

DOI: 10.1002/zaac.200670082

Nichtharmonische Strukturverfeinerung an ionenleitenden Silbermineralien

Michael Leitl, Arno Pfitzner*

Institut für Anorganische Chemie, Universität Regensburg,
Universitätsstraße 31, D-93040 Regensburg

Keywords: Pyrargyrite; Stephanite; Pearceite; Ionic conductivity; Impedance spectroscopy; Non-harmonic refinement

Silbermineralien sind für ihre interessanten strukturellen und physikalischen Eigenschaften bekannt. Ag_3SbS_3 und Ag_3AsS_3 [1, 2] zum Beispiel sind beide Halbleiter und gute Ionenleiter. Einige dieser Mineralien errangen technisches Interesse durch ihre interessanten Eigenschaften im Bereich der optischen Anwendungen. So ist Ag_3AsS_3 bekannt dafür, dass es gute nichtlinear-optische Eigenschaften besitzt.

Viele Silbermineralien wurden bisher nur unzureichend strukturell charakterisiert, da die Beschreibung der Silberverteilung mittels anisotroper Auslenkungsparameter in ionenleitenden Verbindungen oft kein befriedigendes Ergebnis liefert. Ein Beispiel hierfür geben Evain et al. [3]. Um die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen für diese ionenleitenden Verbindungen besser verstehen zu können, wurden die Kristallstrukturen von synthetischem Pyrargyrit Ag_3SbS_3 (Abb. 1), natürlichem Stephanit Ag_5SbS_4 (Leihgabe der Mineralogischen Staatssammlung München, Sammlungsnummer 51164) und synthetischem Pearceit $(\text{Ag}_{1-x}\text{Cu}_x)_{16}\text{As}_2\text{S}_{11}$ ($x = 0.26, 0.32$) unter Verwendung nichtharmonischer Auslenkungsparameter verfeinert und mit den Ergebnissen impedanzspektroskopischer Untersuchungen (Abb. 2) in Beziehung gesetzt.

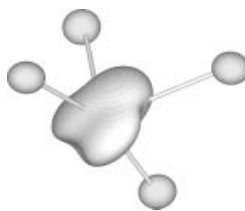


Abb. 1 AgS_4 -Einheit in der Kristallstruktur von Ag_3SbS_3 ($(\text{Ag}_{1-x}\text{Cu}_x)_{16}\text{As}_2\text{S}_{11}$)

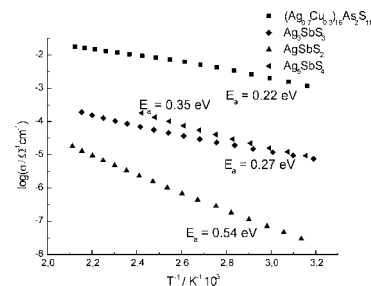


Abb. 2 Leitfähigkeiten von Myrargyrit AgSbS_2 , Pyrargyrit Ag_3SbS_3 , Stephanit Ag_5SbS_4 und Pearceit $(\text{Ag}_{1-x}\text{Cu}_x)_{16}\text{As}_2\text{S}_{11}$

- [1] P. Engel, W. Nowacki, *Neues Jahrb. Mineral. Mh.* **1966**, 181.
 [2] K. A. Schönau, S. A. T. Redfern, *J. Appl. Phys.* **2002**, 92, 7415.
 [3] M. Evain, E. Gaudin, F. Boucher, V. Petricek, F. Taulelle, *Acta Cryst. B*, **1998**, 54, 376.