

Maria CICHOCIŃSKA, Józef NEDOMA, Witold ŻABIŃSKI *

X-RAY POWDER DATA FOR LANGBEINITE

UKD 549.761.23:548.734.3

A b s t r a c t. X-ray powder data for langbeinite have been improved. Powder pattern of langbeinite from Kłodawa salt dome has been indexed by the method described by Nedoma (1966). These data can be useful in identifying this mineral and in discussing the influence of isomorphous substitutions on the lattice parameters of langbeinite.

Langbeinite $K_2Mg_2(SO_4)_3$ is a not uncommon component of marine evaporites. It has been found in Poland in the Kłodawa salt dome (Popborski 1955, Hanczke 1969, Charysz & Fijał in press). Its structure was investigated by Gossner & Koch (1931) and by Zemann & Zemann (1957). The results of these investigations have shown that this mineral crystallizes in space group $P2_13$ with $a_0 = 9.92 \text{ \AA}$. Langbeinite occurring in evaporites does not contain any significant amounts of isomorphous admixtures although substitution of magnesium by calcium or manganese is possible as shown on synthetic specimens (Ramsdell 1935, Bellanca 1947 — fide Dana et al. 1951) In spite of the fact that mineral naturally occurring in salt deposits has a rather simple chemical formula and a very constant composition, the published X-ray powder data (Ramsdell 1935, Omori & Kerr 1963) are incomplete and sometimes ambiguous, what makes the X-ray identification of langbeinite difficult. It seemed therefore necessary to make an attempt to improve the powder data for this mineral.

X-ray investigation were carried out on two specimens: from Kłodawa (Poland) and from Stebnik (USSR). A camera of diameter 114.6 mm and filtered $CuK\alpha$ -radiation were used. The lines registered on both powder photographs have been found to be identical within the limits of experimental error. The interpretation of these patterns was carried out by a method developed by Nedoma (1966), consisting in measuring the reflections in such a manner that every line is characterized by two numbers giving the upper and lower limits of an interval in which the line is certainly contained.

The complete set of d values and hkl -indices for langbeinite is given in the Table 1 which contains also the intensities of lines as estimated

* Academy of Mining and Metallurgy, Cracow (Kraków)

Table 1

X-ray powder data for langbeinite

Langbeinite from Kłodawa			Powder data according to					
			Ramsdell (1935)			Omori, Kerr (1963)		
d (Å)	I	hkl	d (Å)	I	hkl	d (Å)	I	hkl
5.728	2	111				5.713	1	111
4.050	8	211	4.07	4	211	4.055	4	211
3.308	1	221				3.264*	8	221
3.137	10	310	3.15	10	310	3.140	15	310
2.991	5	311	3.00	5	311	2.829*	100	320
2.752	5	320	2.77	5	320			
2.651	8	321	2.66	6	321	2.657	6	321
2.480	1	400				2.409	1	410
2.406	5	410, 322	2.40	4	410, 322			
2.277	3	331	2.28	3	331	2.279	1	331
2.218	1	420				2.164	2	421
2.165	3	421	2.16	2	421			
2.115	3	332	2.12	2	332			
2.025	4	422	2.03	3	422	1.995*	45	510, 422
1.984	1	430						
1.945	5	510, 431	1.95	4	510, 431			
1.909	1	511, 333						
1.842	3	520, 432	1.85	4	520, 432			
1.811	1	521						
1.726	5	522, 441	1.73	4	522, 441			
1.701	1	530, 433						
1.677	1	531						
1.631	1	610						
1.609	6	611, 532	1.61	5	611, 532	1.629*	13	611
1.569	2	620				1.610	3	620
1.550	3	621, 540, 443	1.55	2	621, 540, 443			
1.531	2	541						
1.479	4	630, 542	1.48	4	630, 542			
1.463	2	631						
1.432	1	444						
1.418	2	632	1.42	2	632			
1.403	1	710, 550, 543						
1.375	1	640						
1.363	1	720, 641						
1.350	3	721, 633, 552	1.35	3	721, 633, 552	* reflection of halite admixture		

(continued Table 1 — only for langbeinite from Kłodawa)

d (Å)	I	hkl	d (Å)	I	hkl
1.326	1	642	0.898	1	11.1.0, 954, 873
1.292	3	731, 553	0.886	1	11.2.0, 10.5.0, 10.4.3, 865
1.271	2	650, 643	0.883	2	11.2.1, 10.5.1, 963
1.261	2	732, 651	0.873	2	11.2.2, 10.5.2, 881, 874
1.230	2	810, 740, 652	0.857	2	11.3.2, 10.5.3, 972, 776
1.193	2	821, 742	0.844	1	11.4.1, 875
1.169	1	822, 660	0.835	1	11.4.2, 10.5.4
1.153	2	831, 750, 743	0.824	2	12.1.0, 10.6.3, 980
1.145	1	751, 555	0.821	3	12.1.1, 11.5.0, 11.4.3, 981, 974
1.123	2	752	0.818	2	11.5.1, 777
1.101	1	841, 744, 663	0.813	2	12.2.1, 10.7.0, 982, 876
1.088	2	911, 753	0.809	2	11.5.2, 10.7.1, 10.5.5
1.070	2	921, 761, 655	0.804	1	12.2.2, 10.6.4
1.051	3	922, 850, 843, 762	0.802	3	12.3.0, 11.4.4, 10.7.2, 966, 885
1.046	1	930, 851, 754	0.799	1	12.3.1, 983
1.023	1	932, 763	0.797	2	11.5.3, 975
1.002	1	941, 853, 770	0.789	2	11.6.1, 10.7.3
0.986	2	10.1.0, 942, 861, 764	0.784	1	12.4.0
0.967	2	10.2.1, 854	0.782	3	12.4.1, 11.6.2, 10.6.5, 984
0.945	2	10.3.1, 952, 765	0.779	1	12.3.3, 11.5.4, 990, 877
0.917	2	10.4.1, 960, 872	0.774	2	12.4.2, 10.8.0, 886

visually in a decimal scale. For comparison the corresponding data found by other authors are also included.

The first two d values are known with an accuracy up to 0.004, the six following ones (from 3.308—2.480) with an accuracy 0.003, the following data (2.406—1.701) are burdened with errors not surpassing 0.002. All remaining d values are known with an accuracy 0.001 or less. Some of registered reflections could be indexed unequivocally, in many cases however two or more sets of hkl indices can correspond to a given reflection. The ambiguity of indexing such reflections can be resolved only on the basis of intensities calculated for the known structure or by single crystal photographs.

Generally it can be said that our data listed in the Table 1 are in good agreement with those published by Ramsdell (1935). The indices characterizing Ramsdell's data are correct. The set of data, however, given by this author does not contain a great number of weaker higher-angle reflections which appear on our photographs. On the other hand considerable discrepancies can be observed when comparing our data with those of Omori and Kerr (1963). The strongest lines given by them (3.264, 2.829, 1.995, and 1.629 Å) and attributed by indexing to langbeinite belong undoubtedly to halite admixture. The line 2.829 Å does not appear

on our photographs at all, and the difference between our values 2.991 and 2.752 Å is so great to assume that Omori and Kerr have not resolved these two lines on their photographs. The same can be said of the lines: 3.264 Å — which has been indexed as 221, 1.995 Å — indexed as 510 and 1.629 Å — indexed as 611.

The lattice constant a_0 evaluated on the basis of our powder photograph of langbeinite from Kłodawa is equal to 9.927 ± 0.008 Å.

We hope that the refined X-ray powder data for langbeinite will be useful in identifying this mineral as well as in discussing the influence of isomorphous substitutions on the lattice parameters of this mineral.

REFERENCES

- CHARYSZ W., FIJAŁ J., (in press): Bischofit, kainit i langbeinit z Kłodawy.
DANA J. D., DANA E. S., PALACHE Ch., BERMAN H., FRONDELL C., 1951: The system of mineralogy. Vol. 2. New York — London.
GOSSNER B., KOCH J., 1931: Über das Kristallgitter von Langbeinit, Northupit and Hanksit. — Zeitschr. Krist. 80, 455—464.
HANCZKE T., 1969: Mineralogia i petrografia soli czechosłowackich kopalni Kłodawa. — Pr. Muz. Ziemi 16, 3—52.
NEDOMA J., 1966: Metoda samouzgodnienia rentgenogramów proszkowych i jej wykorzystanie w badaniach nad odmianami polimorficznymi Na_2BeF_4 . — Zesz. Nauk AGH, Rozprawy 70, 1—68.
OMORI K., KERR P. F., 1963: Infrared studies of saline sulfate minerals. — Geol. Soc. Amer. Bull. 74, 709—734.
POBORSKI J., 1955: Złoże solne w Kłodawie. — IG Biul.
RAMSDELL L. S., 1935: An X-ray study of the system K_2SO_4 — MgSO_4 — CaSO_4 . — Amer. Miner. 20, 569 — 574.
ZEMANN A., ZEMANN J., 1957: Die Kristallstruktur von Langbeinit $\text{K}_2\text{Mg}_2(\text{SO}_4)_3$. — Acta Cryst. 10, 409—413.

Maria CICHOCIŃSKA, Józef NEDOMA, Witold ŻABIŃSKI

DANE RENTGENOWSKIE PROSZKOWE DLA LANGBEINITU

Streszczenie

Rozbieżność danych rentgenowskich dla langbeinitu $\text{K}_2\text{Mg}_2(\text{SO}_4)_3$, opublikowanych w pracach Ramsdella (1935) oraz Omori i Kerra (1963), skłoniła autorów do dokładnego pomierzenia odległości międzypłaszczyznowych tego minerału. W tym celu wykonano zdjęcia rentgenowskie langbeinitu z Kłodawy i ze Stebnika. Na obu zdjęciach zarejestrowano ponad 70 refleksów tego minerału, gdy tymczasem wymienieni autorzy podają mniej niż 20 linii. Zdjęcia obydwu okazów langbeinitu okazały się identyczne w granicach błędów pomiarowych. Rentgenogram langbeinitu z Kłodawy wywskaźnikowano metodą opisaną przez Nedomę (1966). Zestawienie odległości międzypłaszczyznowych tego minerału oraz odpowiednich wskaźników zawiera tabela 1. Podano w niej też intensywność linii ocenioną wizualnie w skali 1 : 10. Dla porównania przytoczono obok odpowiednie wartości opublikowane przez innych autorów. Uzyskane wy-

niki są w zasadzie zgodne z danymi Ramsdella, jednakże pominał on wiele słabszych wysokokątowych linii zarejestrowanych w tej pracy. Znaczną rozbieżność stwierdzono natomiast w porównaniu z danymi Omori i Kerra: najsilniejsze refleksy przypisane przez tych autorów langbeinitowi pochodzą bowiem niewątpliwie od domieszki halitu. Obliczane odległości międzypłaszczyznowe langbeinitu mogą się okazać pomocne przy rentgenowskiej identyfikacji tego minerału, jak również przy badaniu wpływu podstawień izomorficznych na rozmiary jego komórki elementarnej.

Марія ЦИХОЦІНСКА, Юзеф НЕДОМА, Вітольд ЖАБІНЬСКИ

РЕНТГЕНОВСКИЕ ДАННЫЕ ДЛЯ ЛАНГБЕЙНИТА

Резюме

Расхождения рентгеновских характеристик лангбейнита приведенных в работах Рамсделла (1935) и Омори и Керра (1963), заставили авторов провести точные замеры межплоскостных расстояний этого минерала. С этой целью были выполнены рентгеновские снимки лангбейнита из Клодавы и Стебника. На снимках было зарегистрировано свыше 70 рефлексов этого минерала, в то время как указанные авторы приводят менее 20 линий. Полученные снимки двух образцов лангбейнита характеризуются сходством в пределах допустимой ошибки измерений. Рентгенограмма лангбейнита из Клодавы была индицирована методом, описанным Недомой (1966). Межплоскостные расстояния этого минерала и соответствующие индексы приведены в таблице 1. В ней указана также интенсивность линий, определенная визуально в шкале 1—10. Для сравнения рядом представлены соответствующие величины, опубликованные другими авторами. Полученные данные в общем сходны с величинами, приведенными Рамсделлом, хотя этот автор пропустил ряд более слабых высокогульных линий, зарегистрированных в настоящей работе. По сравнению с данными Омори и Керра отмечаются значительные расхождения. Самые сильные рефлексы, которые эти авторы связывают с лангбейнитом, вызваны несомненно примесью галита. Рассчитанные межплоскостные расстояния лангбейнита можно использовать для рентгеновского определения этого минерала, а также при изучении влияния изоморфических замещений на размеры его элементарной ячейки.