

# 蒙山矿的晶体结构

陆 琦 彭 忠

(武汉地质学院, 武汉)

主题词: 新矿物; 蒙山矿, 结构测定;  $R = 0.047$ ; Zr的配位

提要: 本文对产于我国山东的新矿物蒙山矿 (Mathiasite) 进行了晶体结构猜测。蒙山矿的晶体化学式为:  $(K, Ca, Sr)(Ti, Cr, Fe, Mg, Zr)_{21}O_{38}$ , 三方晶系, 空间群  $R\bar{3}$ , 晶胞参数:  $a_0 = 10.3722 \text{ \AA}$ ,  $c_0 = 20.7161 \text{ \AA}$  (六方定向),  $a_R = 9.1403 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 69.137^\circ$  (菱面体定向)。

应用RASA-5RP自动转靶四圆单晶衍射仪, 对蒙山矿收集了独立的1554个衍射强度。经结构解析和修正, 求得了晶体中各原子的坐标、温度因子、占位度。并计算了原子的间距和键角。结构修正的偏离因子:  $R = 0.047$ 。

蒙山矿产于金伯利岩中, 形成于高温高压下。通过结构测定, 确定了该矿物中 Ti、Cr、Mg、K 等元素的配位形式, 特别是查明了 Zr 在这种以 Ti 为主的复杂氧化物中有独立的结晶学位置, 并有缺席现象。以上研究成果丰富了金伯利岩中金属副矿物的矿物学和晶体化学内容。

## 一、前 言

蒙山矿<sup>(1)</sup> (Mathiasite)<sup>(2)</sup> 是1981年在我国及南非发现的新矿物\*, 晶体化学式为:  $(K, Ca, Sr)(Ti, Zr, Fe, Mg, Zr)_{21}O_{38}$ 。与此同时, 还发现了钡蒙山矿 (Lindsleyite)  $(Ba, Sr)(Ti, Cr, Fe, Mg, Zr)_{21}O_{38}$ <sup>(2)</sup>。后来, Jones 等人用新的中子活化方法对这些产于地幔中的钛的氧化物矿物中的稀土元素作了较细致的工作<sup>(3)</sup>。

笔者自1981年起就对产于我国山东金伯利岩中的沂蒙矿、蒙山矿等进行了成分和结构的研究<sup>(4)(5)</sup>, 表1列出了我国山东的两个蒙山矿样品的电子探针分析结果, 同时附上近几年来国内外发表的该矿物及同族矿物的电子探针分析资料。所列矿物均属锶铁钛矿 (Crichtonite) —— 钕铀钛铁矿 (Davidite) 族, 通式:  $AM_{21}O_{38}$ , A 为大阳离子, 可为 K、Na、Ca、Ba、Sr……, B 为小阳离子, 可为 Ti、Cr、Fe、Mg 等。蒙山矿 (Mathiasite), 钒蒙山矿 (Lindsleyite), 钡蒙山矿 (Lindsleyite) 三个矿物分别为 K、Ca 及 Ba 端元, 稀土元素在三个端元矿物中均有少量分布。需要注意的是在 Crichtohite 族新发现的几个矿物中均有一定量的 Zr (3.20—5.32%), 在一个化学分子式中 Zr 的个数为 0.6—0.7 (氧为 38 时)。Zr 在晶体中是占据一定的位置还是以类质同象形式无序地替代 Ti 等元素, 以及 K、Ca、Sr 等较大半径的元素间的互相替代是否会出现有序化, 均值得研究。

用四圆单晶衍射仪测定 (经最小二乘修正), 蒙山矿属三方晶系, 空间群  $R\bar{3}$ , 晶胞参数:  $a_0 = 10.3722(9) \text{ \AA}$ ,  $c_0 = 20.7161(12) \text{ \AA}$  (六方定向);  $a_R = 9.1403 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 69.137^\circ$  (菱面体定向)。

\* 蒙山矿标本我国早已采集, 但美国人先于我国向国际新矿物与矿物命名委员会报告并获批准, 并命名为 Mathiasite, 我国则称其为蒙山矿。

表 1 蒙山矿及同族矿物的电子探针分析结果

Table 1. Electron microprobe analyses of Mathiasite and its analogues

矿物名称 化学成分	蒙山矿 <sup>602°</sup>	蒙山矿 <sup>604°</sup>	蒙山矿 <sup>(1)<sup>①</sup></sup>	蒙山矿 <sup>(2)</sup> (Mathiasite)	钡蒙山矿 <sup>(3)</sup> (Lindsleyite)	钡蒙山矿 <sup>(3)</sup> (Titanate) 3094	钛铈钙矿 <sup>(2)</sup> (Loveringite)
Na <sub>2</sub> O				0.09	0.10	0.026	
K <sub>2</sub> O	1.66	1.73	0.96	1.22	0.55	0.56	0.04
CaO	0.73	0.97	0.31	1.09		<0.25	2.50
BaO			1.42	0.96	2.56	3.32	
SrO			0.05	0.66	1.18	1.28	0.01
La <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.36	0.45	0.25	0.19		0.17	1.23
Ce <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.56	0.61	0.41	0.35		0.23	1.12
ZrO <sub>2</sub>	4.80	4.65	3.79	5.35	3.41	3.20	4.38
HfO <sub>2</sub>			0.19				0.21
TiO <sub>2</sub>	55.65	54.11	53.94	59.32	59.64	62.41	58.06
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	17.59	19.78	19.85	16.71	15.10	14.16	5.97
FeO	11.38	10.27	10.31	7.96	11.22	12.10	20.01
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.74	1.80	0.54	0.62	0.59	0.80	0.96
MgO	4.29	4.06	4.05	4.12	3.32	0.91	1.38
MnO	0.11	0.09	0.08	0.14	0.08	0.10	0.15
Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub>			1.17	0.15	0.02		
Ta <sub>2</sub> O <sub>5</sub>				0.08			
V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>			0.29			0.50	1.30
其 它			微量 NiO、SiO <sub>2</sub>				有微量PbO、 NdO、Re <sub>2</sub> O 97.32
	98.86	98.84	97.61	99.01	97.77	100.16	

\* 本文。分析者：桂林冶金地质研究所。

## 二、蒙山矿的晶体结构测定

### 1 结构推测

对蒙山矿的晶体结构，笔者曾根据氧化物中氧最紧密堆积原理进行过讨论<sup>[6]</sup>。

图1表示了氧在最紧密堆积的一个层中的分布情况，线交点处代表氧的位置。

A  $a_0 = 2.88 \text{ \AA}$   $a_0$ 、 $b_0$ 方向最小距离，代表结构：红锌矿；

B  $a = 2 \times 2.88 = 5.76 (\text{\AA})$  代表结构：塔菲石；

C  $a = \sqrt{3} \times 2.88 = 4.99 (\text{\AA})$  代表结构：刚玉；

D  $a = \sqrt{13} \times 2.88 = 10.38 (\text{\AA})$  蒙山矿属该结构；

E  $a = 13 \times 2.88 = 37.44 (\text{\AA})$  锰铁钛矿和铅锰钛铁矿(Senaite)的二级超结构。

这里所谓二级超结构是指阳离子在a、b方向上的有序化，实际上，沿c方向上A类原子(K、Ca、Ba等)以及Zr等较大半径的原子亦可能存在有序化现象，这些均属结构测定感兴趣的问题。为此，进行了大量粉晶及单晶照相工作。

表2列出了本文及其他作者发表的该矿物的粉晶数据。各作者所测的主要数据基本吻合，部分d值及强度差异显然是各样品间成分差异造成的。在拍摄粉末照片时，延长了曝光时间，但未发现特殊的弱线。

单晶照相工作是在旋转阳极X光发生器上进行的。拍摄了多张[110]的迴摆图及(hhl)

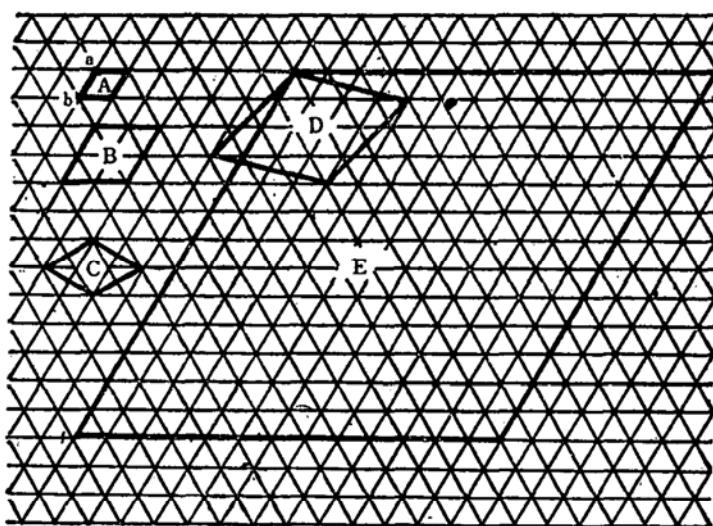


图 1 氧最密层的结构

Fig. 1 Structure of closest-packed oxygen layer

表 2 蒙山矿及同族矿物的X射线粉末数据

Table 2. X-ray diffraction patterns for Mathiasite and its analogues

蒙山矿 <sup>604*</sup>		蒙山矿 <sup>(1)<sup>(1)</sup></sup>		蒙山矿 <sup>(1)<sup>(2)</sup></sup> (Mathiasite)		钡蒙山矿 <sup><sup>(2)</sup></sup> (Lindsleyite)		钡蒙山矿 <sup><sup>(3)</sup></sup> (Titanate 3094)	
d	I	d	I	d	I	d	I	d	I
		4.20	30	4.44	40				
				4.14	50			4.13	
				3.74	20			3.75	
3.38	5	3.44	80	3.39	60	3.37	30	3.37	
3.04	4	3.06	50	3.04	30	3.04	40	3.03	
				2.99	80				
2.87	6	2.89	100	2.88	80	2.87	70	2.877	
				2.84	40	2.83	70		
2.79	5			2.75	20	2.73	20	2.743	
2.62	4	2.63	40	2.63	30	2.61	10	2.618	
2.473	2	2.48	40	2.48	50	2.47	30	2.478	
				2.43	40	2.39	30		
2.246	2	2.26	70	2.25	90	2.24	40	2.243	
2.133	7	2.14	70	2.14	100	2.13	100	2.134	
		1.94	30	1.91	20	1.91	20	1.917	
				1.84	20	1.85	10	1.844	
1.805	8	1.80	50	1.797	70	1.80	100	1.794	
		1.71	40	1.71	30	1.70	40	1.705	
1.599	10	1.60	50	1.59	50	1.59	100	1.591	
1.519	4	1.50	50	1.52	10	1.519	100		
1.447	7	1.44	100	1.44	10	1.44	100	1.44	

\* X光照相条件: FeKa, 35kV, 20mA, 24小时。

的华盛堡图(见照片1、2)。从照片1、2可看到:沿c轴及[110]方向未发现有附加的超结构点,这说明在所测样品中,沿a、b方向及c方向不存在阳离子的有序化现象。

## 2 结构测定

选用的单晶样品大小为 $0.07 \times 0.07 \times 0.09\text{ mm}^3$ ,收集强度前用电子探针对其成分进行了全定量分析,成分见表1中蒙山矿604。在日本RASA-5RP全自动转靶四圆单晶衍射仪上收集了晶体的衍射强度。实验条件为:50kV、120mA、MoK $\alpha$ 、石墨单色器,接收狭缝 $1^\circ$ ,采用 $2\theta/\omega$ 联合扫描,扫描速度 $4^\circ/\text{分}$ ,背景扫描时间5秒,在 $2\theta$ 为 $65^\circ$ 范围内收集了独立的衍射点1554个,经PI因子校正转化为 $|F_{hkl}|$ ,定 $|F| > 3\sigma|F|$ 为可观察点,则有1348个衍射点参加了结构解析和修正。强度未作吸收校正。

用SHELX-76结晶学程序进行了结构解析和修正,求得了各原子的坐标,温度因子、占位度等各项结晶学参数,作了三维的Fourier函数截面;计算了晶体中各原子的间距和键角(见表3、4)。由计算所得的结构因子Fc和实验所得的结构因子Fo求得了偏离因子 $R=0.056$ ,在取 $|F| > 5\sigma|F|$ 的1177个衍射点进行结构校正时, $R=0.047$ 。根据探针分析和结构测定,蒙山矿一个晶胞的化学式为: $(\text{K}_{1.82}\text{Ca}_{0.52}\text{La}_{0.05}\text{Ce}_{0.06})_{2.45} (\text{Ti}_{36.09}\text{Cr}_{12}\text{Fe}_{7.39}\text{Mg}_{5.51}\text{Zr}_{2.02}\text{Al}_{1.76}\text{Mn}_{0.06})_{64.83}\text{O}_{114}$

其一般的晶体化学式为:



表3 原子坐标和温度因子

Table 3. Atomic coordinates and temperature factors

原子	X	Y	Z	B	$B_{11}$	$B_{22}$	$B_{33}$	$B_{12}$	$B_{13}$	$B_{23}$
Zr	0.0	0.0	0.0	0.0108	0.0114	0.0114	0.0099	0.0	0.0	0.0057
K(Ca)	0.0	0.0	0.5	0.0162	0.0179	0.0179	0.0143	0.0	0.0	0.0078
Cr(Al)	0.6236	0.1503	-0.0016	0.0072	0.0069	0.0058	0.0079	-0.0007	-0.0001	0.0024
Ti(1)	0.3164	0.0765	0.1013	0.0084	0.0090	0.0077	0.0083	-0.0002	-0.0007	0.0040
Ti(2)	0.2449	0.3281	0.1083	0.0096	0.0105	0.0093	0.0097	0.0025	0.0003	0.0056
Mg(Fe)	0.0	0.0	0.1891	0.0037	0.0041	0.0041	0.0027	0.0	0.0	0.0021
O <sub>1</sub>	0.4397	0.0312	0.0504	0.0078	0.0065	0.0088	0.0096	-0.0018	0.0003	0.0046
O <sub>2</sub>	0.3621	0.2604	0.0587	0.0069	0.0061	0.0064	0.0083	0.0013	0.0024	0.0027
O <sub>3</sub>	0.0545	0.1849	0.0615	0.0101	0.0080	0.0125	0.0127	-0.0023	-0.0007	0.0075
O <sub>4</sub>	0.2889	0.4941	0.0555	0.0070	0.0075	0.0093	0.0057	0.0029	0.0014	0.0053
O <sub>5</sub>	0.4660	0.1855	0.1705	0.0086	0.0109	0.0082	0.0062	0.0002	-0.0008	0.0053
O <sub>6</sub>	0.0980	0.3634	0.1596	0.0083	0.0055	0.0102	0.0085	0.0012	0.0007	0.0032
O <sub>7</sub>	0.0	0.0	0.2863	0.0079	0.0091	0.0091	0.0048	0.0	0.0	0.0046

## 三、结构描述

蒙山矿的结构如图2所示。氧原子垂直c轴成层作最紧密堆积,重复周期为9层,可表达为CB'ABA'CAC'B……,或 $hc'h\bar{h}c'h\bar{h}c'h$ 。根据Fourier函数计算值和占位度计算值确定了各原子在结构中的位置。Ti、Cr、Al及部分Fe占据了八面体位置,配位数为6;Mg及部分Fe占据了四面体位置,配位数为4,八面体与四面体以共棱或共角顶方式相连。在A'、B'、C'

表4 部分原子间距和主要键角  
Table 4 Part of atomic distances and main bond angles

多面体类型	原子间距(Å)	键角(°)
Zr—O八面体		
$6 \times \text{Zr}—\text{O}_3$	2.130(4)	
平均键长	2.130	
$6 \times \text{O}_3—\text{O}_3$	2.958(5)	87.99(11)
$6 \times \text{O}_3—\text{O}_3$	3.066(6)	92.01(11)
Cr—O畸变八面体		
$2 \times \text{Cr}—\text{O}_1$	1.991(2)	
$\text{Cr}—\text{O}_2$	1.967(4)	
$—\text{O}_{41}$	2.035(5)	
$—\text{O}_{42}$	1.978(5)	
$—\text{O}_7$	2.014(4)	
平均键长	1.998	
$\text{O}_{11}—\text{O}_{12}$	2.757(6)	87.50(14)
$—\text{O}_3$	2.821(4)	90.91(12)
$—\text{O}_{41}$	2.714(6)	84.80(14)
$—\text{O}_7$	2.863(5)	89.70(12)
$\text{O}_{12}—\text{O}_3$	2.897(7)	93.93(17)
$—\text{O}_{41}$	2.858(5)	90.29(18)
$—\text{O}_{42}$	2.977(3)	97.01(20)
$\text{O}_2—\text{O}_{42}$	3.930(7)	95.90(21)
$—\text{O}_7$	2.860(7)	91.97(17)
$\text{O}_{41}—\text{O}_{42}$	2.788(7)	88.01(22)
$\text{O}_7$	2.699(8)	83.63(18)
$\text{O}_{42}—\text{O}_7$	2.699(9)	85.06(19)
Ti—O畸变八面体		
$\text{Ti}—\text{O}_1$	1.890(2)	
$—\text{O}_2$	1.933(3)	
$—\text{O}_3$	1.904(4)	
$—\text{O}_{51}$	1.997(5)	
$—\text{O}_{52}$	2.012(5)	
$—\text{O}_6$	2.017(5)	
平均键长	1.958	
$\text{O}_1—\text{O}_2$	2.871(3)	97.34(14)
$—\text{O}_3$	2.879(4)	98.70(15)
$—\text{O}_{51}$	2.896(6)	96.30(15)
$—\text{O}_6$	2.878(7)	90.98(18)
$\text{O}_2—\text{O}_3$	2.931(2)	99.59(16)
$—\text{O}_{51}$	2.822(7)	91.86(18)
$—\text{O}_{52}$	2.620(7)	80.38(18)
$\text{O}_3—\text{O}_{52}$	2.794(7)	87.79(19)
$—\text{O}_6$	2.636(9)	84.45(20)
$\text{O}_{51}—\text{O}_{52}$	2.583(7)	77.66(20)
$—\text{O}_6$	2.629(3)	81.83(19)
$\text{O}_{52}—\text{O}_6$	2.945(6)	90.75(21)

续表

多面体类型	原子间距(Å)	键角(°)
Ti <sub>2</sub> —O畸变八面体		
Ti <sub>2</sub> —O <sub>2</sub>	1.971(2)	
—O <sub>3</sub>	2.028(3)	
—O <sub>4</sub>	1.892(4)	
—O <sub>5</sub>	2.033(4)	
—O <sub>61</sub>	2.035(5)	
—O <sub>62</sub>	1.966(6)	
平均键长	1.971	
O <sub>2</sub> —O <sub>3</sub>	2.881(4)	92.15(12)
—O <sub>4</sub>	2.880(4)	96.42(16)
—O <sub>5</sub>	2.620(6)	81.73(15)
—O <sub>62</sub>	2.874(7)	93.76(19)
O <sub>3</sub> —O <sub>4</sub>	2.901(3)	93.39(16)
—O <sub>5</sub>	2.727(7)	84.37(17)
—O <sub>61</sub>	2.632(7)	80.74(18)
O <sub>4</sub> —O <sub>61</sub>	2.780(7)	90.03(19)
—O <sub>62</sub>	2.919(9)	98.30(17)
O <sub>5</sub> —O <sub>61</sub>	2.920(6)	91.77(19)
—O <sub>62</sub>	2.629(3)	82.20(18)
O <sub>61</sub> —O <sub>62</sub>	2.872(7)	91.73(23)
Mg(Fe)—O四面体		
3×Mg—O <sub>3</sub>	1.947(3)	
Mg—O <sub>7</sub>	2.009(2)	
平均键长	1.963	
3×O <sub>5</sub> —O <sub>5</sub>	3.236(5)	112.44(16)
3×O <sub>5</sub> —O <sub>7</sub>	3.167(5)	106.31(18)
K(Ca)—O复杂多面体		
6×K—O <sub>4</sub>	2.810(5)	
6×K—O <sub>5</sub>	2.861(5)	
平均键长	2.838	
6×O <sub>4</sub> —O <sub>4</sub>	2.788(4)	59.48(9)
O <sub>61</sub> —O <sub>61</sub>	2.780(6)	58.70(13)
—O <sub>62</sub>	2.919(2)	61.94(4)
—O <sub>63</sub>		85.69(18)
—O <sub>64</sub>		118.23(16)
—O <sub>65</sub>		121.25(2)
—O <sub>66</sub>		94.27(3)
6×O <sub>5</sub> —O <sub>5</sub>	2.872(3)	60.25(6)
6×O <sub>5</sub> —O <sub>7</sub>		119.76(6)

层中K(Ca)替代了一个氧的位置，它的配位多面体为似双锥鼓状的复杂多面体，与沂蒙矿中K的配位多面体相似<sup>[4]</sup>。

Zr的配位多面体为八面体，配位数为6，这使蒙山矿的结构更匀称。Zr—O距离为2.130 Å，明显大于其它阳离子与氧的距离，显然这是因为Zr<sup>4+</sup>的半径大于其它小阳离子的半径所致。

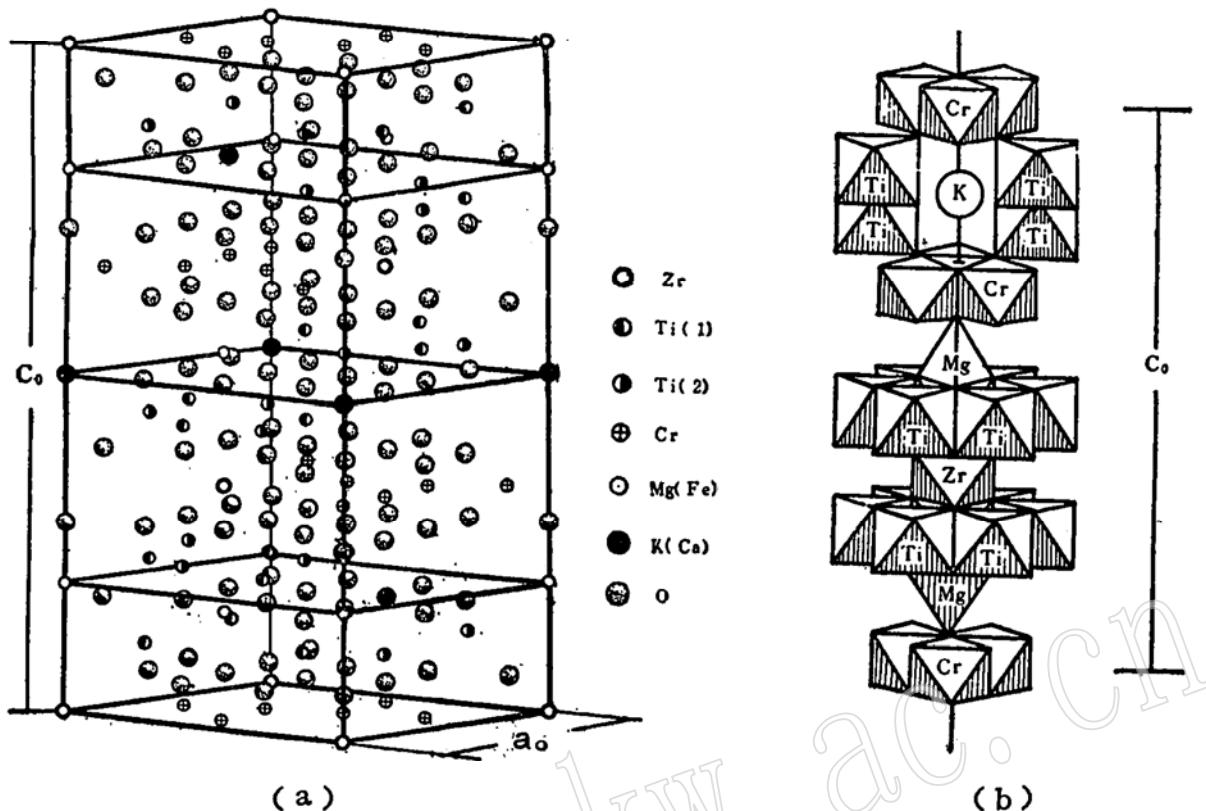


图 2 蒙山矿的晶体结构图  
 Fig. 2. Crystal structure of Mathiasite  
 (a) 一个晶胞中原子的分布  
 (a) Atomic distribution in one cell  
 (b) 沿三次轴八面体和四面体的排列  
 (b) Arrangement of octahedra and tetrahedra along the trigonal axis

Zr在矿物中的配位数有6和8。有关Zr的矿物资料表明，一般说来，在Zr矿物中若有Na、Ca、Ba、Nb等元素时，由于受到这些阳离子的影响，使Zr处于低配位状态。Zr矿物中若无其它阳离子或仅有 $[SiO_4]$ ，Zr的配位数为8。蒙山矿产于金伯利岩中，另据Podpore等<sup>(8)</sup>近来在900℃和 $30 \times 10^5$ Pa的条件下合成了钡蒙山矿(Lindsleyite)，因此，蒙山矿形成的压力和温度无疑是很高的。在高压下Zr的配位数应趋于8，但由于在蒙山矿中主要成分是Ti、Cr、Fe、Mg等半径较小的离子，它们对阴离子有较大的吸引力，同时排斥Zr离子，所以，Zr的配位数是6而不是8。需要指出，根据Fourier函数计算，在坐标(0, 0, 0)位置上，Zr在蒙山矿中占一个独立的位置是确定的。从表5中可看到Zr位置上的Fourier函数值(HEIGHT=358)明显比Ti等其它小阳离子位置上的大。虽然在高温下Zr也可以有限地替代Ti，但从Ti的Fourier值(HEIGHT=251—274)来看，这种替代即使有也是微不足道的，所以Zr的位置是独立的。同时，根据占位度的修正值来看，Zr的数量是不足的，也就是说它有缺席。这是由于Zr<sup>4+</sup>具较高的正电荷，当它以六次配位形式位于一较紧密匀称的结构中时，就会出现缺席现象。占位度的计算值为0.1203，理论值为0.1667，两者之比为0.72，而从成分的百分比量计算Zr的个数是0.67，两者是吻合的，充分证明了上述的缺席现象。从现有的实验结果来看，蒙山矿中的缺席是无序的。

表5 各原子的占位度及Fourier函数值

Table 5. Site occupancies of atoms and their heights in the Fourier map

元素 占位度	Zr	K(Ca)	Ti(1)	Ti(2)	Cr(Al)	Mg(Fe)
计算占位度Gc	0.1203(6)	0.2067(63)	1.0041(55)	1.0224(56)	0.9160	0.4211
理论占位度Go	0.1667	0.1667	1	1	1	0.3333
Gc/Go	0.72	1.24	1.00	1.02	0.92	1.26
相差原因	缺位	含TR			含Al	含Fe
Fourier函数峰高 (Height)	358	355	274	251	265	1.27

沂蒙矿中Fe以三方双锥的五次配位形式存在<sup>[4]</sup>，在蒙山矿中Fe无独立位置，这可能由于Fe存在Fe<sup>2+</sup>及Fe<sup>3+</sup>两种价态，因此，配位数分别为6和4，这进一步说明蒙山矿结构上的匀称性。

#### 四、结语

本文在精确测定蒙山矿晶体结构的基础上，取得以下几点成果：

1 元素Zr在蒙山矿这种以Ti为主的复杂氧化物中占据一个独立位置。虽然蒙山矿形成于高压下，但Zr在其中的配位数是6而不是8。Zr在晶体中有缺位，其占位度约为0.72。

2 虽然蒙山矿与沂蒙矿均产于山东金伯利岩中，且成分大致相同，但蒙山矿的结构与沂蒙矿有差异。主要表现在前者结构比较匀称，后者具似层状构造；反映在物理性质上，蒙山矿无明显解理，硬度较大，HV50、100、200分别为1381、1010、1072Kg/mm<sup>2</sup>；而沂蒙矿有//(0001)的完全解理及//(1011)的中等解理，硬度较小，仅为273Kg/mm<sup>2</sup>。这说明成分相似的矿物当结构上存在差异时，其物理性质也不同。

3 与沂蒙矿的研究对比，在本次对蒙山矿的结构研究中，对K、Ca等碱金属、碱土金属元素及Ti、Cr等元素在地幔矿物中的晶体化学特点和地球化学行为有了进一步的认识。

4 可以预言，随着这类矿物结构精测的不断实现，将会发现晶胞中a、b或c方向上的阳离子的有序化现象，即发现具超结构的新矿物。

本文的实验和计算工作曾得到沈今川、束今赋同志的大力帮助，亦得到施倪承等同志的协助，在此一并表示感谢。

#### 参考文献

- [1] 周剑雄等，1984。我国金伯利岩中发现的蒙山矿。矿物学报，第3期，第193—197页。
- [2] Haggerty, S. E., 1983. Lindsleyite (Ba) and mathiasite(K) two new chromium-titanates in the crichtonite series from the upper mantle. Amer. Min. 68, 495-505.
- [3] Jones, A. P., 1985. New INAA and lysis of a mantle-derived titanate mineral. Amer. Min. 70, 414-418.
- [4] 彭志忠、陆琦，1985，沂蒙矿的晶体结构。中国科学B辑，4,351—355。
- [5] 蓝承信等，1983，沂蒙矿K(Cr, Ti, Fe, Mg)<sub>12</sub>O<sub>19</sub>——我国发现的一种新矿物。科学通报，27,15,932—936。

[6] 彭志忠, 1985, 结构矿物学新成果。地质科技情报, 第2期, 第55—63页。

[7] 王 漢等, 1985, 系统矿物学。地质出版社。

## Crystal Structure of Mathiasite

Lu Qi, [Peng Zhizhong]

(Wuhan College of Geology)

**Key words:** new mineral; mathiasite; determination of crystal structure;  $R=0.047$ ; coordination about Zr

### Abstract

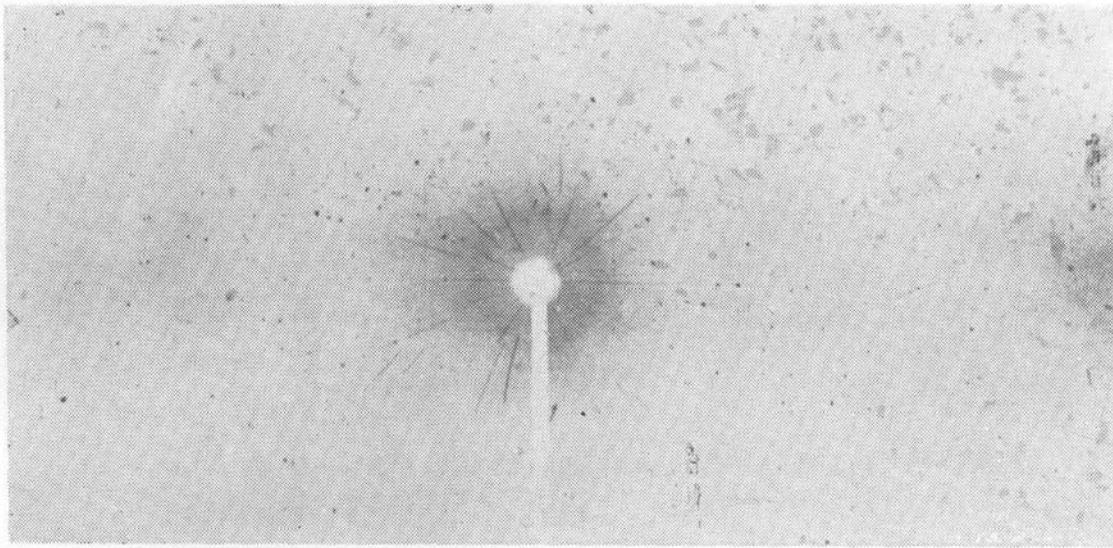
The crystal structure of mathiasite, a new mineral from Shandong province, has been determined, and the crystal chemical formula is written as  $(K, Ca)(Ti, Cr, Fe, Mg, Zr)_{21}O_{38}$ . The mineral belongs to trigonal system having space group of  $R\bar{3}$ , with its cell parameters being  $a=10.3722\text{ \AA}$ ,  $c=20.7161\text{ \AA}$ ,  $\alpha_R=9.1403\text{ \AA}$  and  $\alpha=69.137^\circ$ .

1554 independent diffraction data were collected on RASA-5RP auto-four-circle single crystal diffractometer; coordinates, temperature factors and site occupancies for all atoms were obtained and refined; atomic distances and angles were calculated. The final deviation factor  $R$  is 0.047.

Mathiasite occurs in kimberlite and must have formed under high temperature and pressure. Through the determination of its structure, the coordination about such atoms as Ti, Cr, Mg and K, especially the coordination about Zr atom in the complex oxide dominated by Ti, has been revealed.

This research contributes to the mineralogy and crystal chemistry of accessory metallic minerals in kimberlite.

陆 琦、彭志忠：蒙山矿的晶体结构



照片1. 蒙山矿〔110〕迴摆图

Photo 1. Oscillation photograph of Mathiasite (axis of rotation〔110〕)

照相条件: CuK $\alpha$ ; 50kV; 100mA; 4小时



照片2. 蒙山矿 (hkl) 华盛堡图

Photo 2. Weissenberg Photograph of Mathiasite (twin hhl)

照相条件: CuK $\alpha$ ; 50kV; 100mA; 20小时