

THE CRYSTAL CHEMISTRY OF SENKEVICHITE, Cs K Na Ca₂Ti O [Si₇O₁₈(OH)], FROM THE DARA-I-PIOZ ALKALINE MASSIF, NORTHERN TAJIKISTAN

YULIA A. UVAROVA[§], ELENA SOKOLOVA AND FRANK C. HAWTHORNE

Department of Geological Sciences, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba R3T 2N2, Canada

ATALI A. AGAKHANOV, LEONID A. PAUTOV AND VLADIMIR YU. KARPENKO

Fersman Mineralogical Museum, Russian Academy of Sciences, Moscow 117071, Russia

ABSTRACT

The crystal structure of senkevichite, ideally Cs K Na Ca₂Ti⁴⁺ O [Si₇O₁₈(OH)], triclinic, $P\bar{1}$, a 10.4191(4), b 12.2408(5), c 7.0569(3) Å, α 90.857(1), β 99.193(1), γ 91.895(1) $^\circ$, V 887.8(1) Å³, Z = 2, D_{calc} 3.125 g/cm³, from Dara-i-Pioz, Tien-Shan Mountains, Tajikistan, has been refined to R_1 = 4.5% for 4872 unique ($F_o > 4\sigma F$) reflections collected on a Bruker single-crystal $P4$ diffractometer equipped with a 4K CCD detector and MoK α X-radiation. Electron-microprobe analysis gave SiO₂ 51.08, TiO₂ 8.94, FeO 0.50, MnO 2.59, CaO 10.98, K₂O 6.13, Na₂O 3.76, Nb₂O₅ 0.64, Cs₂O 15.28, (H₂O)_{calc} 1.09, sum 100.99 wt. %, and (H₂O) was determined from crystal-structure analysis. Senkevichite is isostructural with tinaksite and tokkoite. There are seven tetrahedrally coordinated Si sites with a grand $\langle Si-O \rangle$ distance of 1.623 Å. Six of these sites are coordinated by O atoms, and the Si(7) site is coordinated by three O atoms and one (OH) group, i.e., this is an acid silicate group. There are three [6]-coordinated M sites. The M(1) site is occupied primarily by Ti⁴⁺ (with minor Nb), with $\langle M(1)-O \rangle$ = 1.985 Å. The M(2) site is occupied solely by Ca, with $\langle M(2)-O \rangle$ = 2.382 Å, and the M(3) site is occupied by Ca (with minor Fe²⁺ and Mn²⁺), with $\langle M(3)-O \rangle$ = 2.317 Å. There is one [7]-coordinated Na site with $\langle Na-O \rangle$ = 2.504 Å. There are two A sites, the [12]-coordinated A(1) site, occupied mainly by Cs (with minor K), with $\langle A(1)-O \rangle$ = 3.318 Å, and the [10]-coordinated A(2) site, occupied solely by K, with $\langle A(2)-O \rangle$ = 2.987 Å. Senkevichite is a Cs-analogue of tinaksite, K₂NaCa₂Ti⁴⁺ O [Si₇O₁₈(OH)], and a Cs-Na-Ti⁴⁺ oxyanalogue of tokkoite, K₂Ca₄F [Si₇O₁₈(OH)].

Keywords: senkevichite, tinaksite, tokkoite, crystal-structure refinement, acid silicate group.

SOMMAIRE

Nous avons affiné la structure cristalline de la senkevichite, de composition idéale Cs K Na Ca₂Ti⁴⁺ O [Si₇O₁₈(OH)], triclinique, $P\bar{1}$, a 10.4191(4), b 12.2408(5), c 7.0569(3) Å, α 90.857(1), β 99.193(1), γ 91.895(1) $^\circ$, V 887.8(1) Å³, Z = 2, D_{calc} 3.125 g/cm³, provenant du complexe de Dara-i-Pioz, dans les montagnes Tien-Shan, au Tajikistan, jusqu'à un résidu R_1 de 4.5% en utilisant 4872 réflexions uniques ($F_o > 4\sigma F$) prélevées avec un diffractomètre à monocristal Bruker $P4$ muni d'un détecteur CCD 4K et rayonnement MoK α . Les analyses effectuées avec une microsonde électronique ont donné SiO₂ 51.08, TiO₂ 8.94, FeO 0.50, MnO 2.59, CaO 10.98, K₂O 6.13, Na₂O 3.76, Nb₂O₅ 0.64, Cs₂O 15.28, (H₂O)_{calc} 1.09, pour un total de 100.99% (poids), et la proportion de (H₂O) a été établie par analyse de la structure. La senkevichite est isostructurale avec la tinaksite et la tokkoïte. La structure contient sept sites Si à coordination tétraédrique, avec une distance moyenne $\langle Si-O \rangle$ de 1.623 Å. Six de ces sites sont coordonnés par des atomes d'oxygène, et le site Si(7) est coordonné par trois atomes d'oxygène et un groupe (OH). Il s'agit donc d'un groupe silicate acide. Il y a trois sites M à coordination [6]. Le site M(1) contient surtout Ti⁴⁺ (et un peu de Nb), avec $\langle M(1)-O \rangle$ = 1.985 Å. Le site M(2) contient uniquement Ca, avec $\langle M(2)-O \rangle$ = 2.382 Å, et le site M(3) contient Ca (et des quantités mineures de Fe²⁺ et Mn²⁺), avec $\langle M(3)-O \rangle$ = 2.317 Å. Il y a un site Na à coordination [7], avec $\langle Na-O \rangle$ = 2.504 Å. Il y a deux sites A, le site A(1) à coordination [12], contenant surtout le césum (et un peu de K), avec $\langle A(1)-O \rangle$ = 3.318 Å, et le site A(2), à coordination [10], contenant uniquement le K, avec $\langle A(2)-O \rangle$ = 2.987 Å. La senkevichite est l'analogue à Cs de la tinaksite, K₂NaCa₂Ti⁴⁺ O [Si₇O₁₈(OH)], et l'oxyanalogue à Cs-Na-Ti⁴⁺ de la tokkoïte, K₂Ca₄F [Si₇O₁₈(OH)].

(Traduit par la Rédaction)

Mots-clés: senkevichite, tinaksite, tokkoïte, affinement de la structure cristalline, groupe silicate acide.

[§] E-mail address: umuvarov@cc.umanitoba.ca