

<https://doi.org/10.46861/bmp.32.054>

PŮVODNÍ PRÁCE/ORIGINAL PAPER

Minerály skupiny neustädtelitu z Jáchymova v Krušných horách (Česká republika)

Neustädtelite group minerals from Jáchymov in the Krušné hory Mts. (Czech Republic)

JIŘÍ SEJKORA^{1)*}, PAVEL ŠKÁCHA²⁾¹⁾ A JAKUB PLÁŠIL³⁾

¹⁾Mineralogicko-petrologické oddělení, Národní muzeum, Cirkusová 1740, 193 00 Praha 9 - Horní Počernice;
*e-mail: jiri.sejkora@nm.cz

²⁾Hornické muzeum Příbram, nám. Hynka Kličky 293, 261 01 Příbram VI

³⁾Fyzikální ústav AV ČR v.v.i., Na Slovance 2, 182 00 Praha 8

SEJKORA J, ŠKÁCHA P, PLÁŠIL J (2024) Minerály skupiny neustädtelitu z Jáchymova v Krušných horách (Česká republika). Bull Mineral Petrolog 32(1): 54-60 ISSN 2570-7337

Abstract

Neustädtelite and not-yet approved Zn-analogue of neustädtelite (*Zn-neustädtelite*) were found in material from the Geister vein, western part of the Jáchymov ore district, the Krušné hory Mts., Czech Republic. Neustädtelite occurs as orange brown crystalline aggregates in association with walpurgite, bismutite, eulytine, preisingerite and zavaritskite. It is triclinic, space group *P*-1, the unit-cell parameters refined from X-ray powder diffraction data are: *a* 4.551(2), *b* 6.134(4), *c* 9.024(5) Å, α 95.26(6)°, β 99.40(4)°, γ 92.89(5)° and *V* 246.9(2) Å³. Chemical analyses of neustädtelite correspond to the empirical formula $\text{Bi}_{1.89}\text{Fe}_{1.00}(\text{Fe}_{0.53}\text{Al}_{0.19}\text{Zn}_{0.15}\text{Ni}_{0.04}\text{Co}_{0.03}\text{Pb}_{0.02})_{\Sigma 0.96}\text{O}_{1.72}(\text{OH})_{1.77}[(\text{AsO}_4)_{1.76}(\text{PO}_4)_{0.13}(\text{SiO}_4)_{0.11}]_{\Sigma 2.00}$ on the basis of $\text{As}+\text{P}+\text{Si} = 4$ apfu. *Zn-neustädtelite* occurs as brownish red spherical crystalline aggregates, formed by tiny tabular crystals in association with atelestite, eulytine, walpurgite and preisingerite. It is triclinic, space group *P*-1, with the unit-cell parameters refined from X-ray powder diffraction data: *a* 9.175(6), *b* 6.150(2), *c* 9.407(4) Å, α 83.52(3)°, β 70.59(4)°, γ 86.94(4)° and *V* 497.4(5) Å³. Chemical analyses of *Zn-neustädtelite* correspond to the empirical formula $(\text{Bi}_{1.96}\text{Ca}_{0.04})_{\Sigma 2.00}\text{Fe}_{1.00}(\text{Zn}_{0.37}\text{Fe}_{0.22}\text{Ni}_{0.21}\text{Co}_{0.15}\text{Pb}_{0.03}\text{Cu}_{0.02})_{\Sigma 1.00}\text{O}_{1.23}(\text{OH})_{2.73}[(\text{AsO}_4)_{1.92}(\text{PO}_4)_{0.06}(\text{SiO}_4)_{0.02}]_{\Sigma 2.00}$ calculated based on the sum of $\text{As}+\text{P}+\text{Si}+\text{V} = 2$ apfu.

Key words: neustädtelite, Zn-analogue of neustädtelite, supergene minerals, Raman spectroscopy, Geister vein, Jáchymov, Krušné hory Mts., Czech Republic

Obdrženo 19. 4. 2024; přijato 25. 6. 2024

Úvod

Neustädtelit a kobaltneustädtelit byly popsány jako nové minerální druhy z haldového materiálu dolu Güldener Falk u Schneebergu - Neustädtelu v Sasku (SRN), kde vystupují v asociaci s preisingeritem, limonitem, goethitem, mixitem, zeuneritem a bismutitem (Krause et al. 2002). Jedná se o Fe³⁺ a Co²⁺ analogy minerálu medenbachitu, již dříve popsaného z lokality Borstein u Reichenbachu v Hessensku, SRN (Krause et al. 1996). Neustädtelit patří k relativně vzácným minerálním druhům, přesto je řada jeho výskytů uváděna z Německa a zjištěn byl i na lokalitách ve Španělsku a Velké Británii (<https://www.min-dat.org/min-11011.html>). V České republice byl výskyt neustädtelitu v jáchymovském rudním revíru zmíněn v knize Škáchy et al. (2019), ale bez uvedení jakýchkoliv analytických dat. V rámci systematického výzkumu supergenních minerálů z českých lokalit byl v jáchymovském materiálu zjištěn vedle neustädtelitu i jeho pravděpodobný Zn analog; komplexní popis obou minerálů je obsahem tohoto příspěvku.

Charakteristika výskytu a studovaných vzorků

Jáchymovský rudní revír v Krušných horách (cca 20 km severně od Karlových Varů, Česká republika) je klasickým příkladem hydrotermální mineralizace žilné-

ho typu Ag+As+Co+Ni+Bi a U. Rudní žíly tu prostupují komplex středně metamorfovaných sedimentárních hornin kambriického až ordovického stáří v plášti variského granitového plutonu. Většina rudních minerálů vznikla během variské mineralizační epochy z mezotermálních až epitermálních fluid (Ondruš et al. 2003a,b,d). Primární a supergenní mineralizace jsou v jáchymovském revíru mimořádně pestré; dosud je odtud známo více než 440 minerálních druhů (Ondruš et al. 1997a,b, 2003c,d; Hloušek et al. 2014; Škáchy et al. 2019).

Dušní žíla (něm. Geister gang) nalézající se v západní části revíru, se odštěpuje od Meridionálního zlomu, který je pokračováním Centrálního zlomu (Pittauerová 2002). Severně od jámy Rovnost I pak na styku s tělesem čedičových tufů mění směr na 10 - 20°, ztrácí na mocnosti a mizí. Na svrchních patrech je úklon žíly směrem k západu ležatější (kolem 50°), na spodních patrech strmější (70 - 80°). Mocnost žíly kolísá mezi 5 cm - 1 m, mocnost mineralizovaných úseků se pohybuje kolem 10 cm. Žíla má řadu odžilků (Mrňa 1960; Macourek, Čumrda 1963). Podle morfologických a strukturních zvláštností je žíla Geister klasifikovaná jako žíla typu drcené zóny s nestálou mocností (Hloušek 2016). Mineralogicky je známá především jako naleziště velmi pestré asociace supergenních minerálů na historických odvalech a v důlních dílech 300 - 500

m jižně od dolu Rovnost I. Minerály skupiny neustädtelitu zde byly zjištěny na dvou typech vzorků.

Neustädtelit byl zjištěn na vzorku sbíraném pravděpodobně v 70. letech 20. století bez uvedené bližší lokalizace. Jako místo nálezu byla původně uvažována halda dolu Zimní Eliáš (Škácha et al. 2019). Po podrobnější revizi bylo zjištěno, že jde pravděpodobně o materiál ze žíly Geister, obdobně jako v případě dalších popisovaných vzorků s minerály neustädtelitové skupiny. Neustädtelit zde tvoří poměrně nenápadné oranžovo-hnědavé krystalické agregáty o velikosti do 0.3 mm, složené z tabulkovitých krystalů o velikosti jen několik setin milimetru. Byl nalezen v asociaci s walpurginem, bismutitem, eulytinem, preisingeritem a zavaritskitem v dutinách křemenné žiloviny (obr. 1).

Dosud nepopsaný Zn-dominantní člen skupiny s pracovním označením **Zn-neustädtelit** byl nalezen pouze na několika vzorcích sbíraných druhým z autorů v oblasti jámy Zelený Jelen na 3. Dušním patře dolu Rovnost I okolo roku 2014. Vzorky byly nalezeny v nadložním odžilku Dušní žíly v historické dobové v jižní sledné chodbě několik metrů nad úrovní 3. Dušního patra asi 20 m jižně od úpadné částečně zatopené šachty jdoucí směrem na 6. Dušní patro. Odžilek žíly Geister je zde tvořen až 5 cm mocnou čočkovitou, silně přeměněnou žilou supergenních minerálů bismutu a uranu pouze s ojedinělými relikty ryzího bismutu. **Zn-neustädtelit** tvoří na vzorcích velmi drobné hnědočervené kulovité agregáty o velikosti do 0.1 mm složené z jednotlivých tabulkovitých krystalů (obr. 2) v úzké asociaci s atelestitem, eulytinem, walpurginem a preisingeritem (obr. 3). V blízkosti se vyskytly také až 0.5 cm velké tabulkovité krystaly torbernitů. **Zn-neustädtelit** se při zvětrávání projevuje rezavými „limonitovými“ povlaky.

Chemické složení

Chemické složení bylo kvantitativně studováno pomocí elektronového mikroanalýzátoru Cameca SX100 (Národní muzeum, Praha) za podmínek: vlnově disperzní analýza, urychlovací napětí 15 kV, proud elektronového svazku 10 nA, průměr svazku 2 μm ; standardy: albit (NaK α), Bi (BiL β), BN (NK α), celestin (SK α , SrL β), Co (CoK α), Cr₂O₃ (CrK α), diopsid (MgK α), fluorapatit (PK α , CaK α), halit (ClK α), hematit (FeK α), chalkopyrit (CuK α), klinoklas (AsL α), LiF (FK α), rodonit (MnK α), sanidín (SiK α , KK α , AlK α), Sn (SnL α), U (UM α), V (VK α), vanadinit (PbM α), YVO₄ (YL α) a ZnO (ZnK α). Obsahy výše uvedených prvků, které nejsou zahrnuty v tabulkách, byly kvantitativně analyzovány, ale zjištěné obsahy byly pod detekčním limitem (většinou

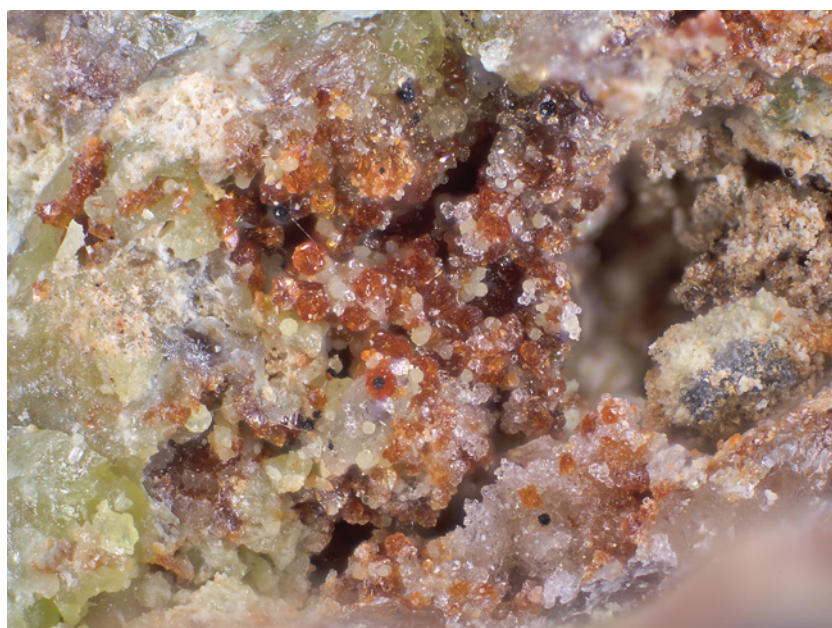
cca 0.03 - 0.1 hm. % pro jednotlivé prvky. Získaná data byla přepočítána na hm. % oxidů za použití PAP algoritmu (Pouchou, Pichoir 1985). Obsahy H₂O byly dopočteny na základě vyrovnání náboje, nižší sumy chemických analýz po dopočtu vody pravděpodobně odrážejí pozorovanou porozitu vzorků.

Chemické složení minerálů skupiny neustädtelitu (pracovní označení, tato skupina nebyla formálně - ve smyslu práce Mills et al. (2009) - definována) je možno vyjádřit obecným vzorcem Bi₂Fe³⁺(M²⁺_x, M³⁺_y)_{Σ1}O_{2+y}(OH)_{2+x}(AsO₄)₂ (tab. 1). Stechiometrie obou studovaných minerálů z Jáchymova velmi dobře odpovídá uvedenému obecnému vzorci této skupiny.

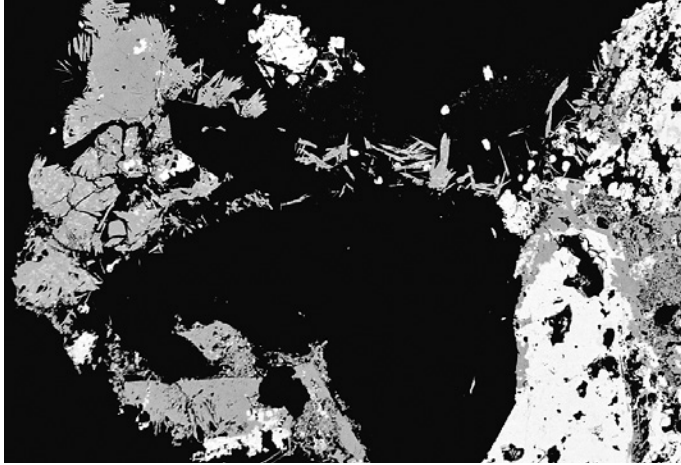
V M-pozici neustädtelitu (tab. 2) je převažující Fe³⁺ (0.48 - 0.59 apfu) doprovázeno obsahy Al (0.17 - 0.23 apfu), Zn (0.14 - 0.16 apfu) a minoritním zastoupením Co,



Obr. 1 Drobné krystaly a krystalické agregáty neustädtelitu (oranžově hnědý) srůstající s walpurginem (žlutý) a bismutitem (krémový) v dutinách křemenné žiloviny. Pravděpodobně žíla Geister. Šířka záběru 2.5 mm, foto P. Škácha.



Obr. 2 Drobné kulovité agregáty Zn-neustädtelitu (hnědočervený) srůstající s atelestitem (jablečně zelený) a preisingeritem (čirý). Důl Rovnost I, 3. Dušní patro, žíla Geister. Šířka záběru 2.5 mm, foto P. Škácha.



Obr. 3 Agregáty Zn-neustädteleit (šedý) srůstající s preisingeritem (bílý), Jáchymov; šířka záběru 800 μm , BSE foto J. Sejkora.

Tabulka 1 Přehled minerálů skupiny neustädteleit

minerál	idealizovaný chemický vzorec
kobaltneustädteleit	$\text{Bi}_2\text{Fe}^{3+}\text{Co}^{2+}\text{O}(\text{OH})_3(\text{AsO}_4)_2$
medenbachit	$\text{Bi}_2\text{Fe}^{3+}(\text{Cu}^{2+}, \text{Fe}^{3+})(\text{O}, \text{OH})_2(\text{OH})_2(\text{AsO}_4)_2$
neustädteleit	$\text{Bi}_2\text{Fe}^{3+}\text{Fe}^{3+}\text{O}_2(\text{OH})_2(\text{AsO}_4)_2$
Zn-neustädteleit*	$\text{Bi}_2\text{Fe}^{3+}(\text{Zn}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Co}^{2+})(\text{O}, \text{OH})_2(\text{OH})_2(\text{AsO}_4)_2$

Zn-neustädteleit* - dosud nepřijatý Zn-analog neustädteleit

Tabulka 2 Chemické složení neustädteleit z Jáchymova (hm. %)

	mean	1	2	3	4
PbO	0.40	0.26	0.26	0.78	0.29
CuO	0.09	0.00	0.16	0.08	0.12
CoO	0.26	0.41	0.17	0.18	0.27
NiO	0.30	0.14	0.41	0.27	0.39
ZnO	1.42	1.47	1.41	1.45	1.36
Al_2O_3	1.13	1.00	1.11	1.30	1.09
Bi_2O_3	50.23	51.55	49.35	50.38	49.64
Fe_2O_3	13.92	14.46	13.87	13.02	14.32
SiO_2	0.76	0.83	0.67	0.79	0.75
As_2O_5	23.10	22.90	23.20	22.49	23.83
P_2O_5	1.02	1.08	1.02	0.86	1.11
H_2O^*	1.82	1.97	1.75	1.97	1.60
total	94.45	96.07	93.39	93.56	94.76
Pb	0.016	0.010	0.010	0.032	0.011
Cu	0.010	0.000	0.018	0.009	0.012
Co	0.030	0.048	0.020	0.022	0.031
Ni	0.035	0.017	0.048	0.033	0.044
Zn	0.153	0.158	0.153	0.161	0.142
Al	0.194	0.171	0.192	0.230	0.182
Bi	1.891	1.938	1.863	1.958	1.809
Fe	1.529	1.586	1.528	1.476	1.522
Si	0.111	0.121	0.098	0.118	0.106
As	1.763	1.746	1.776	1.771	1.761
P	0.126	0.133	0.126	0.110	0.133
Σ	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000
O	1.722	1.758	1.720	1.706	1.705
OH	1.774	1.917	1.709	1.975	1.507

Mean - průměr čtyř bodových analýz; H_2O^* - obsah vypočtený na základě vyrovnání náboje.

Ni, Fe, Cu a Pb (do 0.02 - 0.05 *apfu*). V aniontové části vzorce je As v nevelké míře substituován P (do 0.13 *apfu*) a Si (do 0.12 *apfu*). Empirický vzorec neustädteleit (průměr čtyř bodových analýz) je možno na bázi As+P+Si = 4 *apfu* vyjádřit jako $\text{Bi}_{1.89}\text{Fe}_{1.00}(\text{Fe}_{0.53}\text{Al}_{0.19}\text{Zn}_{0.15}\text{Ni}_{0.04}\text{Co}_{0.03}\text{Pb}_{0.02})_{\Sigma 0.96}\text{O}_{1.72}(\text{OH})_{1.77}[(\text{AsO}_4)_{1.76}(\text{PO}_4)_{0.13}(\text{SiO}_4)_{0.11}]_{\Sigma 2.00}$.

V případě Zn-neustädteleit (tab. 3) je v M-pozici dominantní Zn s obsahy v rozmezí 0.31 - 0.41 *apfu* významněji substituován Fe^{3+} (0.15 - 0.26 *apfu*), Ni (0.18 - 0.25 *apfu*) a Co (0.10 - 0.17 *apfu*), minoritně byly zjištěny i obsahy Cu, Al a Pb (do 0.05 - 0.08 *apfu*). V aniontu je As doprovázen obsahy P (do 0.08 *apfu*), Si (do 0.07 *apfu*) a V (do 0.01 *apfu*). Empirický vzorec Zn-neustädteleit (průměr 14 bodových analýz) lze na bázi As+P+Si+V = 4 *apfu* uvést následovně: $(\text{Bi}_{1.96}\text{Ca}_{0.04})_{\Sigma 2.00}\text{Fe}_{1.00}(\text{Zn}_{0.37}\text{Fe}_{0.22}\text{Ni}_{0.21}\text{Co}_{0.15}\text{Pb}_{0.03}\text{Cu}_{0.02})_{\Sigma 1.00}\text{O}_{1.23}(\text{OH})_{2.73}[(\text{AsO}_4)_{1.92}(\text{PO}_4)_{0.06}(\text{SiO}_4)_{0.02}]_{\Sigma 2.00}$.

Rentgenová prášková data

Rentgenová prášková difrakční data neustädteleit byla získána pomocí práškového difraktometru PANalytical Empyrean (FZÚAV ČR, Praha) s polovodičovým detektorem PIXcel^{3D} za použití $\text{CuK}\alpha$ záření (45 kV, 40 mA). Pro získání neorientovaných difrakčních dat bylo využito primárního Göbelova zrcadla, poskytujícího fokusovaný intenzivní rentgenový svazek ($\text{CuK}\alpha_{1,2}$) dopadající na borosilikátovou kapiláru (průměr 0.3 mm) s práškovým preparátem. Data byla snímána kontinuálními scany (40 scanů, celkový čas experimentu cca 48 h) v rozmezí 3 - 60° 2 θ s integrovaným krokem 0.028° a načítacím časem 150 sekund na krok.

Rentgenová prášková difrakční data Zn-neustädteleit byla získána pomocí práškového difraktometru Bruker D8 Advance (Národní muzeum, Praha) s polovodičovým pozičně citlivým detektorem LynxEye za užití $\text{CuK}\alpha$ záření (40 kV, 40 mA). Práškový preparát byl nanesen v acetonové suspenzi na nosič zhotovený z monokrystalu křemíku a následně pak byla pořízena difrakční data ve step-scanning režimu (krok 0.01°, načítací čas 8 s/krok detektoru, celkový čas experimentu cca 15 hod.).

Získaná data pro oba minerály byla vyhodnocena pomocí software ZDS pro DOS (Ondruš 1993) za použití profilové funkce Pearson VII, indexována byla na základě teoretických záznamů vypočtených z krystalových struktur neustädteleit a kobaltneustädteleit (Krause et al. 2002), parametry základních cel byly následně zpřesněny pomocí programu Burnhama (1962). Pozice difrakčních maxim v rentgenových práškových datech obou fází (tab. 4 a 5) dobře odpovídají publikovaným údajům pro neustädteleit a kobaltneustädteleit (Krause et al. 2002) i teoretickým záznamům vypočteným ze strukturálních dat; zřetelné rozdíly mezi pozorovanými a teoretickými hodnotami intenzit jednotlivých difrakcí jsou pravděpodobně vyvolány minimálním množstvím materiálu pro experimenty a texturními efekty; obdobné rozdíly v intenzitách maxim uvádí i Krause et al. (2002) pro vzorky z typové lokality. Zpřesněné parametry základních cel obou minerálů jsou v tabulce 6 porovnány s publikovanými údaji pro minerály této skupiny.

Tabulka 3 Chemické složení Zn-neustädtelitu z Jáchymova (hm. %)

	mean	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
CaO	0.27	0.44	0.43	0.16	0.11	0.38	0.21	0.39	0.13	0.19	0.27	0.25	0.27	0.14	0.40
PbO	0.76	0.73	0.58	0.92	0.87	0.55	0.32	0.60	0.84	0.74	0.43	1.11	1.12	1.04	0.76
CuO	0.14	0.11	0.09	0.28	0.14	0.02	0.06	0.13	0.42	0.67	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
CoO	1.25	1.31	1.22	1.41	1.33	1.20	0.86	1.17	1.37	1.33	0.98	1.37	1.34	1.22	1.32
NiO	1.68	1.51	1.60	1.90	1.83	1.57	1.53	1.57	2.04	1.95	1.57	1.67	1.49	1.74	1.60
ZnO	3.34	3.40	3.68	3.16	2.87	3.72	3.57	3.56	2.95	3.16	3.60	3.23	3.51	2.95	3.39
Al ₂ O ₃	0.08	0.00	0.00	0.10	0.15	0.00	0.00	0.00	0.23	0.38	0.07	0.08	0.07	0.00	0.00
Bi ₂ O ₃	50.59	49.89	51.60	50.08	50.40	50.53	51.06	50.39	50.92	49.79	50.73	49.80	50.57	51.42	51.01
Fe ₂ O ₃	10.73	10.62	11.11	10.40	10.81	10.56	11.02	10.74	10.28	10.25	10.89	10.76	10.84	10.96	11.00
SiO ₂	0.14	0.06	0.05	0.22	0.49	0.12	0.17	0.12	0.34	0.14	0.18	0.00	0.00	0.00	0.00
As ₂ O ₅	24.41	24.65	25.07	24.37	23.86	24.49	24.38	24.53	24.21	24.33	24.29	24.40	24.46	24.22	24.45
P ₂ O ₅	0.43	0.41	0.65	0.37	0.33	0.46	0.35	0.37	0.34	0.63	0.36	0.37	0.44	0.49	0.49
V ₂ O ₅	0.03	0.00	0.07	0.06	0.05	0.00	0.00	0.06	0.10	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00
H ₂ O*	2.72	2.65	2.74	2.66	2.58	2.71	2.67	2.71	2.73	2.72	2.70	2.74	2.80	2.81	2.87
total	96.55	95.79	98.90	96.10	95.82	96.31	96.21	96.33	96.90	96.27	96.07	95.78	96.97	96.99	97.29
Ca	0.043	0.071	0.067	0.026	0.018	0.061	0.034	0.063	0.021	0.030	0.044	0.041	0.044	0.023	0.065
Pb	0.031	0.030	0.023	0.037	0.035	0.022	0.013	0.024	0.034	0.030	0.018	0.046	0.046	0.043	0.031
Cu	0.016	0.012	0.010	0.032	0.016	0.002	0.007	0.015	0.048	0.076	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Co	0.150	0.158	0.142	0.170	0.161	0.145	0.104	0.141	0.165	0.159	0.119	0.168	0.163	0.150	0.160
Ni	0.204	0.183	0.187	0.230	0.222	0.190	0.186	0.190	0.246	0.234	0.192	0.206	0.181	0.214	0.195
Zn	0.371	0.378	0.395	0.351	0.319	0.413	0.399	0.395	0.326	0.348	0.403	0.365	0.392	0.333	0.379
Al	0.014	0.000	0.000	0.018	0.027	0.000	0.000	0.000	0.041	0.067	0.013	0.014	0.012	0.000	0.000
Bi	1.964	1.936	1.935	1.940	1.958	1.958	1.993	1.954	1.967	1.917	1.985	1.965	1.975	2.028	1.993
Fe	1.216	1.203	1.216	1.176	1.226	1.193	1.256	1.215	1.159	1.151	1.243	1.239	1.235	1.261	1.255
Si	0.020	0.009	0.007	0.033	0.074	0.018	0.026	0.018	0.051	0.021	0.027	0.000	0.000	0.000	0.000
As	1.922	1.939	1.906	1.914	1.879	1.923	1.929	1.929	1.896	1.899	1.926	1.952	1.937	1.937	1.937
P	0.055	0.052	0.080	0.047	0.042	0.059	0.045	0.047	0.043	0.080	0.046	0.048	0.056	0.063	0.063
V	0.003	0.000	0.007	0.006	0.005	0.000	0.000	0.006	0.010	0.000	0.000	0.000	0.007	0.000	0.000
Σ	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000
O	1.230	1.203	1.216	1.194	1.252	1.193	1.256	1.215	1.199	1.218	1.256	1.253	1.247	1.261	1.255
OH	2.733	2.663	2.662	2.670	2.593	2.713	2.697	2.717	2.727	2.705	2.733	2.799	2.824	2.870	2.896

Mean - průměr 14 bodových analýz; H₂O* - obsah vypočtený na základě vyrovnání náboje.

Tabulka 4 Rentgenová prášková data neustädtelitu z Jáchymova

<i>d</i> _{obs.}	<i>l</i> _{obs.}	<i>d</i> _{calc.}	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>d</i> _{obs.}	<i>l</i> _{obs.}	<i>d</i> _{calc.}	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>	<i>d</i> _{obs.}	<i>l</i> _{obs.}	<i>d</i> _{calc.}	<i>h</i>	<i>k</i>	<i>l</i>
8.872	89.2	8.857	0	0	1	2.967	16.6	2.976	0	-2	1	2.0292	10.9	2.0308	2	-1	1
6.096	31.5	6.095	0	1	0	2.915	91.4	2.913	1	0	2	2.0197	7.6	2.0205	0	2	3
5.281	28.2	5.277	0	-1	1	2.796	47.9	2.796	0	2	1	1.9991	9.2	1.9988	1	2	2
4.472	6.6	4.480	1	0	0	2.768	26.6	2.769	0	-1	3	1.9631	6.0	1.9631	-1	2	3
4.428	18.3	4.428	0	0	2	2.680	41.3	2.682	-1	0	3	1.9263	8.0	1.9263	2	1	1
4.294	12.3	4.301	-1	0	1	2.633	16.2	2.638	0	-2	2	1.8871	11.9	1.8843	0	-2	4
3.770	100.0	3.769	0	-1	2	2.560	37.6	2.557	0	1	3	1.8409	11.7	1.8415	1	-1	4
3.732	36.9	3.730	-1	1	0	2.4936	12.2	2.4882	1	-2	1	1.7704	24.1	1.7693	-2	2	2
3.535	85.3	3.539	-1	1	1	2.3220	7.0	2.3174	-1	-2	2	1.7704	24.1	1.7713	0	0	5
3.498	68.4	3.500	1	1	0	2.2629	32.1	2.2645	-2	0	1	1.6980	2.5	1.6958	-1	2	4
3.424	21.0	3.421	0	1	2	2.1273	8.5	2.1333	-1	0	4	1.6503	9.4	1.6494	-2	-2	3
3.034	22.8	3.047	0	2	0	2.0894	9.7	2.0894	2	0	1	1.6503	9.4	1.6499	-2	1	4

Tabulka 5 Rentgenová prášková data *Zn-neustädteľitu* z Jáchymova

$d_{obs.}$	$l_{obs.}$	$d_{calc.}$	h	k	l	$d_{obs.}$	$l_{obs.}$	$d_{calc.}$	h	k	l	$d_{obs.}$	$l_{obs.}$	$d_{calc.}$	h	k	l
8.853	22.6	8.827	0	0	1	3.419	9.5	3.418	0	-1	2	2.554	8.5	2.552	0	-1	3
6.104	10.3	6.110	0	1	0	3.056	9.5	3.055	0	2	0	2.5009	3.9	2.5005	2	2	2
5.288	100.0	5.279	0	1	1	3.047	0.2	3.045	-2	1	1	2.3220	3.4	2.3204	-2	2	1
4.321	4.9	4.326	2	0	0	2.976	0.3	2.978	-2	-1	1	2.2372	3.9	2.2395	2	2	3
3.768	56.2	3.763	0	1	2	2.920	14.6	2.920	2	0	3	2.0299	3.1	2.0300	0	3	1
		3.758	2	1	1	2.800	13.3	2.801	0	-2	1	1.9236	8.4	1.9247	0	3	2
3.559	18.5	3.559	2	1	0	2.758	9.2	2.762	0	1	3	1.8816	2.3	1.8813	0	2	4
3.514	8.5	3.517	2	-1	1	2.680	7.0	2.680	-2	0	2	1.7654	2.1	1.7654	0	0	5
3.501	10.3	3.503	-2	1	0	2.641	29.2	2.640	0	2	2	1.5307	3.4	1.5305	4	2	5

Tabulka 6 Parametry základní cely minerálů skupiny *neustädteľitu* (pro *triklinickou* prostorovou grupu *P-1*)

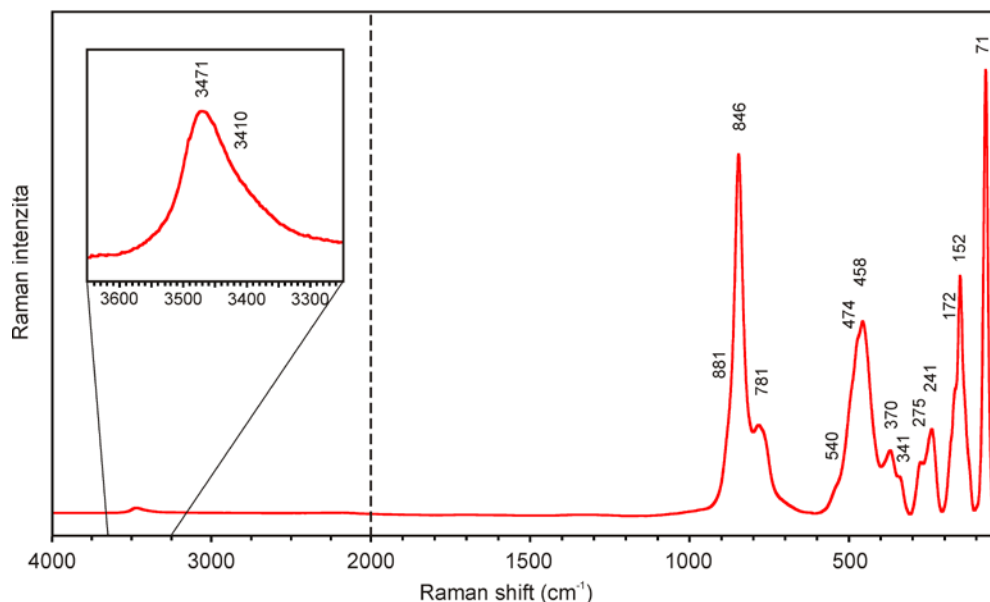
	<i>neustädteľit</i>	<i>neustädteľit</i>	<i>Zn-neustädteľit</i>	<i>kobaltneustädteľit</i>	<i>medenbachit</i>
	tato práce	Krause et al. (2002)	tato práce	Krause et al. (2002)	Krause et al. (2002)
a [Å]	4.551(2)	4.556(1)	9.175(6)	9.156(1)	9.162(2)
b [Å]	6.134(4)	6.153(2)	6.150(2)	6.148(1)	6.178(1)
c [Å]	9.024(5)	8.984(2)	9.407(4)	9.338(1)	9.341(2)
α [°]	95.26(6)	95.43(2)	83.52(3)	83.24(1)	83.50(2)
β [°]	99.40(4)	99.22(2)	70.59(4)	70.56(1)	71.04(2)
γ [°]	92.89(5)	92.95(3)	86.94(4)	86.91(1)	85.15(2)
V [Å ³]	246.9(2)	246.9	497.4(5)	492.2	496

Ramanovo spektrum

Ramanovo spektrum *Zn-neustädteľitu* bylo pořízeno za pomoci disperzního spektrometru DXR (Thermo Scientific) spojeného s konfokálním mikroskopem Olympus (Národní muzeum Praha). Podmínky měření: zvětšení objektivu 100 \times , použitý laser 633 nm, rozsah měření 45 - 4000 cm^{-1} , doba expozice 10 s, celkový počet expozic 100, výkon laseru 8 mW, apertura 50 μm pinhole. Reprezentativní spektrum bylo vybráno ze setu spekter měřených na různých fragmentech pro získání nejlepšího odstupu signálu od pozadí a nejmenšího rozsahu fluo-

rescence. Možné termické poškození měřených bodů, sledované pomocí vizuální kontroly povrchu vzorku po měření a případných změn spektra v průběhu měření, nebylo zjištěno. Spektrometr byl kalibrován pomocí softwarově řízené procedury s využitím emisních linií neonu (kalibrace vlnočtu), Ramanových pásů polystyrenu (kalibrace frekvence laseru) a standardizovaného zdroje bílého světla (kalibrace intenzity). Získané spektrum bylo zpracováno pomocí programu Omnic 9 (Thermo Scientific).

Ramanovo spektrum studovaného *Zn-neustädteľitu* je uvedeno na obrázku 4; vlnočty jednotlivých pásů s



Obr. 4 Ramanovo spektrum *Zn-neustädteľitu* z Jáchymova (split u 2000 cm^{-1}).

Tabulka 7 Interpretace Ramanova spektra Zn-neustädteřitu z Jáchymova

pozice	[cm ⁻¹]	interpretace pásů
3471		
3410		v OH valenční vibrace OH skupin
881		antisymetrická valenční vibrace ν_3 (AsO ₄) ³⁻
846		
781		symetrická valenční vibrace ν_1 (AsO ₄) ³⁻
540		deformační vibrace M-O (M = Fe, Co, Ni, Zn...) vazeb
454		
458		deformační vibrace ν_4 (AsO ₄) ³⁻
370		
341		deformační vibrace ν_2 (AsO ₄) ³⁻
275		
241		
172		valenční vibrace M-O (M = Fe, Co, Ni, Zn...) vazeb a mřížkové vibrační módy
152		
71		

interpretací založenou na pracích Čejka (1999) a Nakamoto (2009) v tabulce 7. Málo intenzivní pás s maximem 3471 cm⁻¹ a raménkem u 3410 cm⁻¹ lze přiřadit k v OH valenčním vibracím OH skupin vázaných vodíkovými vazbami. Pro jednotlivé komponenty je podle empirického vztahu mezi vlnočty vibrací a délkou vodíkových vazeb O-H...O (Libowitzky 1999) možno odvodit délky vazeb 2.87 a 2.80 Å, které jsou v souladu s hodnotami 2.88, 2.90 a 2.92 Å, zjištěnými při studiu krystalové struktury analogického neustädteřitu, kobaltneustädteřitu a medenbachitu (Krause et al. 2002).

Intenzivní pás s maximem 846 cm⁻¹ a raménkem 781 cm⁻¹ je projevem symetrické valenční vibrace ν_1 (AsO₄)³⁻, raménko u 881 cm⁻¹ je pravděpodobně spojeno s antisymetrickou valenční vibrací ν_3 (AsO₄)³⁻. Středně intenzivní pás s maximem 458 cm⁻¹ a raménkem 474 cm⁻¹ náleží rozštěpené trojnásobně degenerované deformační vibraci ν_4 (AsO₄)³⁻; méně intenzivní pás s maximem 370 a raménkem 341 cm⁻¹ pak dvojnásobně degenerované deformační vibraci ν_2 (AsO₄)³⁻. Nevýrazné raménko u 540 cm⁻¹ může být spojeno s deformačními vibracemi M-O (M = Fe, Co, Ni, Zn...) vazeb v oktaedrech. Další pozorované intenzivní pásy s komponentami 275, 241, 172, 152 a 71 cm⁻¹ lze přiřadit valenčním vibracím M-O (M = Fe, Co, Ni, Zn...) vazeb v oktaedrech a mřížkovým vibračním módům.

Závěr

V materiálu z jáchymovského rudního revíru byl pomocí komplexu mineralogických metod zjištěn výskyt dosud z našich lokalit nepopsaného neustädteřitu a jeho Zn-dominantního analogu s pracovním označením *Zn-neustädteřit*. Vzhledem k minimálnímu množství materiálu dostupného pro výzkum, malé velikosti a charakteru krystalů a faktu, že je v M pozici dominantní Zn (0.31 - 0.41 apfu) významně substituován Ni, Co a Fe, není v současné době možné předložit *Zn-neustädteřit* jako nový minerální druh. Nicméně se jedná o zajímavou varietu tohoto známého minerálního druhu a zároveň jde o další pozoruhodný supergenní minerál rozšiřující řady již tak pestré oxidační zóny jáchymovského revíru.

Poděkování

Předložená práce vznikla za finanční podpory Ministerstva kultury v rámci institucionálního financování dlouhodobého koncepčního rozvoje výzkumné organizace Národní muzeum (DKRVO 2024-2028/1.II.a, 00023272) a projektu CzechNanoLab by MEYS CR (LM2018110) pro JP.

Literatura

- BURNHAM CHW (1962) Lattice constant refinement. Carnegie Inst Washington Year Book 61: 132-135
- ČEJKA J (1999) Infrared spectroscopy and thermal analysis of the uranyl minerals. Rev Mineral 38: 521-622
- HLOUŠEK J (2016) Jáchymov, Joachimsthal. Díl 1, díl 2. Kateřina Hloušková, Jáchymov, 595 a 537 s.
- HLOUŠEK J, PLÁŠIL J, SEJKORA J, ŠKÁCHA P (2014) Novinky a nové minerály z Jáchymova, (2003 - 2014). Bull mineral-petrolog Odd Nár Muz (Praha) 22: 155-181
- KRAUSE W, BERNHARDT HJ, GEBERT W, GRAETSCH H, BELENDORFF K, PETITJEAN K (1996) Medenbachite, Bi₂Fe(Cu, Fe)(O,OH)₂(OH)₂(AsO₄)₂, a new mineral species: Its description and crystal structure. Am Mineral 81(3-4): 505-512
- KRAUSE W, BERNHARDT HJ, McCAMMON C, EFFENBERGER H (2002) Neustädteřite and cobaltneustädteřite, the Fe³⁺- and Co²⁺-analogues of medenbachite. Am Mineral 87(5-6): 726-738
- LIBOWITZKY E (1999) Correlation of O-H stretching frequencies and O-H...O hydrogen bond lengths in minerals. Monat Chem 130: 1047-1059
- MACOUREK K, ČUMRDA J (1963) Zhodnocení těžební činnosti jáchymovských dolů na hydrotermálním ložisku Jáchymov. MS, archiv DIAMO, Příbram - Šachta č. 14, sv. 140166
- MRŇA F (1960) Dílčí zpráva o geochemickém výzkumu komplexního zrudnění v Jáchymovské oblasti 1958-1960. MS, archiv DIAMO, Příbram - Šachta č. 14, sv. 29
- MILLS SJ, HATERT F, NICKEL EH, FERRARIS G (2009) The standardisation of mineral group hierarchies: application to recent nomenclature proposals. Eur J Mineral 21: 1073-1080

- NAKAMOTO K (2009) Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds Part A: Theory and applications in inorganic chemistry. John Wiley and Sons Inc. Hoboken, New Jersey
- ONDRUŠ P (1993) ZDS - A computer program for analysis of X-ray powder diffraction patterns. Materials Science Forum, 133-136, 297-300, EPDIC-2. Enschede
- ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, HLOUŠEK J, SKÁLA R, FRÝDA J, ČEJKA J, GABAŠOVÁ A (1997a) Secondary minerals of the Jáchymov (Joachimsthal) ore district. J Czech Geol Soc 42: 3-76
- ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, SKÁLA R, CÍSAŘOVÁ I, HLOUŠEK J, FRÝDA J, VAVŘÍN I, ČEJKA J, GABAŠOVÁ A (1997b) New naturally occurring phases of secondary origin from Jáchymov (Joachimsthal). J Czech Geol Soc 42: 77-107
- ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, GABAŠOVÁ A, DRÁBEK M, DOBEŠ P, MALÝ K, HLOUŠEK J, SEJKORA J (2003a) Ore-forming processes and mineral parageneses of the Jáchymov ore district. J Czech Geol Soc 48: 157-192
- ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, GABAŠOVÁ A, HLOUŠEK J, ŠREIN V (2003b) Geology and hydrothermal vein system of the Jáchymov (Joachimsthal) ore district. J Czech Geol. Soc. 48: 3-18
- ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, GABAŠOVÁ A, HLOUŠEK J, ŠREIN V (2003c) Supplement to secondary and rock-forming minerals of the Jáchymov ore district. J Czech Geol Soc 48: 149-155
- ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, GABAŠOVÁ A, HLOUŠEK J, ŠREIN V, VAVŘÍN I, SKÁLA R, SEJKORA J, DRÁBEK M (2003d) Primary minerals of the Jáchymov ore district. J Czech Geol Soc 48: 19-147
- PITTAUEROVÁ D (2002) Zvětrávání uranu na historické haldě stříbrného dolu v Jáchymově. MS, dipl práce PřFUK, 1-44
- POUCHOU J, PICHOU F (1985) „PAP“ (φρζ) procedure for improved quantitative microanalysis. In: Armstrong JT (ed): Microbeam Analysis: 104-106. San Francisco Press San Francisco
- ŠKÁCHA P, PLÁŠIL J, HORÁK V (2019) Jáchymov: mineralogická perla Krušnohoří. Academia, Praha 682 s.