

ÜBER DIE GITTERDIMENSIONEN DES ZINKOXYDS UND DAS ACHSEN-VERHÄLTNIS DES ZINKITS.

VON
TOM. BARTH

Auf Veranlassung des Herrn Professor Dr. V. M. GOLDSCHMIDT habe ich die Gitterdimensionen des Zinkoxyds neu ermittelt. Denn obwohl das Zinkoxyd bereits sehr früh mittels Röntgenstrahlen untersucht wurde, und auch seine Struktur eher als die der meisten anderen Verbindungen festgelegt wurde, so hat doch in den letzten Jahren die Zahl der Verbindungen, deren Gitterdimensionen *genau* ermittelt sind, so rasch zugenommen, dass jetzt auch für die Gitterdimensionen des Zinkoxyds eine Revision erwünscht erschien.

Es ist ja einleuchtend, dass die Berechnungen gewöhnlicher Debye-Scherrer-Diagramme, insbesondere der nicht regulären Kristallarten, nicht mit grosser Genauigkeit durchführbar sind.

Wenn man aber nach der Methode von WYCKOFF¹ verfährt, bei welcher die betreffende Substanz mit etwas Natriumchlorid fein verrieben wird, damit die Kantenlänge des Elementarwürfels von Natriumchlorid als Standard dienen kann, erhält man viel genauere Werte.

Indem nach diesem Verfahren vorgegangen wurde, erhielt ich die folgenden Zahlen für die Dimensionen des hexagonalen Elementarparallelepipeds:

$$a_0 = 3,242 \cdot 10^{-8} \text{ cm}; \quad c_0 = 5,176 \cdot 10^{-8} \text{ cm}.$$

Die älteren Berechnungen von Pulverdiagrammen des Zinkoxyds führten zu den folgenden Zahlen:

¹ R. W. G. WYCKOFF, Zeitschr. f. Krist. 59, 55, (1923).

$a_0 = 3,246\text{Å}$; $c_0 = 5,219\text{Å}$, (Kristalle von Franklin Furnace, WEBER¹.)

$a_0 = 3,220\text{Å}$; $c_0 = 5,211\text{Å}$ (AMINOFF²).

Tabelle 1. Zinkoxyd.
Kupferstrahlung Cu K α = 1,539 Å.

Indizes	φ	
	beob.	berechn.
0002	17° 16'	17° 18'
10 $\bar{1}$ 1	18° 15'	18° 10'
10 $\bar{1}$ 2	23° 47'	23° 51'
11 $\bar{2}$ 0	28° 19'	28° 20'
10 $\bar{1}$ 3	31° 33'	31° 34'
11 $\bar{2}$ 2	34° 3'	34° 3'
2021	34° 36'	34° 35'
2 $\bar{0}$ 22	38° 36'	38° 36'
2023	44° 58'	44° 58'
2130	46° 28'	46° 28'
2131	47° 46'	47° 45'

$a_0 = 3,242\text{ Å}$, $c_0 = 5,176\text{ Å}$.

Obenstehende Tabelle enthält die beobachteten und berechneten Glanzwinkel der Strukturflächen von ZnO. Die Aufnahme der Debye-Scherrer-Diagramme und der Gang der Berechnung sind in früheren Arbeiten beschrieben. (z. B. Zeitschr. physik. Chemie 121, 78, 1926) Als Strahlungsquelle diente eine *Hadding-Siegbahn*sche Metallröntgenröhre mit Kupferantikathode. Als Vergleichsubstanz wurde Stassfurter Steinsalzkristalle verwendet.

Das Achsenverhältnis des Zinkits war nicht eindeutig bestimmt, denn wie eine Einsichtnahme in die betreffende Literatur zeigt, führen die Winkelmessungen der verschiedenen Forscher zu Achsenverhältnissen die unter einander ziemlich grosse Variationen aufweisen. Diese Nichtübereinstimmung ist, wie es scheint, erstens dadurch bedingt, dass gut ausgebildete Kristalle des Zinkits schwer zu erhalten sind, zweitens bestehen diese Kristalle selten oder nie ausschliesslich aus reinem ZnO, indem sie immer eine Beimischung von MnO und FeO, (meistens auch von anderen Substanzen) enthalten.

¹ L. WEBER, Zeitschr. f. Krist. 57, 393, (1922).

² G. AMINOFF, Zeitschr. f. Krist. 57, 204, (1922).

Zuerst hat nun RINNE¹ einen bräunlich gefärbten Kristall, der aus Hohofenschlacken isoliert war, gemessen. Später hat TRAUBE² mehrere Kristalle (alle aus Hohofenschlacken) untersucht. Immer fand er aber für die verschiedenen Kristalle sehr verschiedene Werte des Achsenverhältnisses. An dieser Stelle sei nur erwähnt, dass die Ausmessung eines wasserhellen Kristalls, der sich nach einer chemischen Untersuchung als vollkommen rein erwies, zu dem Verhältnis $c/a = 1,6077$ führte; diese Zahl ist in vielen Hand- und Lehrbüchern (z. B. DANA'S Mineralogie und GROTH'S Kristallographie) angeführt.

Für den natürlich vorkommenden Zinkit von Franklin Furnace fand jedoch PALACHE³ das Verhältnis $c/a = 1,5870$. Da aber die Analysen der Zinkite von Franklin Furnace immer ca. 3—6% MnO zeigen, so musste TRAUBE'S Messung die zuverlässigste bleiben, wenn es sich um den *reinen* Zinkit handelt.

Nach der vorliegenden Röntgenuntersuchung ist aber das Achsenverhältnis des reinen Zinkits

$$c/a = 1,596 \pm 0,004;$$

denn diese Messungen sind an chemisch reiner Substanz (ZnO, pro anal., Merck) ausgeführt, und es ist somit wahrscheinlich, dass dieses Material noch reiner gewesen ist als TRAUBES wasserhelle Kristall der Hohofenschlacke.

¹ FR. RINNE, Neues Jahrb. f. Min. etc. 1884, 2, 164.

² H. TRAUBE, Neues Jahrb. f. Min. etc. 1894 B. Bd. 9, 147.

³ CH. PALACHE, Am. Jour. Science 29, 177, (1910).

Mineralogisches Institut der Universität

Oslo 31. Januar 1927.