

DOI: 10.1002/zaac.200670086

Die inkommensurabel modulierten Strukturen von FeSbS_2Cl und FeSbSe_2Br

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.

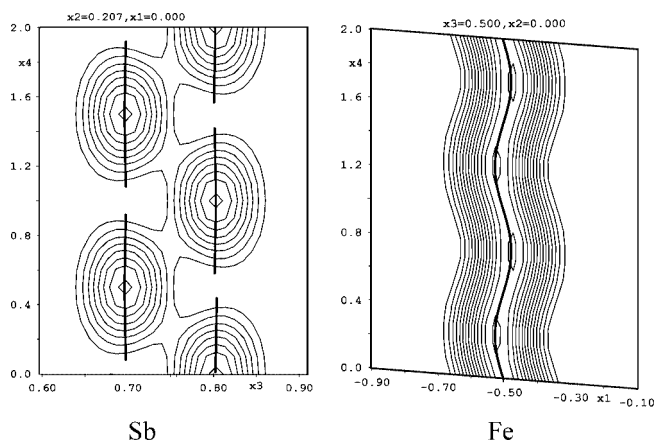


Abb. 1 Berechnete Elektronendichtekarten um Sb und Fe in FeSbS_2Cl . Die dicken Linien repräsentieren die Atomlagen und deren Besetzung. Die Antimonlage ist besetzungsmoduliert, während die Eisenposition lagemoduliert ist.

Wir berichten über zwei neue Verbindungen in diesem System mit $M = \text{Fe}$, FeSbS_2Cl und FeSbSe_2Br . Im Beugungsbild treten bei beiden Verbindungen Satellitenreflexe in a^* -Richtung auf. Mit dem q -Vektor $(0.153, 0, 0)$ für FeSbS_2Cl bzw. $(0.116, 0, 0)$ für FeSbSe_2Br lassen sich alle Reflexe indizieren. Die Verfeinerung in der eindimensional inkommensurabel modulierten Raumgruppe $Cmcm(a00)0ss$ (Nr. 422 [4]) führt zu den R -Werten für $R1 = 0.021$, $wR2 = 0.054$ (FeSbS_2Cl , alle Haupt- und Satellitenreflexe) und $R1 = 0.039$, $wR2 = 0.076$ (FeSbSe_2Br , 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.