

**HELLBLAUE OLENIT-SCHÖRL-DRAVIT MISCHKRYSTALLE VON EBERSDORF,
NIEDERÖSTERREICH: CHEMISMUS UND KRISTALLSTRUKTUR**

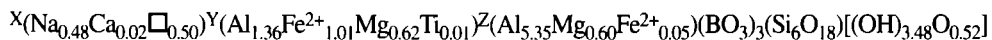
von

A. Ertl¹, F. Pertlik¹ & H.-J. Bernhardt²

¹Institut für Mineralogie und Kristallographie
Universität Wien, Geozentrum, Althanstrasse 14, A-1090 Wien

²Z. Elektronen-Mikrosonde der RUB
Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum

Aus einem Pegmatit der Gföhler Einheit bei Ebersdorf, Niederösterreich, wurden stark zonierte Turmaline beschrieben, die einen dunkelbraunen Kern (Schörl-Dravit) und eine hellblaue Außenzone besitzen [1]. Chemische Analysen der Außenzone (Mikrosonden-Analysen) sind in Tabelle 1 wiedergegeben. Diese Analysen lassen sich unter Berücksichtigung des Strukturtyps zu folgender Formel verrechnen:



(mit X, Y und Z sind neun- (1x) und sechskoordinierte (2x) Kationenpositionen ausgewiesen).

Die Analysenwerte für die Elemente K, Ba, Cr, Mn, Cu, Zn sowie F und Cl skalieren in Größenordnungen um die Nachweisgrenze. Da F- und Li-Gehalte in Al-reichen Turmalinen positiv korrelieren und Mg-reiche Turmaline generell einen unbedeutenden Li-Gehalt aufweisen, ist in vorliegendem Turmalin nur ein vernachlässigbarer Li-Gehalt zu erwarten. Für Eisen wurde die Wertigkeitsstufe 2+ angenommen, der Gehalt an B₂O₃ und H₂O nicht bestimmt. Der Mg Anteil an der Z Position wurde anhand der Abbildung 3 aus [2] in Korrelation mit dem Fe²⁺ Anteil an der Y Position ermittelt, B₂O₃ mit 3.0 in der Formelberechnung berücksichtigt und H₂O als Differenz auf 100 ausgewiesen.

Eine Strukturanalyse des hellblauen Turmalins (Außenzone) mit a = 15.935(3) Å und c = 7.164(2) Å konvergierte für 3111 Intensitäten (h, k, l und -h, -k, -l nicht gemittelt) und 2θ_{max} = 90° bei R (konventionell): 0.033 für 97 variable Parameter. Ausgewählte interatomare Abstände sind in Tabelle 2 angeführt.

Generell wurden die Besetzungsfaktoren für die Atompositionen X, Y und Z zusammen mit den jeweiligen Ortsparametern verfeinert und so rechnerisch folgende Besetzungen ermittelt: Position X ist ~50 % mit Na besetzt (~50 % □), Y zu ~70 % mit (Al+Mg) und zu ~30 % mit Fe, Z zu 100 % mit (Al+Mg). Eine Differenzierung zwischen Al und Mg war aufgrund des praktisch gleichen Streuvermögens dieser Atome nicht möglich.

Eine Verfeinerung Si \leftrightarrow B an der Tetraeder-Position ergab keine signifikante Unterbesetzung, bezogen auf das Streuvermögen eines Si-Atoms. Des weiteren entspricht der mittlere $\langle \text{Si-O} \rangle$ Abstand von 1.619 Å einer Vollbesetzung dieser Position mit Si. Die Mikrosondenanalysen (Si: 6.00 apfu) weisen ebenfalls darauf hin, daß die Tetraeder-Position vollständig mit Si besetzt sein muß. Somit sind in diesem Turmalin im Gegensatz zu Olenit-Elbait Mischkristallen, die immer einen gewissen Anteil von ^{14}B aufweisen, sowohl signifikante Anteile von ^{14}B , wie auch von ^{14}Al auszuschließen. [3,4].

Die Alkalidefizienz des untersuchten Turmalins (Position X ~ 50 % □) und der mittlere $\langle \text{X-O} \rangle$ Abstand mit 2.704 Å sind mit einem als Schörl bezeichneten Turmalin aus dem vulkanischen Tuff der Jack Creek Lagerstätte direkt vergleichbar [5], wobei an letzterem bei gleicher Besetzung der X-Position ein mittlerer $\langle \text{X-O} \rangle$ Abstand von 2.713 Å bestimmt wurde. Die anhand letzterer Turmalinstruktur im Vergleich mit etwa einem Dutzend Literaturdaten ermittelte Korrelation zwischen dem $\langle \text{X-O} \rangle$ Abstand (= Größe des XO_9 -Polyeders) und der Verzerrung des Si_6O_{18} -Ringes stimmt innerhalb des einfachen Fehlers mit den vorliegenden Ergebnissen überein. Bei relativ großen XO_9 -Polyedern weisen alkalidefiziente Turmaline mit geringem Ca-Gehalt den geringsten Verzerrungsgrad des Tetraederringes auf [5]. Der $\langle \text{Z-O} \rangle$ Abstand von 1.922 Å ist deutlich größer als bei Turmalinen, die an der Z-Position nur mit Al besetzt sind (~1.90 Å). Diese Vergrößerung wird hauptsächlich durch Anteile von Mg an dieser Position hervorgerufen.

Anhand der an fünfzig Turmalinen unterschiedlicher Genese bestimmten Kristallstruktur und deren chemischer Zusammensetzung konnte PIECZKA [6] eine einfache Korrelation zwischen mittlerer Größe der oktaedrisch koordinierten Kationpolyeder und Chemismus ableiten. Die mittleren Abstände $\langle \text{Y-O} \rangle$ mit 2.012 Å und $\langle \text{Z-O} \rangle$ mit 1.922 Å, (Maß für die Größe der Kationpolyeder) sowie die für diese Kationpositionen berechneten Elektronendichten [Chemismus ausgedrückt als Verhältnis (Al+Mg) / Fe] bestimmt am Turmalin von Ebersdorf, stehen in guter Übereinstimmung zu dieser Korrelation.

Unter Berücksichtigung der Strukturanalyse und der Mikrosondenanalysen ergibt sich für den untersuchten Turmalin ein Olenit-Anteil von ~50 %, nebst ~30 % Schörl- und ~20 % Dravit-Anteilen.

	A	B
Na₂O	1.49 (4)	1.50
MgO	5.14 (15)	5.00
CaO	0.1 (2)	0.11
Al₂O₃	35.88 (12)	35.24
SiO₂	36.58 (14)	36.58
TiO₂	0.08 (4)	0.05
FeO	7.72 (16)	7.72
B₂O₃	n. b.	10.62
H₂O	n. b.	3.18
Σ		100.00

Tabelle 1

Analysenwerte für den hellblauen Turmalin (Außenzone) mit Standardabweichungen in runden Klammern. A: Gew. % (Analyse); B: Gew. % (der angegebenen Formel entsprechend). Analytiker: H.-J. Bernhardt.

X-	O(1) = 2.519(2); 3x	Z	O(5) = 1.883(1)	Si-	O(5) = 1.608(1)
	O(4) = 2.761(1); 3x		O(6) = 1.891(1)		O(6) = 1.609(1)
	O(2) = 2.832(2); 3x		O(7) = 1.891(1)		O(2) = 1.622(1)
Y-	O(1) = 1.975(1); 2x		O(7') = 1.923(1)		O(4) = 1.636(1)
	O(5) = 2.006(1); 2x		O(6') = 1.954(1)	B-	O(1) = 1.364(2)
	O(3) = 2.114(1)		O(3) = 1.990(1)		O(7) = 1.379(1); 2x
	O,F = 1.995(1)				

Tabelle 2

Ausgewählte interatomare Abstände in Å. Standardabweichungen in runden Klammern.

Literatur

- [1] ERTL, A. (1995): Elbait, Olenit, Dravit-Buergerit-Mischkristalle, Dravit, Uvit und ein neuer Al-Tourmalin(?) von österreichischen Fundstellen. - Mitt. Österr. Miner. Ges., 140, 55-72.
- [2] BLOODAXE, E. S., HUGHES, J. M., DYAR, M. D., GREW, E. S. & GUIDOTTI, C. V. (1999): Linking structure and chemistry in the schorl-dravite series. - Amer. Min. 84, 922-928.
- [3] ERTL, A., PERTLIK, F. & BERNHARDT, H.-J. (1997): Investigations on olenite with excess boron from the Koralpe, Styria, Austria. - Österr. Akad. Wiss., Math.-Naturw. Kl., Abt. I, Anzeiger, 134, 3-10.
- [4] TAGG, S. L., CHO, H., DYAR, M. D. & GREW, E. S. (1999): Tetrahedral boron in naturally occurring tourmaline. - Amer. Min., 84, 1451-1455.
- [5] FOIT, F. F. Jr. (1989): Crystal chemistry of alkali-deficient schorl and tourmaline structural relationships. Amer. Min. 74, 422-431.
- [6] PIECZKA, A. (1997): Statistical interpretation of structural parameters of tourmalines: iron ordering in octahedral sites. - "TOURMALINE 1977", Int. Symp. on Tourmaline, Abstracts 70-71.