©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

Carinthia II	182./102. Jahrgang	S. 727–738	Klagenfurt 1992

Zur Fe-Mg-Verteilung in zwei Anthophylliten aus Kärnten

Von Eva Maria WALITZI, Michael SCHLAMADINGER und Franz WALTER

Mit 3 Abbildungen und 6 Tabellen

Zusammenfassung: Von zwei Anthophylliten von Kärntner Fundpunkten, St. Leonhard/Saualpe und Roßalm/Reißeckgruppe, wurden chemische Analysen und Kristallstrukturverfeinerungen durchgeführt sowie kristallographische und optische Daten bestimmt. Infrarot- und Mößbauerspektren bestätigen den unterschiedlichen Chemismus und den hohen Ordnungsgrad von Eisen und Magnesium in den Kristallstrukturen. Ein deutlicher Zusammenhang zwischen dem $Mg/(Mg+Fe^{2+})$-Verhältnis und der Differenz der Winkel O5-O6-O5 in der A- und B-Tetraederkette konnte festgestellt werden.

Abstract: Chemical analyses and crystal structure refinements of two anthophyllites from Carinthian locations, St. Leonhard/Saualpe and Rossalm/Reisseckgroup have been done. Crystallographical and optical data were determined. Infrared and Moessbauer spectra confirm the different chemical compositions and the high degree of iron and magnesium ordering in the crystal structures. A clear correlation between $Mg/(Mg+Fe^{2+})$ ratio and difference of O5-O6-O5 angles in tetrahedral A and B chain could be found.

EINLEITUNG

Um die Reihe der kristallchemischen Untersuchungen an rhombischen Amphibolen der näheren Umgebung fortzusetzen, wurden Anthophyllite von zwei Fundpunkten in Kärnten aufgesammelt: Anthophyllit von St. Leonhard an der Saualpe (Österreichische Karte 1:50.000, Blatt 187 Bad St. Leonhard, ca. 1200 m Seehöhe, 14°42'14"/46°47'25") und Anthophyllit von der Roßalm/Reißeckgruppe (Österreichische Karte 1:50.000, Blatt 182 Spittal an der Drau, ca. 2350 m Seehöhe, 13°23'11"/46°53'53").

Die beiden Anthophyllite unterscheiden sich in ihrer chemischen Zusammensetzung, besonders im Mg-Fe-Verhältnis. Die geordnete Aufteilung von Magnesium und Eisen innerhalb des Kristallgitters wird durch Strukturverfeinerungen bestimmt und mit den entsprechenden Ergebnissen aus Infrarot- und Mößbauer-Spektren verglichen.

Der Anthophyllit von St. Leonhard stammt aus Meta-Ultrabasiten, welche als tiefste Einheit zusammen mit Granatglimmerschiefern, Marmo-

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

ren, Kalksilikatschiefern und Amphiboliten die Plankogelserie aufbauen (WEISSENBACH, 1975). Neben den Rosetten aus hellem, radialstrahligem Anthophyllit konnten röntgenographisch Talk, Klinochlor, Klinoenstatit und ein eisenhältiges Karbonat festgestellt werden. Der Anthophyllit von der Roßalm tritt in Serpentinitkörpern auf, welche in Bändergneisen und Amphiboliten liegen, die nach CLIFF et al. (1971) Gesteine der inneren Schieferhülle sind. Die weißen rosetten- und garbenförmig angeordneten Anthophyllitfasern werden von Talk und Chlorit begleitet.

EXPERIMENTELLES UND STRUKTURBESTIMMUNG

Die Anreicherung des Probenmaterials erfolgte in beiden Fällen nach einer Vorpräparation durch Anreicherung mit dem Magnetseparator und durch anschließendes Aussuchen von Hand unter dem Stereomikroskop. Hiebei erwies sich das Aussortieren der reinen Proben, besonders vom Fundpunkt St. Leonhard, als schwierig, da zwischen den Anthophyllitbüscheln feinstschuppiger Talk und Chlorit eingelagert waren. Schließlich konnte eine mit dem Diffraktometer überprüfte Homogenität der Anthophyllite erreicht werden. Neben Analysen mit dem Absorptionsspektrometer und Messungen an einer Elektronenstrahlmikrosonde wurden naßchemische Vollanalysen, vgl. Tabelle 1, durchgeführt; der ausgewiesene H_2O^+-Wert ist als Glühverlust bestimmt und wurde daher, ebenso wie die geringen Analysenwerte für Titan und Kalium, nicht in die Formelberechnung (auf der Basis von 15 Kationen) einbezogen. Die Formelberechnungen bilden die Grundlagen für die anschließenden Strukturverfeinerungen, unter Berücksichtigung der OH-Gruppen als Sauerstoffe und der geringen Werte von Mangan, Calcium und Natrium als Eisen. Die Zellparameter wurden mittels eines Guinierdiffraktometers (Type 642 der Fa. Huber) aus jeweils 30 Reflexen ($18^0 < 2\Theta < 65^0$) ermittelt. Die Bestimmung der optischen Daten erfolgte am Spindeltisch mit den Einkristallen, welche für die Strukturverfeinerungen verwendet wurden. Die Abmessungen der farblosen, prismatischen Kristalle betrugen 0,25 x 0,085 x 0,04 mm für den Anthophyllit/St. Leonhard und 0,30 x 0,10 x 0,05 mm für den Anthophyllit/Roßalm. Die Messung der Intensitäten wurde an einem automatischen STOE-Vierkreisdiffraktometer (MoKα-Strahlung, Graphitmonochromator) durchgeführt. Für den Anthophyllit/St. Leonhard wurden 1572 ($F_o < 6\sigma F_o = 1082$) bzw. für den Anthophyllit/Roßalm 4283 ($F_o < 6\sigma F_o = 2601$) unabhängige Reflexe gemessen. Gitterkonstanten und optische Daten sind in Tabelle 1 enthalten. Die Ausgangsbasis für die Strukturverfeinerungen mit dem Programm SHELX-76 (SHELDRICK, 1976) waren die Daten des Anthophyllits von FINGER (1970). Lorentz- und Polarisationsfaktoren wurden ange-

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

Tab. 1: Naßchemische Analyse, Formelkoeffizienten (berechnet auf der Basis von 15 Kationen), optische und kristallographische Daten sowie Dichte für den Anthophyllit/St. Leonhard und für den Anthophyllit/Roßalm.

	St. Leonhard			Roßalm		
	Gew.-%			Gew.-%		
SiO_2	57.69	Si	7.63	57.18	Si	7.89
Al_2O_3	1.51	Al	0.24	0.20	Al	0.03
			7.87			7.92
TiO_2	0.04	Ti^{4+}	—	0.04	Ti^{4+}	—
Fe_2O_3	0.79	Fe^{3+}	0.08	3.20	Fe^{3+}	0.33
FeO	6.34	Fe^{2+}	0.70	10.48	Fe^{2+}	1.21
MnO	0.09	Mn^{2+}	0.01	0.24	Mn^{2+}	0.03
MgO	31.86	Mg	6.28	26.57	Mg	5.47
CaO	0.43	Ca	0.05	0.22	Ca	0.03
Na_2O	0.04	Na	0.01	0.05	Na	0.01
K_2O	0.01	K	—	0.02	K	—
			7.13			7.08
$H_2O^+_{(ber.)}$	2.27	OH	2.00	2.05	OH	2.00
Σ	101.07			100.25		

$n\alpha$	1.614	Raumgruppe		1.621	
$n\beta$	1.623	Pnma		1.631	
$n\gamma$	1.630	Z = 4		1.643	
$2V_{n\alpha\ beob.}$	81.0^o r > v		$2V_{n\gamma\ beob.}$	85.2^o	r < v
$2V_{n\alpha\ ber.}$	82.4^o		$2V_{n\gamma\ ber.}$	85.4^o	
a [Å]	18.543(4)			18.565(2)	
b [Å]	17.997(3)			18.028(2)	
c [Å]	5.281(1)			5.286(1)	
V [$Å^3$]	1762.3(5)			1769.1(5)	
$D_{ber.}$ [$g.cm^{-3}$]	3.04			3.12	

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

wendet, auf Absorptionskorrekturen konnte wegen der geringen Kristallgrößen verzichtet werden. Die Streufaktoren für neutrale Atome sind den International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. IV (1974) entnommen. Die Strukturverfeinerung im Hinblick auf die Besetzung der M-Positionen bereitete beim Anthophyllit/St. Leonhard ebenso große Schwierigkeiten wie das Aussuchen von reinem Probenmaterial. Auf Grund der feinfaserigen Ausbildung fanden sich wenige zur Messung geeignete Einkristalle. Davon mußten wieder einige nach Überprüfung durch Weissenbergaufnahmen ausgeschieden werden, und schließlich war auch noch eine Selektion nach der Qualität der Reflexe am automatischen Vierkreisdiffraktometer notwendig. Eine mögliche Verunreinigung im kleinsten Bereich einerseits und die nicht sehr gute Qualität der Intensitätsdaten andererseits geben die Erklärung für folgende Ergebnisse: Bei schließlich realistischen Atomkoordinaten und der chemi-

Tab. 2: Atomkoordinaten von Anthophyllit/St. Leonhard sowie Atomkoordinaten und isotrope Temperaturfaktoren [$B_{eq} = 8/3\ \pi^2(U_{11} + U_{22} + U_{33})$] von Anthophyllit/Roßalm.

Atom	x		y		z		$B_{eq}[Å^2]$
	St.Leonh.	Roßalm	St.Leonh.	Roßalm	St.Leonh.	Roßalm	Roßalm
M1	0.126(1)	0.1252(1)	0.163(1)	0.1633(1)	0.389(2)	0.3936(5)	0.38
M2	0.125(1)	0.1249(1)	0.073(1)	0.0732(7)	-0.107(2)	-0.1075(5)	0.34
M3	0.127(1)	0.1261(2)	0.25	0.25	-0.102(4)	-0.1062(7)	0.48
M4	0.124(1)	0.1238(1)	-0.009(1)	-0.0095(1)	0.388(2)	0.3903(2)	0.58
T1A	0.230(1)	0.2305(1)	-0.165(1)	-0.1656(1)	-0.433(2)	-0.4327(4)	0.29
T1B	0.019(1)	0.0186(1)	-0.167(1)	-0.1662(1)	0.276(2)	0.2743(4)	0.27
T2A	0.227(1)	0.2273(1)	-0.079(1)	-0.0797(1)	0.064(2)	0.0646(4)	0.29
T2B	0.025(1)	0.0248(1)	-0.082(1)	-0.0820(1)	-0.223(2)	-0.2243(4)	0.36
O1A	0.183(1)	0.1826(3)	0.163(1)	0.1628(3)	0.052(4)	0.0592(10)	0.48
O1B	0.070(2)	0.0685(3)	0.161(2)	0.1636(3)	-0.271(5)	-0.2719(10)	0.53
O2A	0.185(1)	0.1861(3)	0.078(1)	0.0775(3)	-0.429(5)	-0.4357(10)	0.51
O2B	0.064(1)	0.0635(3)	0.076(1)	0.0776(1)	0.214(4)	0.2212(10)	0.48
O3A	0.181(2)	0.1826(4)	0.25	0.25	-0.439(7)	-0.4410(14)	0.38
O3B	0.069(2)	0.0694(4)	0.25	0.25	0.233(6)	0.2293(13)	0.42
O4A	0.187(1)	0.1873(3)	-0.001(1)	-0.0014(3)	0.069(5)	0.0738(10)	0.49
O4B	0.068(1)	0.0665(3)	-0.007(1)	-0.0064(3)	-0.291(4)	-0.2905(10)	0.53
O5A	0.197(1)	0.1974(3)	-0.117(1)	-0.1182(3)	0.331(4)	0.3304(10)	0.60
O5B	0.051(1)	0.0505(3)	-0.113(1)	-0.1120(3)	0.055(4)	0.0540(10)	0.51
O6A	0.201(1)	0.1994(3)	-0.130(1)	-0.1303(3)	-0.171(4)	-0.1737(10)	0.60
O6B	0.049(1)	0.0487(3)	-0.139(1)	-0.1401(3)	-0.451(4)	-0.4512(9)	0.45
O7A	0.203(2)	0.2019(4)	-0.25	-0.25	0.542(5)	0.5427(16)	0.81
O7B	0.047(2)	0.0473(4)	-0.25	-0.25	0.219(6)	0.2216(15)	0.45

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

schen Analyse entsprechender Kationenbesetzung von T1 und T2 mit Silizium, M1, M2, M3 nur mit Magnesium und M4 mit 0,60 Magnesium und 0,40 Eisen verfeinerte der R-Wert nicht unter 10,0%. Die resultierenden isotropen Temperaturkoeffizienten für M1, M2 und M3 unterschieden sich beträchtlich, und eine anisotrope Verfeinerung lieferte keine Konvergenz.

Für den Anthophyllit/Roßalm ergab die Strukturverfeinerung bei einem resultierenden R-Wert von 5,5% eine Kationenbesetzung von T1 und T2 mit Silizium sowie M2 nur mit Magnesium, M1 und M3 mit sehr wenig Eisen und M4 mit 0,30 Magnesium und 0,70 Eisen.

In Tabelle 2 sind die Atomkoordinaten des Anthophyllits/St. Leonhard und des Anthophyllits/Roßalm sowie dessen äquivalente isotrope Temperaturfaktoren zusammengestellt. Tabelle 3 zeigt ausgewählte Bindungslängen für beide Anthophyllite; die Sauerstoff-Sauerstoff-Abstände und die interatomaren Winkel weisen durchschnittlich die in rhombischen Amphibolen üblichen Werte auf.

Tab. 3: Ausgewählte Bindungslängen [Å] von Anthophyllit/St. Leonhard und von Anthophyllit/Roßalm.

	St. Leonhard		Roßalm			St. Leonhard		Roßalm	
	A-Kette	B-Kette	A-Kette	B-Kette		A-Kette	B-Kette	A-Kette	B-Kette
T1-O1	1.612(24)	1.642(29)	1.616(6)	1.618(6)	M1-O1	2.071(25)	2.074(28)	2.064(6)	2.057(6)
-O5	1.644(22)	1.639(24)	1.635(6)	1.633(6)	-O2	2.130(26)	2.161(25)	2.118(6)	2.126(6)
-O6	1.614(22)	1.628(23)	1.616(6)	1.624(5)	-O3	2.074(27)	2.057(25)	2.084(5)	2.067(5)
-O7	1.620(14)	1.615(16)	1.616(3)	1.626(3)	M1-O	2.095		2.086	
T1-O	1.623	1.631	1.621	1.625					
T2-O2	1.632(25)	1.655(25)	1.610(6)	1.641(6)	M2-O1	2.123(24)	2.073(29)	2.129(6)	2.124(6)
-O4	1.597(25)	1.605(24)	1.596(6)	1.605(6)	-O2	2.036(27)	2.038(25)	2.075(6)	2.079(6)
-O5	1.661(21)	1.640(24)	1.664(6)	1.637(6)	-O4	1.981(27)	2.029(24)	2.017(6)	2.044(6)
-O6	1.610(22)	1.644(23)	1.639(6)	1.653(5)	M2-O	2.047		2.078	
	1.625	1.636	1.627	1.634					
T1-T2(+z)	3.045(13)	3.053(12)	3.052(3)	3.056(3)	M3-O1(2x)	2.041(26)	2.125(30)	2.082(6)	2.083(6)
T1-T2(-z)	3.072(13)	3.059(12)	3.076(3)	3.044(3)	-O3	2.043(40)	2.077(36)	2.058(8)	2.062(8)
T1-T1	3.063(13)	2.988(13)	3.044(3)	3.022(3)	M3-O	2.075		2.075	
M1-M1	3.117(10)		3.126(3)		M4-O2	2.157(24)	2.097(24)	2.153(6)	2.128(6)
M1-M2(+z)	3.085(16)		3.098(3)		-O4	2.051(26)	1.991(22)	2.052(6)	1.995(6)
M1-M2(-z)	3.122(16)		3.107(4)		-O5	2.377(21)	2.902(23)	2.409(6)	2.902(6)
M1-M3(+z)	3.026(20)		3.069(4)		-O6	3.491(22)	2.860(21)	3.466(6)	2.862(6)
M1-M3(-z)	3.106(20)		3.072(4)		M4[4]	2.074		2.082	
M1-M4	3.101(9)		3.116(3)		M4[5]	2.135		2.147	
M2-M3	3.189(9)		3.188(2)		M4[6]	2.256		2.267	
M2-M4(+z)	3.000(14)		3.024(3)		M4[7]	2.348		2.357	
M2-M4(-z)	3.045(14)		3.045(3)		M4[8]	2.491		2.496	

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

INFRAROT- UND MÖSSBAUERSPEKTREN

Zum Vergleich wurden nicht nur die Infrarotspektren der beiden beschriebenen Anthophyllite, sondern auch das Spektrum vom Anthophyllit/Ochsenkogel (WALITZI et al., 1989) zur Untersuchung herangezogen.

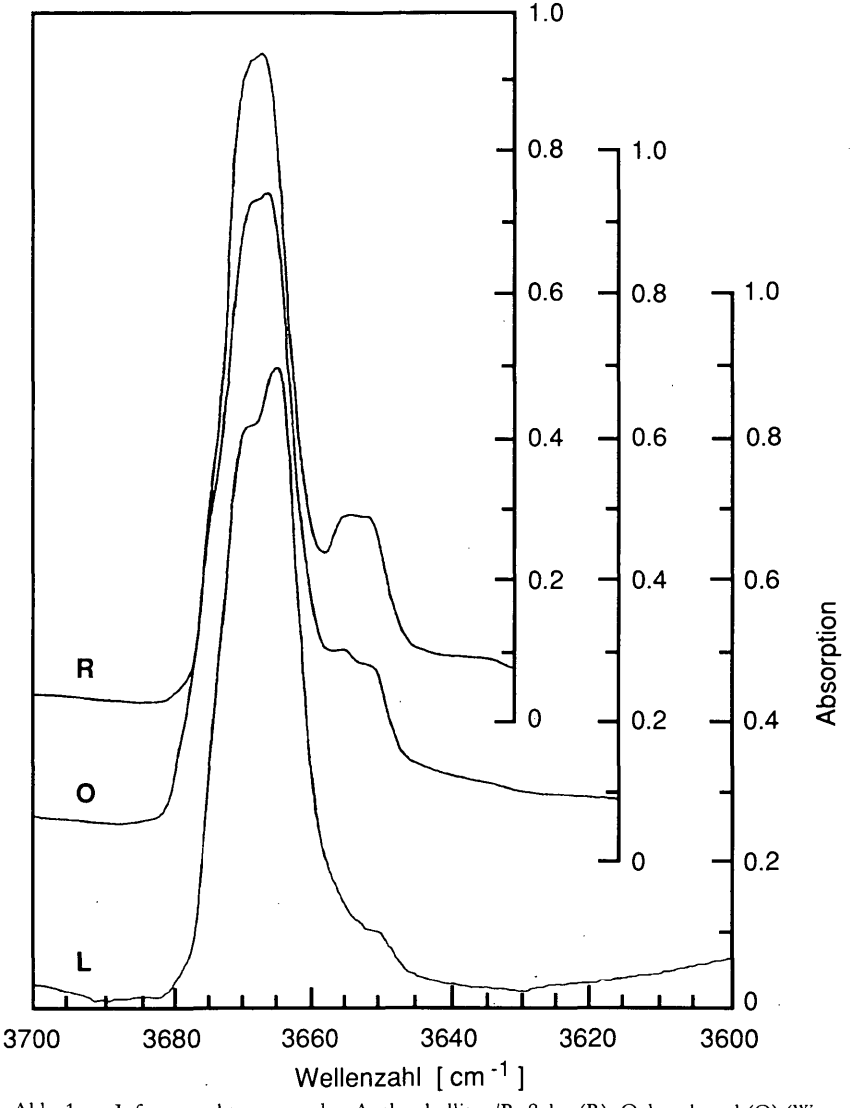


Abb. 1: Infrarotspektren von den Anthophylliten/Roßalm (R), Ochsenkogel (O) (WALITZI et al., 1989) und St. Leonhard (L).

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

Die Spektren der drei Amphibole, dargestellt in der Abb. 1, zeigen eine starke Bande mit einer Wellenzahl zwischen 3667 und 3668 cm^{-1} und Halbwertsbreiten zwischen 10 und 13 cm^{-1} sowie eine schwächere Bande zwischen 3651 und 3654 cm^{-1} mit Halbwertsbreiten von 10 cm^{-1}.

Nach Vergleich von Spektren aus LAW (1981) kann die starke Bande der A-Bande eines Amphiboles zugeordnet werden und entspricht einer Besetzung der Kationenpositionen M1, M2, M3 durch Magnesium. Die schwächere Bande entspricht der B-Bande, welche an einer der drei Positionen den Einbau von zweiwertigem Eisen darstellt. Das Größenverhältnis der beiden Banden ist für die drei Anthophyllitspektren unterschiedlich, vgl. Abb. 1, und entspricht qualitativ den aus den chemischen Analysen und den Strukturverfeinerungen resultierenden Verteilungen von Magnesium und Eisen in M1, M2, M3:

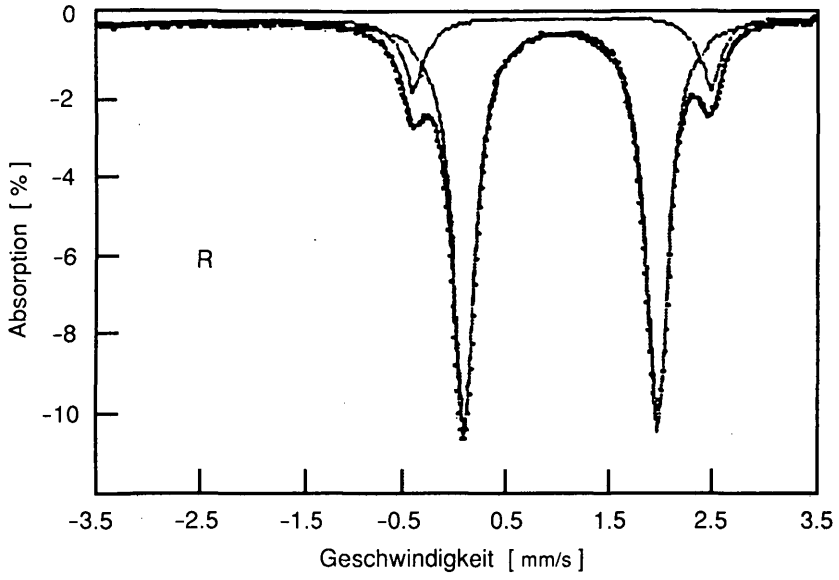
Anthophyllit/Roßalm 4.87 Mg + 0.13 Fe, Anthophyllit/Ochsenkogel (WALITZI et al., 1989) 4.95 Mg + 0.05 Fe, Anthophyllit/St. Leonhard 5.00 Mg.

Die Mößbauerspektroskopie wurde für den Anthophyllit/Roßalm und im Vergleich für den Anthophyllit/Ochsenkogel (WALITZI et al., 1989) durchgeführt. Die Spektren der beiden Anthophyllite sind in der Abb. 2 dargestellt, und die rechnerische Auswertung liegt in der Tabelle 4 vor.

In beiden Spektren lassen sich zwei gut aufgelöste Dubletts unterscheiden. Auf Grund ihrer Isomerieverschiebung gegenüber α-Eisen (IS > 1 mm s^{-1}) und ihrer Quadrupolaufspaltung können die Linien Fe^{2+} auf zwei kristallographisch nichtäquivalente Lagen mit stark unterschiedlicher Verzerrung zugeordnet werden. Das jeweils stärkere Dublett mit geringerer Quadrupolaufspaltung entspricht dem Fe^{2+} auf der M4-Position, und das schwächere Dublett mit der größeren Quadrupolaufspaltung entspricht dem Fe^{2+} auf den Positionen M1, M2, M3. Eine Lokalisierung des Eisens auf einer der drei letztgenannten Positionen ist wegen der kristallographischen Ähnlichkeit der Gitterplätze mit Hilfe der Mößbauerspektroskopie nicht möglich. Nach Vergleich der vorliegenden Spektren mit der Literatur, insbesondere mit SEIFERT (1977), ist darauf zu schließen, daß Eisen nur in zweiwertiger Form vorkommt.
Stellt man die Kationenbesetzungen der Positionen M1–M4 für den Anthophyllit/Roßalm und für den Anthophyllit/Ochsenkogel (WALITZI et al., 1989) aus den Strukturverfeinerungen auf Grund der naßchemischen Analysen den Ergebnissen aus der Mößbauerspektroskopie gegenüber, so zeigt sich sehr gute Übereinstimmung:

Anthophyllit/Roßalm Fe^{2+} auf M4 [%] Chemisch-Strukturverfeinerung 91.5 Mößbauerspektroskopie 92.9; Fe^{2+} auf M1,M2,M3 [%] Chemisch-Strukturverfeinerung 8.5 Mößbauerspektroskopie 7.1; Anthophyllit/

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at



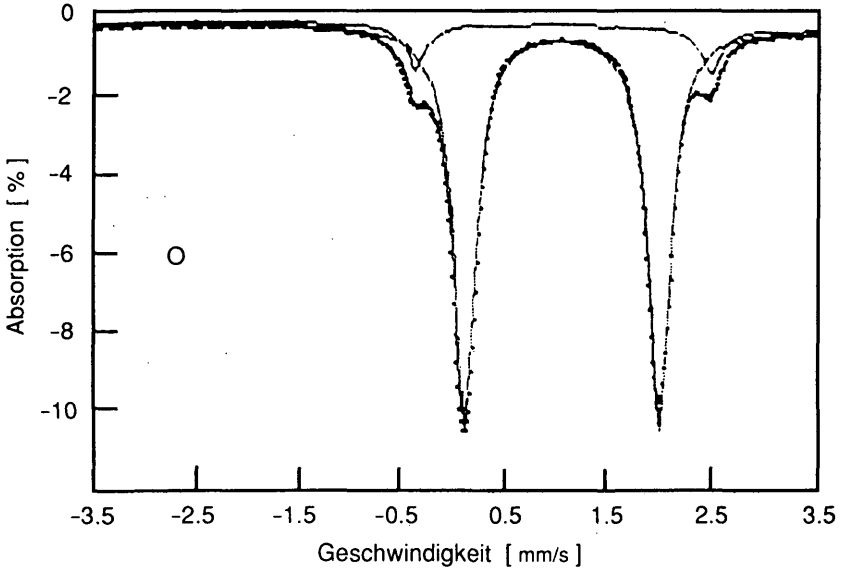


Abb. 2: Mößbauerspektren von Anthophyllit/Roßalm (R) und von Anthophyllit/Ochsenkogel (O) (WALITZI et al., 1989).

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

Tab. 4: Mößbauer Daten von Anthophyllit/Roßalm und von Anthophyllit/Ochsenkogel (WALITZI et al., 1989); IS = Isomerieverschiebung (relativ zu α-Fe), QS = Quadrupolaufspaltung.

	Dublett Nr.	IS [mm/s]	Halbwertsbreite [mm/s]	Intensität [%]	QS [mm/s]	Anteil [%]
Anthophyllit/ Roßalm	1	1.14(1)	0.27(2)	4.06(1)	2.80(2)	15.4
	2	1.11(1)	0.28(1)	21.22(1)	1.80(1)	84.6
Anthophyllit/ Ochsenkogel	1	1.14(1)	0.25(3)	2.46(1)	2.78(2)	10.0
(Walitzi et al.,1989)	2	1.11(1)	0.28(1)	19.81(1)	1.82(1)	90.0

Ochsenkogel (WALITZI et al., 1989) Fe^{2+} auf M4 [%] Chemisch-Strukturverfeinerung 96.1 Mößbauerspektroskopie 95.3; Fe^{2+} auf M1,M2,M3 [%] Chemisch-Strukturverfeinerung 3.9 Mößbauerspektroskopie 4.7.
Der aus der naßchemischen Analyse des Anthophyllites/Roßalm erhaltene Fe_2O_3-Wert muß wohl als Analysenfehler betrachtet werden.

DISKUSSION

Entsprechend den mittleren T-O-Abständen (Tabelle 3) sind die Tetraeder T1 und T2 fast ausschließlich mit Silizium besetzt, vgl. HAWTHORNE (1983). Die minimalen vernachlässigbaren Aluminiumgehalte, vgl. Tabelle 1, werden auch durch die gute Auflösung der beiden für die Kationenpositionen M1–M4 Dubletts in den Mößbauerspektren bestätigt, denn nach SEIFERT (1977) bewirkt in Anthophylliten ein steigender Aluminiumgehalt eine abnehmende Auflösung der beiden Dubletts.
Analog zum Anthophyllit vom Ochsenkogel (WALITZI et al., 1989) sind die mittleren T2-O-Abstände sowohl in der A- als auch in der B-Kette größer als die mittleren T1-O-Distanzen. Innerhalb der T2-Tetraeder sind in beiden Anthophylliten die kürzeste (T2-O4) und die längste (T2-O5) Si-O-Bindung zu finden. Die für die Tetraederknickung bestimmenden Winkel O5-O6-O5 betragen für den Anthophyllit/St. Leonhard in der A-Kette 169.1° und in der B-Kette 159.2° sowie für den Anthophyllit/Roßalm in der A-Kette 170.5° und in der B-Kette 158.2°.

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

Die Besetzung der M-Positionen beider Anthophyllite zeigt einen hohen Ordnungsgrad. Die oktaedrisch koordinierten Kationenpositionen M1, M2, M3, welche nach der Verfeinerung vorwiegend mit Magnesium besetzt sind, haben sehr gleichmäßige M-O-Distanzen, vgl. Tabelle 3.

Wie in der Literatur beschrieben, weist in beiden untersuchten Anthophylliten die M4-Position eine Konzentration des Eisens und eine starke Verzerrung ihres Koordinationspolyeders auf. Je nach Berücksichtigung der M4-O-Bindungslängen kann nach HAWTHORNE (1983) eine Umgebung durch 4 bis 8 nächste Sauerstoffe diskutiert werden; in beiden Anthophylliten schließt die Kugelsymmetrie der Elektronendichteverteilung von M4 eine Aufspaltung dieser Position aus. Auch hier wird wegen der Länge der achten M4-O-Bindung die [7]-Koordination vorgezogen (vgl. HAWTHORNE, 1983).

Zwischen der Differenz des Knickungswinkels O5-O6-O5 in der A- und in der B-Tetraederkette und dem $Mg/(Mg + Fe^{2+})$-Verhältnis zeigt sich für die Anthophyllite von Montana (FINGER, 1970), vom Ochsenkogel

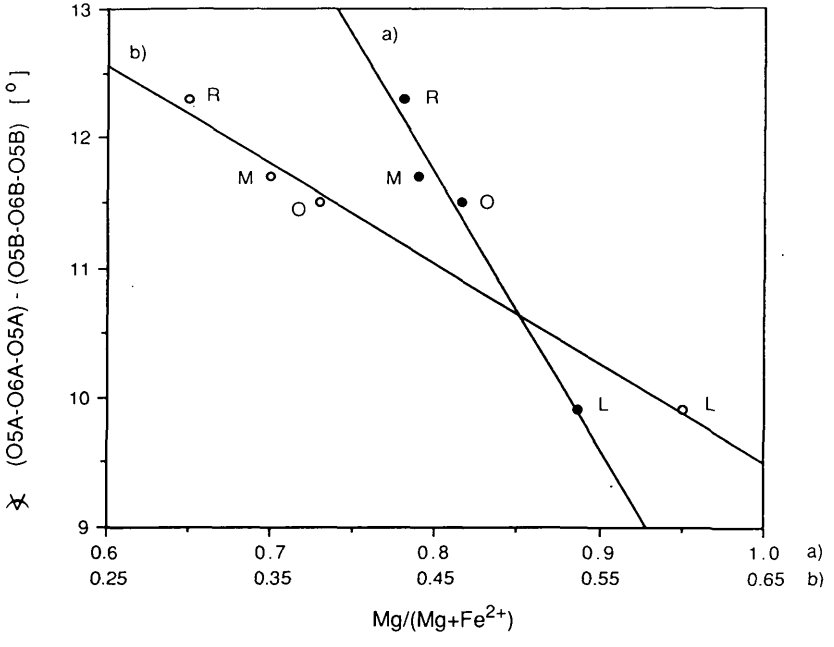


Abb. 3: Für die Anthophyllite/St. Leonhard (L), Montana (M) (FINGER, 1970), Ochsenkogel (O) (WALITZI et al., 1989) und Roßalm (R) ist die Differenz der O5-O6-O5-Winkel in der A- und B-Tetraederkette gegen das $Mg/(Mg + Fe^{2+})$-Verhältnis a) in M1–M4 (volle Kreise) und b) in M4 (leere Kreise) aufgetragen.

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

Tab. 5: Vergleich der Differenz der Knickungswinkel O5-O6-O5 in der A- und B-Tetraederkette mit dem $Mg/(Mg+Fe^{2+})$-Verhältnis in allen M-Positionen bzw. nur im M4 für Anthophyllite.

Anthophyllit	O5-O6-O5 [°] A-Kette	O5-O6-O5 [°] B-Kette	Differenz [°]	$Mg/(Mg+Fe^{2+})$ in M1 - M4	$Mg/(Mg+Fe^{2+})$ in M4
St. Leonhard	169.1	159.2	9.9	0.886	0.600
Ochsenkogel (Walitzi et al., 1989)	169.4	157.9	11.5	0.816	0.380
Montana (Finger, 1970)	169.2	157.5	11.7	0.790	0.349
Roßalm	170.5	158.2	12.3	0.781	0.300

(WALITZI et al., 1989), von der Roßalm und von St. Leonhard ein deutlicher Zusammenhang. Diese Korrelation kann in Abhängigkeit aller M-Positionen oder wegen der geringen Eisenbesetzung von M1, M2, M3 in Abhängigkeit von M4 in zwei Regressionsgeraden, vgl. Abb. 3, dargestellt werden; die Daten dazu enthält Tabelle 5, wobei das $Mg/(Mg+Fe^{2+})$-Verhältnis der Kristallstrukturanalyse entnommen und der

Tab. 6: Kristallchemische Formeln und Besetzung der Kationenpositionen M1–M4 für den Anthophyllit/St. Leonhard und für den Anthophyllit/Roßalm.

Anthophyllit/St. Leonhard

$$(Na_{0.01}Ca_{0.05}Mg_{1.28}Fe_{0.78}Mn_{0.01})^{[7]}_{2.13}\,Mg^{[6]}_{5}[(Si_{7.63}Al_{0.24})_{7.78}O_{22}](OH)_2$$

M1: 1.00 Mg, M2: 1.00 Mg, M3: 1.00 Mg, M4: 0.60 Mg + 0.40 Fe

Anthophyllit/Roßalm

$$(Na_{0.01}Ca_{0.03}Mg_{0.60}Fe_{1.41}Mn_{0.03})^{[7]}_{2.08}(Mg_{4.87}Fe_{0.13})^{[6]}_{5}[(Si_{7.89}Al_{0.03})_{7.92}O_{22}](OH)_2$$

M1: 0.96 Mg + 0.04 Fe, M2: 1.00 Mg, M3: 0.95 Mg + 0.05 Fe, M4: 0.30 Mg + 0.70 Fe

©Naturwissenschaftlicher Verein für Kärnten, Austria, download unter www.biologiezentrum.at

Eisenwert als Fe^{2+} gerechnet ist. Es ist zu beobachten, daß mit der Zunahme an zweiwertigem Eisen in M bzw. in M4 eine Vergrößerung der Knickungswinkeldifferenz verbunden ist.
Die A-Position erwies sich in beiden Anthophylliten als unbesetzt.
In Tabelle 6 sind für beide Anthophyllite die resultierenden kristallchemischen Formeln und die Besetzung der Kationenpositionen M1, M2, M3, M4 angegeben, wobei die Eisenwerte das naßchemisch bestimmte Fe^{2+} und Fe^{3+} zusammenfassen.

DANKSAGUNG

Die Autoren danken Herrn Ass.-Prof. Doz. Dr. Ch. KRATKY, Institut für Physikalische Chemie der Universität Graz, für die Möglichkeit zur Benützung des Vierkreisdiffraktometers. Ferner gilt unser Dank Herrn Dr. G. FALESCHINI, Institut für Anorganische Chemie der Universität Graz, für die Herstellung der Infrarotspektren und Herrn Prof. Dr. G. AMTHAUER sowie Herrn Dr. W. LOTTERMOSER, Institut für Mineralogie der Universität Salzburg, für die Anfertigung der Mößbauerspektren. Herrn Dr. K. KLIMA, Institut für Technologische Geologie und Angewandte Mineralogie der TU Graz, danken wir für die Guinieraufnahmen.

LITERATUR

CLIFF, R. A., R. J. NORRIS, E. R. OXBURGH & R. C. WRIGHT (1971): Structural, metamorphic and geochronological studies in the Reisseck and Southern Ankogel groups, the Eastern Alps. – Jb. Geol. B.-A., Wien, 114:121–272.

FINGER, L. W. (1970): Refinement of the crystal structure of an anthophyllite. – Carnegie Inst. Wash. Year Book, 68:283–288.

HAWTHORNE, F. C. (1983): The crystal chemistry of amphiboles. – Can. Mineral., 21:173–480.

International Tables for X-ray Crystallography (1974): vol. IV (IBERS, J. A., HAMILTON, W. C. eds.) Birmingham: Kynoch Press.

LAW, A. D. (1981): Studies of the orthoamphiboles II. – hydroxyl spectra of anthophyllites. – Bull. Minéral., 104:423–430.

SEIFERT, F. (1977): Compositional dependence of the hyperfine interaction of ^{57}Fe in anthophyllite. – Phys. Chem. Minerals, 1:43–52.

SHELDRICK, G. M. (1976): SHELX-76. Program for crystal structure determination. Univ. of Cambridge, England.

WALITZI, E. M., F. WALTER & K. ETTINGER (1989): Verfeinerung der Kristallstruktur von Anthophyllit vom Ochsenkogel/Gleinalpe, Österreich. – Z. Kristallogr., 188:237–244.

WEISSENBACH, N. (1975): Gesteinsinhalt und Seriengliederung des Hochkristallins in der Saualpe. – Clausthaler Geol. Abh., Sonderband 1/1975 (Geologie der Saualpe): 61–114.

Anschriften der Verfasser: Univ.-Prof. Dr. Eva Maria WALITZI und Dr. Franz WALTER, Institut für Mineralogie-Kristallographie und Petrologie der Karl-Franzens-Universität Graz, Universitätsplatz 2, A-8010 Graz. Dr. Michael SCHLAMADINGER, Rettenberggasse 2, A-6111 Volders.

ZOBODAT - www.zobodat.at

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

Zeitschrift/Journal: Carinthia II

Jahr/Year: 1992

Band/Volume: 182_102

Autor(en)/Author(s): Walter Franz, Walitzi Eva Maria, Schlamadinger Michael

Artikel/Article: Zur Fe-Mg-Verteilung in zwei Anthophylliten aus Kärnten 727-738