

### 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 Magnetoplumbite<sup>1</sup>. Zur gleichen Kristallstruktur gehören ebenfalls Verbindungen mit  $\text{CaO}$  bzw.  $\text{BaO}$  und gemischter Zusammensetzung im  $\text{Me}_2\text{O}_3$ -Anteil<sup>2</sup> (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 BERTAUT<sup>2</sup> 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<sub>I</sub>, 4f<sub>II</sub> 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  $\text{Me}^{3+}$  im Magnetoplumbit (1).  
Raumgruppe  $D_{6h}^4$ -P  $6_3/\text{mmc}$ .

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 <sub>I</sub>	0,333	0,666	0,028
4f <sub>II</sub>	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<sub>I</sub> 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 Atomverteilung<sup>3</sup>.

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  $\text{Al}^{3+}$  in der hier untersuchten Verbindung nicht die scheinbar für  $\text{Al}^{3+}$  typische Punktlage 2a sondern die Punktlage 2b besetzt. In 2a befindet sich  $\text{Fe}^{3+}$ , was bei den Bariumverbindungen von BERTAUT nie beobachtet wurde. Eine Betrachtung der Koordinationspolyeder (4f<sub>I</sub> = Tetraeder; 2a, 4f<sub>II</sub>, 12k = Oktaeder, 2b = trigonale Bipyramide) zeigt, daß die hier gefundene Metallverteilung ( $\text{Fe}^{3+}$  im Oktaeder (2a),  $\text{Al}^{3+}$  in trigonaler Bipyramide (2b)) mit der Polyedergröße der Koordinationszahl und den Abständen harmonisiert.  $\text{Fe}^{3+}$  (in 2a) besitzt 6 O<sup>2-</sup>-Nachbarn im Abstand von 184 pm,  $\text{Al}^{3+}$  (in 2b) 3 O<sup>2-</sup>-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  $D_{6h}^4$ -P  $6_3/\text{mmc}$ .

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 <sub>I</sub> )	0,333	0,666	0,027
Fe	(4f <sub>II</sub> )	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.

<sup>1</sup> V. ADELSKÖLD, Ark. Kemi **12**, 29 [1938].

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

<sup>3</sup> H. PAUSCH, Dissertation Kiel 1976.