

Synchysite-(Y) (新奇钙钇矿) 的晶体结构

王 立 本

(中国地质科学院矿床地质研究所, 北京 100037)

周 康 靖

(中国科学院福建物质结构研究所, 福州 350002)

主题词 新奇钙钇矿 晶体结构 青海省三色沟

提 要 新奇钙钇矿(synchysite-(Y)), $YCa(CO_3)F$, 经单晶X射线魏森堡法研究表明属单斜晶系, 空间群为 $C2/c$, 由四圆衍射仪精化求得的晶胞参数为: $a=12.039(3) \text{ \AA}$, $b=6.950(1) \text{ \AA}$, $c=18.436(6) \text{ \AA}$, $\beta=102.45(2)^\circ$ 。在四圆衍射仪上采用 $MoK\alpha$ 辐射收集的三维衍射数据, 已经劳伦兹偏振因子校正, 未做吸收校正。总共1019个衍射点的强度数据, 应用全矩阵最小二乘法对结构进行了精化, 经各向异性温度因子校正后, R 因子为0.086。

新奇钙钇矿具有(001)层状结构特征, Ca 层和(YF)层由磷酸根层隔开。层的堆垛方式与 $C2/c$ 白云母类似, 其中 Ca 层与白云母中的K层相对应, CO_3 层和(YF)层则分别对应于白云母中的四面体层和八面体层。由于 Ca 层上下两边的 CO_3 层的相对错动, 形成了类似于 $2M_1$ 白云母的堆垛多型结构。

1 引 言

新奇钙钇矿($YCa(CO_3)_2F$)最初由Smith等(1955, 1960)^[1-2]做为新矿物报导, 并以其产地命名为doverite。Levinson(1966)^[3]认为该矿物系synchysite的富钇变种, 经国际矿物学会新矿物和矿物命名委员会同意重新命名为synchysite-(Y)。

长期以来, 认为钙-稀土氟碳酸盐矿物的结构具球方解石型结构特征, 其成分介于 $CeCO_3F-CaCO_3$ 之间, 而实际上, 在 $CaCO_3-CeCa(CO_3)_2F$ 之间从未发现存在矿物, 而在 $CeCO_3F$ 和 $CeCa(CO_3)_2F$ 之间则存在一系列矿物。其中已命名的有四种矿物, 即bastnaesite, parisite, roentgenite和synchysite。由中国新矿物及矿物命名委员会审订的汉译名分别为: 氟碳铈矿, 氟碳钙铈矿, 伦琴石和直氟碳钙铈矿。与此相关的还有bastnaesite-(Y), synchysite-(Y), synchysite-(Nd)等矿物种, 分别译为氟碳钇矿、直氟碳钙钇矿和直氟碳钙钆矿^[4]。这些译名显然是遵循几个不同的原则确定的, 即氟碳铈矿和氟碳钙铈矿是按化学成分, 伦琴石是按音译, 直氟碳钙铈矿是按对称性和成分确定的, 旨在与氟碳钙铈矿相区别。实际上, 钙-稀土氟碳酸盐矿物是由bastnaesite(B)和synchysite(S)的结构块层规则堆垛形成的一系列顺序(sequential)多型体。Landuyt(1975)^[5]利用晶格象技术在

透射电镜下确定了 B_3S_2 、 B_3S_4 和 BS_4 等三个相,最近吴秀玲等(1994)^[6]利用同样的技术又确定出 B_5S_2 、 B_5S_4 和 $B_{18}S_{10}$ 等相,甚至还区分出 B_5S_4-1H 、 $3R$ 和 $6R$, B_5S_2-1H 和 $3R$, $B_{18}S_{10}-1H$ 和 $3R$ 等多型。可以预言利用高分辨电子显微术还有可能找到更多的B_nS_n顺序多型体,预示着这个系列中还会有若干新矿物,如果仍然沿袭现有的汉译原则,将来该系列矿物汉名的确定就会相当困难和混乱。为此,笔者(1992)^[7]曾建议了一个汉译名原则,本文则根据这一建议采用新奇钙钇矿来取代直氟碳钙钇矿的名称,并期望权威机构根据现已取得的该系列矿物的新的研究成果,对这类矿物的汉名重新加以审订。

已发现和命名的四种钙-稀土氟碳酸盐矿物均为重要的工业矿物,这些矿物的发现已有相当长的时间,但长期以来,这些矿物的晶体结构一直没有解决。近年来,该系列矿物的晶体结构研究获得了突破性的进展。Ni等(1993)^[8]完成了氟碳铈矿结构的高精度分析,证实了Donnay等(1953)^[9]和Oftedal(1931 a, b)^[10-11]对氟碳铈矿结构的预测。笔者与Ni等(1994)^[12]合作精确地测定了新奇钙钇矿的晶体结构,结果表明,新奇钙钇矿虽然有 $a = 7.11 \text{ \AA}$, $c = 54.7 \text{ \AA}$ 的三方晶系 R 格子,但这是一个假格子,其真实对称轴为单斜晶系。在Ca层上下两侧的 CO_3 层有规律的相对错动,使得各结构层共同的三次对称轴不复存在。实际上,从 CO_3 的分布来考虑,新奇钙钇矿中Ca层和 CO_3 层的结构与氟碳铈矿和球方解石(vaterite)均不同构。由此可以推论,由B和S堆积形成的顺序多型体,包括parisite(BS), roentgenite(BS_2)以及其它 B_mS_n 等皆不会有真正的 R 格子,而是单斜 c 心格子晶胞与 R 格子的偶合现象。这样看来,以往对这些多型体的对称和空间群的推测需要重新考虑。

本文阐述的是新奇钙钇矿的矿物学和晶体结构详情,并对其结构和晶体化学特征进行了讨论。

2 新奇钙钇矿的矿物学

样品采自青海省西部三色沟的一条碳酸盐岩脉,单晶样品是由青海省地质矿产局的罗世清高级工程师提供的。新奇钙钇矿单晶呈无色至浅黄色,透明至半透明,玻璃光泽,无解理,断口不平整。单晶的晶形由六方柱,六方双锥和平行双面等单形构成,由此推断的点群为 $6/mmm$ 。实测密度为 $3.85-3.87 \text{ g/cm}^3$,折光率为 $N_p \approx N_m = 1.642$, $\gamma = 1.739$, $2V < 10^\circ$ 。由化学全分析结果计算的经验分子式为: $(Y_{0.521}, La_{0.062}, Ce_{0.167}, Pr_{0.027}, Nd_{0.081}, Sm_{0.008}, Eu_{0.003}, Gd_{0.038}, Tb_{0.005}, Dy_{0.047}, Ho_{0.009}, Er_{0.025}, Tm_{0.005}, Yb_{0.015}, Lu_{0.002})_{1.015} (Ca_{0.998}, Mg_{0.015}, Mn_{0.013})_{1.026} C_2 O_{8.225} F_{0.885}$ 。理论化学分子式为: $YCa(CO_3)_2F$ 。

3 X射线衍射实验

3.1 单位晶胞和空间群的确定

新奇钙钇矿的单位晶胞和空间群是用魏森堡法确定的。由于具有很强的六方假格子,正常曝光很难求得真单胞。实验中采用长时间曝光,沿假六方对称的3个二次轴 a_1 、 a_2 和 a_3 取得0、1和2等三层魏森堡图。仔细检查这套照片有如下发现:(1)3个方向均具有 R 格子特

征,其轴长为 $a_r = 6.93 \text{ \AA}$, $c_r = 54.0 \text{ \AA}$; (2) 沿 a_1 取得的魏森堡图具 c 滑移面,其弱点的分布不同于 a_2 和 a_3 两个方向,而 a_2 和 a_3 两个方向的衍射点的分布完全相同,但不具 c 滑移面。这表明三次轴不存在, R 格子是六方假对称之外的又一级假对称; (3) a_1 是唯一的二次轴。由此确定的衍射符号为 $2/mC_2c_2$,可能的空间群为 Cc 和 $C2/c$ 。由此确定的单位晶胞参数的近似值为 $a = 12.00 \text{ \AA}$, $b = 6.93 \text{ \AA}$, $c = 18.49 \text{ \AA}$, $\beta = 102.5^\circ$ 。

3.2 强度数据的收集和处理

在对新奇钙钇矿的单晶认定 b 轴方向之后,在Enraf-Nonius CAD4四圆单晶衍射仪上收集了强度数据。对强度数据做了劳伦兹偏振因子校正,但未做吸收校正。经过精化的晶胞参数连同数据收集的实验条件及与结构精化有关的结晶学数据列在表1中。

表1 新奇钙钇矿的结晶学数据和结构精化的结果

Table 1 Crystal data and results of structure refinements for synchysite-(Y)

产地	青海省西部三色沟			
样品尺寸	0.1×0.2×0.3mm ³			
单位晶胞	(最小二乘法精化)			
	$a(\text{ \AA})$	12.039(3)	$c(\text{ \AA})$	18.436(6)
	$b(\text{ \AA})$	6.950(1)	$\beta(^{\circ})$	102.45(2)
空间群	C2/C			
Z	12			
MoK α 辐射 (石墨单色器)				
扫描类型	$\theta/2\theta$			
θ 范围	1°—26°			
收集到的数据点	1350			
>3 $\sigma(I)$ 的数据点	1019			
R	0.086			
R _w	0.090			
变量个数	153			

注: 括号中的数字为最后一位数字的标准偏差

3.3 结构的解析和精化

应用SDP软件包对新奇钙钇矿的晶体结构进行解析和精化。

采用帕特逊函数和直接法获得了Y、Ca和F的原子坐标,其后采用傅立叶合成和差值傅立叶合成等方法获得了包括C和O的所有原子的原子坐标。采用全矩阵最小二乘法对原子坐标、各向同性温度因子和各向异性温度因子分别进行了精化,还对Y(1)和Y(2)进行占位度的修正。

表2中所列的是占位度、原子坐标和各向同性温度因子。各向异性热振动参数列于表3。表4所示的是新奇钙钇矿的原子间的键长。各碳酸根的C—O键长和O—C—O的键角列于表5。

4 晶体结构的描述和讨论

4.1 晶体结构的描述

Wang等^[12]曾指出新奇钙钇矿具有层状堆垛结构的特征,新奇钙钇矿具有类似的结构

表2 新奇钙钇矿: 占位度、原子坐标和各向同性热振动参数
 Table 2 Synchysite-(Y): site occupancies, atomic coordination,
 and isotropic thermal vibration parameters

原子	占位度	原子坐标			B(eqv.)
		x	y	z	
Y(1)	0.64	0.5000(0)	0.2595(4)	0.2500(0)	0.54(4)
Y(2)	1.33	0.6707(1)	0.2545(3)	0.7506(1)	0.46(2)
Ca(1)	0.50	0.2500(0)	0.2500(0)	0.5000(0)	0.9(1)
Ca(2)	1.00	0.9121(4)	0.2513(6)	0.5007(3)	0.75(7)
F(1)	0.50	0.500(0)	0.077(3)	0.7500(0)	2.3(4)
F(2)	1.00	0.845(1)	0.084(2)	0.7768(8)	1.1(3)
O(1)	1.00	0.434(1)	0.297(3)	0.8737(9)	1.5(3)
O(2)	1.00	0.923(1)	0.063(3)	0.0519(9)	1.2(3)
O(3)	1.00	0.940(2)	0.052(3)	0.1747(10)	2.3(4)
O(4)	1.00	0.486(1)	0.179(2)	0.3759(9)	1.1(3)
O(5)	1.00	0.610(2)	0.073(3)	0.0485(8)	1.9(3)
O(6)	1.00	0.678(2)	0.042(3)	0.1722(12)	2.6(4)
O(7)	1.00	0.308(1)	0.151(3)	0.1754(10)	1.6(3)
O(8)	1.00	0.696(2)	0.132(2)	0.8744(10)	1.5(3)
O(9)	1.00	0.269(2)	0.113(3)	0.0548(9)	1.4(3)
C(1)	1.00	0.974(2)	0.105(4)	0.118(1)	1.4(5)
C(2)	1.00	0.398(2)	0.097(4)	0.383(1)	1.0(4)
C(3)	1.00	0.286(2)	0.053(4)	0.118(1)	1.6(5)

表3 新奇钙钇矿: 各向异性热振动参数
 Table 3 Synchysite-(Y): anisotropic thermal vibration parameters

原子	B ₁₁	B ₂₂	B ₃₃	B ₁₂	B ₁₃	B ₂₃
Y(1)	0.74(7)	0.76(8)	0.24(7)	0	0.36(5)	0
Y(2)	0.86(5)	0.35(5)	0.24(4)	0.02(4)	0.25(4)	0.00(4)
Ca(1)	1.2(2)	1.3(2)	0.3(2)	0.4(2)	0.5(2)	-0.1(2)
Ca(2)	1.1(1)	0.6(1)	0.6(1)	0.0(2)	0.4(1)	-0.1(2)
F(1)	3.4(8)	0.4(7)	4.1(9)	0	3.2(6)	0
F(2)	1.6(5)	0.5(5)	1.3(5)	0.2(4)	0.6(4)	-0.7(4)
O(1)	1.6(6)	2.5(8)	0.8(6)	-0.4(6)	0.9(4)	-0.3(6)
O(2)	1.4(6)	1.2(6)	0.5(6)	0.4(6)	0.1(5)	-0.9(5)
O(3)	4.0(9)	2.3(8)	0.8(6)	1.5(7)	1.0(6)	0.7(6)
O(4)	2.4(6)	0.5(6)	0.5(6)	1.4(5)	0.5(5)	0.6(5)
O(5)	4.1(7)	1.6(6)	0.5(5)	-3.1(5)	1.6(5)	-0.9(5)
O(7)	1.9(6)	1.4(7)	1.8(7)	1.0(6)	0.8(5)	-0.6(6)
O(8)	3.0(8)	0.1(5)	1.2(6)	0.7(6)	0.1(6)	1.0(5)
O(9)	1.9(6)	1.9(6)	0.3(5)	-0.3(6)	0.1(5)	-0.9(5)
C(1)	0.0(7)	3(1)	1.3(9)	-0.3(8)	-0.3(7)	0.3(9)
C(2)	1.8(7)	1.4(8)	0.3(6)	0.3(7)	1.7(5)	-0.8(6)
C(3)	1.9(9)	2(1)	0.7(8)	-0.8(9)	-0.2(7)	-1.2(8)

表4 新奇钙钇矿: 原子间距 (Å)

Table 4 Synchysite-(Y); bond distances(Å)

Y(1)-Y(2)	4.118(1)	Ca(2)-Ca(2)	3.897(3)	Y(2)-O(7)	2.465(5)
Y(1)-Y(2)	3.955(1)			Y(2)-O(8)	2.395(5)
Y(1)-Y(2)	3.967(1)	F(1)-F(2)	4.073(4)		
Y(1)-Y(2)	4.122(1)	F(1)-F(2)	3.979(7)	Ca(1)-O(2)	2.463(5)
Y(1)-Y(2)	3.951(1)	F(1)-F(2)	3.983(7)	Ca(1)-O(2)	2.463(5)
Y(1)-Y(2)	3.967(1)	F(1)-F(2)	4.069(7)	Ca(1)-O(5)	2.414(5)
		F(2)-F(2)	4.154(5)	Ca(1)-O(5)	2.414(5)
Y(2)-Y(2)	4.107(1)	F(2)-F(2)	4.161(5)	Ca(1)-O(8)	2.411(6)
Y(2)-Y(2)	3.969(1)			Ca(1)-O(8)	2.411(6)
Y(2)-Y(2)	3.965(0)	Y(1)-O(3)	2.479(6)	Ca(1)-O(9)	2.709(5)
		Y(1)-O(3)	2.479(6)	Ca(1)-O(9)	2.709(5)
Y(1)-F(1)	2.338(6)	Y(1)-O(4)	2.428(5)		
Y(1)-F(2)	2.305(4)	Y(1)-O(4)	2.427(5)	Ca(2)-O(1)	2.436(5)
Y(2)-F(1)	2.394(3)	Y(1)-O(7)	2.534(6)	Ca(2)-O(2)	2.374(5)
Y(2)-F(2)	2.365(4)	Y(1)-O(7)	2.537(6)	Ca(2)-O(2)	2.725(6)
Y(2)-F(2)	2.347(4)			Ca(2)-O(4)	2.387(5)
				Ca(2)-O(5)	2.649(7)
		Y(2)-O(1)	2.385(6)	Ca(2)-O(5)	2.404(5)
Ca(1)-Ca(2)	4.07(2)	Y(2)-O(3)	2.509(6)	Ca(2)-O(9)	2.402(6)
Ca(1)-Ca(2)	3.989(1)	Y(2)-O(6)	2.489(7)	Ca(2)-O(9)	2.363(6)
Ca(1)-Ca(2)	3.978(1)	Y(2)-O(6)	2.531(7)		

表5 新奇钙钇矿: 碳酸根的键长(Å)和键角(°)

Table 5 Synchysite-(Y); bond distances(Å) and angles(°) of the carbonate groups

C(1)-O(1)	1.282(9)	O(1)-C(1)-O(2)	117.39(70)
C(1)-O(2)	1.271(10)	O(1)-C(1)-O(3)	118.70(74)
C(1)-O(3)	1.256(10)	O(2)-C(1)-O(3)	123.88(71)
C(2)-O(4)	1.243(9)	O(4)-C(2)-O(5)	114.04(74)
C(2)-O(5)	1.292(8)	O(4)-C(2)-O(6)	122.26(65)
C(2)-O(6)	1.273(10)	O(5)-C(2)-O(6)	123.70(75)
C(3)-O(7)	1.229(9)	O(7)-C(3)-O(8)	117.03(78)
C(3)-O(8)	1.309(10)	O(7)-C(3)-O(9)	126.44(83)
C(3)-O(9)	1.220(10)	O(8)-C(3)-O(9)	114.94(69)

特征。结构中Ca层和Y—F层以1:1的比例交替分布。Ca原子和Y原子以—Ca—Y—Ca—Y—的方式处在与C*轴平行的点列上。在Y—F层中，Y和F分别处在近规则的六边形的角顶上。重原子的这一分布，很好地解释了 $a' = 4.0 \text{ \AA}$, $c' = 9.0 \text{ \AA}$, $c'' = 18.0 \text{ \AA}$ 的两级假六方单胞 (Ofstedal等, 1931)。碳酸根的堆垛方式决定了晶胞所具有的单斜对称。碳酸根平面近似与(001)正交, 3个碳酸根的平面法线与(001)的平面法线的交角分别为 88.1° , 88.1° 和 87.7° 。图1和图2分别为新奇钙钇矿的结构在(010)和(001)上的投影。

由图1可见, 新奇钙钇矿的单位晶胞由两个(YF)层和两个Ca层和夹在中间的4个CO₃层组成。Ca层处在 $z = 0, 1/2$ 的位置, (YF)层处在 $1/4, 3/4$ 位置, (CO₃)的分布比起与(YF)层的间距稍稍靠近Ca层。

结构中Ca层中的所有Ca原子均共面, 平行于(001), 其中, Ca(1)处在特殊位置(I),

Ca(2)在一般位置, Ca(1)位于Ca(2)原子连线的中点上。Y(1)和Y(2)均与F(1)、 $2 \times F(2)$ 配位, 其中F(1)与Y(1)、Y(2)共面, F(2)稍稍偏离该平面。由表4和图1、图2可见, (YF)层两侧各有3个氧原子与Y配位。Ca(1)分别与Ca层两侧各4个氧原子配位, 为八次配位, 而Ca(2)则与一侧的4个氧原子、另一侧的3个氧原子配位, 为七次配位。

4.2 晶体结构的讨论

前已述及, 长期以来钙-稀土氟碳酸盐矿物的晶体结构未能定量解析, 其原因在于这些矿物具有很强的假六方对称, 这阻碍了空间群和单位晶胞的正确确定, 从而不能获得轻原子的坐标参数。事实表明, 这类矿物的结构研究不能单靠四圆衍射仪解决, 需要进行详尽的X射线晶体学研究来确定其所具有的真实对称。

正如Wang等^[12]对新奇钙钇矿的结构所指出的, 新奇钙钇矿, 如果不考虑 CO_3 层的分布, 可以导出 $c'' = 18.00 \text{ \AA}$ 的六方假单胞, 由于沿 c^* 轴存在着重原子更为复杂的堆垛序列: Y(1)—Ca(2)—Y(2)—Ca(1)—Y(2)—Ca(2)—Y(1) (图1), 从而也存在着 $c'' = 18.00 \times 3 = 54.0 \text{ \AA}$ 的另一级假单胞。

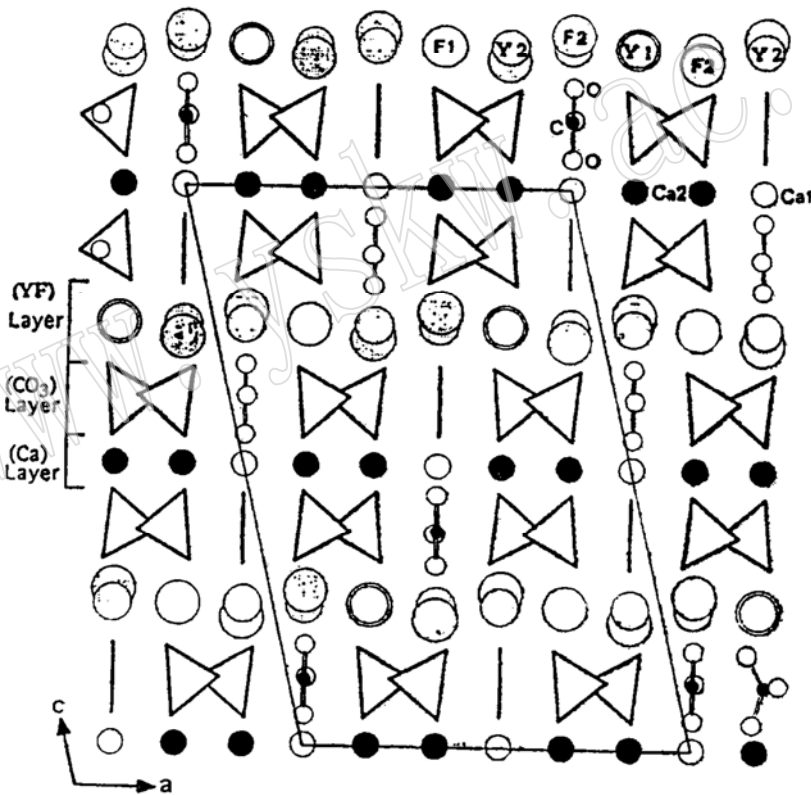


图1 新奇钙钇矿的晶体结构在(010)上的投影

(三角形表示碳酸根, 氧原子在三角形的角顶; 圆圈从最大到最小依次表示F, Y, Ca和C; 平行四边形为晶胞轮廓)

Fig.1 Crystal structure of synchysite-(Y), projected on (010)
(Triangles represent (CO_3) groups, and O atoms lie at the apices of triangles; circles from the largest to smallest represent F, Y, Ca and C atoms, respectively; the unit cell is outlined)

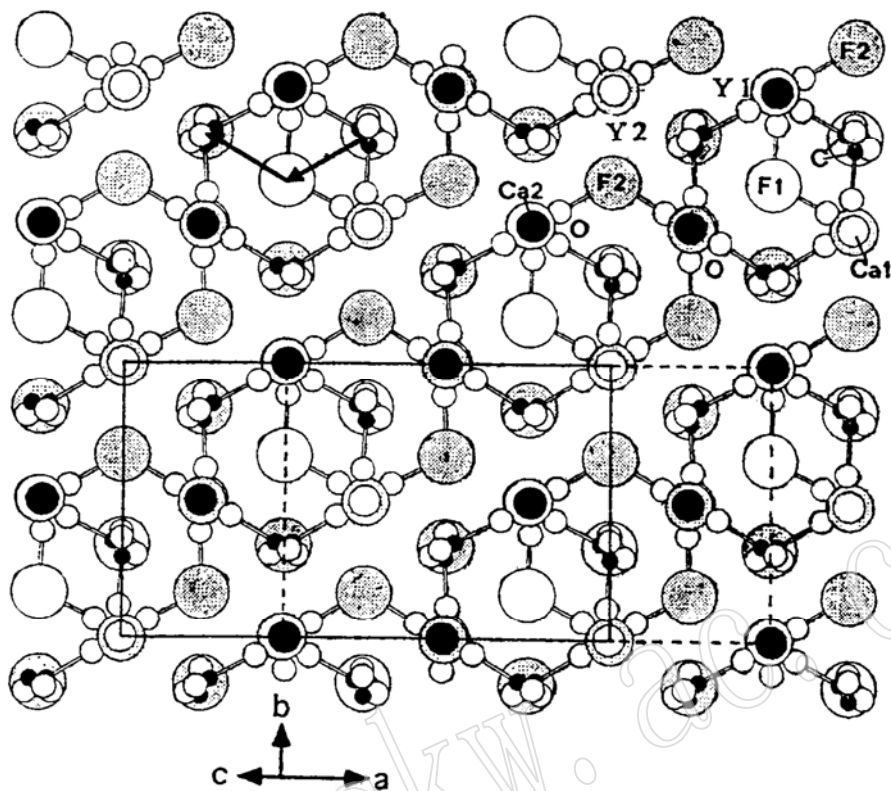


图2 新奇钙钇矿的晶体结构在(001)上的投影

(原子符号同图1; 箭头表示结构层的位移方向; 虚线表示晶胞底部, 实线表示晶胞顶部)

Fig. 2 Crystal structure of synchysite-(Y), projected on (001)

(Atomic symbols are the same as those in Fig. 1; arrows indicate the shift direction of the layer structure, dashed line outlines the bottom of the unit cell, and solid line outlines the top the unit cell)

结构的单斜对称是由 CO_3 层的堆垛造成的。Ni等^[6]对氟碳铈矿的研究表明, 结构中存在着沿 $\bar{6}$ 和 $[0001]$ 3次轴分布的 $F(1)$ 和 $2 \times F(2)$ 点列, $F(1)-F(1)$ 间距为 4.88 \AA 。由于在新奇钙钇矿中YF层与Ca层交替出现, 使得不同层的 $F(1)-F(1)$ 间距加大到 9.00 \AA 。由于这个大的孔隙空间的存在和结构稳定性的需要, CO_3 的分布趋向于充填这个空间。在 $z = 1/2$ 以上的 CO_3 层在(001)平面中沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向位移 2.30 \AA , 而在 $z = 1$ 以上的 CO_3 层则沿 $[\bar{1}10]$ 方向位移同样的距离(图2), 使得YF层两侧的 CO_3 的直立的边两端的氧原子与 $F(1)$ 处于同一个与 c^* 近似平行的点列上(图2), 从而形成 $F(1), \text{CO}_3$ 边, CO_3 边, $F(2), \text{CO}_3$ 边, CO_3 边, $F(1)$ 这样一个沿 c^* 的堆垛序列, 致使6次轴和3次轴不复存在, 即沿 c^* 无对称, 而只保留了(001)面中的一个2次轴。碳酸根沿a方向的位移经计算为 $2 \times (b/3) \cos 30^\circ = 4.01 \text{ \AA}$, 由于Ca层上下的碳酸根层的位移, β 角可计算为 $90^\circ + \arctan(4.01 \text{ \AA} / 18.00 \text{ \AA}) = 102.56^\circ$, 与实测的 102.45° 相当吻合。

与新奇钙铈矿^[12]一样, 新奇钙钇矿的堆垛序列与具有层间阳离子的2:1云母类似, 并可与白云母的结构相比较; 二者的空间群均为 $C2/c$; 新奇钙钇矿中的 CO_3 层和YF层分别对

应于白云母中的四面体层和 $[AlO_5(OH)]$ 八面体层;与白云母的八面体层一样,YF层中存在2次轴;Ca层对应于白云母的K层,二者均存在对称中心(I);二者均存在单斜C心格子与六方和R格子的偶合现象。据此,也可以将多型结构的概念引入新奇钙钇矿晶体结构的描述,由于 CO_3 层的位移规律与 $2M_2$ 白云母相同,可称之为 $2M_2$ 新奇钙钇矿。

氟碳铈矿和新奇钙钇矿是钙-稀土氟碳酸盐矿物系列的端员矿物,该系列的其它矿物均为这两个端员组份构成的顺序多型体,因此,这两个矿物结构的定量解析无疑将大大促进帕瑞钙铈矿(Parisite-(Ce))等其它多型体矿物的结构研究的深入。

在本文的早期工作阶段,得到已故的彭志忠教授的关怀、指导和大力支持,笔者受益匪浅。同时,也得到郭宗山教授、马喆生教授的帮助和指导。罗世清同志提供了单晶样品和部分矿物学数据。季克俭研究员对本文的发表给予了支持。作者向他们致以诚挚的谢意。

参考文献

- 1 Smith W L, Stone J, Riska D D & Levine H. Doverite, a new yttrium mineral. *Science*, 1955, 122, 31.
- 2 Smith W L, Stone J, Ross D R & Levine H. Doverite, a possible new yttrium fluocarbonate from Dover, Morris County, New Jersey. *Am. Mineral.*, 1960, 45, 92—98.
- 3 Levinson A A. A system of nomenclature for rare earth minerals. *Am. Mineral.*, 1966, 51, 152—157.
- 4 新矿物及矿物命名委员会审订. 英汉矿物种名称. 科学出版社, 1984.
- 5 Van Landuyt J & Amelinckx S. Multiple beam direct lattice imaging of new mixed-layer compounds of bastnaesite—synchysite series. *Am. Mineral.*, 1966, 60, 351—358.
- 6 吴秀玲、杨光明、孟大维、潘兆楹、李斗星、戴吉岩. 钙稀土氟碳酸盐矿物中新多型体的HREM研究. *岩石矿物学杂志*, 1994, 13(4): 335—340.
- 7 王立本. 关于钙-稀土氟碳酸盐矿物名称的汉译问题. *矿物岩石地球化学通讯*, 1992, (1): 14—15.
- 8 Ni Yunxiang, Hughes J M & Mariano A N. The atomic arrangement of bastnaesite-(Ce), $Ce(CO_3)F$, and structural elements of synchysite-(Ce), roentgenite-(Ce), and parisite-(Ce). *Am. Mineral.*, 1993, 78, 415—418.
- 9 Donnay G & Donnay J D H. The crystallography of bastnaesite, parisite, roentgenite and synchysite. *Am. Mineral.* 1953, 38, 932—963.
- 10 Oftedal I. Zur Kristallstruktur von Bastnaesit, $(Ce, La)FCO_3$. *Z. Kristallogr.*, 1931a, 78, 462—469.
- 11 Oftedal I. Über Parisit, Synchysit und Kordylit. *Z. Kristallogr.*, 1931b, 79, 437—464.
- 12 Wang L, Ni Y, Hughes J M, Bayliss P. & Drexler J W. The atomic arrangement of synchysite-(Ce), $CeCaF(CO_3)_2$. *Canadian Mineral.*, 1994, 32, 865—871.

The Crystal Structure of Synchysite-(Y), $YCa(CO_3)F$

Wang Liben

(Institute of Mineral Deposits, Chinese Academy of Geological Sciences, Beijing 100037)

Zhou Kangjing

(Fujian Institute of Matter Structure, Academia Sinica, Fuzhou 350002)

Key words: synchysite-(Y); crystal structure; Sanshegou of Qinghai Province

Abstract

The monoclinic space group of synchysite-(Y) was determined as $C2/c$ by single-crystal crystallographic research using Weissenberg method. The unit cell parameters obtained and refined on a four-circle diffractometer are a 12.039(3), b 6.950(1), c 18.436(6) Å, and β 102.45(2)°. From 1350 independent reflections collected by means of $MoK\alpha$ radiation on the same instrument, 1019 reflections with $I > 3\sigma(I)$ were corrected for Lorentz and polarization factors; however, no absorption correction was conducted. After the refinement with anisotropic temperature factors by the full matrix least square method, the residual index for the 1019 reflections was $R = 0.086$.

Synchysite-(Y) possesses a characteristic (001) layer structure, with layers of (Ca) and (YF) separated by layers of carbonate groups. The layers stack in a manner analogous to $C2/c$ muscovite, where (Ca) layers in synchysite-(Y) are equivalent to (K) layers in muscovite, (CO_3) layers in synchysite-(Y), to layers of tetrahedra in muscovite, and (YF) layers in synchysite-(Y), to layers of octahedra in muscovite. As in muscovite, offsets of adjacent (CO_3) layers are similar to those in $2M_2$, which results in the layer-stacking polytype structure.