

Österreichische Akademie der Wissenschaften

Sitzung der mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse
vom 3. Mai 1956

Sonderabdruck aus dem Anzeiger der math.-naturw. Klasse der
Österreichischen Akademie der Wissenschaften, Jahrgang 1956, Nr. 8

(Seite 83 bis 85)

Das wirkl. Mitglied F. Machatschki übersendet eine kurze
Mitteilung, und zwar:

„Die Struktur zweier Si-armer Amphibole.“ Von
Haymo Heritsch, Peter Paulitsch und Eva-Maria Walitzi.

In gewissen Si-armen Amphibolen tritt formelmäßig
(Ca, Na, K)₂₋₃ auf (vgl. z. B. die Schreibweise bei
F. Machatschki, 1953). Das Überschreiten des Koeffizienten 2
bedeutet, daß nicht nur die Achter-Koordination mit Ca bzw. Na
besetzt ist, sondern auch eine weitere Position A (Bezeichnung
nach B. E. Warren, 1929) (1/2; 0; 1/2) besetzt sein muß. Einer
von uns (H. Heritsch, 1953) hat darauf hingewiesen, daß die
Koordination dieser Position A einer Überprüfung zugeführt
werden müsse.

Als Material für diese Untersuchung eignen sich besonders
Hornblenden, bei denen der Koeffizient für (Ca, Na, K) nahe an 3
liegt. Das ist bei Karinthin von Gertrusk, Kärnten (S. Koritnig,
1940) und einer barroisitischen Hornblende vom Radhausberg,
Salzburg (P. Paulitsch, 1947) der Fall. Diese standen uns im
Originalmaterial zur Verfügung.

Zur Bestimmung der Gitterkonstanten benützten wir Drehkristallaufnahmen um [001] und [010] sowie Weissenberg-Äquatoraufnahmen um dieselben Richtungen und Pseudo-Äquatoraufnahmen um [010] erste Schichtlinie. Die Gitterkonstanten in der Orientierung $I\ 2/m$ lauten für Karinthin:

$a_0 = 9,86 \text{ \AA}$, $b_0 = 17,99 \text{ \AA}$, $c_0 = 5,30 \text{ \AA}$, $\beta = 74^\circ 26'$; für barroisitische Hornblende: $a_0 = 9,90 \text{ \AA}$, $b_0 = 18,04 \text{ \AA}$, $c_0 = 5,33 \text{ \AA}$, $\beta = 73^\circ 15'$. Die berechneten und experimentellen Dichten sind für Karinthin $d_{\text{ber.}} = 3,14$ gegenüber $d_{\text{exp.}} = 3,13$, für barroisitische Hornblende $d_{\text{ber.}} = 3,16$, gegenüber $d_{\text{exp.}} = 3,21$.

Sätze von Weissenbergaufnahmen um [001] (Äquator) lieferten uns die Intensitäten für die Strukturbestimmung unter Anwendung von Kupferstrahlung. Die Intensitäten sind mit Hilfe einer Reflexskala visuell geschätzt und die Absorptionsfaktoren für die spezielle Kristallgestalt — wesentlich $\{110\}$ — wurden graphisch ermittelt. Nach abwechselnder Berechnung von F-Werten für (hk0) und Fourierprojektionen parallel Z wurde ein endgültiger Satz von Atomkoordinaten, x/a und y/b, erhalten. Die z/c-Koordinaten sind durch Raumüberlegungen gewonnen, wie sie schon E. J. W. Whittaker, 1949 und J. Zussman, 1955 an Krokydolith bzw. Aktinolith angestellt haben. Die Atomkoordinaten stimmen mit den von B. E. Warren, 1929 (Tremolit), E. J. W. Whittaker, 1949 (Krokydolith) und J. Zussman, 1955 (Aktinolith) mitgeteilten Werten im allgemeinen gut überein.

Abstandsrechnungen zwischen Kationen und Anionen sowie zwischen Anionen und Anionen ergaben die entsprechenden zu erwartenden Werte. Die Kationen der Sechser-Koordination (Mg, Fe, Ti, Al, Mn) sind zum Unterschied von Krokydolith (E. J. W. Whittaker, 1949) und in Übereinstimmung mit Aktinolith (J. Zussman, 1955) statistisch über ihre drei Punktlagen verteilt.

Die Position A ($1/2; 0; 1/2$), deren Untersuchung diese Arbeit gewidmet ist, erscheint, wie die Fourierprojektionen zeigen, in Karinthin und in barroitischer Hornblende tatsächlich besetzt. In den bis jetzt von den genannten Autoren untersuchten Amphibolen ist sie jedoch als nicht besetzt gefunden worden. Die Peakhöhen der Position A in unseren Fourierprojektionen hatten allerdings nicht die aus den Analysen zu erwartende Höhe. Trotzdem genügen die gefundenen Peakhöhen, um die Besetzung zu belegen.

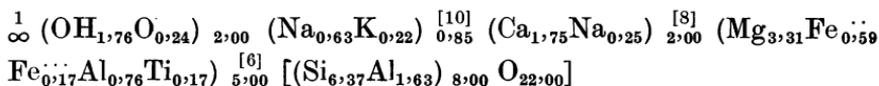
Aus den gefundenen Koordinaten folgt die Abstandstabelle für die Umgebung der Position A.

Umgebung der Position A (1/2; 0; 1/2):

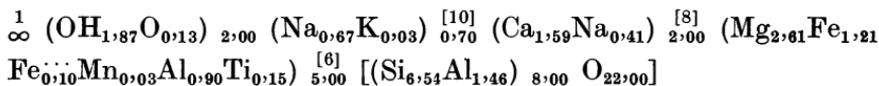
	Barroisitische Hornblende	Karinthin	
0 ₇ '	3,4 ₁ Å	3,3 ₇ Å	2 ×
0 ₆	3,0 ₃ Å	3,0 ₀ Å	4 ×
0 ₅	3,1 ₀ Å	3,1 ₀ Å	4 ×
0 ₇	2,7 ₁ Å	2,7 ₃ Å	2 ×

Die Diskussion der ausgewiesenen Abstände macht von den verschiedenen Möglichkeiten eine Zehner-Koordination am wahrscheinlichsten. Aus Abstandsgründen tritt das gesamte Kalium-Ion in diese Zehner-Koordination ein. Daraus ergeben sich folgende kristalchemische Formeln:

Karinthin



Barroisitische Hornblende



Die ausführliche Arbeit erscheint in Tschermaks Mineralogisch-Petrographischen Mitteilungen.

Literatur:

Heritsch, H. (1953), erschienen 1955, Tschermaks Min. Petr. Mitt. (dritte Folge), 5, 242.

Koritnig, S. (1940), Zentralbl. f. Min. etc., Abt. A, 31.

Machatschki, F. (1953), Spezielle Mineralogie auf geochem. Grundlage, Springer Wien, 44 und 338.

Paulitsch, P. (1947), Tschermaks Min. Petr. Mitt. (dritte Folge), 1, 14.

Warren, B. E. (1929), Zeitschr. f. Kristallographie, 72, 42 und 493.

Whittaker, E. J. W. (1949), Acta Cryst. 2, 312.

Zussman, J. (1955), Acta Cryst. 8, 301.