

硅镁钡石的晶体结构

龚国洪¹, 裘愉卓^{2,1}, 肖昕³

1. 中国科学院 地球化学研究所 矿床地球化学国家重点实验室, 贵阳 550002;
2. 中国科学院 广州地球化学研究所 矿物与成矿重点实验室, 广州 510640;
3. 贵州大学 化学化工学院, 贵阳 550025

硅镁钡石 (Magbasite) 是 1965 年谢苗诺夫在白云鄂博稀土矿床中发现的, 当时报道的分子式为: $\text{KBa}(\text{Al}, \text{Sc})\text{Fe}^{2+}\text{Mg}_5\text{Si}_6\text{O}_{20}\text{F}_2$; 杨主明等 (2009) 报道的成分为: $\text{KBa}(\text{Mg}, \text{Fe})_8\text{Si}_8\text{O}_{23}\text{F}_5$ 。两者均用的是同一样品 (type specimen), 同时也给出了 XRD 数据。鉴于这个样品的结晶形态呈纤维状或纳米管状, 所以晶体结构测定一直无法进行。

作者在白云鄂博矿床主矿岩芯中再次发现了该矿物, 通过检测最终确定了该矿物分子式为: $\text{KBa}(\text{Mg}, \text{Fe})_8\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{F}, \text{OH})_7$ 。矿物呈长柱状—针状的扇形集合体。经劳埃和四园衍射仪进行挑选, 获得多个单晶体进行晶体结构测定和分析, 获得了晶体

结构全部数据。

取 $\pm 0.15 \text{ mm}^3$ 的单晶体, 在 Bruker Smart Apex II CCD 单晶 X 射线衍射仪上收集独立衍射点 1133 个, 使用经石墨单色化的 $\text{Mo K}\alpha$ 射线 ($\lambda = 0.071073 \text{ nm}$), 扫描方式为 φ - ω , 晶胞参数 $a=1.8945 \text{ nm}$, $b=2.2496 \text{ nm}$, $c=0.52911 \text{ nm}$, 斜方晶系, 空间群为 Cmma , $Z=4$, 晶胞体积 $V=2255.0(14) \text{ \AA}^3$, $R[F^2 > 2\sigma(F^2)]=0.057$, $wR(F^2)=0.184$ 。 $w=1/[\sigma^2(F_o^2) + (0.1616P)^2 + 159.315P]$, 其中 $P=(F_o^2 + 2F_c^2)/3$ 。对强度数据进行了 LP 因子和经验吸收校正, 结构解析和精修用 SHELXTL 程序, 氢原子坐标由理论计算得到。硅镁钡石的原子坐标参数如下表:

	x	y	z	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
O1	0.1936 (3)	0.3175 (2)	0.6656 (9)	0.0130 (11)
O2	0.0783 (4)	0.2500	0.6684 (15)	0.0174 (17)
O3	0.0792 (3)	0.3492 (3)	0.9181 (11)	0.0163 (12)
O4	0.0780 (3)	0.3484 (3)	0.4108 (11)	0.0173 (12)
O5	0.0778 (3)	0.4518 (3)	0.1718 (10)	0.0182 (12)
O6	0.1926 (3)	0.3852 (2)	0.1726 (10)	0.0157 (12)
F1	0.3226 (3)	0.4485 (2)	-0.6272 (9)	0.0232 (11)
Mg1	0.2500	0.32121 (18)	0.0000	0.0131 (8)
H1	0.0000	0.601 (7)	0.35 (9)	0.6 (3)*
O7	0.0000	0.5439 (4)	0.3231 (15)	0.0195 (17)
F2	0.1978 (3)	0.2500	1.1638 (12)	0.0183 (14)
Mg2	0.2500	0.39044 (18)	-0.5000	0.0119 (8)
Mg3	0.0000	0.2500	1.1667 (8)	0.0018 (9)
Fe1	0.0000	0.5000	0.0000	0.0131 (6)
Mg4	0.08971 (16)	0.5000	-0.5000	0.0010 (7)
Ba1	0.2500	0.5000	0.0000	0.0214 (4)
Si2	0.10867 (11)	0.38571 (10)	0.1667 (4)	0.0133 (5)
Si1	0.10937 (11)	0.31773 (10)	0.6655 (4)	0.0129 (5)
K1	0.2500	0.2500	0.5000	0.0407 (12)