

Aus dem Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien, Österreich

Kristallchemie natürlicher Telluride

I: Verfeinerung der Kristallstruktur des Sylvanits, AuAgTe_4

F. Pertlik

Mit 2 Abbildungen

Eingegangen am 30. Januar 1984;

angenommen am 15. April 1984

Zusammenfassung

Mikrosondenanalysen und die Verfeinerung der Kristallstruktur zeigen, daß Sylvanit, AuAgTe_4 , aus Baia de Arieş (= Offenbánya), Rumänien, eine stöchiometrische Zusammensetzung und eine geordnete Kristallstruktur besitzt ($a = 8,95(1) \text{ \AA}$, $b = 4,478(5) \text{ \AA}$, $c = 14,62(2) \text{ \AA}$; $\beta = 145,35(5)^\circ$; $Z = 2$; Raumgruppe $P2/c - C_{2h}^4$). Das Au-Atom ist von sechs Te-Atomen in einer für die Oxidationszahl III charakteristischen [4+2]-Koordination umgeben. Um das Ag-Atom (Oxidationszahl I) sind ebenfalls sechs Te-Atome, jedoch in einer [2+2+2]-Koordination, angeordnet. Über gemeinsame Kanten bauen AuTe_6 - und AgTe_6 -Polyeder „Schichten“ parallel (100) auf. Diese „Schichten“ werden über Te_2 -Hanteln ($\text{Te-Te} = 2,82 \text{ \AA}$) zu einem Gerüst verknüpft.

Summary

Crystal Chemistry of Natural Tellurides. I: Refinement of the Crystal Structure of Sylvanite, AuAgTe_4

Electron microprobe analyses and the refinement of the crystal structure indicate, that sylvanite, AuAgTe_4 , from Baia de Arieş (= Offenbánya), Romania, has a stoichiometric composition and an ordered crystal structure ($a = 8.95(1) \text{ \AA}$, $b = 4.478(5) \text{ \AA}$, $c = 14.62(2) \text{ \AA}$; $\beta = 145.35(5)^\circ$; $Z = 2$; space group $P2/c - C_{2h}^4$). The Au atom is surrounded by six Te atoms in a [4+2] coordination as characteristic for oxidation state III. Around the Ag atom (oxidation state I) are also six Te atoms, but arranged in a [2+2+2] coordination. Via common edges the AuTe_6 and AgTe_6 polyhedra build up "sheets" parallel to (100). These "sheets" are combined to a network of Te_2 dumbbells ($\text{Te-Te} = 2.82 \text{ \AA}$).

Einleitung

Eine Übersicht von Untersuchungen an dem Mineral Sylvanit im Hinblick auf Morphologie, chemische Zusammensetzung und physikalisches Verhalten bringen Palache et al. (1944). Die erste röntgenographische Bestimmung der Gitterkonstanten dieses Minerals (in kX-Einheiten) führten Tunell und Ksanda (1937) an Kristallen von Creep Creek, Colorado, und Săcărâmb (= Nagy-Äg), Rumänien, durch. Diese Konstanten wurden von Tunell (1941) übernommen, der mittels

Pulver- und Weissenberg-Aufnahmen den Strukturtyp dieses Minerals bestimmte. In einem wichtigen, zusammenfassenden Artikel über die Kristallchemie der Goldtelluride wurden von *Tunell* und *Pauling* (1952) nebenbei auch die von *Tunell* und *Ksanda* (1937) in kX-Einheiten angegebenen Gitterkonstanten in Å-Einheiten umgerechnet. Ein Pulverdiffraktogramm (d -Werte und relative Intensitäten) für Sylvanit gibt *Thompson* (1949). Im *Mineral Powder Diffraction File* (1980) werden dann auch Indizes angegeben, die jedoch einer teilweisen Revision bedürfen.

Experimentelles

Kristalle von Sylvanit, an denen die vorliegenden Untersuchungen durchgeführt wurden, stammen aus Baia de Arieş (= Offenbánya), Rumänien (vgl. *Slavík* und *Spencer*, 1928), Sammlung des Institutes für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien (Inv. Nr. 9017). Anhand von Weissenberg- und Präzessionsaufnahmen wurden die Gitterkonstanten neu bestimmt sowie die systematische Auslöschung überprüft. In Tabelle 1 sind diese Werte den Angaben von *Tunell* und *Pauling* (1952) gegenübergestellt, deren Aufstellung zum besseren Vergleich beibehalten wurde. Die Gitterparameter der reduzierten Zelle (*Křivý* und *Gruber*, 1976) wären $a = 8,950$ Å, $b = 4,478$ Å, $c = 8,864$ Å, $\beta = 110,31^\circ$ ($Z = 2$) und werden durch folgende Transformationen des direkten Gitters erhalten (100/010/101).

Quantitative Mikrosondenanalysen des untersuchten Sylvanits (Fehlergrenze 2 rel.%) bestätigten die stöchiometrische Zusammensetzung AuAgTe_4 . An Spurenelementen konnten gefunden werden: $\text{Cu} \leq 0,2$ Gew.% und $\text{Ni} \leq 0,1$ Gew. (vgl. *Carnot*, 1901).

Zur Messung dreidimensionaler Röntgendaten wurde aus einem Kristall ein etwa zylinderförmiges Bruchstück mit den Dimensionen 0,12 mm (Zylinderhöhe) und 0,2 mm (Durchmesser) präpariert. Die Beugungsintensitäten ($\pm h, k$,

Tabelle 1. Gitterparameter für Sylvanit, AuAgTe_4 . Die Aufstellung der Elementarzelle nach *Tunell* und *Ksanda* (1937) wurde beibehalten

	<i>Tunell</i> und <i>Pauling</i> (1952)	diese Arbeit
a (Å)	8,96 (2)	8,95 (1)
b (Å)	4,49 (2)	4,478 (5)
c (Å)	14,62 (2)	14,62 (2)
β ($^\circ$)	145,43 (20)	145,35 (5)
Z	2	2
ρ rönt ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	8,17	8,16
ρ exp ($\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$)	8,16 ^a	~ 8,1
Raumgruppe	$P2/c - C_2^4$	$P2/c - C_2^4$
μ ($\text{MoK}\alpha$) (cm^{-1})		~ 422

^a Nach *Palache* (1900).

$\pm l$ -Reflexe) wurden auf einem Zweikreisdiffraktometer (Stoe Stadi 2, MoK α -Strahlung, Graphitmonochromator, ω -scan) bei Drehung um die Zylinderachse (entspricht [010]) gesammelt. Nach einer Absorptionskorrektur entsprechend der Kristallgestalt, nach Korrekturen für die Lorentz- und Polarisierungseffekte entsprechend der Weissenberggeometrie sowie nach Mittelung der Mehrfachmessungen lagen 886 symmetrieunabhängige Beugungsintensitäten mit $I \geq 2 \sigma_I$ vor. Diese Korrekturen sowie ein statistischer Symmetrietest, der mit hoher Wahrscheinlichkeit für eine zentrosymmetrische Struktur sprach, wurden mit dem Programmsystem SHELX-76 (Sheldrick, 1976) durchgeführt. Für die Verfeinerung der Kristallstruktur nach der Methode der kleinsten Quadrate (volle Matrix) wurde von der Struktur nach Tunell (1941) ausgegangen (RG: $P2/c$). Unter Berücksichtigung der anomalen Dispersion sowie der sekundären Extinktion (Zachariasen, 1967) ergab sich für die 886 als beobachtet gewerteten Reflexe ($I \geq 2 \sigma_I$) $R = 7,2\%$, mit σ -Wichtung $R_w = 6,0\%$; $w = 1/\sigma$ (Programm SFLS-5, Prewitt, 1966). Für diese Berechnungen wurden sowohl die Streukurven für neutrale Atome als auch die Dispersionsterme $\Delta f'$ und $\Delta f''$ den *International Tables*, Vol. IV (1974) entnommen. Eine abschließend gerechnete Differenzfouriersumme $F_o - F_c$ gab keine Anhaltspunkte für eine auch nur partielle Besetzung weiterer Punktlagen. Sie zeigte als Restdichte nur Maxima bis zu $4,0 [e \cdot \text{\AA}^{-3}]$, was bei der vorliegenden Verbindung als sehr gering zu erachten ist. In Tabelle 2 sind die Ortsparameter und anisotropen Temperaturparameter dieser Strukturverfeinerung angegeben.

Wie oben erwähnt, sprach der Symmetrietest für die zentrische Raumgruppe $P2/c$ und nicht für die azentrische, von der Auslöschung her ebenfalls mögliche Raumgruppe Pc . Diesen Befund bestätigt nicht nur der R -Wert dieser Strukturverfeinerung, sondern vor allem die geringen Unterschiede in den Schwingungsamplituden der Hauptachsen der anisotropen Temperaturparameter (Tabelle 3).

Tabelle 2. Ortsparameter und anisotrope Temperaturparameter ($\beta_{ij} \cdot 10^4$) für Sylvanit mit Standardabweichungen in Klammern. Ursprung der Elementarzelle in $\bar{1}$. Numerierung der Atome nach Tunell (1941)

$$B_{eq} = (B_{11} + B_{22} + B_{33})/3$$

$$ATF = \exp [-(h^2 \beta_{11} + \dots + 2hk\beta_{12} + \dots)]$$

Atom	Punktlage	x	y	z	B_{eq}
Au	2a	0	0	0	,61
Ag	2e	0	,5182 (4)	1/4	,77
Te (1)	4g	,2992 (3)	,0278 (2)	,0003 (2)	1,06
Te (2)	4g	,2821 (3)	,4045 (2)	,2366 (2)	,95

Atom	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Au	54 (4)	96 (4)	25 (2)	-20 (3)	27 (2)	-11 (2)
Ag	40 (7)	125 (7)	27 (3)	0	32 (4)	0
Te (1)	78 (6)	140 (5)	38 (2)	6 (3)	43 (3)	5 (2)
Te (2)	60 (5)	124 (4)	32 (2)	1 (3)	33 (3)	-3 (2)

Tabelle 3. *Schwingungsamplituden der Hauptachsen der anisotropen Temperaturparameter (R.M.S. in Å) und deren Orientierung (Winkel in °) zu den kristallographischen Achsen a*, b* und c**

Atom	R.M.S.	a*	b*	c*
Au	,112	87,9	86,9	122,4
	,106	120,1	30,2	113,4
	,076	30,2	60,0	41,8
Ag	,032	44,4	90,0	78,9
	,113	90,0	0,0	90,0
	,098	45,6	90,0	11,1
Te (1)	,129	103,3	110,9	134,7
	,118	88,1	22,1	100,7
	,099	13,4	96,7	46,6
Te (2)	,126	96,2	72,3	128,7
	,111	85,6	17,9	76,6
	,088	7,6	92,3	41,9

Die chemische Verwandtschaft sowie die etwa gleiche Raumbeanspruchung der Elemente Au und Ag ließe prinzipiell einen gegenseitigen Ersatz in Kristallstrukturen zu (vgl. *Tunell* und *Pauling*, 1952). Dies wurde auch während der Strukturverfeinerung des Sylvanits in Erwägung gezogen, und daher der Besetzungsfaktor für diese Atome (Au und Ag) während der Verfeinerung nach der Methode der kleinsten Quadrate freigegeben. Da keine signifikanten Abweichungen der Besetzungsparameter für die Au- bzw. Ag-Positionen rechnerisch zu ermitteln waren, kann der Schluß gezogen werden, daß im Sylvanit die gegenseitige Ersetzbarkeit bzw. der Austausch dieser beiden Atome als gering zu erachten ist.

Diskussion

Die wichtigsten interatomaren Abstände und Bindungswinkel im Sylvanit sind in Tabelle 4 zusammengestellt. Die Unterschiede in den interatomaren Abständen zwischen der Strukturbestimmung durch *Tunell* (1941) und der vorliegenden Strukturverfeinerung sind $< 0,1$ Å.

Wie aus Tabelle 4 zu ersehen ist, wird das Atom Au (Punktsymmetrie $\bar{1}$) von je sechs Te-Atomen koordiniert, wobei ein verzerrter Oktaeder vorliegt. Vier koplanar angeordnete Te-Atome mit einem mittleren Au-Te-Abstand von 2,686 Å (mittlere Abweichung 0,015 Å) umgeben neben zwei weiteren Te-Atomen – in Transstellung – mit Au-Te = 3,329 Å ($2\times$) das Zentralatom, so daß dieses Atom eine ausgeprägte [4+2]-Koordinationsart aufweist. Eine vergleichbare Umgebung eines Au-Atoms bestimmten *Haendler* et al. (1974) in der Verbindung AuTe_2I , in der ebenfalls vier koplanare Te-Atome (Au-Te = 2,688 Å, $4\times$) neben zwei I-Atomen (Au-I = 3,330 Å; $2\times$) eine [4+2]-Koordinationsart aufbauen. Als weiteres Beispiel ähnlicher Koordinationsverhältnisse sei die Verbindung AuTeI angeführt

Tabelle 4. *Interatomare Abstände (Å) und Bindungswinkel (°) im Sylvanit*. Standardabweichungen in Klammern in Einheiten der letzten Stellen. Im Au- bzw. Ag-Polyeder sind vom Zentralatom aus alle Abstände bis 4,0 Å, in den zwei Te-Polyedern bis 3,5 Å angegeben. In der vorletzten Spalte sind die Abstände zwischen den Ligandatomen der Polyeder, in der letzten Spalte der Winkel am Zentralatom zu diesen Atomen angegeben. Zusätzlich sind in den Te-Polyedern die Abstände zu den umgebenden Atomen im Bereich zwischen 3,5 Å und 3,9 Å angeführt

Die Transformation der Koordinaten des jeweiligen Atoms, bezogen auf die Angaben in Tabelle 2, erfolgt nach:

1	x	y	z	7	$-x$	y	$1/2 - z$
2	$-x$	$-y$	$-z$	8	$1 - x$	y	$1/2 - z$
3	x	$-1 + y$	z	9	x	$1 + y$	z
4	$-x$	$1 - y$	$-z$	10	$1 - x$	$-y$	$-z$
5	x	$1 - y$	$1/2 + z$	11	$1 - x$	$-1 + y$	$1/2 - z$
6	x	$-y$	$1/2 + z$	12	$1 - x$	$1 + y$	$1/2 - z$

$Au_1 - Te(1)_{1,2} = 2,678(2)$	$Te(1)_1 - Te(1)_2$	5,355(5)	180,0(—)
$Te(2)_{1,2} = 2,693(2)$	$Te(2)_1$	3,960(3)	95,01(7)
$Te(2)_{3,4} = 3,329(1)$	$Te(2)_2$	3,628(3)	84,99(7) ^c
	$Te(2)_3$	4,542(3)	97,65(6)
	$Te(2)_4$	3,985(3)	82,35(6) ^c
	$Te(1)_2 - Te(2)_1$	3,628(3)	84,99(7) ^c
	$Te(2)_2$	3,960(3)	95,01(7)
	$Te(2)_3$	3,985(3)	82,35(6) ^c
	$Te(2)_4$	4,542(3)	97,65(6)
	$Te(2)_1 - Te(2)_2$	5,387(4)	180,0(—)
	$Te(2)_3$	4,478(2)	95,49(7)
	$Te(2)_4$	4,077(5)	84,51(7) ^a
	$Te(2)_2 - Te(2)_3$	4,077(5)	84,51(7) ^a
	$Te(2)_4$	4,478(2)	95,49(7)
	$Te(2)_3 - Te(2)_4$	6,658(3)	180,0(—)
$Ag_1 - Te(1)_{4,5} = 2,928(2)$	$Te(1)_4 - Te(1)_5$	4,213(5)	92,03(10) ^b
$Te(1)_{2,6} = 3,227(2)$	$Te(1)_2$	4,478(2)	93,23(7)
$Te(2)_{1,7} = 2,736(2)$	$Te(1)_6$	6,149(4)	174,74(75)
	$Te(2)_1$	3,985(3)	89,37(6) ^c
	$Te(2)_7$	4,513(3)	105,63(7)
	$Te(1)_5 - Te(1)_2$	6,149(4)	174,74(75)
	$Te(1)_6$	4,478(2)	93,23(7)
	$Te(2)_1$	4,513(3)	105,63(7)
	$Te(2)_7$	3,985(3)	89,37(6) ^c
	$Te(1)_2 - Te(1)_6$	4,213(5)	81,51(9) ^b
	$Te(2)_1$	3,628(3)	74,45(7) ^c
	$Te(2)_7$	4,202(3)	89,21(7)
	$Te(1)_6 - Te(2)_1$	4,202(3)	89,21(7)
	$Te(2)_7$	3,628(3)	74,45(7) ^c
	$Te(2)_1 - Te(2)_7$	5,376(5)	158,56(28)

Tabelle 4 (Fortsetzung)

Te (1) ₁ –	Au ₁ = 2,678 (2)	Au ₁ – Ag ₄	4,244 (1)	98,33 (6)
	Ag ₄ = 2,928 (2)	Ag ₂	4,329 (1)	93,84 (5)
	Ag ₂ = 3,227 (2)	Te (2) ₈	4,323 (2)	103,58 (8)
	Te (2) ₈ = 2,823 (2)	Ag ₄ – Ag ₂	4,478 (3)	93,23 (19)
	Te (2) ₁₁ = 3,593 (2)	Te (2) ₈	4,289 (3)	96,43 (6)
	Te (1) ₁₀ = 3,609 (4)	Ag ₂ – Te (2) ₈	5,945 (2)	158,58 (12)
Te (2) ₂ = 3,628 (3)				
Te (2) ₁ –	Au ₁ = 2,693 (2)	Au ₁ – Au ₉	4,478 (2)	95,49 (9)
	Au ₉ = 3,329 (1)	Ag ₁	4,329 (1)	105,77 (7)
	Ag ₁ = 2,736 (2)	Te (1) ₈	4,164 (2)	98,00 (5)
	Te (1) ₈ = 2,823 (2)	Au ₉ – Ag ₁	4,244 (1)	88,26 (6)
		Te (1) ₈	6,023 (2)	156,42 (9)
	Te (2) ₈ = 3,586 (4)	Ag ₁ – Te (1) ₈	4,451 (2)	106,41 (8)
	Te (1) ₁₂ = 3,593 (2)			
	Te (1) ₂ = 3,628 (3)			

Gemeinsame Kanten der Polyeder:

^a zwischen den AuTe₆-Polyedern

^b zwischen den AgTe₆-Polyedern

^c zwischen den AuTe₆- und AgTe₆-Polyedern.

(Fenner und Mootz, 1978). Innerhalb einer Abweichung von 0,224 Å wird das Au-Atom planar von drei Te-Atomen (Au-Te = 2,642; 2,654; 2,684 Å) und einem I-Atom (Au-I = 2,680 Å) umgeben, während zwei weitere I-Atome in Transstellung (Au-I = 3,500 und 3,633 Å) das Polyeder zu einer [4+2]-Koordination ergänzen.

Die Autoren der Strukturanalysen von AuTe₂I (Haendler et al., 1974) und AuTeI (Fenner und Mootz, 1978) nehmen an, daß in diesen Verbindungen das Au-Atom die Oxidationszahl III besitzt, die sich in einer ausgeprägten [4+2]-Koordination um dieses Atom äußert. Aufgrund der im Sylanit bestimmten [4+2]-Koordination um das Atom Au wird vom Verfasser angenommen, daß auch in diesem Mineral das Element Au in dieser Oxidationszahl vorliegt (vgl. Wells, 1975).

Das Ag-Atom (Punktsymmetrie 2) wird ebenfalls von sechs Te-Atomen verzerrt oktaedrisch umgeben. Hier liegt jedoch eine einseitige Verzerrung vor, wobei die Winkel zwischen zwei kristallographisch äquivalenten Bindungen 159°, 92° und 82° betragen, so daß sich zusammen mit den signifikanten Unterschieden in den Ag-Te-Abständen eine Verzerrung des Oktaeders hinzu einer [2+2+2]-Koordination um das Ag-Atom ergibt. Die Verzerrung des Polyeders um das Ag-Atom läßt jedoch weiters eine Tendenz zur Ausbildung einer tetraedrischen [4]-Koordination erkennen, wobei die vier Te-Atome mit den kürzesten Abständen (Ag-Te = 2,736(2) Å, 2× und Ag-Te = 2,928(2) Å, 2×) die Tetraederatome

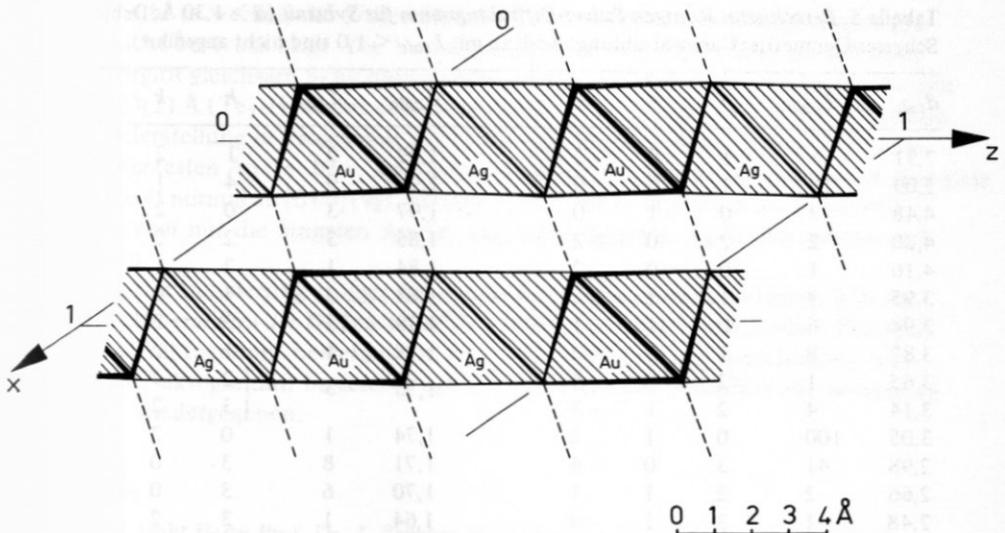


Abb. 1. Die Struktur des Sylvanits, projiziert parallel [010]. Die über gemeinsame Kanten verknüpften AuTe_6 - und AgTe_6 -Oktaeder bilden gleichsam Schichten, die durch kurze Te-Te-Bindungen von 2,82 Å (Te_2 -Hanteln) verbunden sind (strichliert dargestellt)

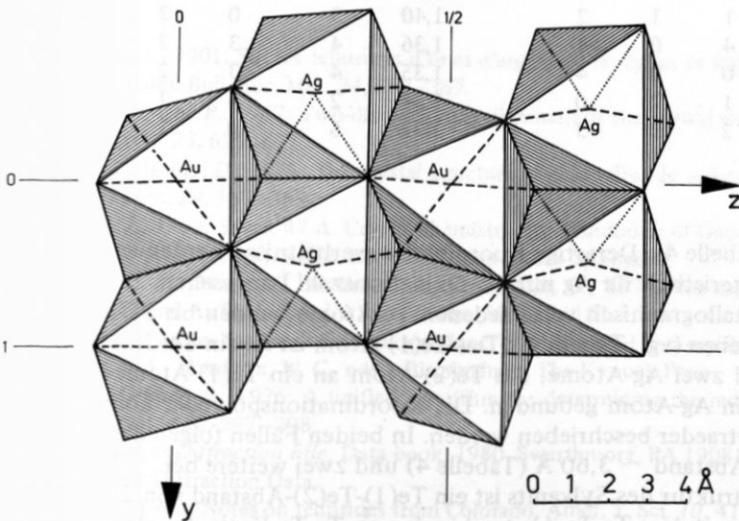


Abb. 2. Projektion einer aus kantenverknüpften AuTe_6 - und AgTe_6 -Oktaedern aufgebauten „Schicht“ normal auf (100). Die vier kürzesten Au-Te- bzw. die zwei kürzesten Ag-Te-Abstände sind strichliert, die zweitkürzesten Ag-Te-Abstände punktiert eingezeichnet

Tabelle 5. Berechnetes Röntgen-Pulver-Diffraktogramm für Sylanit ($d > 1,30 \text{ \AA}$; Debye-Scherrer-Geometrie; $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung; Reflexe mit $I_{\text{calc}} < 1,0$ sind nicht angeführt)

d_{calc}	I_{calc}	h	k	l	d_{calc}	I_{calc}	h	k	l
7,31	6	1	0	-2	1,99	2	1	2	-3
5,09	10	1	0	0	1,98	9	4	1	-6
4,48	3	0	1	0	1,97	3	0	2	2
4,20	2	2	0	-2	1,85	3	2	2	-1
4,16	1	0	0	2	1,84	1	2	1	1
3,95	3	1	1	-1	1,83	3	4	0	-8
3,94	6	0	1	1	1,79	11	3	2	-4
3,82	8	1	1	-2	1,78	1	1	2	-4
3,65	1	2	0	-4	1,75	3	2	2	-5
3,14	4	2	1	-3			3	2	-3
3,05	100	0	1	2	1,74	1	0	2	3
2,98	41	3	0	-4	1,71	8	3	0	-8
2,66	2	2	1	-1	1,70	6	3	0	0
2,48	1	3	1	-4	1,64	1	3	2	-2
2,47	1	1	1	-4	1,55	5	4	1	-2
2,39	2	3	1	-5	1,52	7	0	2	4
2,36	1	0	1	3	1,51	1	3	2	-7
2,24	14	0	2	0			0	3	0
2,16	3	0	2	1	1,49	3	6	0	-8
2,14	29	3	1	-6	1,46	1	1	3	-2
2,12	25	3	1	-2	1,41	1	2	3	-3
2,11	3	1	1	2	1,40	3	0	3	2
2,10	7	4	0	-4	1,36	4	3	2	-8
2,08	18	0	0	4	1,35	4	3	2	0
2,05	3	1	2	0	1,34	2	4	1	-10
2,00	1	2	2	-3	1,32	6	0	1	6

darstellen (vgl. Tabelle 4). Derartige Koordinationsverhältnisse werden von *Frueh* (1969) als charakteristisch für Ag mit der Oxidationszahl I angesehen.

Die zwei kristallographisch verschiedenen Te-Atome werden bis $3,5 \text{ \AA}$ von vier Atomen umgeben (vgl. Tabelle 4). Das Te(1)-Atom ist an ein Te(2)-Atom, ein Au-Atom und zwei Ag-Atome, das Te(2)-Atom an ein Te(1)-Atom, zwei Au-Atome und ein Ag-Atom gebunden. Die Koordinationspolyeder können als stark verzerrte Tetraeder beschrieben werden. In beiden Fällen folgen drei weitere Te-Nachbarn im Abstand $\sim 3,60 \text{ \AA}$ (Tabelle 4) und zwei weitere bei $\sim 3,97 \text{ \AA}$. Auffällig in der Struktur des Sylanits ist ein Te(1)-Te(2)-Abstand von $2,823(2) \text{ \AA}$ (Te_2 -Hantel), der mit dem Te-Te-Abstand in der ∞ -Te-Te-Kette des elementaren trigonalen Tellurs mit $2,835(2) \text{ \AA}$ vergleichbar ist (*Cherin und Unger, 1967*). Vergleichbare Te-Te-Abstände in Te_2 -Hanteln wurden in zwei weiteren Telluriden bestimmt: Frobergit, FeTe_2 , mit $2,93 \text{ \AA}$ und Mattagamit, CoTe_2 , ebenfalls mit $2,93 \text{ \AA}$ (*Tengnér, 1938*). In beiden Fällen handelt es sich um Strukturen des Markasit-Typs.

In Abb. 1 werden die Au- und Ag-Koordinationspolyeder als Oktaeder dar-

gestellt, d.h. es werden die Unterschiede in den einzelnen Bindungslängen graphisch nicht berücksichtigt. Die Verknüpfung dieser Oktaeder über gemeinsame Kanten ergibt gleichsam Schichten parallel (100), die über kurze Te-Te-Bindungen von 2,823(2) Å (Te₂-Hanteln) verbunden sind. Abb. 2 stellt eine dieser Schichten in Oktaederstellung in Projektion auf (100) dar. Weiters sind in jedem Polyeder die vier kürzesten Au-Te- bzw. Ag-Te-Abstände eingezeichnet. Sylvanit zeigt eine gute Spaltbarkeit normal zu [010] (vgl. *Palache et al.*, 1944). Wie aus Abb. 2 ersichtlich, werden dabei nur die längsten Au-Te- und zweitlängsten Ag-Te-Bindungen aufgebrochen.

Da in der Indizierung einiger Röntgenreflexe Divergenzen zwischen den Angaben im *Mineral Powder Diffraction File* (1980) und einem berechneten Röntgen-Pulver-Diffraktogramm bestehen, ist zur Vollständigkeit ein berechnetes, indiziertes Diffraktogramm, basierend auf der vorliegenden Strukturverfeinerung, in Tabelle 5 wiedergegeben.

Danksagung

Der Autor dankt Herrn Prof. Dr. *J. Zemann* für viele anregende Diskussionen und Herrn *F. Kluger* für die Hilfe bei den Mikrosondenmessungen, die an einem Gerät des „Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung“ (Proj. Nr. 1939) durchgeführt wurden. Rechenzeit wurde vom „Interuniversitären Rechenzentrum Wien“ zur Verfügung gestellt, die chemischen Analysen durch Mittel aus der „Hochschuljubiläumsstiftung der Stadt Wien“ ermöglicht.

Literatur

- Carnot, M. A.*, 1901: Sur les tellurures d'or et d'argent de la région de Kalgoorlie (Australie occidentale). *Bull. Soc. Min.* 24, 357–367.
- Cherin, P., Unger, P.*, 1967: Two-dimensional refinement of the crystal structure of tellurium. *Acta Cryst.* 23, 670–671.
- Fenner, J., Mootz, D.*, 1978: The crystal structure of gold telluride iodide AuTeI. *J. Solid State Chem.* 24, 367–369.
- Frueh, A. J.*, 1969: Silver. 47-A. Crystal chemistry. In: *Handbook of Geochemistry*, Vol. II/4 (*Wedepohl, K. H.*, ed.). Berlin-Heidelberg-New York: Springer.
- Haendler, H. M., Mootz, D., Rabenau, A., Rosenstein, G.*, 1974: The crystal structures of AuTe₂Cl und AuTe₂I. *J. Solid State Chem.* 10, 175–181.
- International Tables for X-ray Crystallography*, Vol. IV, revised and supplementary tables, 1974 (*Ibers, J. A., Hamilton, W. C.*, eds.). Birmingham: The Kynoch Press.
- Křivý, I., Gruber, B.*, 1976: A unified algorithm for determining the reduced (Niggli) cell. *Acta Cryst.* A32, 297–298.
- Mineral Powder Diffraction File*. Data book, 1980. Swarthmore, PA 19081, U.S.A.: International Centre for Diffraction Data.
- Palache, C.*, 1900: Notes on tellurides from Colorado. *Amer. J. Sci.* 10, 419–427.
- *Berman, H., Frondel, C.*, 1944: The system of mineralogy, Vol. I. New York: J. Wiley and Sons, Inc.
- Prewitt, C. T.*, 1966: Structure Factor Least Squares Program. (Unveröffentlicht.)
- Sheldrick, G. M.*, 1966: SHELX-76, program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.
- Slavík, F., Spencer, L. J.*, 1928: Place-names of mineral-localities in central Europe. *Min. Mag.* 21, 441–479.

- Tengnér, St.*, 1938: Über Diselenide und Ditelluride von Eisen, Kobalt und Nickel. *Z. anorg. allg. Chem.* 239, 126–132.
- Thompson, R. M.*, 1949: The telluride minerals and their occurrence in Canada. *Amer. Min.* 34, 342–382.
- Tunell, G.*, 1941: The atomic arrangement of sylvanite. *Amer. Min.* 26, 457–477.
- *Ksanda, C. J.*, 1937: The space-group and unit cell of sylvanite. *Amer. Min.* 22, 728–730.
- *Pauling, L.*, 1952: The atomic arrangement and bonds of the gold-silver ditellurides. *Acta Cryst.* 5, 375–381.
- Wells, A. F.*, 1975: Structural inorganic chemistry (4th ed.). Oxford: Clarendon Press.
- Zachariasen, W. H.*, 1967: A general theory of X-ray diffraction in crystals. *Acta Cryst.* 23, 558–564.

Anschrift des Verfassers: Doz. Dr. *F. Pertlik*, Institut für Mineralogie und Kristallographie, Universität Wien, A-1010 Wien, Österreich.