



Doctoral Thesis

Züchtung und Kristallstrukturen von β -Eukryptit, LiAlSiO₄

Author(s):

Tscherry, Viktor

Publication Date:

1971

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000090169> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. Nr. 4654

**Züchtung und Kristallstrukturen
von β -Eukryptit, LiAlSiO_4**

ABHANDLUNG

zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften
der
EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE
ZÜRICH

vorgelegt von

VIKTOR TSCHERRY

dipl. Natw. ETH

geboren am 9. Januar 1937

Gampel (Kt. Wallis)

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. F. Laves, Referent

Prof. Dr. A. Niggli, Korreferent

Juris Druck + Verlag Zürich

1971

XIV. Z u s a m m e n f a s s u n g

Aus schmelzflüssigen Lösungen konnten Einkristalle von β -Eukryptit, LiAlSiO_4 mit einem Durchmesser bis über 20 mm gezüchtet werden.

Die Ueberlagerungsstruktur I, mit ähnlichen Gitterkonstanten wie Hochquarz, wurde mit 496 unabhängigen Hauptreflexen ($h, k, l = 2n$) unter Berücksichtigung der Extinktion zu einem R-Wert von 4 % verfeinert. Die hochquarzähnliche Struktur konnte bestätigt werden. In den weiten Strukturkanälen, die parallel zur c-Achse verlaufen, befinden sich die Li-Atome in stark verzerrten Tetraederlücken.

Die Ueberlagerungsstruktur II, deren c-Achse gegenüber dem Hochquarz verdoppelt ist, wurde mit 496 unabhängigen Haupt- und 118 unabhängigen c-Reflexen ($h, k = 2n, l = 2n+1$) zu einem R-Wert von 5.6 % verfeinert. Die Struktur von β -Eukryptit, wie sie WINKLER erstmals beschrieben hatte, konnte bezüglich der Si/Al-Ordnung bestätigt werden. Die Li-Atome hingegen befinden sich in gleicher Höhe z wie Silizium und Aluminium.

Die Ueberstruktur, deren Achsen gegenüber dem Hochquarz verdoppelt sind, wurde mit 496 unabhängigen Haupt-, 118 unabhängigen c- und 256 unabhängigen a-Reflexen ($h, k = 2n+1$ oder $h+k = 2n+1, l=2n+1$) bestimmt und zu einem R-Wert von 5.7 % verfeinert.

Die Strukturbeschreibung lautet:

$$\begin{aligned} \text{Raumgruppe } P6_4 22 & \quad Z = 12 \\ a = 10.49182 \pm 0.00033 \text{ \AA} & \quad c = 11.17497 \pm 0.00073 \text{ \AA} \\ c/a = 1.06511 & \\ 3 \text{ Li in (b): } & \quad 0 \ 0 \ \frac{1}{2}, \quad 0 \ 0 \ 5/6, \quad 0 \ 0 \ 1/6 \\ 3 \text{ Li in (c): } & \quad \frac{1}{2} \ 0 \ 0, \quad 0 \ \frac{1}{2} \ 1/3, \quad \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 2/3 \\ 6 \text{ Li in (f): } & \quad \frac{1}{2} \ 0 \ z, \quad 0 \ \frac{1}{2} \ 1/3+z, \quad \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 2/3+z \\ & \quad \frac{1}{2} \ 0 \ \bar{z}, \quad 0 \ \frac{1}{2} \ 1/3-z, \quad \frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ 2/3-z \\ & \quad z = 0.32418 \pm 0.00348 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 6 \text{ Si in (g): } & \quad x \ 0 \ 0, & \quad 0 \ x \ 1/3, & \quad \bar{x} \ \bar{x} \ 2/3 \\
 & \quad \bar{x} \ 0 \ 0, & \quad 0 \ \bar{x} \ 1/3, & \quad x \ x \ 2/3 \\
 & \quad x = 0.24921 \pm 0.00037
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 6 \text{ Al in (h): } & \quad x \ 0 \ \frac{1}{2}, & \quad 0 \ x \ 5/6, & \quad \bar{x} \ \bar{x} \ 1/6 \\
 & \quad \bar{x} \ 0 \ \frac{1}{2}, & \quad 0 \ \bar{x} \ 5/6, & \quad x \ x \ 1/6 \\
 & \quad x = 0.25111 \pm 0.00040
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 6 \text{ Si in (i): } & \quad x \ 2x \ 0, & \quad 2\bar{x} \ \bar{x} \ 1/3, & \quad x \ \bar{x} \ 2/3 \\
 & \quad \bar{x} \ 2\bar{x} \ 0, & \quad 2x \ x \ 1/3, & \quad \bar{x} \ x \ 2/3 \\
 & \quad x = 0.24851 \pm 0.00022
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 6 \text{ Al in (j): } & \quad x \ 2x \ \frac{1}{2}, & \quad 2\bar{x} \ \bar{x} \ 5/6, & \quad x \ \bar{x} \ 1/6 \\
 & \quad \bar{x} \ 2\bar{x} \ \frac{1}{2}, & \quad 2x \ x \ 5/6, & \quad \bar{x} \ x \ 1/6 \\
 & \quad x = 0.25177 \pm 0.00023
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 12 \text{ O1 in (k): } & \quad x \ y \ z, & \quad \bar{y} \ x-y \ 1/3+z, & \quad y-x \ \bar{x} \ 2/3+z \\
 & \quad \bar{x} \ \bar{y} \ z, & \quad y \ y-x \ 1/3+z, & \quad x-y \ x \ 2/3+z \\
 & \quad y \ x \ 1/3-z, & \quad \bar{x} \ y-x \ 2/3-z, & \quad x-y \ \bar{y} \ \bar{z} \\
 & \quad \bar{y} \ \bar{x} \ 1/3-z, & \quad x \ x-y \ 2/3-z, & \quad y-x \ y \ \bar{z} \\
 x = 0.19872 \pm 0.00048 & \quad y = 0.08662 \pm 0.00039 & \quad z = 0.09094 \\
 & & & \quad \pm 0.00033
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 12 \text{ O2 in (k)} \\
 x = 0.39632 \pm 0.00046 & \quad y = 0.09763 \pm 0.00042 & \quad z = 0.40450 \\
 & & & \quad \pm 0.00039
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 12 \text{ O3 in (k)} \\
 x = 0.39750 \pm 0.00053 & \quad y = 0.10509 \pm 0.00048 & \quad z = 0.92924 \\
 & & & \quad \pm 0.00043
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 12 \text{ O4 in (k)} \\
 x = 0.59177 \pm 0.00043 & \quad y = 0.20260 \pm 0.00051 & \quad z = 0.24989 \\
 & & & \quad \pm 0.00044
 \end{aligned}$$

Die SiO_4 - und AlO_4 - Tetraeder besitzen die gleiche Symmetrie wie die Tiefquartztetraeder. Die thermischen Daten der Sauerstoffe stimmen mit den entsprechenden im Tiefquarz überein. Eine Beschreibung der Struktur befindet sich auf den Seiten 71 und 72, sowie 79 bis 81.