

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  $\text{AsO}_4$ -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<br>$C2/c$ | Gaitit<br>$P\bar{1}$ |
|---|---------------------|----------------------|
| $a$ [pm]  | 1923,8(2)           | 557,8(1)             |
| $b$ [pm]  | 773,1(1)            | 589,9(1)             |
| $c$ [pm]  | 976,5(1)            | 689,0(1)             |
| $\alpha$ [°]                                    | –                   | 108,06(1)            |
| $\beta$ [°]                                     | 104,47(1)           | 97,38(1)             |
| $\gamma$ [°]                                    | –                   | 109,07(1)            |
| $Z$   | 4                   | 1                    |
| $D$ (ber.) $\text{g/cm}^3$                      | 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  $\text{AsO}_4$ -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,  $\text{CaSO}_4$ .**

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