

CRYSTAL-STRUCTURE REFINEMENT OF A HIGHLY ORDERED STAUROLITE

ROBERTA OBERTI, FRANK C. HAWTHORNE*, ALBERTO ZANETTI AND LUISA OTTOLINI

CNR Centro di Studio per la Cristallografia e la Cristallografia, via Abbiategrosso 209, I-27100 Pavia, Italy

JUAN I. SOTO

Departamento de Geodinámica, C.S.I.C. – Universidad de Granada, Ave. Fuentenueva s/n, E-18071 Granada, Spain

ABSTRACT

The crystal structure of zinc-rich staurolite, $\text{Zn}_{2.40}\text{Fe}_{1.41}\text{Mg}_{1.27}\text{Mn}_{0.01}\text{Ni}_{0.01}\text{Ti}_{0.09}\text{Li}_{0.01}\text{Cr}_{0.02}\text{Al}_{16.80}\text{Si}_{7.99}\text{O}_{45}(\text{OH})_3$, a 7.877(3), b 16.609(5), c 5.665(1) Å, β 90.68(2)°, V 741.0 Å³, $Z = 1$, from the Nevado-Filábride complex, Lubrin, Almería province, Spain, has been refined to an R index of 2.0% based on 986 observed reflections collected with MoK α X-radiation. This crystal is poor in Al, as reflected in the high Si content and the large amount of [6]-coordinated Mg. The β value is the largest yet measured for staurolite, and is slightly larger than the maximum β -angle predicted for staurolite (Hawthorne *et al.* 1993b). Site-scattering refinement shows that the $M(3)$ cations are highly, but not completely, ordered: $Q_{M(3)} [= (X_{M(3A)} - X_{M(3B)}) / (X_{M(3A)} + X_{M(3B)})]$ is equal to 0.89, rather than to the value of 1.0 expected for the β angle of this crystal. However, the refined $M(3A)$ and $M(3B)$ site-scattering values are compatible with complete order of Al at $M(3A)$ but disorder of Mg over $M(3A)$ and $M(3B)$. The results of this work quantitatively support the order-disorder model for staurolite proposed by Hawthorne *et al.* (1993b), but suggest that the quantitative details can be affected by the presence of [6]-coordinated Mg because it behaves differently from [6]-coordinated Al.

Keywords: staurolite, crystal structure, chemical analysis, cation order.

SOMMAIRE

La structure cristalline d'un échantillon de staurolite zincifère, de composition $\text{Zn}_{2.40}\text{Fe}_{1.41}\text{Mg}_{1.27}\text{Mn}_{0.01}\text{Ni}_{0.01}\text{Ti}_{0.09}\text{Li}_{0.01}\text{Cr}_{0.02}\text{Al}_{16.80}\text{Si}_{7.99}\text{O}_{45}(\text{OH})_3$, a 7.877(3), b 16.609(5), c 5.665(1) Å, β 90.68(2)°, V 741.0 Å³, $Z = 1$, provenant du complexe de Nevado-Filábride, à Lubrin, dans la province d'Almería, en Espagne, a été affinée jusqu'à un résidu R de 2.0% en utilisant 986 réflexions observées avec rayonnement MoK α . Ce cristal a une faible teneur en Al, comme le témoigne la teneur élevée en Si et en ⁶Mg. L'angle β est le plus grand qui soit connu pour la staurolite, et dépasse même la valeur maximum prédite (Hawthorne *et al.* 1993b). L'affinement du pouvoir de dispersion montre que les cations au site $M(3)$ sont fortement ordonnés, mais ne le sont pas complètement; $Q_{M(3)} [= (X_{M(3A)} - X_{M(3B)}) / (X_{M(3A)} + X_{M(3B)})]$ est égal à 0.89, plutôt qu'à la valeur attendue selon l'angle β de ce cristal, 1.0. Toutefois, les valeurs affinées de la dispersion aux sites $M(3A)$ et $M(3B)$ sont compatibles avec une mise en ordre complète de Al au site $M(3A)$, et un désordre complet des atomes Mg sur les sites $M(3A)$ et $M(3B)$. Nos résultats concordent avec le modèle ordre-désordre proposé par Hawthorne *et al.* (1993b), mais ils semblent indiquer que la présence de ⁶Mg peut en affecter les détails quantitatifs, vu son comportement distinct de celui de ⁶Al.

(Traduit par la Rédaction)

Mots-clés: staurolite, structure cristalline, analyse chimique, degré d'ordre des cations.

INTRODUCTION

It is now well established that staurolite is monoclinic at room temperature and pressure (Hurst *et al.* 1956, Smith 1968, Tagai & Joswig 1985, Bringham &

Griffen 1986, Ståhl *et al.* 1988, Alexander 1989, Hawthorne *et al.* 1993a, b). Hawthorne *et al.* (1993a) refined the crystal structure of forty-two crystals of staurolite with β angles in the range 90.00–90.45°, and Hawthorne *et al.* (1993b) showed that all displacements of atomic positions [except the x coordinate of the O(4) atom] from the ideal values for orthorhombic C_{2mm} symmetry are continuous linear functions of the β angle. In addition, the degrees of Al-□ (vacancy), (Fe,Mg)-□ and (Fe,Zn...)-□ order over the

* Now condemned to the Department of Geological Sciences, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba R3T 2N2.
E-mail address: fchawthorn@bldgwall.lan1.umanitoba.ca