6)               | 109,60° |
| –O(5)      | 162,3 pm | –O(6)              | 109,39° | O(5)–Si(2)–O(6)     | 109,59° |
| –O(6)      | 162,2 pm |                    |         |                     |         |

Standardabweichungen: Abstände 0,2 pm, Winkel 0,07°; symmetrisch äquivalente Atome sind durch ′ gekennzeichnet

Die unter (a) aufgeführte Beobachtung ist verständlich, da für die Spitzensauerstoffatome eine deutlichere Betonung der homöopolaren Bindung Si—O erwartet werden kann. Von einer Interpretation der beiden anderen Beobachtungen wird Abstand genommen, da der Datensatz für weitere Schlüsse nicht genau genug erscheint.

#### 4. Strukturbeschreibung

Die Struktur besteht aus zweidimensional unendlichen Schichten von verknüpften  $\text{SiO}_4$ -Tetraedern gleicher Orientierung parallel zu  $(001)$ . Die Stapelung zweier entgegengesetzt orientierter Tetraederschichten läßt durch die Einlagerung von (OH)-Gruppen Oktaederlücken entstehen, die vollständig mit Mg-Atomen besetzt werden. Jedes Oktaeder besteht aus vier Tetraederspitzen-Sauerstoffatomen und zwei (OH)-Gruppen. Man kann die Talkstruktur in vier Ebenen zerlegen (Abb. 1). Die erste Ebene besteht aus den Mg-Atomen (I), die zweite Ebene aus Tetraederspitzen-Sauerstoffatomen sowie (OH)-Gruppen (II), die dritte Ebene aus Si-Atomen (III) und vierte Ebene aus Basis-Sauerstoffatomen der  $\text{SiO}_4$ -Tetraeder (IV).

*I. Mg-Atome.* Die Mg-Atome bilden ein zentriertes Sechseck-Netz. In jedem Punkt des Netzes stoßen sechs Dreiecke zusammen. Die Kantenlänge der

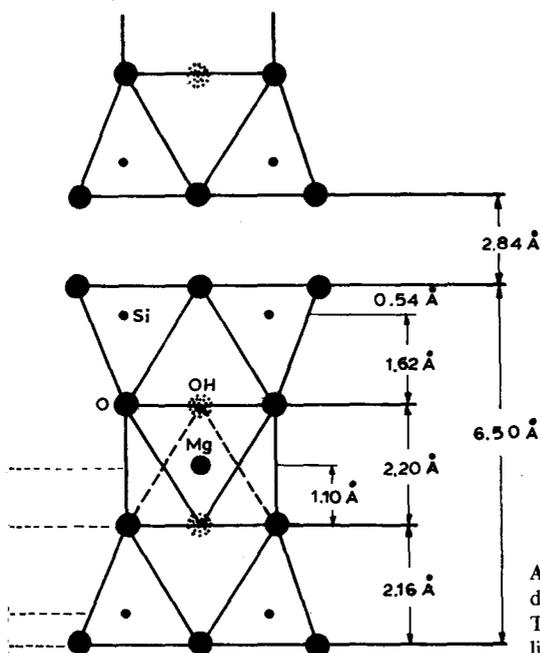
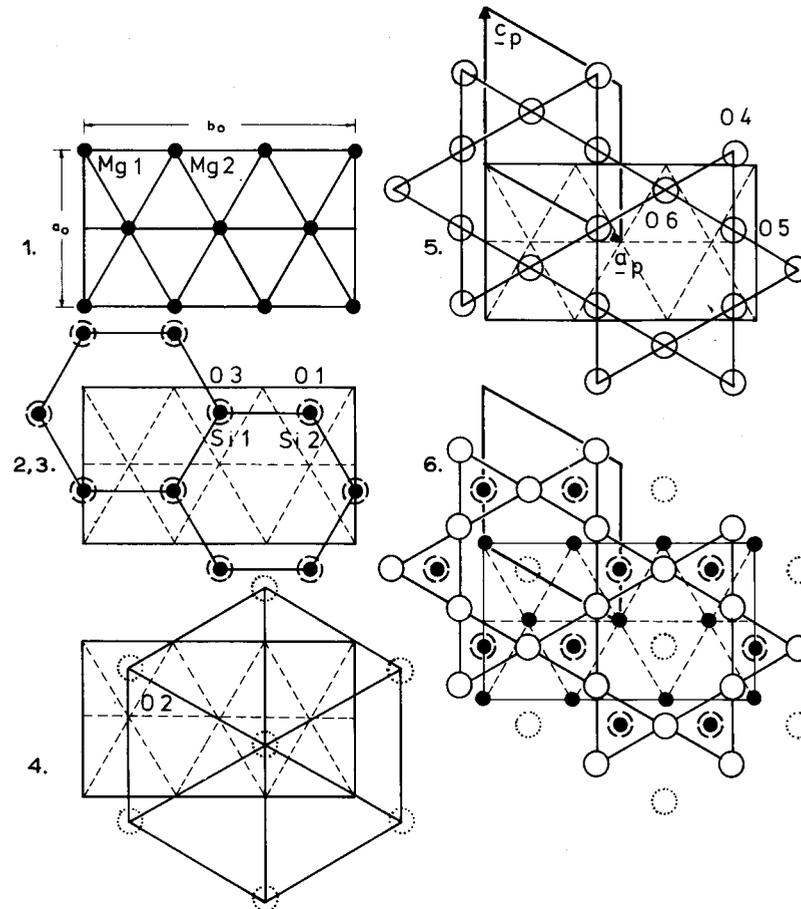


Abb. 1. Schematische Darstellung der einzelnen Ebenen in der Talkstruktur. Die Projektionsebene liegt senkrecht zu  $a_0$ .



**Abb. 2.** Zerlegung der Talkstruktur in einzelne Ebenen parallel zu (001); 1. Mg-Atome, 2. Si-Atome (G-Netz), 3. Tetraederspitzen-Sauerstoffatome (G-Netz), 4. (OH)-Lagen, 5. Tetraederbasis-Sauerstoffatome (N-Netz), primitive Zelle, 6. Zusammenstellung der einzelnen Ebenen, primitive Zelle

Hexagone beträgt 305 pm. Die Hexagonalität der Schicht ist sehr gut erfüllt. Die Hexagone beginnen im Nullpunkt der Elementarzelle und sind derart angeordnet, daß Kanten parallel zur  $b$ -Achse liegen (Abb. 2.1).

*II. (O,OH)-Schicht.* Unterscheidet man nicht Tetraederspitzen-Sauerstoffatome von (OH)-Sauerstoffatomen, so bilden beide zusammen ebenfalls ein zentriertes Sechseck-Netz, welches kongruent und parallel zum Mg-Netz ist. Betrachtet man nur die Tetraederspitzen-Sauerstoffatome so, bilden sie ein G-Netz (Graphit-Netz), welches durch (OH)-Sauerstoffatome zentriert wird.

Die (OH)-Lagen bilden für sich ein zentriertes Sechseck-Netz mit einer Kantenlänge  $305 \cdot \sqrt{3} = 529$  pm, es ist kantenparallel zu  $a$  orientiert und beginnt bei  $x = y = \frac{1}{6}$  (Abb. 2.4). Die (OH)-Lagen zentrieren in der Projektion Mg-Dreiecke so, daß das Sechseck-Netz der Mg-Atome in nichtverknüpfte Dreiecke zerfällt. Der Abstand des Graphit-Netzes der Tetraederspitzen-Sauerstoffatome von der Mg-Ebene beträgt 110 pm. Der Abstand der (OH)-Sauerstoffatome beträgt 105 pm, das heißt, die (OH)-Sauerstoffatome liegen 5 pm tiefer als die Tetraederspitzen. Die Lokalisierung und Orientierung der Sauerstoffschicht ist eindeutig gegeben durch die Verteilung der (OH)-Sauerstoffatome.

*III. Si-Atome.* Die Si-Atome bilden ein G-Netz (Graphit-Netz), welches die gleiche Orientierung hat wie das Netz der Tetraederspitzen-Sauerstoffatome. Der Abstand des Graphit-Netzes von der Mg-Ebene beträgt 272 pm. Die Kante der Hexagone beträgt 305 pm.

*IV. O-Atome.* Die Sauerstoffatome der Tetraederbasisflächen bilden ein N-Netz (Dreieck-Sechseck-Netz). Die Kantenlänge der Hexagone bzw. Dreiecke ist 265 pm (O–O Abstand = 265 pm). Die Dreiecke des N-Netzes entsprechen der Basis der  $(\text{SiO}_4)^{4-}$ -Tetraeder (Abb. 2.5). Sämtliche Sauerstoffatome dieser Ebene sind verbrückend, dadurch entsteht eine unendlich ausgedehnte Tetraederschicht. Die Orientierung des Netzes in der Zelle ist derart, daß die Si-Atome sowie die Tetraederspitzen-Sauerstoffatome die in dem N-Netz auftretenden Dreiecke in der Projektion zentrieren. Dann liegen die Sauerstoffatome dieser Ebene in der Projektion zwischen zwei Si-Atomen. Die Hexagone werden in der Projektion von (OH)-Lagen zentriert. Der Abstand dieser Ebene von der Mg-Ebene beträgt 326 pm, von der vorliegenden Si-Ebene 54 pm.

Da die Mg-Ebene genau in der  $a, b$ -Ebene liegt und ferner das Symmetriezentrum im Nullpunkt mit Mg-Atom besetzt ist, erhält man durch Inversion die symmetrisch äquivalente Anordnung mit entgegengesetzter Orientierung.

Der Abstand zwischen den abgeschlossenen Paketen beträgt 284 pm. Da jedes Paket für sich bindungsmäßig abgesättigt ist, erfolgt die Verknüpfung zum nächsten Paket durch van-der-Waals-Kräfte. Durch diesen schwachen Bindungscharakter ist die gute Spaltbarkeit des Talkes nach (001) bedingt.

## Literatur

- Burzlaff, H., Böhme, R., Gomm, M.: CRYSTAN A Crystallographic Program System for Minicomputers. Erlangen 1977  
Donnay, J. D. H., Ondik, H. M.: Crystal Data 3. Edition, Vol. II (1973)  
Gruner, J. W.: The crystal structure of Talc and Pyrophyllite. Z. Kristallogr. **88**, 412 (1934)  
Hendricks, S. B.: On the crystal structure of Talc and Pyrophyllite. Z. Kristallogr. **99**, 264 (1938)

- Lindemann, W., Wörgerbauer, R., Christenn, H.: Röntgenstrukturanalyse von Talk. Sprechsaal Ker. Glas, Heft 7–8 (1975)
- Pauling, L.: Proc. U.S. Nat. Acad. Sci. **16**, 123 (1930)
- Perdikatsis, B.: Über die Talk- und Protoenstatit-Struktur und ihre strukturellen Beziehungen. Dissertation, Universität Erlangen 1972
- Rayner, J. H., Brown, G.: Triclinic form of Talc. Nature Vol. 212 (1966)