

DIE KRISTALLSTRUKTUR DES MINERALS HAINIT

Giester, G.¹, Pertlik, F.¹ & Ulrych, J.²

¹Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien, Geozentrum
Althanstraße 14, A-1090 Wien, Österreich

²Geologisches Institut der Akademie der Wissenschaften, Rozvojova 135
CZ-16502 Prag, Tschechische Republik
email: gerald.giester@univie.ac.at

Im Laufe mineralogisch-petrographischer Untersuchungen der Phonolithe der Umgebung von Friedland (Frydlant) in Nordböhmen konnte aus dem Nephelinphonolith vom Hohen Hain (Hradiste) ein bis dahin unbekanntes Silikat isoliert und mit dem Namen Hainit belegt werden. Semiquantitative Analysen ergaben als Hauptelemente Ca, Na und Ti, die Morphologie und die physikalischen Parameter ließen auf eine Verwandtschaft der neuen Phase mit dem Mineral Rinkit (heute Mosandrit) schließen [1]. Neuere Untersuchungen [2] zeigten, dass Hainit mit Götzenit [3] weitestgehend idente physikalische Parameter aufweist und dass die beiden Minerale als isostrukturell anzusehen sind [2, 3]. Zur Belegung dieser Überlegungen wurde am Originalmaterial (am Institut für Mineralogie der Universität Prag hinterlegt) eine Stukturanalyse durchgeführt: Nonius Kappa CCD Diffraktometer; Mo-K α Strahlung; Metrik und Aufstellung der Elementarzelle nach Götzenit [3]; Raumgruppe P-1; $a=9.594(1)$, $b=5.702(1)$, $c=7.288(2)$ [Å]; $\alpha=89.89(3)$, $\beta=101.09(3)$, $\gamma=101.17(3)$ [°]; $V=383.55$ [Å³]; $Z=1$; $R(F): 0.040$ für 3460 Röntgenintensitäten mit $F_o > 4\sigma F_o$ und $2\Phi_{max}=80$ [°]. Die Verfeinerung der Ortsparameter sämtlicher Atome, ausgehend von den für Götzenit [3] angegebenen, unter gleichzeitiger Freigabe der Besetzung der Kationenpositionen ergab, dass das Element Natrium, verteilt auf zwei Punktlagen, von O bzw F Atomen koordiniert wird, in einem Fall von [8] (spezielle Punktlage), im anderen von [7] Atomen. Letztere Punktlage ist statistisch etwa 1:1 mit Na und Ca Atomen belegt. Die Ti Atome sind oktaedrisch [6] koordiniert, wobei diese Punktlage auch zu etwa 20% mit Zr Atomen statistisch besetzt ist. Die verbleibenden zwei Ca Punktlagen sind unregelmäßig [6] bzw. [7] koordiniert. Je zwei SiO₄ Tetraeder bilden über ein gemeinsames O Atom Si₂O₇ Gruppen aus. Diese Gruppen, parallel zu [001] angeordnet, verknüpfen die beschriebenen Kationpolyeder zu einem 3-dimensionalen Gerüst.

Nach [2] sind die beiden Minerale Hainit und Götzenit zwar als isostrukturell anzusehen, repräsentieren jedoch auf Grund ihrer chemischen Zusammensetzung eigenständige Minerale. Ausgehend von den Formeln $Na_2Ca_4[(Ti,Zr,Mn,Fe,Nb,Ta)_{1.50} \quad 0.50](Si_2O_7)_2F_4$ für Hainit und $Na_2Ca_5Ti(Si_2O_7)_2F_4$ für Götzenit, wurden die Na, Ca-Positionen als A-Positionen, jene mit Ti (incl. weiterer Elemente wie Zr, Mn, Fe, Nb, Ta) als B-Position definiert. Das Verhältnis A/B, für Hainit 4, für Götzenit 7, wurde sehr willkürlich als Charakteristikum für die beiden Minerale herangezogen.

Literatur

- [1] BLUMRICH, J. (1892).Tschermaks Mineral. Petr. Mitt. 13,465-495.
[2] JOHAN, Z. & CECH, F. (1989) C. R. Acad. Sci. Paris, t. 308, Serie II, 1237-1242.
[3] CANNILLO, E., MAZZI, F. & ROSSI, G. (1972): Soviet Physics – Crystallography 16, 1026-1030.