

大别山绿辉石晶体结构的再研究

——兼与谢舜克等同志商榷

郭卫东 罗谷风 郭 昀

(南京大学地球科学系)



谢舜克等(1989)曾测定了大别山一个绿辉石的晶体结构,认为它具 $P2/c$ 空间群;四面体链分别呈 SA 和 OB 扭转; M 阳离子晶位全部为 6 次配位的八面体; Al 在所有这四种晶位中均有相当多的占有率,为绿辉石的新型结构。本文对该资料再研究后确认其真实空间群为 $P2/n$;结构中仅有一种 O 旋转的四面体链; $M2$ 和 $M2(1)$ 晶位为 8 次配位; Al 全部进入 $M1(1)$ 晶位, $Al-Mg$ 呈完全有序分布,属典型的 $P2/n$ 有序绿辉石。本文给出了重新计算的该绿辉石的结构数据,并对当前计算机使用日益广泛的情况下,在结构数据的处理中应更重视结晶学分析提出了看法。

关键词 绿辉石 空间群 晶体结构 大别山

绿辉石是榴辉岩的主要矿物成分,并广泛出现于蓝片岩相的变质岩中,其重要意义已引起人们越来越大的关注。

已知绿辉石的结构有无序态和有序态之别。前者具有 $C2/c$ 空间群;有序绿辉石则可有 3 种不同的对称,即 $P2^{[1]}$, $P2/n^{[2,3]}$ 和 $P2/c^{[4]}$ 空间群。其中以 $P2/n$ 最为常见。

谢舜克等^[5](以下简称“谢文”)在研究大别山地区榴辉岩的变质矿物学时,对编号为“石 4”的绿辉石样品进行了晶体结构测定,并称“发现了绿辉石的新类型 $P2/c$ 空间群”,“确定了绿辉石的新型结构”。但笔者在对其有关内容进行了核查和分析后认为,谢文对空间群的判定有误,对晶体结构的描述和分析也存在着问题,因而其资料实际上无法供人们直接利用。不过其原始数据仍是有价值的。为此,本文在讨论“石 4”绿辉石之真实空间群的同时,还以谢文的原始数据为基础,探讨并给出了其合理的晶体结构解释。

1 样品的化学组成

谢舜克等^[5]给出的“石 4”绿辉石之化学成分列于表 1。表中同时列出了由笔者计算得出的以 6 个氧为基准的阳离子数。它与谢文^[5]给出的相应结果微有出入。

该绿辉石的化学组成笔者按 Morimoto^[6]的 $Jd-Ae-Q$ ($Q=En+Fs+Wo$) 三端员组分表示

注:本文为国家自然科学基金资助项目(编号 49070082)。

本文 1994 年 9 月收到,1995 年 3 月改回,刘淑春编辑。

为 $\text{Jd}_{41.0}\text{Ae}_{11.3}\text{Q}_{47.7}$; 谢文^[5]给出的端员组分含量则为 $\text{Jd}_{43.28}\text{Ae}_{10}\text{Di}_{33.82}\text{Hd}_{11.38}\text{Tsch}_{1.55}$ ①。

表 1 “石 4”绿辉石的化学组成

Table 1 Chemical data for the shi-4 omphacite

氧化物	SiO ₂	TiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	FeO	MnO	MgO	CaO	Na ₂ O	K ₂ O	P ₂ O ₅	Σ
重量(%) ^[5]	55.83	0.21	10.09	4.32	3.65	0.02	7.41	11.01	7.33	0.23	0.35	100.45
阳离子	Si	Ti	Al	Fe ³⁺	Fe ²⁺	Mn	Mg	Ca	Na	K		Σ
阳离子数	1.996	0.006	0.425	0.116	0.109	0.001	0.395	0.422	0.508	0.010		3.988

注:阳离子数以 6 个氧为基准。

2 真实空间群的判断

谢奕克等^[5]得出“石 4”绿辉石之单斜晶胞参数(为了后面讨论方便,本文对谢文给出的晶胞参数符号一律加撇号表示,以利区别)如下:

$$a' 0.525 4(2), b' 0.875 6(2), c' 0.947 3(2)\text{nm}, \beta' 105.07(3)^\circ; V' 0.420 8\text{nm}^3\text{②}。$$

衍射系统消光规律为 $h0l$ 型衍射之存在条件: l 等于偶数,相应的空间群为 $P2/c$ 。

笔者经仔细分析后发现,谢文^[5]对该绿辉石空间群的判定有误。

(1)众所周知,辉石属单链结构硅酸盐,其硅氧四面体链沿 c 轴延伸,单胞的 c 值均在 0.520nm 左右。但从谢文^[5]给出的晶胞参数值和晶体结构图中可明显看出,他们所选择的 c' 轴和 a' 轴与辉石的规范定向准则不符,四面体链成了平行于 a' 轴延伸。由于空间群符号的表示形式是与晶体定向密切相关的,故可肯定,“石 4”绿辉石按规范定向时的空间群不可能是 $P2/c$ 。

(2)为了使晶体定向规范化,对“石 4”绿辉石来说一种可能的选择方案是:保持原来的 b' 轴不变, a' 轴与 c' 轴则互换。经此变换后的 c'' 轴便与四面体链的延伸方向一致了,且除 $c''=a'=0.525 4\text{nm}$ 外, $a''=c'=0.947 3\text{nm}$,也恰好落在绿辉石 a 值的分布范围 0.945—0.968nm^[7]之内,但空间群则相应地转换为 $P2/a$ 。

然而进一步的分析表明,此方案中 c'' 轴的取向虽已符合规范,但 a'' 轴的选择仍有问题。首先,有序绿辉石系由无序绿辉石经有序化转变而成,因而任何规范定向的有序绿辉石必然是无序绿辉石空间群 $C2/c$ 的一个子群,而 $P2/a$ 却不属此列。

其次,“石 4”绿辉石的 $\beta''=\beta'=105.07^\circ$,已超出了天然绿辉石的 β 下限值; a'' 值看来也偏低,与成分不相称。Seki 和 Onuki^[8]曾得出关于天然硬玉-透辉石系列矿物之晶胞参数与化学成分间的关系,其中除 c 基本上不随成分而变化外,其他参数对成分的变化都较敏感。据此,由 b' 值得出“石 4”绿辉石之 Jd 分子百分含量为 45.5,与化学分析的结果 41.0 相近;但由 $a''(=c')$ 和 $\beta''(=\beta')$ 值导出的 Jd 数却分别为 85.5 和 0(实际上无对应值,因 β' 已小于 $\text{Jd}=0$ 的 β 下限值),均与化学分析结果相差很大,而两者本身之间更是南辕北辙,相差甚远。它反映了 a'' 轴以

① $\text{Jd}-\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$; $\text{Ae}-\text{NaFe}^{3+}\text{Si}_2\text{O}_6$; $\text{En}-\text{Mg}_2\text{Si}_2\text{O}_6$; $\text{Fs}-\text{Fe}_2\text{Si}_2\text{O}_6$; $\text{Wo}-\text{Ca}_2\text{Si}_2\text{O}_6$; $\text{Di}-\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$; $\text{Hd}-\text{CaFeSi}_2\text{O}_6$; $\text{Tsch}-\text{CaAlAlSiO}_6$ 。

② 原文为 $4.208 \times 10^5 \text{nm}^3$,显然有误。

及原始的 c' 轴的选择确有问题。

(3) 经研究后笔者确信,对谢文^[5]给出的晶胞须作以下的坐标系变换后,才是“石 4”绿辉石按规范定向的单胞:

$$\vec{a} = -\vec{a}' - \vec{c}', \quad \vec{b} = \vec{b}', \quad \vec{c} = \vec{a}'$$

变换后得出的晶胞参数及对应于 Seki 和 Onuki^[8]的 Jd 值列于表 2。表中还对照列出了 3 个 Jd 值相近的绿辉石之晶胞参数。不难看出,它们彼此间都相符得很好,从而证明了经笔者修正后的定向是正确的。

表 2 绿辉石的晶胞参数

Table 2 Unit-cell parameters for omphacites

	大别山“石 4”	江苏东海 M01-4	Bessi, Japan	California, U. S. A.
化学成分 ^①	Jd _{41.0} Ae _{11.3} Q _{47.7}	Jd _{40.6} Ae _{3.4} Q _{56.0}	Jd _{37.2} Ae _{12.4} Q _{50.4}	Jd _{38.0} Ae _{9.8} Q _{52.2}
a (nm)	0.956 3 (Jd _{44.8}) ^②	0.956 3	0.958 3	0.959 6
b (nm)	0.875 6 (Jd _{45.5}) ^②	0.876 1	0.877 6	0.877 1
c (nm)	0.525 4	0.524 8	0.526 0	0.526 5
β (°)	106.96 (Jd _{36.1}) ^②	106.85	106.85	106.93
V (nm ³)	0.420 8	0.420 8	0.423 5	0.423 9
资料来源	本文	③	[2]	[1]

① 由笔者换算得出。② 括弧内为根据文献[8]对应于晶胞参数值得出的 Jd 分子%。③ 郭卫东硕士学位论文(1993)。

对应于坐标系的变换,衍射存在的条件便由 $h0l$ 型衍射 l 为偶数转换为 $h+l$ 为偶数;空间群则由 $P2/c$ 转换为 $P2/n$ 。后者是“石 4”绿辉石按规范定向时应有的空间群。

(4) 图 1 是 $P2/n$ 绿辉石的 $[010]$ 选区电子衍射花样。图中给出了两套不同的倒易格子划分方式和对应的指标化结果。其中一套与绿辉石的规范定向相适应,另一套则相当于谢文^[5]给出的定向。可以看出,这两套格子的取向和相应的衍射存在条件虽然明显不同,但格子参数却相当近似。这一点看来乃是导致谢文^[5]对“石 4”绿辉石之空间群误判的主要客观原因。

3 晶体结构讨论

谢舜克等^[5]对“石 4”绿辉石还用四圆单晶 X 射线衍射仪进行了结构测定。其非加权结构偏离因子 $R=0.047$,各原子的坐标值列于表 3。由于谢文^[5]给出的晶体定向是非规范的,为此笔者对其坐标进行了规范化定向的变换,得出的结果在表 3'中对应列出,并将原子的标记也改为通常习用的符号。表 4 列出了键长和键角值。各项数据与 Matsumoto 等^[2]对日本 Bessi 之 $P2/n$ 绿辉石结构测定的结果相一致,仅有非本质性的微小差异。

然而谢文^[5]给出的结构图和某些结构解释却存在着明显的问题。

(1) 谢文^[5]的结构图(图 2)严重失准。除取向不符合规范之外,单胞内竟出现了 25 个 O 离子;且它们的位置几乎普遍偏差甚大,有若干 O 离子甚至移到了 M 阳离子的分布面上;有的 Si-O 键及 M -O 键的连接错误或缺失,以致难以判断配位关系;此外,个别原子或 y 坐标值的标记有误。为此,笔者重新绘制了“石 4”绿辉石的晶体结构图,如图 3 所示。

(2) 谢文^[5]提出,“石 4”绿辉石中“键角变化值得注意的是硅氧四面体链是折线,主要由于

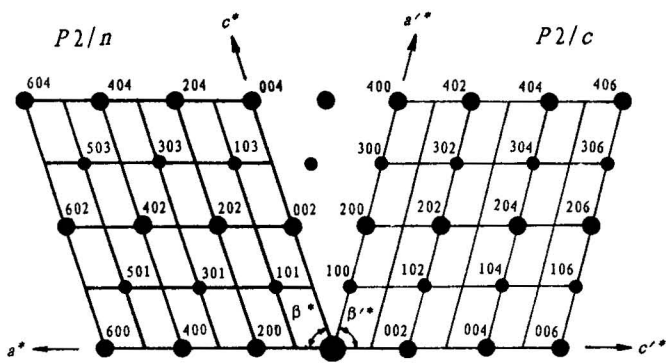


图 1 绿辉石[010]电子衍射花样及其倒易格子的两种不同划分

Fig. 1 A [010] SAED pattern of omphacite with two distinctive forms of reciprocal lattice

左方对应于规范定向的 $P2/n$ 晶格;

右方对应于谢文^[5]采取的 $P2/c$ 晶格

The left reciprocal lattice, whose orientation is consistent with convention, is corresponding to space group $P2/n$, and the right one is corresponding to $P2/c$ adopted by Xie Douke et al. ^[5]

桥氧发生扭转。”然后在叙述了桥氧及非桥氧的 O-Si-O 链角值后认为,“前者为 SA 扭转,后者具有 OB 扭转的特征,一为四面体三角形(100)面与另一三角形平行,后者其方向相反,前者扭转较后者小。”在这里,看来谢文^[5]是把 O-Si-O 键角与仅由桥氧构成的 O3-O3-O3 链折曲角混淆了,但笔者理解其意思的实质是认为存在着分别为 S 旋转和 O 旋转且折曲角不等的 A,B 两种硅氧四面体链。然而这与谢文^[5]自己测定的结构资料是矛盾的。笔者根据其原子坐标求得,“石 4”绿辉石中仅有一种 O 旋转的硅氧四面体链,其 O3-O3-O3 折曲角为 170.02° ,与已知绿辉石的链折曲角相比,并无特殊之处。

表 3 “石 4”绿辉石结构中原子的坐标

Table 3 Atomic parameters in crystal structure of the Shi-4 omphacite

A				B			
原子	x	y	z	原子	x	y	z
O1(1)	0.363 0(5)	0.337 3(5)	0.122 4(8)	O4	-0.240 6(8)	-0.337 3(5)	0.137 0(5)
O1(2)	0.361 6(5)	0.177 3(5)	0.647 4(8)	O6	0.285 8(8)	-0.177 3(5)	0.138 4(5)
O2(1)	0.612 4(5)	0.509 6(5)	0.305 4(8)	O3	0.307 0(8)	0.490 4(5)	-0.387 6(5)
O2(2)	0.605 0(5)	-0.002 9(5)	0.802 1(8)	O5	-0.197 2(8)	0.002 9(5)	-0.395 1(5)
O3(1)	0.607 2(5)	0.265 4(5)	0.007 5(8)	O2	0.599 7(8)	-0.265 4(5)	-0.392 8(5)
O3(2)	0.599 4(5)	0.240 5(5)	0.501 0(8)	O1	0.098 3(8)	0.240 5(5)	0.099 4(5)
T1	0.539 5(2)	0.346 7(2)	0.227 7(3)	Si 2	-0.311 8(3)	0.346 7(2)	0.460 5(2)
T2	0.537 7(2)	0.162 3(2)	0.731 1(3)	Si 1	0.193 4(3)	-0.162 3(2)	-0.037 7(2)
M1(1)	0.250 0(0)	0.348 4(2)	0.750 0(0)	Al 1	0.500 0(0)	-0.348 4(2)	0.250 0(0)
M1	0.250 0(0)	0.157 2(2)	0.250 0(0)	Al 2	0.000 0(0)	0.157 2(2)	-0.250 0(0)
M2	0.250 0(0)	0.552 0(3)	0.250 0(0)	Al 4	0.000 0(0)	-0.448 0(3)	-0.250 0(0)
M2(1)	0.250 0(0)	0.950 5(2)	0.750 0(0)	Al 3	0.500 0(0)	0.049 5(2)	0.250 0(0)

注: B 为原始数据,引自文献^[5],由中国科学院物质结构研究所吴锦金测定,选用了非规范定向的坐标系;

A 为按规范定向时的数据,由笔者根据 B 换算得出,原点在对称中心上。

表 4 “石 4”绿辉石结构的键长和键角
Table 4 Bond distances and bond angles in
structure of the Shi-4 omphacite

键长(nm)	T1-	T2-	M1(1)-	M1-	M2-	M2(1)-
-O1(1)	0.161 8(4)		0.194 2(3)	0.212 8(3)	0.236 1(3)	
-O1(2)		0.161 7(3)	0.200 2(3)	0.205 6(3)		0.238 9(3)
-O2(1)	0.158 8(3)		0.189 4(3)		0.238 5(3)	
-O2(2)		0.158 3(3)		0.201 1(3)		0.240 2(3)
-O3(1)	0.164 3(3)	0.167 4(3) ^②			0.270 7 ^①	0.245 9(3)
-O3(2)	0.166 6(3)	0.164 1(3)			0.246 6(3)	0.277 8 ^①
平 均	0.162 9 ^①	0.162 9 ^①	0.194 6 ^①	0.206 5 ^①	0.248 0 ^①	0.250 7 ^①

键角(°)	O1(1)-T1-	O2(1)-T1-	O3(1)-T1-	键角(°)	O1(2)-T2-	O2(2)-T2-	O3(2)-T2-
-O2(1)	118.02(17)			-O2(2)	117.22(17)		
-O3(1)	108.87(16)	109.65(16)		-O3(2)	109.60(16)	110.26(16)	
-O3(2)	109.17(16)	105.35(16)	104.98(16)	-O3(1)	108.08(16)	104.90(16)	106.09(16)

注:数据引自文献[5];①为本文笔者所补充;②原文为 1.647(3),有误。

在理论上,对于规范定向的任何 $P2/n$ 辉石而言,由空间群的对称性所决定,其结构中只能有由两种不同的硅氧四面体交替分布而连成的唯一一种四面体链,根本不可能有两种对称不等价的 SA 链和 OB 链并存;同时,一条链内两种不同的四面体分别呈 S 和 O 旋转,这在结构的几何构型上也是不可能的。以上结论同样也适用于谢文^[5]给出的该 $P2/n$ 结构,因为它与规范定向的 $P2/n$ 间有特定的关系,两者在空间群符号表示形式上的差异,乃是对应的两种定向之间进行坐标系变换所派生的结果,而结构本身的对称性并不随坐标系的变换而变化。

(3) 谢文^[5]明确认为,“石 4”绿辉石中由大阳离子占据的 $M2$ 和 $M2(1)$ 晶位为 6 次配位;它们给出的 $M2-O$ 和 $M2(1)-O$ 键长也各只有 6 个数据,都在 0.240nm 上下。然而笔者查明,在“石 4”绿辉石中, $M2$ 及 $M2(1)$ 都还各与另 2 个桥氧相键连,只是键长稍长,分别为 0.270 7nm 和 0.277 8nm(表 4)。所以,它们都具有 8 次的变形立方体配位而不是 6 次的八面体配位。这与所有 Ca 辉石和 Na-Ca 辉石中的情况都是一致的。

4 结构有序性的探讨

谢奕克等^[5]在测定“石 4”绿辉石的结构和穆斯堡尔谱时,还给出了金属阳离子在其各种

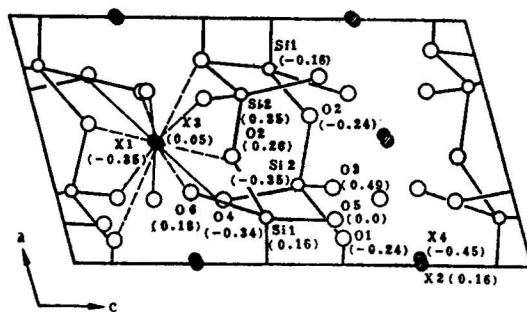


图 2 谢奕克等^[5]给出的“石 4”绿辉石结构图
Fig. 2 Structural diagram of the Shi-4 omphacite
given by Xie Douke et al.^[5]

表 5 谢奕克等^[5]给出的“石 4”绿辉石中的阳离子占位

Table 5 Site occupacies of cations in the Shi-4

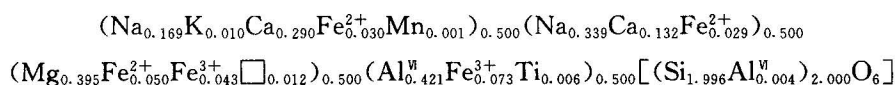
omphacite given by Xie Douke et al. ^[5]

	M2	M2(1)	M1	M1(1)
Fe ²⁺ ①	0.008	0.021 0	0.025 0	0.031 7
Al	0.086	0.110 3	0.108 7	0.105 0
Mg			0.198 0	0.195 0
Na	0.343 0	0.163 0		
Ca	0.139 0	0.281 0		

① Fe²⁺离子总数按穆斯堡尔谱得出的结果计算。

至于进入 $M2$ 和 $M2(1)$ 晶位的 Na 和 Ca, 基于局部电价平衡的考虑, 一般认为只能是部分有序的, 预期它们在 $M2$ 和 $M2(1)$ 中的 Na/Ca 极限值分别为 2/1 和 1/2^[2,11,12]; 而 Carpenter^[13] 则认为可以达到 3/1 和 1/3。谢文^[5]给出“石 4”绿辉石中的对应值分别为 2.5/1 和 1/1.7。但因其 Na, Ca 总量不足 1.00, 尚有 Fe²⁺, Mn 和 K 进入, 故应作适当调整。

综上所述并根据表 2 的数据, 笔者给出“石 4”绿辉石之晶体化学式如下:



顺便指出, 在谢文^[5]给出的该矿物之晶体化学式中, 将半径偏小的部分 Mg 指派与 Na, Ca 共占大阳离子位置, 而将半径偏大的 Mn 及全部 Fe²⁺置于同 Al 一起。这不仅不合理, 也与谢文^[5]本身作出的占位指认(表 5)相矛盾。

5 结论

(1) 关于 $P2/c$ 有序绿辉石在 1978 年国外已有报道^[4], 已知仅发现于一个交代钠质普通辉石的绿辉石中^[14]。谢奕克等^[5]所报道的大别山 $P2/c$ 绿辉石, 其真实的空间群应为 $P2/n$, 结构测定本身也表明它具有典型的 $P2/n$ 绿辉石晶体结构的全部特征, 而不同于真正的 $P2/c$ 绿辉石的结构。

(2) 大别山“石 4”绿辉石按规范定向选取的晶胞参数应为: $a=0.956\ 3$, $b=0.875\ 6$, $c=0.525\ 4\text{nm}$; $\beta=106.96^\circ$; $V=0.420\ 8\text{nm}^3$; $Z=4$ 。空间群 $P2/n$ 。硅氧四面体链的折曲角为 170.02° ; Al 和 Mg 分占 $M1(1)$ 和 $M1$ 晶位而成有序分布; Na, Ca 的分布仅为部分有序。

(3) 一种晶体, 如果晶胞选择, 亦即晶体定向不规范, 会导致一系列错误, 包括晶胞参数、衍射指标和系统消光规律的改变, 以及空间群甚至晶系的误判; 而这些错误还可能导致被误认为发现了新矿物。此种情况笔者在我国新矿物评审中已遇到不止一例^[15]。究其根源, 其一是忽视了存在多解性的问题, 往往仅以偏差的大小作为正确与否的唯一判据; 其二, 更重要的是忽视了从结晶学和矿物学的角度对结果的合理性进行分析和检验。应当讲, 这一工作在任何场合下都是有益且有效的, 应是第一位的。笔者还认为, 类似的情况在其他领域内也有存在, 虽然涉及的具体对象不同, 但引发问题的根本原因有其共同之处。因此, 在近年来计算机的运用日益普遍和频繁的情况下, 对于上述带有共性的本质问题, 应当引起更为广泛和充分的重视。

参 考 文 献

- 1 Clark J R, Pepike J J. Eclogitic pyroxenes ordered with $P2$ symmetry. *Science*, 1966, 154:1 003—1 004.
- 2 Matsumoto T, Tokonami M, Morimoto N. The crystal structure of omphacite. *Am. Mineral.*, 1975, 60:634—641.
- 3 Curtis L, Gittins J, Kocman V, Rucklidge J C, Hawthorne F C, Ferguson R B. Two crystal structure refinements of a $P2/n$ titanian ferro-omphacite. *Can. Mineral.*, 1975, 13: 62—67.
- 4 Carpenter M A. Kinetic control of ordering and exsolution in omphacite. *Contrib. Mineral. Petrol.*, 1978, 67:17—24.
- 5 谢宝克, 郭坤. 中国东南岩石圈板块边界变质带. 北京:地质出版社, 1989. 175—191 页.
- 6 Morimoto N. 辉石命名法. *矿物学报*, 1988, 8:289—305.
- 7 Deer W A, Howie R A, Zussman J. 造岩矿物, 二卷 A: 单链硅酸盐, 第二版. 谢宇平等译. 北京:地质出版社, 1983. 319—346 页.
- 8 Seki Y, Onuki H. Variation of unit-cell dimensions in natural jadeite-diopside mineral series. *岩石矿物地球化学杂志*, 1967, 58:233—237.
- 9 Shannon R D. Revised effective ionic radii and systematic of interatomic distances in halides and chalcogenides. *Acta Cryst.*, 1976, A32:751—767.
- 10 Cameron M, Papike J J. Structural and chemical variations in pyroxenes. *Am. Mineral.*, 1981, 66:1—50.
- 11 Clark J R, Appleman D E, Papike J J. Crystal-chemical characterization of clinopyroxenes based on eight new structure refinements. *Mineral. Soc. Am. Spec. Paper*, 1969, 2:31—50.
- 12 Champness P E. Speculation on an order-disorder transformation in omphacite. *Am. Mineral.*, 1973, 58: 540—542.
- 13 Carpenter M A, Dormenighetti M C, Tazzoli V. Application of Landau theory to cation ordering in omphacite. I: Equilibrium behavior. *Eur. J. Mineral.*, 1990, 2:7—18.
- 14 Carpenter M A. Omphacites from Greece, Turkey and Guatemala: composition limits of cation ordering. *Am. Mineral.*, 1978, 64:102—108.
- 15 罗谷风. X 射线衍射计算程序之结果分析中的问题探讨. 第五届全国 X 射线衍射学术会议论文集, 1991. 124—125 页.

RESTUDY ON THE CRYSTAL STRUCTURE OF OMPHACITE FROM THE DABIE MOUNTAINS

Guo Weidong, Luo Gufeng and Guo Yun

(Department of Earth Sciences, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu)

Abstract

Xie Douke et al. (1989) determined the crystal structure of omphacite from the Dabie Mountains. They affirmed that this crystal has space group $P2/c$, and in its structure, there are two kinds of tetrahedral chain with S-rotation and O-rotation respectively; the four symmetrical-ly unequivalent M -sites are all 6-coordinated octahedra and Al exists in all of them with higher occupancies.

A restudy on the data of this structure was carried out by the authors. It reveals that the true space group of the omphacite from the Dabie Mountains is $P2/n$ rather than $P2/c$; and in its structure, there is only one kind of tetrahedral chain with O-rotation, the O3-O3-O3 chain angle is 170.02° , and $M2$ and $M2(1)$ sites are of 8-coordination distinguished from 6-one of $M1$ and $M1(1)$ sites. In addition, the authors deem that, based on the M -O bond separation, all of Al

should enter the smallest $M1(1)$ site, while the site occupation between Al and Mg would be completely ordered. Thus, the structure mentioned above is a typical one of ordered omphacite with space group $P2/n$, rather than a new type $P2/c$ structure for omphacite.

The cause responsible for an incorrect space group is that the selection of the unit cell does not conform to the standard. The authors, therefore, recalculated the unit cell parameters and atom coordinates based on the data given by Xie Douke et al., and furnish the correct ones here. Although some major errors have been found in the structural explanation given by Xie Douke et al., the structural data are valuable.

Key words: omphacite, space group, crystal structure, Dabie Mountains

作者简介

郭卫东,生于1968年8月。1993年由南京大学地球科学系矿物学专业研究生毕业,获硕士学位。现为地质矿产部海洋地质研究所工程师。通讯处:青岛市十八号信箱,邮码:266071。