



Doctoral Thesis

## Die Tiefquarz-Modifikation von ALPO-4

**Author(s):**

Schwarzenbach, Dieter

**Publication Date:**

1965

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000133917> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Prom. Nr. 3708

# Die Tiefquarz-Modifikation von $\text{AlPO}_4$

Von der  
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN  
HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung  
der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften  
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von  
DIETER SCHWARZENBACH  
dipl. Naturwissenschaftler ETH  
von Horgen (Kt. Zürich)

Referent: Herr Prof. Dr. F. Laves  
Korreferent: Herr Prof. Dr. A. Niggli

Juris-Verlag Zürich  
1965

XIV. Zusammenfassung

Die Struktur der Tiefquarz-Modifikation von  $\text{AlPO}_4$  wurde genau bestimmt und mit 539 unabhängigen Reflexen zu einem R-Wert von 4.6 % verfeinert. Die Intensitätsmessungen wurden an verschiedenen unverzwilligten Kristallkugeln ausgeführt, die aus einem künstlichen Einkristall geschnitten wurden. Die Strukturfaktoren wurden unter Berücksichtigung von Extinktionseffekten und anomaler Streuung gewonnen. Mittels der anomalen Streuung wurde die absolute Konfiguration bestimmt. Zu den Strukturfaktoren wurden möglichst zuverlässige statistische Streuungen ermittelt. Die Verfeinerung mit der "Least-squares"-Methode wurde mit auf diesen Streuungen basierenden Gewichten sowie mit Einheitsgewichten und mit dem Hughes'schen Gewichtssystem durchgeführt, wobei sich nur wenig verschiedene Resultate ergaben. Die Strukturbeschreibung lautet:

Raumgruppe $P3_121$	$Z = 3$	
$a = 4.94291 \pm .00016$	$c = 10.94761 \pm .00046$	$c/a = 2.21481 \pm .00012$
3 Al in (a): $x \ 0 \ \frac{1}{3}, \ 0 \ x \ \frac{2}{3}, \ \bar{x} \ \bar{x} \ 0$		$x = .4664 \pm .0002$
3 P in (b): $x \ 0 \ \frac{5}{6}, \ 0 \ x \ \frac{1}{6}, \ \bar{x} \ \bar{x} \ \frac{1}{2}$		$x = .4669 \pm .0002$
6 O1 in (c): $x \ y \ z, \ \bar{y} \ x-y \ \frac{1}{3}+z, \ y-x \ \bar{x} \ \frac{2}{3}+z$ $y \ x \ \bar{z}, \ \bar{x} \ y-x \ \frac{1}{3}-z, \ x-y \ \bar{y} \ \frac{2}{3}-z$		
$x = .4165 \pm .0005$	$y = .2918 \pm .0005$	$z = .3982 \pm .0001_4$
6 O2 in (c): $x = .4169 \pm .0005$	$y = .2569 \pm .0004$	$z = .8833 \pm .0001_5$

Die Analogie zum Tiefquarz erwies sich als nahezu vollkommen. Die physikalischen Eigenschaften, die Zwillingsgesetze, die absolute Konfiguration und ihre Beziehung zur optischen Aktivität, die Verzerrungen der Sauerstofftetraeder und die thermischen Schwingungen der Atome entsprechen den Gegebenheiten bei Quarz. Die beiden kristallographisch unabhängigen Sauerstofflagen erwiesen sich als chemisch äquivalent. Die Bindungslängen Al-O und P-O stimmen gut mit den in der Literatur angegebenen Werten überein. Der Al-O-Abstand könnte als Richtwert für zu erwartende Bindungslängen in Gerüst-Alumosilikaten verwendet werden, analog der Verwendung des bei Quarz gefundenen Si-O-Abstandes.

Die P-O-Bindung ist stärker kovalent als die Al-O-Bindung. Die Struktur wird daher durch Al und die Gruppierung  $\text{PO}_4$  aufgebaut und lässt sich als Inselstruktur auffassen.