

Die gemittelte Struktur des Labradorits

The average structure of the labradorite

Von S. Klein [1] und M. Korekawa, München

Mit 1 Abbildung und 1 Tabelle im Text

KLEIN, S. & KOREKAWA, M.: Die gemittelte Struktur des Labradorits. [The average structure of the labradorite.] – N. Jb. Miner. Mh., 1976, H. 2, 66–69, Stuttgart, 1976.

Key words: Plagioclase, labradorite, space group, parameter (lattice constants), diagram, temperature, anisotropy.

Labradoritkristalle zeigen bei Röntgenbeugungsexperimenten neben Hauptreflexen noch Satellitenreflexe, die von einer Überstruktur herühren, die bisher jedoch quantitativ nicht bestimmt werden konnte. 1976 wurde von M. KOREKAWA [2] eine Theorie aufgestellt, die es gestattet, die Überstruktur aus allgemeinen Eigenschaften der Satellitenintensitäten bestimmen. Danach beruht die Überstruktur des Labradorits in erster Linie auf einer nicht-statistischen Verteilung der Ca/Na- und Al/Si-Atome, wobei letztere im Röntgenfalle wegen der geringen Unterschiede in den Atomformfaktoren nur eine untergeordnete Rolle spielen [3]. Daneben wird die Überstruktur von einer Störung der Translationsinvarianz der Atomlagen zwischen benachbarten Zellen getragen, die nach KOREKAWA durch Verschiebungswellen beschrieben werden kann. Hinweise über die Richtung und den Betrag dieser Verschiebungswellen liefert die anisotrope Verfeinerung der Atomparameter mit Hilfe der Hauptreflexe. Denn die Lage und die Intensität der Hauptreflexe werden ausschließlich von der gemittelten Struktur festgelegt, wogegen sich die Verschiebung der Ortsparameter der Überstruktur in verstärkten anisotropen Temperaturkoeffizienten niederschlägt.

Mit einem Röntgen-Einkristall-Diffraktometer wurden die integrierten Intensitäten von 3263 Hauptreflexen eines Labradoritkristalls bestimmt. In der Meßprobe handelt es sich um einen Kristall mit pauschaler Zusammensetzung von 52 Mol-% Anorthitgehalt aus Labrador. Die Anorthit-Struktur gehört zur Raumgruppe $P\bar{1}$ mit $c \approx 14 \text{ \AA}$ mit der Annahme der Zentralsymmetrie und die Albit-Struktur zur Raumgruppe $C\bar{1}$ mit $c \approx 7 \text{ \AA}$. Überziehen wir uns bei der gemittelten Struktur des Labradorits auf die Anorthit-Zelle mit $a = 8,176(3)$, $b = 12,841(3)$, $c = 14,207(3) \text{ \AA}$, $\alpha = 93,53(5)^\circ$, $\beta = 116,27(5)^\circ$, $\gamma = 89,77(5)^\circ$, so erhalten wir für die 8 Ca/Na, 32 Al/Si- und 64 O-Atome die identischen Punktlagen x, y, z ; $x + 1/2, y + 1/2, z$; $x, y, z + 1/2$; $x + 1/2, y + 1/2, z + 1/2$.

river
 utt
 e c
 en
 r H
 . 18
 et,
 en
 - Li
 wo
 At
 rd
 nla
 a V
 ch
 rfe
 ge u
 ttel
 er
 ied
 gra
 nt. F
 mme
 ruk
 ent
 Ä. S
 e a
 a
 a/N
 + 3

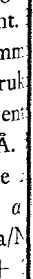


Fig. 1. The centrosymmetric structure of the labradorite.

drei Hauptachsen der Ellipsoide aus den anisotropen Temperaturkoeffizienten ergeben. Die großen Volumina aller O-, Ca- und Na-Ellipsoide fallen gegenüber den kleinen Volumina der Al/Si-Ellipsoide auf. Bemerkenswert ist dabei, daß die drei O-Atome Oc(m), Ob(m) und Oa (1), welche die größten Abstand größten Temperaturkoeffizienten aufweisen, zum T1(m)-Tetraeder gehören, was sehr wahrscheinlich auf Al-Besetzung zurückzuführen ist.

Tab. 1. Atomparameter der gemittelten Struktur des Labradorits.

Tab. 1. Atom parameters of the labradorite structure.

	M	x	y	z	B11	B22	B33	B12	B13	B23
Od(m)	1.0	0.1884	0.8670	0.2158	1.78	1.73	1.37	0.26	0.01	0.11
Od(o)	1.0	0.1987	0.1077	0.1918	1.68	1.72	1.03	-0.01	0.19	0.11
Oc(m)	1.0	0.0149	0.6888	0.1085	2.02	2.20	1.55	1.09	0.07	-0.01
Oc(o)	1.0	0.0140	0.2929	0.1390	1.81	1.93	1.54	-0.20	0.58	0.03
Ob(m)	1.0	0.3171	0.3537	0.1232	1.94	1.64	3.12	0.20	1.23	-0.01
Ob(o)	1.0	0.3121	0.6066	0.0949	1.62	1.45	1.78	-0.07	0.69	-0.01
Oa(2)	1.0	0.0821	0.4936	0.1390	1.11	1.06	1.14	0.03	0.29	0.01
Oa(1)	1.0	0.0037	0.1297	0.9896	2.33	2.46	0.96	0.22	0.74	0.01
T2(m)	1.0	0.6823	0.8797	0.1738	0.62	0.59	0.47	0.05	0.07	0.01
T2(o)	1.0	0.6862	0.1094	0.1585	0.56	0.48	0.49	0.18	0.04	-0.01
T1(f)	1.0	0.0036	0.8177	0.1159	0.76	0.93	0.36	0.50	0.06	0.01
T1(o)	1.0	0.0060	0.1647	0.1069	0.82	1.11	0.44	-0.21	0.11	0.01
Na	0.48	0.2675	0.9728	0.0867	0.31	2.33	0.83	-0.49	0.14	-0.01
Ca	0.52	0.2696	0.0268	0.0520	1.26	2.57	2.24	0.41	0.21	-0.01

Gehen wir davon aus, daß alle Atome in erster Näherung thermischen Schwingungen gleicher Größenordnung unterliegen, so können wir auf festes Al/Si-Gerüst schließen, in dem die O-, Ca- und Na-Atome in Form von Verschiebungswellen Beiträge zur Überstruktur liefern. Diese Informationen sollten neben der mit dem USCI-Programm bestimmten Überstrukturzelle [6] einen entscheidenden Beitrag zur endgültigen Lösung dieses Überstrukturproblems liefern.

Literatur

- [1] KLEIN, S. (1970): Teil der Diplomarbeit unter Anleitung von H. JAGODZINSKI, Universität München.
- [2] KOREKAWA, M. (1967): Habilitationsschrift, Universität München.
- [3] KOREKAWA, M. & JAGODZINSKI, H. (1967): Die Satellitenreflexe des Labradorits. - Schweiz. Miner. Petrogr. Mitt. 47, 269-278.
- [4] BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1962): ORFLS. - Report ORNL-TM-305, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- [5] JOHNSON, C. K. (1965): ORTEP. - Report ORNL-3794, Revised, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee.
- [6] KLEIN, S. (1975): USCI-Programm. - J. Appl. Cryst., 8, 649-652.