

Sitzung der mathematisch-naturwissenschaftlichen Klasse
vom 16. Februar 1967

Sonderabdruck aus dem Anzeiger der math.-naturw. Klasse der
Osterreichischen Akademie der Wissenschaften, Jahrgang 1967, Nr. 3

(Seite 89 bis 92)

Das wirkl. Mitglied H. Heritsch übersendet eine kurze Mitteilung, und zwar:

„Über die Struktur des Natrium-Amphibols aus dem Glasbachgraben bei Schlaining, Burgenland.“
Von Eva Maria Walitzi und Jutta Borschutzky. (Aus dem Institut für Mineralogie und Petrographie der Universität Graz.)

Die auffallend niedrige Besetzung der 8-Koordination in der chemischen Formel des Natrium-Amphibols vom Glasbachgraben gab Anlaß zu der vorliegenden, mit zweidimensionalen Fouriermethoden ausgeführten Strukturuntersuchung, H. Heritsch (1965). Es wird damit die Reihe der am hiesigen Institut seit H. Heritsch (1953/56) — vor allem in Hinblick auf die Besetzung der 10-koordinierten Position A — durchgeführten kristallchemischen Untersuchungen an Mineralien der Amphibolgruppe fortgesetzt. Besonderes Interesse gilt der Kationenverteilung in den Positionen M_1 , M_2 und M_3 .

Die Gitterkonstanten des Natrium-Amphibols vom Glasbachgraben in der Aufstellung $C 2/m$ betragen nach H. Heritsch (1965):

$$a = 9,68 \text{ \AA} \pm 0,01, \quad b = 17,96 \text{ \AA} \pm 0,05, \quad c = 5,33 \text{ \AA} \pm 0,01, \\ \beta = 103^\circ 27' \pm 06'.$$

Spaltstücke des von H. Heritsch (1965) chemisch und optisch untersuchten Materials wurden zur Gewinnung der Intensitätsdaten der $hk0$ -Reflexe verwendet. Die aus integrierten Weißenberg-Äquatoraufnahmen um $[001]$ (hergestellt mit Cu- und Mo-Strahlung) visuell geschätzten Reflexintensitäten sind bis zu einem Bereich von $\sin \theta/\lambda$ ca. $0,8 \text{ \AA}^{-1}$ erfaßt. Auf eine

Absorptionskorrektur konnte verzichtet werden. Die Streukurven für die Strukturfaktorenberechnung sind den International Tables (1962) entnommen. Schrittweise Verfeinerung unter Anwendung eines isotropen Temperaturfaktors führte zu einer Fourierprojektion parallel [001], vgl. Abb. 1, und zu einem

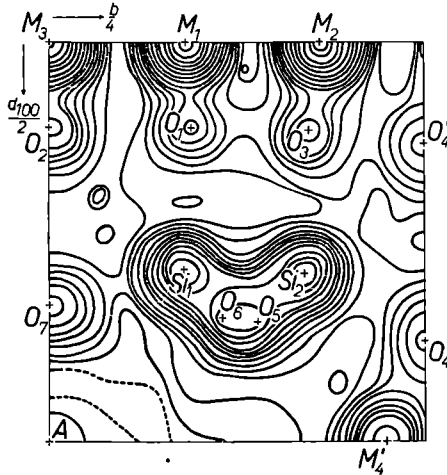


Abb. 1. Fourierprojektion parallel [001]. Der Konvergenzfaktor für die Fourierkoeffizienten beträgt $\exp(-4,7 \sin^2 \theta / \lambda^2)$. Die Nulllinie ist strichliert gezeichnet. Die Höhenschichtlinien sind bis 10 e.Å^{-2} im Abstand von 1 e.Å^{-2} und ab 10 e.Å^{-2} im Abstand von 2 e.Å^{-2} eingetragen.

Satz von x- und y-Koordinaten, vgl. Tabelle 1, (siehe Seite 3) bei einem Zuverlässigkeitsfaktor $R_{\text{hko}} = 0,117$ (nur beobachtete Reflexe berücksichtigt). Als z-Parameter wurden die geringfügig geänderten Werte der Hornblende Stramez, vgl. F. Trojer und E. M. Walitzi (1965) eingesetzt.

Die Fourierprojektion parallel [001], vgl. Abb. 1, zeigt, daß die Position A im Natrium-Amphibol aus dem Glasbachgraben nicht besetzt ist, wie das bei fehlendem Ersatz von Si durch Al in den Silizium-Sauerstoff-Bändern zu erwarten war, vgl. B. E. Warren (1930) und z. B. S. Ghose (1965).

Die niedrige Besetzung der 8-koordinierten Position M_4 mit $(\text{Ca}_{0,16} \text{Na}_{1,29} \text{K}_{0,11})_{1,56}$ drückt sich in der geringen Peakhöhe von M_4 in der Fourierprojektion sowie in der Größe der Elektronenzahl aus. Die Elektronenzahl der Position M_4 hat für den vorliegenden Natrium-Amphibol einen Wert von 13, während die

Tabelle 1. Atomkoordinaten in C 2/m.

Atom	x	y	z
O ₁	0,114	0,096	0,21
O ₂ (OH)	0,106	0,000	0,71
O ₃	0,108	0,172	0,71
O ₄	0,373	0,253	0,81
O ₅	0,352	0,138	0,14
O ₆	0,345	0,114	0,65
O ₇	0,332	0,000	0,33
M ₁	0,000	0,090	0,50
M ₂	0,000	0,174	0,00
M ₃	0,000	0,000	0,00
M ₄	0,000	0,277	0,50
Si ₁	0,287	0,089	0,34
Si ₂	0,291	0,169	0,85

Tabelle 2. Die wichtigsten interatomaren Abstände in Å.

SiO-Tetraeder:

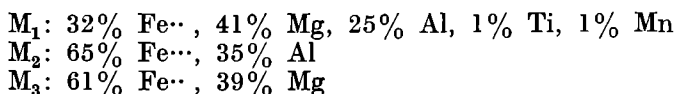
Si ₁ —O ₁	1,67	Si ₂ —O ₃	1,76
—O ₅	1,62	—O ₄	1,66
—O ₆	1,67	—O ₅	1,62
—O ₇	1,66	—O ₆	1,67
Mittel	1,66	Mittel 0—0	2,70;
		Mittel	1,68; Mittel 0—0
			2,73

Koordinationspolyeder um M₁, M₂, M₃ und M₄:

M ₁ —O ₁	2,13 (2×)	M ₂ —O ₁	1,95 (2×)
—O ₂	2,09 (2×)	—O ₃	2,05 (2×)
—O ₃	1,99 (2×)	—O ₄	1,93 (2×)
Mittel	2,07; Mittel 0—0	2,93; Mittel	1,98; Mittel 0—0
			2,82
M ₃ —O ₁	2,19 (4×)	M ₄ —O ₃	2,34 (2×)
—O ₂	2,05 (2×)	—O ₄	2,32 (2×)
Mittel	2,14; Mittel 0—0	3,06; —O ₅	2,60 (2×)
		—O ₆	2,65 (2×)
		Mittel	2,48; Mittel 0—0
			2,93

hier bisher untersuchten Hornblenden bei Vollbesetzung der 8-Koordination für M₄ Elektronenzahlen von 16 bis 19 aufweisen, vgl. H. Heritsch und L. Riechert (1959/61). Obwohl der mittlere M₄-O-Abstand, vgl. Tabelle 2, 2,48 Å beträgt, wird der in der chemischen Analyse ausgewiesene Kaliumgehalt in die M₄-Position hineinzurechnen sein, da der Kaliumanteil nur 7% von der M₄-Besetzung ausmacht.

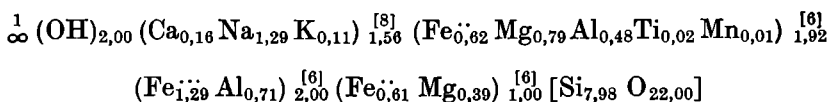
Für die Kationen in der 6-Koordination wurde eine nicht statistische Besetzung der Punktlagen M_1 , M_2 und M_3 mit



angenommen.

Eine deutliche Verschlechterung des Zuverlässigkeitsfaktors bei statistisch gerechneten Strukturparametern spricht vor allem für eine nicht statistische Verteilung. Die mittlere M_2 -O-Distanz von 1,98 Å, vgl. Tabelle 2, als kleinste M-O-Entfernung macht eine bevorzugte Besetzung von M_2 durch $\text{Fe}^{\cdot\cdot\cdot}$ neben Al wahrscheinlich.

Die spezielle kristallchemische Formel des Natrium-Amphibols aus dem Glasbachgraben kann daher mit



angegeben werden.

Es wird daran gedacht, eine weitere Verfeinerung der Koordinaten durchzuführen.

Herrn Prof. Dr. H. Heritsch danken wir für die Anregung zu dieser Arbeit sowie für die Überlassung des Originalmaterials.

Literatur

- Ghose, S. (1965). A scheme of cation distribution in the amphiboles. *Min. Mag.* 35, 46.
- Heritsch, H. (1953/56). Bemerkungen zur Schreibung der kristallchemischen Formel der Hornblende. *Tschermaks Min. Petr. Mitt. (Dritte Folge)* 5, 242.
- Heritsch, H. (1965). Der Natrium-Amphibol aus dem Glasbachgraben bei Schlaining, Burgenland. *Tschermaks Min. Petr. Mitt. (Dritte Folge)* 10, 209.
- Heritsch, H. und Riechert, L. (1959/61). Strukturuntersuchung an einer basaltischen Hornblende von Černošín, ČSR. *Tschermaks Min. Petr. Mitt. (Dritte Folge)* 7, 235.
- International Tables for X-Ray Crystallography (1962). Vol. III. Kynoch Press, Birmingham.
- Trojer, F. und Walitzi, E. M. (1965). Strukturuntersuchung an einer Hornblende aus dem eklogitischen Gestein von Stramez, südliche Koralpe. *Tschermaks Min. Petr. Mitt. (Dritte Folge)* 10, 233.
- Warren, B. E. (1930). The crystal structure and chemical composition of the monoclinic amphiboles. *Z. Krist.* 72, 493.