

Atomanordnung und Strukturverfeinerung von Cancrinit

Von O. JARCHOW

Mineralogisch-Petrographisches Institut der Universität Hamburg

(Eingegangen am 15. Juli 1965)

Abstract

X-ray photographs of (Ca, Na)CO₃ cancrinites show diffuse satellites with the indices ($hkl \pm \frac{3}{4}$). The examined crystals from Litchfield, U.S.A., have the space group $P6_3$ and the lattice dimensions $a = 12.75 \text{ \AA}$ and $c = 5.14 \text{ \AA}$.

The crystal structure has been determined—independently of all previous structure assumptions—from the relation of the transformation hauyn—cancrinite and refined on three-dimensional data by the least-squares method to $R = 0.089$.

The structure is composed of an ordered Si, Al framework with channels around the threefold axis and the axis 6_3 ; the other cations and anions as Na, Ca, H₂O, CO₃ etc. are enclosed in these channels.

Auszug

Röntgenaufnahmen von (Ca, Na)CO₃-Cancriniten zeigen neben scharfen Reflexen diffuse Satelliten mit den Indizes ($hkl \pm \frac{3}{4}$). Der untersuchte Cancrinit von Litchfield, U.S.A., hat die Raumgruppe $P6_3$ und die Gitterkonstanten $a = 12,75$ und $c = 5,14 \text{ \AA}$.

Die Kristallstruktur wurde — unabhängig von allen bisherigen Strukturvorschlägen — aus der Transformationsbeziehung Hauyn—Cancrinit bestimmt und nach der Methode der kleinsten Quadrate bis zu einem R -Faktor von 8,9% dreidimensional verfeinert.

Die Struktur besteht aus einem geordneten Si, Al-Gerüst mit Kanälen um die 3zähligen Achsen und um die Achsen 6_3 , in denen weitere Kationen und Anionen, wie Na, Ca, H₂O, CO₃ u. a., enthalten sind.

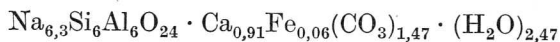
Einführung

In der systematischen Mineralogie wird der Cancrinit zusammen mit Davyn, Wischnewit und Mikrosommit den hexagonalen Feldspatvertretern zugeordnet. Die aufgeführten Substanzen und ihre vielen Zwischenglieder lassen sich vom strukturellen Gesichtspunkt alle

als Glieder der Cancrinitreihe beschreiben. Ihnen allen liegt das gleiche Bauprinzip zugrunde, eine $\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24}$ -Gerüststruktur, in der verschiedene Anionen- und Kationen Gruppen eingelagert werden können. Entsprechend ihrem unterschiedlichen Raumbedarf verursachen diese Einlagerungen eine schwache, unterschiedliche Deformation der einzelnen Gitter. Es scheint daher sinnvoller, die Einlagerungen in Beziehung zur Grundstruktur zu setzen und diese Beziehung auch namentlich zu kennzeichnen, wie: Karbonat-Cancrinit, Sulfat-Cancrinit, usw.

Während man den Cancrinit früher allein als Zersetzungsprodukt des Nephelins ansah, gilt es heute als sicher, daß er zum großen Teil als selbständige magmatische Ausscheidung unter hohem CO_2 -Druck entstanden ist. Dafür sprechen die Syntheseversuche von EITEL (1922, 1954), BARRER und WHITE (1952), WYART und MICHEL-LEVY (1949), LITVIN und DEMJANETS (1961), EDGAR und BURLEY (1963), EDGAR (1964), REESE (1965) u.a. Versuche von BARRER and FALCONER (1956) über die Ionenaustauschenschaften des Cancrinites bestätigen — ebenso wie die Syntheseversuche — die variable chemische Zusammensetzung der Cancrinite bei annähernd gleichbleibender Struktur. Zum gleichen Ergebnis führen chemische Analysen natürlicher Cancrinite verschiedener Fundorte.

Für die vorliegende röntgenographische Untersuchung wurde Material unterschiedlicher Vorkommen (Litchfield, U.S.A., Ilmengebirge und Barkevitz, Norwegen) getestet. Die Strukturanalyse erfolgte an dem Material aus Litchfield. Die chemische Analyse dieses Vorkommens ergab die Zusammensetzung



(die Analyse wurde auf der Basis $\text{Si} + \text{Al} = 12$ berechnet). Wie die Strukturanalyse zeigt, wird diese Formelschreibweise den strukturellen Besonderheiten des Cancrinites nicht gerecht, da es sich hier um eine fehlgeordnete Einlagerungsverbindung handelt. So zeigen Röntgenaufnahmen aller drei Vorkommen neben den scharfen Reflexen noch schwache, diffuse Satellitenreflexe. Aus einer Strukturanalyse unter Einbeziehung nur scharfer Reflexe, wie es in dieser Arbeit ausschließlich geschieht, folgt die röntgenographisch bestimmte Zusammensetzung $\text{Na}_6[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}] \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

In einer späteren Untersuchung soll der Zusammenhang zwischen verschiedenen Einlagerungen und den Satellitenreflexen geklärt werden.

