

The Determination of the Crystal Structure of Pectolite, $Ca_2NaHSi_3O_9$

By **M. J. BUERGER**

With 15 figures

(Received August 20, 1956)

Zusammenfassung

Die Kristallstruktur des triklinen, zur Raumgruppe $P\bar{1}$ gehörenden Pektoliths wurde mit Hilfe von drei PATTERSON-Projektionen bestimmt.

Die PATTERSON-Projektion $P(xz)$ konnte gelöst werden nach Auffinden zweier konjugierter Spitzen im Diagramm. Diese legen zwei Paare von Spitzen, die durch Inversion einander zugeordnet sind, fest. Beide Paare wurden der Berechnung je einer Minimumfunktion zugrunde gelegt. Diese Funktionen vom Rang 2 ergaben kombiniert eine verstärkte Minimum-Funktion vom Rang 4, aus der die Struktur abgelesen werden konnte.

Die PATTERSON-Projektionen $P(xy)$ und $P(yz)$ und deren Lösungen durch die Minimum-Funktionen (sowie auch andere Fakten) zeigten, daß der Pektolith eine Unterstruktur besitzt, so daß es möglich war, die Unterstrukturtheorie anzuwenden. Dementsprechend wurden die partiellen PATTERSON-Projektionen gebildet. Die drei Projektionen des Pektoliths wurden dann durch FOURIER-Synthesen verfeinert.

Die Struktur des Pektoliths wurde bereits früher beschrieben.¹ Es ist eine vom Pyroxentyp verschiedene Kettenstruktur. Die *Na*-Atome haben eine ungewöhnliche Umgebung und zeigen eine beträchtliche anisotrope Wärmebewegung. Die *H*-Atome verbinden *O*-Atome von zwei verschiedenen Tetraedern.

Abstract

Pectolite is triclinic, space group $P\bar{1}$, with 15 nonhydrogen atoms in the asymmetric unit. Its crystal structure has been determined by solving the three PATTERSON projections by the use of image-seeking functions.

The PATTERSON projection $P(xz)$ was solved after finding two conjugate peaks on the map. These located two sets of inversion peaks upon each of which a scaled minimum function was based. These two functions of rank 2 were combined to give the more powerful minimum function of rank 4. This was such a good approximation to the electron density that the general nature of the structure could be deduced from it.

¹ M. J. BUERGER, The arrangement of atoms in crystals of the wollastonite group of metasilicates. Proc. Nat. Acad. Sci. **42** (1956) 113—116.

