Zur Metallverteilung in $\text{SrFe}_7\text{Al}_5\text{O}_{19}$

The Atomic Distribution in $\text{SrFe}_7\text{Al}_5\text{O}_{19}$

H. PAUSCH und Hk. MÜLLER-BUSCHBAUM

Institut für Anorganische Chemie
der Christian-Albrechts-Universität Kiel

(Z. Naturforsch. **31b**, 1148 [1976]; eingegangen am 10. Mai 1976)

Crystal Structure, Atomic Distribution

Single crystals of $\text{SrO} \cdot 3,5 \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 2,5 \text{Al}_2\text{O}_3$ were prepared and investigated by X-ray diffraction. The atomic distribution differs from former investigations of magnetoplumbite compounds.

Verbindungen der Zusammensetzung $\text{SrO} \cdot 6 \text{Me}_2\text{O}_3$ ($\text{Me}_2\text{O}_3 = \text{Fe}_2\text{O}_3, \text{Al}_2\text{O}_3, \text{Ga}_2\text{O}_3, \text{Cr}_2\text{O}_3$) gehören zur Verbindungsklasse der Magnetoplumbite¹. Zur gleichen Kristallstruktur gehören ebenfalls Verbindungen mit CaO bzw. BaO und gemischter Zusammensetzung im Me_2O_3 -Anteil² (z. B.:

$\text{BaO} \cdot 5 \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$; $\text{BaO} \cdot 3 \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 3 \text{Ga}_2\text{O}_3$). Bei den gemischt zusammengesetzten Magnetoplumbitvarianten interessiert die Verteilung der dreiwertigen Metalle auf die im Magnetoplumbit vorgegebenen Punktlagen (vgl. Tab. I).

Nach Untersuchungen von BERTAUT² verteilen sich die dreiwertigen Metallionen nicht generell statistisch auf die in Tab. I angegebenen Punktlagen, sondern zeigen bei den aluminiumhaltigen Magnetoplumbitvarianten (z. B. $\text{BaO} \cdot 5 \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$) eine teilweise geordnete Verteilung: Al in 2a, Fe in 2b, 4f_I, 4f_{II} und 2 Al + 10 Fe in 12k. Die zitierte Arbeit zeigt weiter, daß Al bevorzugt die Punktlage 2a geordnet, die Punktlage 12k partiell

Tab. I. Parameter für Me^{3+} im Magnetoplumbit (1).
Raumgruppe D_{6h}^{4h} -P 6₃/mmc.

Punktlage	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
2a	0,0	0,0	0,0
2b	0,0	0,0	0,250
4f _I	0,333	0,666	0,028
4f _{II}	0,333	0,666	0,189
12k	0,167	0,334	0,892

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. Hk. MÜLLER-BUSCHBAUM, Institut für anorganische Chemie der Universität Olshausenstraße 40–60, Haus 22 und 21, D-2300 Kiel.

statistisch besetzt. Bei steigendem Al-Anteil

($\text{BaO} \cdot 3 \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 3 \text{Al}_2\text{O}_3$) wird zusätzlich 4f_I von Al mitbesetzt.

Bei der Untersuchung einer Verbindung der Zusammensetzung $\text{SrO} \cdot 3,5 \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 2,5 \text{Al}_2\text{O}_3$ (Gitterkonstanten: $a = 571,4$, $c = 2278,4$ pm) wurde die bevorzugte Besetzung der Punktlage 2a durch Aluminium nicht gefunden. Die an 460 symmetrieunabhängigen Reflexen vorgenommene Einkristalluntersuchung (Vierkreisdiffraktometer PHILIPS PW 1100) zeigt bei einem Gütefaktor von $R = 0,07$ die in Tab. II aufgeführte Atomverteilung³.

Der charakteristische Unterschied zur vergleichbaren Verbindung $\text{BaO} \cdot 3 \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 3 \text{Al}_2\text{O}_3$ besteht darin, daß Al^{3+} in der hier untersuchten Verbindung nicht die scheinbar für Al^{3+} typische Punktlage 2a sondern die Punktlage 2b besetzt. In 2a befindet sich Fe^{3+} , was bei den Bariumverbindungen von BERTAUT nie beobachtet wurde. Eine Betrachtung der Koordinationspolyeder (4f_I = Tetraeder; 2a, 4f_{II}, 12k = Oktaeder, 2b = trigonale Bipyramide) zeigt, daß die hier gefundene Metallverteilung (Fe^{3+} im Oktaeder (2a), Al^{3+} in trigonaler Bipyramide (2b)) mit der Polyedergröße der Koordinationszahl und den Abständen harmonisiert. Fe^{3+} (in 2a) besitzt 6 O²⁻-Nachbarn im Abstand von 184 pm, Al^{3+} (in 2b) 3 O²⁻-Nachbarn im Abstand 177 pm und zwei deutlich weitere (Spitze und Fuß der trigonalen Bipyramide) mit 246 pm.

Tab. II. Parameter für $\text{SrFe}_7\text{Al}_5\text{O}_{19}$,
Raumgruppe D_{6h}^{4h} -P 6₃/mmc.

Atomart	Punktlage	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Sr	(2d)	0,333	0,666	0,750
Fe	(2a)	0,0	0,0	0,0
Al	(2b)	0,0	0,0	0,250
3 Fe/Al	(4f _I)	0,333	0,666	0,027
Fe	(4f _{II})	0,333	0,666	0,187
5 Fe/7 Al	(12k)	0,168	0,337	0,895
O	(4e)	0,0	0,0	0,142
O	(4f)	0,333	0,666	0,945
O	(6h)	0,179	0,358	0,250
O	(12k)	0,146	0,292	0,050
O	(12k)	0,509	1,018	0,147

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danken wir für die Unterstützung mit wertvollen Sachmitteln.

¹ V. ADELSKÖLD, Ark. Kemi **12**, 29 [1938].

² E. F. BERTAUT, A. DESCHAMPS, R. PAUTHENET u. S. PICKART, J. Phys. Rad. **2**, 404 [1959].

³ H. PAUSCH, Dissertation Kiel 1976.