

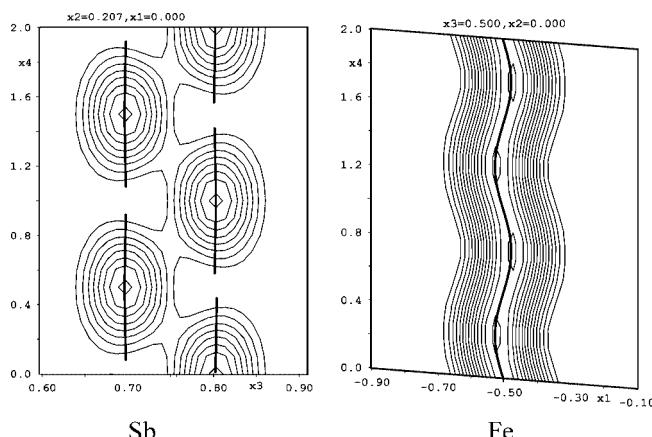
# Die incommensurabel modulierten Strukturen von $\text{FeSbS}_2\text{Cl}$ und $\text{FeSbSe}_2\text{Br}$

Michael F. Bräu, Franz Rau, Arno Pfitzner\*

Universität Regensburg, Institut für anorganische Chemie,  
Universitätsstr. 31, D-93040 Regensburg

**Keywords:** modulated crystal structure

Im System  $MPnQ_2X$  ( $M = \text{Mn, Cd}$ ;  $Pn = \text{Sb, Bi}$ ;  $Q = \text{S, Se}$ ;  $X = \text{Cl, Br, I}$ ) sind einige Verbindungen bekannt, die interessante magnetische Eigenschaften aufweisen [1–3]. Sie kristallisieren in den Raumgruppen  $C2/m$  bzw.  $Pnma$ . Ihnen allen gemeinsam ist der Aufbau aus Oktaedern  $MQ_6$  und  $MQ_2X_4$  bzw.  $MQ_4X_2$ , die über Kanten zu Strängen verknüpft sind. Die Pnictide verbinden die Stränge über kovalente  $Pn-Q$ -Bindungen.



**Abb. 1** Berechnete Elektronendichtekarten um Sb und Fe in  $\text{FeSbS}_2\text{Cl}$ . Die dicken Linien repräsentieren die Atomlagen und deren Besetzung. Die Antimonlage ist besetzungsmoduliert, während die Eisenposition lagemoduliert ist.

Wir berichten über zwei neue Verbindungen in diesem System mit  $M = \text{Fe}$ ,  $\text{FeSbS}_2\text{Cl}$  und  $\text{FeSbSe}_2\text{Br}$ . Im Beugungsbild treten bei beiden Verbindungen Satellitenreflexe in  $a^*$ -Richtung auf. Mit dem  $q$ -Vektor  $(0.153, 0, 0)$  für  $\text{FeSbS}_2\text{Cl}$  bzw.  $(0.116, 0, 0)$  für  $\text{FeSbSe}_2\text{Br}$  lassen sich alle Reflexe indizieren. Die Verfeinerung in der eindimensional incommensurabel modulierten Raumgruppe  $Cmcm(a00)0ss$  (Nr. 422 [4]) führt zu den  $R$ -Werten für  $R1 = 0.021$ ,  $wR2 = 0.054$  ( $\text{FeSbS}_2\text{Cl}$ , alle Haupt- und Satellitenreflexe) und  $R1 = 0.039$ ,  $wR2 = 0.076$  ( $\text{FeSbSe}_2\text{Br}$ , alle Haupt- und Satellitenreflexe).

- [1] L. Wang, Y. Hung, S. Hwu, H. Koo, M.-H. Whangbo, *Chem. Mater.* **2006**, *18*, 1219.
- [2] C. Doussier, G. André, P. Léone, E. Janod, Y. Moëlo, *J. Solid State Chem.* **2006**, *179*, 486.
- [3] A. Pfitzner, M. Zabel, F. Rau, Z. *Anorg. Allg. Chem.* **2005**, *631*, 1439.
- [4] A. Yamamoto, *Acta Cryst.* **1996**, *A52*, 509.