

Kristallgitters und den [110] Richtungen von (100) und (111) Silbereinkristallflächen besteht. Dieser Befund zeigt, daß die Bildung der 3D-Kristallstruktur über eine Reorganisation der unterschiedlichen 2D-Adsorbatstruktur erfolgen muß.

Untersuchungen über die Nukleations-Wachstums-Kinetik in Abhängigkeit von der kristallographischen Orientierung des Substrats und vom Bedeckungsgrad des 2D-Adsorbats bestätigen diese Vorstellung.

Literatur

1. Jüttner, K., Lorenz, W. J.: Underpotential Metal Deposition on Single Crystal Surfaces. *Z. phys. Chem. Neue Folge*, im Druck
2. Jüttner, K., Lorenz, W. J., Staikov, G., Budevski, E.: *Electrochim. Acta* **23**, 741 (1978)
3. Lorenz, W. J., Schmidt, E., Staikov, G., Bort, H.: *Faraday Symp. Chem. Soc.* **12**, 14 (1977)

P. Keller (Institut für Mineralogie und Kristallchemie), H. Hess und H. Riffel (Institut für Anorganische Chemie, Universität Stuttgart). **Die Kristallstrukturen von zwei neuen Calcium-Zink-Arsenat-Mineralen von Tsumeb/Namibia.**

Die Kristallstrukturen der beiden neuen Minerale Prosperit, $\text{Ca}_2\text{Zn}_4[\text{H}_2\text{O}](\text{AsO}_4)_4$ [1], und Gaitit, $\text{Ca}_2\text{Zn}[(\text{H}_2\text{O})_2](\text{AsO}_4)_2$ [2] wurden bestimmt. Sämtliche kristallographischen Messungen wurden mit einem rechnergesteuerten Vierkreisdiffraktometer Syntex $P2_1$ unter Verwendung von $\text{MoK}\alpha$ -Strahlung und einem Graphit-Monochromator ausgeführt. Experimentelles und die kristallographischen Daten für die Minerale sind in der Tabelle 1 enthalten.

In der Kristallstruktur von Prosperit sind die Koordinationszahlen für Calcium $KZ = 9$ und für Zink $KZ = 5$. Die Koordination des Calciums kann als ein deformiertes, kubisches Antiprisma beschrieben werden, bei dem über einer der quadratischen Flächen ein weiterer Ligand angeordnet ist (monocapped antiprism). Zwei $\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_8$ -Polyeder sind über eine Fläche zu einer Doppelgruppe verknüpft. Die Koordinationspolyeder des Zinks sind stark deformierte trigonale Bipyramiden. Zwei $\text{Zn}(2)\text{O}_5$ -Polyeder bilden eine kantenverknüpfte Doppelgruppe. An diese sind zwei $\text{Zn}(1)\text{O}_5$ -Polyeder über Ecken gebunden, so daß eine zickzackförmige Vierergruppe entsteht. Die Koordinationspolyeder der Kationen bilden ein Gerüst, aus dem sich Zickzackketten in Richtung [101] hervorheben. Sie bestehen aus den Doppelgruppen der $\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_8$ - und $\text{Zn}(2)\text{O}_5$ -Polyeder, die über Kanten verkettet sind. Schwach deformierte AsO_4 -Tetraeder und Wasserstoffbrückenbindungen verdichten die Gerüststruktur.

Die Kristallstruktur von Gaitit ist isotyp mit Talmessit, $\text{Ca}_2\text{Mg}[(\text{H}_2\text{O})_2](\text{AsO}_4)_2$ [3]. Die Koordinationszahlen sind für Calcium

Tabelle 1. Experimentelles und Kristalldaten für Prosperit, $\text{Ca}_2\text{Zn}_4[\text{H}_2\text{O}](\text{AsO}_4)_4$, und Gaitit, $\text{Ca}_2\text{Zn}[(\text{H}_2\text{O})_2](\text{AsO}_4)_2$

Raumgruppe	Prosperit $C2/c$	Gaitit $P\bar{1}$
a [pm]	1923,8(2)	557,8(1)
b [pm]	773,1(1)	589,9(1)
c [pm]	976,5(1)	689,0(1)
α [°]	–	108,06(1)
β [°]	104,47(1)	97,38(1)
γ [°]	–	109,07(1)
Z	4	1
D (ber.) g/cm^3	4,32	3,82
Zahl d. Reflexe (gem.)	2055	1451
Zahl d. Reflexe (beob.)	1528	1370
Verfeinerung mit anisotropen Temperaturfaktoren		
R_1	0,034	0,040
R_2	0,026	0,057

$KZ = 8$ und für Zink $KZ = 6$. Die $\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})\text{O}_7$ -Polyeder sind untereinander über drei Kanten zu weitmaschigen Netzen nach $(0\bar{1}1)$ verknüpft. Die schwach deformierten $\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_2\text{O}_4$ -Oktaeder verbinden diese Schichten zu einem Gerüst aus Kationen-Koordinationspolyedern. Die AsO_4 -Tetraeder sind auffallend stark deformiert. Bemerkenswert sind außerdem die besonders kräftigen Wasserstoffbrückenbindungen mit Bindungsabständen von $\text{H}_2\text{O}-\text{O}(4) = 257,5$ [pm] bzw. $\text{H}_2\text{O}-\text{O}(4)' = 261,5$ [pm].

Literatur

1. Gait, R. I., Sturman, B. D., Dunn, P. J.: Canad. Miner. **17**, 87–92 (1979)
2. Sturman, B. D., Dunn, P. J.: Canad. Miner. **18**, 197–200 (1980)
3. Catti, M., Ferraris, G., Ivaldi, G.: Bull. Soc. fr. Minér. Cristallogr. **100**, 230–236 (1977)

A. Kirfel und G. Will (Mineralogisches Institut der Universität Bonn).
Dynamische und statische Deformationsdichten in Anhydrit, CaSO_4 .

Zur Untersuchung der chemischen Bindung, insbesondere in $[\text{SO}_4]^{2-}$, wurden an natürlichen Anhydritkristallen (CaSO_4 , $a = 7,006(1)$ Å, $b = 6,998(1)$ Å, $c = 6,245(1)$ Å, Raumgruppe *Amma*) bei Raumtemperatur Röntgen- ($s_{\text{max}} = 1,08$ Å⁻¹) und Neutronenbeugungsexperimente ($s_{\text{max}} = 1,01$ Å⁻¹) durchgeführt. Neben den konventionellen Strukturverfeinerungen mit beiden Datensätzen wurden die Röntgenreflexdaten zusätzlich verwendet zu: