

determined as being  $u = 0.344 \pm 0.003$ . Nearest-neighbor interatomic distances are listed in Table 2.

Table 2. Nearest-neighbor interatomic distances in  $Ce_2O_2X$  compounds

	Ce-4O, ( $\pm 0.02 \text{ \AA}$ )	Ce-3X, ( $\pm 0.02 \text{ \AA}$ )
$Ce_2O_2S$	2.39	2.99
$Ce_2O_2Se$	2.38	3.10
	Ce-4O	Ce-4X
$Ce_2O_2Te$	2.37	3.51
$Ce_2O_2Sb$	2.38	3.55
$Ce_2O_2Bi$	2.39	3.58

Compounds with the analogous compositions  $M_2N_2S$  and  $M_2N_2Se$ , with  $M = Th$  and  $U$  (Benz & Zachariassen, 1969), and  $Ce_2O_2S$  (Zachariassen, 1949) and  $Ce_2O_2Se$  (Benacerraf, Guittard, Domange & Flahaut, 1959) have been reported with a structure distinct from the above with hexagonal symmetry. Crystal structure data on the latter Ce compounds are summarized in Tables 1 and 2. Compounds  $M_2N_2P$  and  $M_2N_2As$ , with  $M = U$  and  $Th$  also exist with this same structure (Benz & Zachariassen, 1970) and one might expect that compounds  $Ce_2O_2P$  and  $Ce_2O_2As$  might exist with this hexagonal structure too. However, all

attempts to prepare these two compounds were unsuccessful. Presumably, insufficient energy is gained when  $Ce^{3+}$  is promoted to the  $Ce^{4+}$  state with formation of  $X^{3-}$  ( $X = P$  and  $As$ ) ions as would be required to stabilize the compounds under our experimental conditions (ca.  $800^\circ$ ).

We made attempts to replace O by N atoms in the crystal lattice of the various Ce compounds by heating selected  $Ce_2(O, N)_2X$  mixtures in  $N_2$ . No significant change of unit-cell dimensions of the compounds in the product mixtures was observed.

#### References

- BENACERRAF, A., GUITTARD, M., DOMANGE, L., FLAHAUT, J. (1959). *Bull. Soc. chim. Fr.* p. 1920.  
 BENZ, R. & ZACHARIASEN, W. H. (1969). *Acta Cryst.* B25, 294.  
 BENZ, R. & ZACHARIASEN, W. H. (1970). *Acta Cryst.* B26, 823.  
 FLAHAUT, J. & GUITTARD, M. (1955). *C. R. Acad. Sci. Paris*, 241, 1775.  
 FLAHAUT, J., GUITTARD, M. & PATRIE, M. (1958). *Bull. Soc. chim. Fr.* p. 990.  
 PARDO, M. P. & FLAHAUT, J. (1962). *C. R. Acad. Sci. Paris*, 255, 937.  
 PICON, M. & PATRIE, M. (1956). *C. R. Acad. Sci. Paris*, 242, 516.  
 ZACHARIASEN, W. H. (1949). *Acta Cryst.* 2, 60.

*Acta Cryst.* (1971). B27, 854

**Structure cristalline de  $RbAlSi_3O_8$ .** Par MADELEINE GASPÉRIN, *Laboratoire de Minéralogie-Cristallographie associé au CNRS, Faculté des Sciences, Tour 16, 9 quai Saint-Bernard, 75-Paris 5, France*

(Reçu le 24 novembre 1970)

The crystal structure of rubidium feldspar  $RbAlSi_3O_8$  has been refined by the least-square method. The final  $R$  factor is 0.07 for the isotropic refinement. Atomic coordinates, interatomic distances and angles show that the structure is very similar to that of sanidized orthoclase: Al and Si are disordered over the tetrahedral sites.

Des monocristaux de  $RbAlSi_3O_8$  de type feldspath ont été obtenus par Ghélis (1970) par cristallisation, pendant une semaine, d'un gel de cette composition à  $600^\circ$  et 1000 bars dans un tube en or scellé. Leurs dimensions comprises entre 50 et  $80\mu$  rendent possible une étude par diffraction des rayons X.

Nous avons utilisé un diffractomètre automatique Nonius pour mesurer, par la méthode d'intégration  $\theta/2\theta$ , 771

réflexions indépendantes telles que  $F_{\min} \geq F_{\max}/10$  avec la radiation  $Mo K\alpha$  pour  $\theta$  compris entre 0 et  $35^\circ$ .

Les paramètres sont  $a = 8,820$ ,  $b = 12,992$ ,  $c = 7,161 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 116,24^\circ$ . Le groupe spatial est  $C2/m$  avec  $Z = 4$ .

Nous avons introduit les coordonnées atomiques trouvées par Colville & Ribbe (1968) pour l'orthose comme point de départ d'un affinement par moindres carrés sur ordinateur 360 IBM d'après le programme de Busing &

Tableau 1. Coordonnées atomiques, en fraction de maille, et facteurs de température isotropes

Atome	RbAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>				Sanidine		
	x	y	z	$\beta$	x	y	z
4Rb (ou K)	0,2958 (2)	0	0,1468 (3)	1,88 (3)	0,2840	0	0,1352
8T <sub>1</sub>	0,0104 (3)	0,1904 (2)	0,2227 (4)	0,76 (4)	0,0097	0,1850	0,2233
8T <sub>2</sub>	0,7227 (3)	0,1195 (2)	0,3440 (4)	0,75 (4)	0,7089	0,1178	0,3444
4O <sub>A</sub> (1)	0	0,1525 (9)	0	1,6 (2)	0	0,1472	0
4O <sub>A</sub> (2)	0,664 (1)	0	0,283 (2)	1,7 (2)	0,6343	0	0,2858
8O <sub>B</sub>	0,832 (1)	0,1596 (6)	0,226 (1)	1,5 (1)	0,8273	0,1469	0,2253
8O <sub>C</sub>	0,0464 (9)	0,3145 (6)	0,263 (1)	1,4 (1)	0,0347	0,3100	0,2579
8O <sub>D</sub>	0,1682 (9)	0,1283 (6)	0,403 (1)	1,5 (1)	0,1793	0,1269	0,4024

Les écarts-type (entre parenthèses) portent sur le dernier chiffre.

Tableau 2. Distances interatomiques

	RbAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	Sanidine		RbAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	Sanidine
$T_1-O_A(1)$	1,633 (5) Å	1,643 Å	$O_A(1)-O_B$	2,632 (8) Å	2,626 Å
$-O_B$	1,629 (4)	1,645	$O_A(1)-O_C$	2,73 (1)	2,744
$-O_C$	1,644 (9)	1,647	$O_A(1)-O_D$	2,618 (8)	2,623
$-O_D$	1,634 (8)	1,643	$O_B-O_C$	2,69 (1)	2,713
$\langle T_1-O \rangle$	1,635 (3)	1,645	$O_B-O_D$	2,69 (1)	2,723
$T_2-O_A(2)$	1,633 (5)	1,645	$O_C-O_D$	2,66 (1)	2,679
$-O_B$	1,627 (8)	1,631	$\langle O-O \rangle$ tétr. 1	2,67 (1)	2,685
$-O_C$	1,634 (8)	1,645	$O_A(2)-O_B$	2,68 (1)	2,686
$-O_D$	1,635 (8)	1,638	$O_A(2)-O_C$	2,603 (9)	2,598
$\langle T_2-O \rangle$	1,632 (4)	1,640	$O_A(2)-O_D$	2,66 (1)	2,675
Rb (ou K)- $O_A(1)$	3,068 (8)	2,910	$O_B-O_C$	2,67 (1)	2,676
$-O_A(2)$	2,95 (1)	2,707	$O_B-O_D$	2,69 (1)	2,709
$-O_B$	3,169 (8)	3,017	$O_C-O_D$	2,70 (1)	2,717
$-O_C$	3,124 (8)	3,140	$\langle O-O \rangle$ tétr. 2	2,67 (1)	2,675
$-O_D$	3,041 (8)	2,953			
$\langle Rb-O \rangle$	3,084 (3)	2,972			

Levy (1962). Les atomes  $T_1$  et  $T_2$  du centre des tétraèdres ont été affectés d'un facteur de diffusion égal à  $(\frac{1}{3}f_{Al} + \frac{2}{3}f_{Si})$  et le facteur de diffusion de Rb a été corrigé de la partie réelle de la dispersion anormale. Aucune correction d'absorption n'a été envisagée.

Au bout de quelques cycles, en introduisant des facteurs de température isotropes pour tous les atomes, le facteur 'R' se stabilise à 0,07.

Les résultats obtenus montrent que cette structure est très proche de celle d'un feldspath potassique où les atomes de Al et Si sont désordonnés, comme dans la sanidine. Rb a la coordination 9, comme K dans les feldspaths et la distance moyenne Rb-O = 3,084 Å traduit l'augmentation du rayon ionique qui résulte du remplacement du potassium par le rubidium.

Le Tableau 1 rassemble les coordonnées atomiques en fraction de maille, les facteurs de température isotropes et les écarts-type évalués par le programme d'affinement.

Tableau 3. Angles

	RbAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	Sanidine
$O_A(1)-T_1-O_B$	107,6 (4)	106,0°
$O_A(1)-T_1-O_C$	112,9 (5)	113,1
$O_A(1)-T_1-O_D$	106,5 (4)	105,9
$O_B-T_1-O_C$	110,6 (4)	111,0
$O_B-T_1-O_D$	110,9 (4)	111,8
$O_C-T_1-O_D$	108,3 (4)	109,0
$\langle O-T_1-O \rangle$	109,5 (2)	109,5
$O_A(2)-T_2-O_B$	110,7 (5)	110,1
$O_A(2)-T_2-O_C$	105,4 (5)	104,6

Tableau 3 (suite)

$O_A(2)-T_2-O_D$	109,0 (5)	108,8
$O_B-T_2-O_C$	109,7 (4)	109,9
$O_B-T_2-O_D$	110,9 (4)	111,5
$O_C-T_2-O_D$	111,0 (4)	111,7
$\langle O-T_2-O \rangle$	109,4 (2)	109,4
$T_1-O_A(1)-T_1$	144,9 (9)	145,1
$T_1-O_A(2)-T_2$	143,8 (8)	137,9
$T_1-O_B-T_2$	152,2 (6)	152,3
$T_1-O_C-T_2$	130,9 (5)	131,4
$T_1-O_D-T_2$	142,1 (5)	141,7
$\langle T-O-T \rangle$	142,8 (3)	141,7

Les Tableaux 2 et 3 regroupent les distances interatomiques et les angles, avec l'erreur calculée d'après la matrice de variance-covariance établie à partir des positions atomiques.

Afin de faciliter la comparaison, nous avons inclus dans chaque Tableau les résultats obtenus par Ribbe (1963) sur la sanidine.

## Références

- BUSING, W. R. & LEVY, H. A. (1962). I.U.Cr. *World List of Crystallographic Computer Programs*, 1st ed.  
 COLVILLE, A. & RIBBE, P. H. (1968). *Amer. Min.* **53**, 25.  
 GHELIS, M. & GASPERIN, M. (1970). *C.R. Acad. Sci., Paris, Série D*, **271**, 1928.  
 RIBBE, P. H. (1963). *Acta Cryst.* **16**, 426.