

Die Struktur der ab 80° C gebildeten Phase B wird über Einkristallmessungen weiter untersucht. Das Zusammenbrechen der Phase B durch fortschreitende Entwässerung ab ca. 150° C spricht gegen einen zeolithischen Charakter der Weinebeneitstruktur.

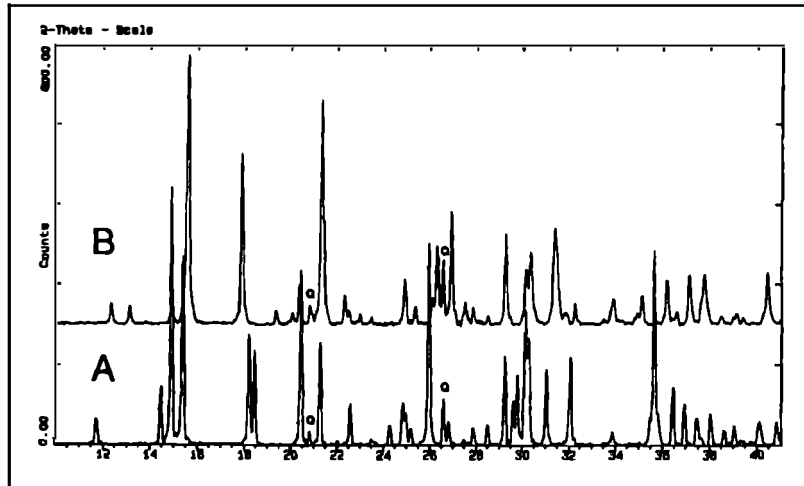


Abb. 2: Röntgendiffraktometerdiagramme von A: Weinebeneit und B: Phase B (80° C), Q = Quarz. Siemens D5000, CuK α -Strahlung, Sekundärmonochromator.

Der Autor dankt Herrn Prof.Dr. W. Smykatz-Kloss für die Anfertigung der DTA/TG-Aufnahme.

TAUCHER, J., WALTER, F., POSTL, W. (1992): Mineralparagenesen in Pegmatiten der Koralpe. - Matrixx, Mineralogische Nachrichten aus Österreich, 1, 23 - 72.

WALTER, F. (1992): Weinebeneit, CaBe₃(PO₄)₂(OH)₂·4H₂O, a new mineral species: mineral data and crystal structure. - Eur. J. Mineral., 4, 1275 - 1283.

KRISTALLSTRUKTURUNTERSUCHUNGEN AN ERYTHRIN UND ANNABERGIT

WILDNER., M., GIESTER, G. und LENGAUER, C.L.

Institut für Mineralogie und Kristallographie, Universität Wien, Dr. Karl Lueger-Ring 1, A-1010 Wien.

Im Zuge der Bearbeitung synthetischer Verbindungen vom Strukturtyp des Vivianits [Me₃(XO₄)₂·8H₂O] wurden auch die Strukturen der Minerale Erythrin von Schneeberg, Sachsen, und Annabergit von Laurion, Attika, bestimmt. In den untersuchten Proben treten sowohl Erythrin als auch Annabergit in strahligen Aggregaten auf, bestehend aus nadeligen (Erythrin) bzw. plattigen (Annabergit) Einkristallen bis zu einigen Millimetern Länge.

Die chemische Zusammensetzung des untersuchten Materials wurde durch EDX- und Mikrosondenmessungen bestimmt und ergab (normiert auf die ideale Summenformel) die empirischen Formeln $\text{Co}_{2.01}\text{Fe}_{0.74}\text{Ni}_{0.25}(\text{AsO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ für Erythrin und $\text{Ni}_{2.48}\text{Mg}_{0.50}\text{Fe}_{0.02}(\text{AsO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ für Annabergit.

Die Röntgenbeugungsintensitäten der Einkristalle sowie exakte 2θ -Werte zur Gitterkonstantenbestimmung wurden an einem Vierkreisdiffraktometer mit MoK α Strahlung gemessen. Ausgehend von den Atomkoordinaten des Vivianits (MORI & ITO, 1950) wurden die Strukturverfeinerungen nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate auf F_0^2 durchgeführt (SHELXL-93; SHELDRICK, 1994).

Raumgruppe C2/m	Erythrin	Annabergit
a [Å]	10.251(3)	10.179(2)
b [Å]	13.447(4)	13.309(3)
c [Å]	4.764(1)	4.725(1)
β [Å]	104.98(1)	105.00(1)
V [Å ³]	634.36	618.24
ρ_{calc} [gcm ⁻³] (Z = 2)	3135	3146
$2\theta_{\text{max}}$ [°]	65	70
gemessene Reflexe	2637	3035
Datensatz	1199	1434
Variable	72	76
wR2 [für alle F_0^2]	0.064	0.037
R1 [für $F_0 > 4\sigma(F_0)$]	0.027	0.015

Tab. 1: Kristalldaten und Details der Intensitätsmessungen und Strukturverfeinerungen von Erythrin und Annabergit.

Die Positionen der H-Atome konnten durch Differenzfouriersumationen bestimmt werden. Für die Me(II)-Punktlagen im Erythrin wurden die reinen Co-Streukurven verwendet, während das Ni/Mg-Verhältnis im Annabergit auf die strukturchemische Formel $[\text{Ni}(1)_{0.99}\text{Mg}(1)_{0.01}][\text{Ni}(2)_{1.65}\text{Mg}(2)_{0.35}](\text{AsO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ verfeinert werden konnte. Sowohl die aus Strukturdaten als auch die aus chemischen Analysen erhaltenen Formeln unterscheiden sich deutlich von der Mg-reicheren Annabergitvarietät "Cabrerit" (GIUSEPPETTI & TADINI, 1982). Hingegen steht die eindeutige Präferenz des Mg für die Me(2)-Punktlage in Übereinstimmung mit "Cabrerit". Wichtige Kristalldaten für Erythrin und Annabergit sowie weitere Details der Intensitätsmessungen und Strukturverfeinerungen sind in Tabelle 1 zusammen gefaßt.

		Erythrin	Annabergit
		Me = Co, Fe	Me = Ni, Mg
Me1-O1	2x	2,029(2)	2,031(1)
Me1-Ow1	4x	2,160(2)	2,114(1)
Me2-O2	2x	2,099(2)	2,054(1)
Me2-O3	2x	2,100(2)	2,092(1)
Me2-Ow2	2x	2,118(2)	2,072(1)
As-O1	1x	1,714(2)	1,707(1)
As-O2	1x	1,683(2)	1,686(1)
As-O3	2x	1,690(2)	1,686(1)
Ow1-H11	1x	0,85(3)	0,84(2)
Ow1-H12	1x	0,73(4)	0,77(2)
Ow2-H21	1x	0,86(5)	0,84(3)
Ow2-H22	1x	0,89(4)	0,81(2)

Tab. 2: Wichtige interatomare Abstände [Å] in Erythrin und Annabergit.

Die Strukturbestimmungen bestätigen die Isotypie des Erythrins mit dem Strukturtyp des Vivianits und zeigen eine große Ähnlichkeit des untersuchten Annabergits mit der Varietät "Cabrerit" (GIUSEPPETTI & TADINI, 1982). Wichtige interatomare Abstände in Erythrin und Annabergit sind in Tabelle 2 zusammengefaßt.

Die Geometrie der Arsenatgruppe ist bei Erythrin und Annabergit sehr ähnlich, mittlere As-O Bindungslängen sind 1,694 Å bzw. 1,691 Å. Die Me(1)O₆-Oktaeder sind jeweils stark gestaucht, wobei der mittlere Co(1)-O Abstand mit 2,116 Å sehr gut den kristallchemischen Erwartungen entspricht, der Ni(1)-O Mittelwert im Annabergit 2,086 Å, hingegen über entsprechenden Literaturdaten liegt. Die Verzerrung des Me(2)O₆ Oktaeders ist deutlich schwächer und in beiden Mineralen uneinheitlich, Me(2)-O Mittelwerte sind 2,106 Å bzw. 2,073 Å. Der im Vergleich zu Ni(2) höhere Ni(1)-O Mittelwert ist insofern bemerkenswert, als die in Übereinstimmung mit "Cabrerit" gefundene starke Präferenz des größeren Mg-Ions für die Me(2) Punktlage einen höheren Ni(2)-O Mittelwert erwarten läßt. Dieser

Umstand legt die Vermutung nahe, daß die Größe der Me(1)-Oktaederlücke vorwiegend durch stereochemische Eigenheiten des Strukturtyps bestimmt wird, während der Me(2)O₆ Oktaeder eine seiner Besetzung entsprechende Größe aufweist. Für diese Interpretation sprechen auch Rietveld-Verfeinerungen der synthetischen Co- und Ni-Endglieder (WILDNER et al., 1994): die jeweiligen Me(1)-O Abstände sind innerhalb der Fehlergrenzen in den natürlichen und synthetischen Verbindungen ident, die mittleren Me(2)-O Abstände sind dagegen in den synthetischen Endgliedern signifikant auf 2,083 Å (Co) bzw. 2,061 Å (Ni) verkürzt. Diese Werte deuten auch, analog zum Annabergit, auf eine starke Bevorzugung von Fe für die Me(2)-Position im Erythrin hin.

- GIUSEPPETTI, G., TADINI, C. (1982): The crystal structure of cabrerite, (Ni,Mg)₃(AsO₄)₂·8H₂O, a variety of annabergite. - Bull. Minéral., **105**, 333 - 337.
- MORI, H., ITO, T. (1950): The structure of vivianite and symplecite. - Acta Cryst., **3**, 1-6.
- SHELDRIK, G.M. (1994) - J. Appl. Cryst. (in Vorbereitung).
- WILDNER, M., LENGAUER, C.L., GIESTER, G. (1994): Crystal structures of erythrite and of the isotopic synthetic compounds Me₃(AsO₄)₂·8H₂O (Me = Mg, Co, Ni). - Abstracts Volume of the 16th General IMA Meeting (im Druck).

EIN NEUER ZUGANG ZU DEN GEOWISSENSCHAFTEN ?

WINKLER, W.

Institut für Mineralogie, Universität Salzburg, Hellbrunnerstraße 34, A-5020 Salzburg.

Die Geowissenschaften sind zwar durch den Österreichischen Lehrplan im Unterricht verankert, wie ausführlich jedoch einzelne Themen behandelt werden, und mit welchem Engagement, ist von den Lehrpersonen abhängig. Das Fehlen von empirischen Kenntnissen auf Seiten der Schüler und Lehrer gegenüber den Themen aus diesem Bereich, aber auch komplizierte Schulbücher, reduzieren den Unterricht auf ein Mindestmaß. Viele Forscher des geowissenschaftlichen Themenkreises dringen mit ihren Untersuchungen in Bereiche der Umweltproblematik, Technik, oder Erforschung von Ressourcen vor, die sich zu einem interdisziplinären Netz zusammenfügen (CORDANI, 1993). Warum also nicht auch den Unterricht in eine solch breite Palette an interdisziplinären Themenfeldern eingliedern?

In den USA gibt es bereits große Bemühungen, diese interdisziplinäre Vernetzung auch auf den Schulunterricht und den Schulbuch-Sektor auszuweiten. Einerseits bemühen sich Geowissenschaftler, andererseits Fachleute aus dem Erziehungsbereich die geowissenschaftlichen Thematiken für Lehrer und Schüler relevant darzustellen (CARPENTER, 1993).

OSBORNE & FREYBERG (1985) entwickeln aus einer Fülle von Unterrichtsmodellen in ihren Arbeiten am "Learning in Science Project" viele Voraussetzungen für den Unterricht bzw. das Lernen generell. Sie sprechen die Unterschiede zwischen den Auffassungen der Wissenschaftler, Lehrer und Schüler an. Die Schüler sollten die Möglichkeit haben, im Unterricht enthaltene Begriffe in einer Alltagssituation zu