

Ca RE₂(CO₃)₄, EIN NEUES MINERAL AUS DER STEIERMARK, ÖSTERREICH

HOLLERER, CH.* , ETTINGER, K.* , TAUCHER, J.** & WALTER, F.*

* Institut für Mineralogie-Kristallographie und Petrologie, Karl-Franzens-Universität Graz, Universitätsplatz 2, A-8010 Graz

** Referat für Mineralogie, Landesmuseum Joanneum, Raubergasse 10, A-8010 Graz

Im Zuge der Bauarbeiten für den Galgenbergtunnel zwischen Leoben und St. Michael, Steiermark wurden auf Klüften von Albit-Chloritschiefern der Grauwackenzone Karbonatparagenesen gefunden (TAUCHER et al., 1994). Auffallend waren dünntafelige farblose Kristalle in meist rosettenartiger Anordnung. Begleitminerale sind Calcit, Siderit, Pyrit und ein Mineral der Kaolinitgruppe.

Mikrosondenanalysen der dünntafeligen Kristalle ergaben folgende Element-Gew. %: Ca 6.8, Ce 25.6, La 10.0, Nd 12.0, Pr 2.5, C und O, deren direkte Quantifizierung zu ungenau war, ergeben den Rest auf 100.

Aus dem Einkristall-FTIR-Spektrum sind auch die charakteristischen Karbonatschwingungen mit einer breiten aufgespaltenen Bande bei 1553 cm⁻¹ und 1418 cm⁻¹, bzw. einer scharfen Bande bei 866 cm⁻¹ belegt. Eine schwache Schulter bei 1606 cm⁻¹ weist auf wahrscheinlich vorhandenes Kristallwasser hin.

Über die Pulverdiffraktometeraufnahme konnte keine Zuordnung zu einem bekannten SE- Karbonat getroffen werden.

Mittels Einkristallmethoden (Weißbergkamera und Vierkreisdiffraktometer) wurden für einen 0.15 x 0.11 x 0.04 mm großen Kristall eine triklone Elementarzelle mit $a = 6.397 \text{ \AA}$, $b = 6.403 \text{ \AA}$, $c = 12.395 \text{ \AA}$, $\alpha = 96.58^\circ$, $\beta = 100.91^\circ$, $\gamma = 100.43^\circ$, $V = 484.4 \text{ \AA}^3$ und die Raumgruppe P-1 bestimmt.

Die idiomorph entwickelten Kristalle wurden mittels Reflexionsgoniometer vermessen und zeigen einen tafeligen Habitus nach {001} mit schmalen Pinakoiden {100} und {010}. Die gute Spaltbarkeit parallel (001) ist auch in der Röntgenpulveraufnahme über bevorzugte Orientierung der Reflexe {00l} ersichtlich.

Die Kristallstrukturbestimmung lieferte über direkte Methoden die allgemeinen Punktlagen für 1 Ca und 2 SE (als gemeinsamer Streufaktor für SE wurde Ce verwendet). Schrittweise wurden über Fourier- bzw. Differenzfourieranalysen 4 allgemeine Punktlagen für C und 12 allgemeine Punktlagen für O erhalten. Bei einem vorläufigen R-Wert von 0.076 mit 1541 beobachteten Reflexen konnten keine weiteren signifikanten Elektronendichten für eine aus dem IR-Spektrum vermutete H₂O-Position gefunden werden.

In der Struktur werden Ca in 8-Koordination und zwei SE in jeweils 9-Koordination mit den Sauerstoffen der CO₃-Gruppen zu einem 3-dimensionalen Gerüst verknüpft.

Auffallend ist die parallel (001) lagenartige Anordnung von jeweils 2 symmetrie-unabhängigen Karbonatgruppen, deren Orientierung zueinander unterschiedlich ist. Auch die Ca- und SE-Positionen befinden sich in diesen Lagen, die auch die Ebene der morphologischen Spaltbarkeit darstellen.

Die mittleren Abstände betragen für Ca–O 2.513 Å, die beiden SE–O 2.544 Å bzw. 2.581 Å und für C–O jeweils 1.312, 1.271, 1.299 und 1.296 Å mit O–C–O Winkeln zwischen 115° und 124°.

Die aus der obigen Mikrosondenanalyse berechneten Kationenverhältnisse mit der Basis Ca=1 ergibt folgende Mineralformel: Ca (Ce_{1,1} La_{0,4} Nd_{0,5} Pr_{0,1})_{2,1} (CO₃)₄, die auch mit der Strukturbestimmung gut übereinstimmt. Vorläufig kann für dieses wahrscheinlich wasserfreie SE-Karbonat CaRE₂(CO₃)₄ als idealisierte Formel angegeben werden. Eine Überprüfung auf den H₂O- Gehalt wird mit neuem Probenmaterial vorgenommen werden.

Wegen der geringen Probenmenge wurde bisher keine Dichtebestimmung durchgeführt. Unter Annahme, daß vergleichbare SE-Karbonate Dichten um 4.3 g.cm⁻³ aufweisen, konnte über die Mineralformel und Z=2 eine Dichte von 4.02 g.cm⁻³ berechnet werden.

Dieselben Kationenproportionen besitzt das wasserfreie SE-Karbonat Sahamalit (Mg,Fe)RE₂(CO₃)₄, dessen Struktur aus zu einem Gerüst vernetzten REO₉-Polyedern und (Mg,Fe)-Oktaedern besteht (PERTLIK & PREISINGER, 1983). Dieses Mineral ist monoklin und hat wegen der oktaedrisch koordinierten Position (Mg,Fe) eine andersartige Vernetzung zum dreidimensionalen Gerüst als das oben beschriebene Mineral mit CaO₈-Polyedern.

Kimurait, CaY₂(CO₃)₄.6H₂O (NAGASHIMA et al., 1986), ist rhombisch und zu wasserreich für eine idente Struktur, wie aus einem IR-Spektrenvergleich mit dem untersuchten SE-Karbonat hervorgeht.

Eine weitere mit dem neuen SE-Karbonat aus der Steiermark vergleichbare Struktur mit vernetzten Schichten aus CO₃-Gruppen, YO₉- und CaO₈-Polyedern parallel (001) wurde für Kamphaugit-(Y) bestimmt (RØMMING et al., 1993). Dieses Mineral ist tetragonal und weist mit CaY(CO₃)₂OH.H₂O aber ein anderes Kationenverhältnis auf.

NAGASHIMA, K., MIYAWAKI, R., TAKASE, J., NAKAI, I., SAKURAI, K.-I., MATSUBARA, S., KATO, A., IWANO, S. (1986): Kimurait, CaY₂(CO₃)₄.6H₂O, a new mineral from fissures in an alkali olivine basalt from Saga Prefecture, Japan, and new data on lokkaite. - Am.Mineral. 71, 1028–1033.

PERTLIK, F., PREISINGER, A. (1983): Crystal Structure of Sahamalit (Mg,Fe) RE₂ (CO₃)₄. - TMPM, 31, 39-46

RØMMING, Ch., KOCHARIAN, A.K., RAADE, G. (1993): The crystal structure of kamphaugite-(Y). - Eur.J.Mineral 5, 685-690.

TAUCHER, J., POSTL, W., MOSER, B. (1994): Minerale aus dem Eisenbahntunnel Galgenberg, Jassing, Leoben, Steiermark – ein Vorbericht. - Matrix 3, 63-68.