

AM-93-521

The atomic arrangement of bastnasite-(Ce), $\text{Ce}(\text{CO}_3)\text{F}$, and structural elements of synchysisite-(Ce), rontgenite-(Ce), and parisite-(Ce)

Yunxiang Ni, John M. Hughes, Anthony N. Mariano

For deposit: Tables 3 and 5

American Mineralogist, 78, 3-4, 415-418.

Table 3. Anisotropic thermal parameters of atoms in bastnäsite.

Atom	$\beta(1,1)$	$\beta(2,2)$	$\beta(3,3)$	$\beta(1,2)$	$\beta(1,3)$	$\beta(2,3)$
Ce	0.00223(5)	0.00259(9)	0.00096(2)	$\beta(2,2)$	0.0002(1)	$2\beta(1,3)$
C	0.002(2)	0.005(2)	0.0016(7)	0.004(4)	0	0
O1	0.007(2)	0.005(1)	0.0018(6)	0.006(2)	0	0
O2	0.0048(9)	0.008(1)	0.0023(4)	0.006(1)	0.001(1)	0.001(1)
F1	0.005(1)	$\beta(1,1)$	0.003(1)	$\beta(1,1)$	0	0
F2	0.005(1)	$\beta(1,1)$	0.0018(7)	$\beta(1,1)$	0	0

Note: The form of the anisotropic displacement parameter is:

$$\exp\{-[\beta(1,1)*h^2+\beta(2,2)*k^2+\beta(3,3)*l^2+\beta(1,2)*hk+\beta(1,3)*hl+\beta(2,3)*kl]\}$$

Numbers in the parentheses denote one ESD of least unit cited.

(For Deposit)

Table 5. Observed and calculated structure factors for bastnäsite.

ON DEPOSIT

Table 5.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	
0	3	0	2867	2876	9	9	-1	0	185	186	11	3	6	2	1349	1352	10	1	4	4	1751	1768	8	
0	4	0	348	342	5	10	-5	0	1175	1197	16	3	7	2	237	234	14	1	5	4	360	351	6	
0	5	0	115	117	13	10	-4	0	272	284	14	4	-3	2	250	242	5	1	6	4	192	173	9	
0	6	0	1869	1857	26	10	-3	0	233	240	10	4	-2	2	2191	2158	12	1	7	4	1333	1326	11	
0	7	0	299	294	9	10	-2	0	1134	1130	11	4	4	2	1444	1427	9	1	8	4	245	227	10	
0	8	0	154	146	12	0	0	1	201	0	3	4	4	2	186	189	11	2	-1	4	2499	2488	12	
0	9	0	1244	1219	16	0	1	1	79	89	12	4	5	2	220	233	10	2	2	4	1935	1999	7	
1	1	0	2097	2161	16	0	3	1	81	61	12	5	-3	2	211	206	6	2	3	4	267	276	6	
1	2	0	92	100	10	0	4	1	252	245	6	5	-1	2	1934	1972	8	2	4	4	259	262	9	
1	3	0	144	149	8	0	7	1	138	132	11	5	5	2	1132	1160	14	2	5	4	1409	1424	26	
1	4	0	1688	1689	9	1	1	1	141	334	7	6	-3	2	1919	1954	9	2	6	4	291	296	8	
1	5	0	241	248	7	1	1	1	359	334	7	6	-2	2	191	187	7	2	7	4	201	238	10	
1	6	0	287	275	7	1	3	1	179	164	11	7	-4	2	189	183	8	2	7	4	201	198	6	
1	7	0	1355	1340	23	1	5	1	166	163	9	7	-5	2	151	141	9	3	-1	4	1708	1737	30	
1	8	0	188	191	11	1	6	1	112	119	15	6	-1	2	1564	1544	12	3	3	4	157	138	10	
2	-1	0	2161	2126	4	2	-1	1	134	112	10	7	-4	2	239	231	11	3	4	4	265	275	9	
2	2	0	1900	1889	20	2	3	1	116	112	10	7	-4	2	189	183	8	3	4	4	1339	1323	12	
2	3	0	207	192	6	3	-1	1	362	334	4	8	-4	2	1432	1448	13	4	-3	4	108	121	10	
2	4	0	218	223	7	4	-3	1	176	164	6	8	-3	2	202	206	9	4	4	4	2019	1956	14	
2	5	0	1566	1579	8	5	-2	1	118	112	9	8	-2	2	187	185	12	4	4	4	297	290	9	
2	6	0	232	224	12	6	-1	1	161	163	11	9	-4	2	1342	1348	17	4	5	4	186	166	12	
2	7	0	260	269	12	8	-3	1	104	100	17	9	-3	2	217	217	11	5	-1	4	1767	1773	10	
2	8	0	1129	1144	12	0	0	2	2191	2140	3	10	-7	2	235	235	9	5	-3	4	1767	1773	10	
3	-1	0	111	83	12	0	2	2	134	136	7	10	-7	2	228	236	10	5	5	4	985	988	16	
3	3	0	2033	2061	21	0	1	2	345	327	7	10	-6	2	232	226	11	6	-5	4	355	359	11	
3	4	0	341	335	7	0	3	2	2355	2348	10	10	-5	2	1142	1142	15	6	-5	4	1744	1733	11	
3	5	0	211	194	8	0	4	2	151	152	9	10	-5	2	124	0	9	6	-2	4	262	264	7	
3	6	0	1367	1375	20	0	5	2	318	313	7	0	0	3	553	526	8	7	-6	4	175	185	10	
3	7	0	238	242	11	0	7	2	1718	1713	12	0	2	3	201	200	8	7	-5	4	1438	1405	14	
4	-2	0	1890	1886	8	0	8	2	210	212	8	1	2	3	155	151	7	7	-3	4	130	157	11	
4	4	0	1366	1333	11	1	2	2	1159	1139	14	1	5	3	203	203	195	8	-6	4	297	288	9	
4	5	0	252	256	10	1	1	2	2310	2296	10	2	3	3	267	269	6	8	-4	4	1417	1413	10	
4	6	0	273	276	9	1	2	2	207	196	8	2	4	3	128	126	11	8	-4	4	274	271	8	
5	-3	0	192	206	7	1	3	2	244	245	6	2	6	3	126	125	13	8	-1	4	1327	1325	13	
5	-1	0	1683	1684	17	1	4	2	1967	1934	16	3	-1	3	154	151	7	9	-6	4	1318	1341	24	
5	5	0	1196	1205	19	1	6	2	228	240	12	5	-2	3	274	269	6	7	9	-5	4	292	297	9
6	-3	0	2041	2039	19	1	7	2	1283	1256	10	6	-5	3	194	195	8	9	-2	4	239	245	14	
6	-2	0	223	216	7	1	8	2	234	239	10	6	-4	3	133	127	11	9	-1	4	230	233	10	
6	-1	0	249	240	8	2	-1	2	2326	2340	11	10	-6	3	120	113	12	10	-5	4	996	984	10	
7	-4	0	334	340	6	2	2	2	2141	2181	9	7	-6	3	2489	2452	5	10	-4	4	160	176	13	
7	-2	0	1568	1561	13	2	3	2	208	204	7	0	0	4	177	161	8	0	1	5	360	348	6	
7	7	0	272	288	7	2	4	2	188	190	8	0	1	4	2055	2072	8	0	2	5	164	157	7	
8	-7	0	1323	1361	11	2	5	2	1548	1538	13	0	5	4	2055	2072	8	0	2	5	267	259	6	
8	-6	0	216	233	9	2	6	2	203	203	9	0	7	4	1665	1658	10	0	7	5	152	140	15	
8	-4	0	1324	1356	12	2	7	2	213	220	10	0	7	4	108	107	14	1	2	5	197	193	8	
8	-3	0	197	207	12	3	-1	2	207	195	7	0	8	4	257	248	9	1	3	5	298	295	6	
9	-7	0	268	262	9	3	3	2	1940	1939	24	1	1	4	2465	2458	11	1	5	5	219	206	12	
9	-4	0	248	250	10	3	4	2	183	194	9	1	2	4	200	198	6	1	6	5	147	137	11	
9	-3	0	1367	1367	26	3	5	2	254	254	8	1	3	4	134	98	12	2	3	5	183	172	11	

Bastnaesite
Table 5.

Page 2

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc											
H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	4	5	122	116	13	8	-3	6	243	245	15
3	-1	5	199	193	6	8	-1	6	1182	1179	11
3	4	5	207	201	9	9	-6	6	1155	1132	18
4	-3	5	295	294	7	9	-5	6	179	163	12
5	-2	5	185	173	8	9	-2	6	204	195	11
6	-5	5	217	206	8	0	2	7	206	210	7
6	-4	5	118	117	11	0	4	7	165	169	9
7	-6	5	135	136	12	0	0	8	2282	2299	8
7	-3	5	210	200	8	0	1	8	97	93	13
0	0	6	2002	2005	6	0	3	8	1859	1866	18
0	2	6	331	323	8	0	5	8	170	172	10
0	3	6	1918	1929	20	0	6	8	1374	1354	10
0	4	6	140	134	10	0	7	8	178	175	12
0	5	6	307	307	10	1	1	8	1745	1808	8
0	6	6	1426	1419	10	1	2	8	138	152	11
0	7	6	190	189	11	1	4	8	1419	1450	17
0	8	6	277	279	11	1	5	8	222	235	9
1	1	6	1948	1954	10	1	6	8	217	194	10
1	2	6	165	177	8	1	7	8	1178	1162	11
1	3	6	167	162	8	2	-1	8	1801	1751	12
1	4	6	1725	1716	21	2	2	8	1574	1553	9
1	5	6	156	174	10	2	3	8	219	210	8
1	6	6	202	199	10	2	4	8	173	190	10
1	7	6	1184	1170	19	2	5	8	1308	1304	10
2	-1	6	1957	1958	10	2	6	8	232	222	11
2	2	6	1904	1903	22	3	-1	8	149	138	10
2	3	6	237	225	7	3	3	8	1448	1461	13
2	4	6	150	170	10	3	4	8	215	197	13
2	5	6	1469	1468	12	3	5	8	216	210	11
2	6	6	207	200	11	4	-2	8	1553	1576	14
2	7	6	187	209	12	4	4	8	1160	1166	11
3	-1	6	173	166	8	5	-3	8	205	219	9
3	3	6	1597	1595	10	5	-1	8	1450	1421	11
3	4	6	168	170	10	6	-5	8	235	224	11
3	5	6	251	242	9	6	-3	8	1467	1443	11
3	6	6	1127	1145	15	6	-2	8	191	175	9
4	-3	6	160	165	9	7	-5	8	1309	1310	10
4	-2	6	1894	1910	35	7	-3	8	198	208	14
4	4	6	1293	1291	18	7	-1	8	189	213	11
4	5	6	154	179	17	8	-4	8	1168	1161	11
5	-3	6	226	236	7	8	-3	8	204	220	21
5	-1	6	1715	1732	16	8	-2	8	220	233	13
6	-5	6	180	151	16	8	-1	8	1180	1161	22
6	-3	6	1602	1602	13	0	4	9	143	136	11
6	-2	6	178	153	9	1	2	9	148	147	15
7	-5	6	1470	1469	9	1	5	9	130	115	17
7	-3	6	181	163	9	3	-1	9	149	148	10
7	-1	6	199	199	10	6	-5	9	122	118	16
8	-6	6	196	212	11	0	0	10	1257	1256	9
8	-4	6	1311	1308	10	0	2	10	193	203	9

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	3	10	1318	1330	16	0	3	10	1318	1330	16
0	5	10	263	265	11	0	5	10	263	265	11
0	6	10	1148	1138	12	0	6	10	1148	1138	12
1	1	10	1653	1631	26	1	1	10	1653	1631	26
1	2	10	143	149	11	1	2	10	143	149	11
1	4	10	1443	1427	26	1	4	10	1443	1427	26
1	5	10	142	152	14	1	5	10	142	152	14
1	6	10	133	133	15	1	6	10	133	133	15
2	-1	10	1626	1651	29	2	-1	10	1626	1651	29
2	2	10	1536	1541	24	2	2	10	1536	1541	24
2	3	10	192	192	11	2	3	10	192	192	11
2	4	10	138	142	15	2	4	10	138	142	15
2	5	10	1191	1165	19	2	5	10	1191	1165	19
3	-1	10	146	143	12	3	-1	10	146	143	12
3	3	10	1252	1233	13	3	3	10	1252	1233	13
3	4	10	1551	1538	16	3	4	10	1551	1538	16
5	-2	10	195	195	10	5	-2	10	195	195	10
5	-1	10	1433	1437	16	5	-1	10	1433	1437	16
6	-5	10	155	143	13	6	-5	10	155	143	13
6	-3	10	1232	1250	11	6	-3	10	1232	1250	11
6	-2	10	141	133	15	6	-2	10	141	133	15
7	-5	10	1166	1172	16	7	-5	10	1166	1172	16
0	0	12	1421	1413	10	0	0	12	1421	1413	10
0	3	12	1243	1244	17	0	3	12	1243	1244	17
0	5	12	135	134	15	0	5	12	135	134	15
1	1	12	1414	1430	19	1	1	12	1414	1430	19
1	4	12	1173	1175	17	1	4	12	1173	1175	17
2	-1	12	1433	1430	25	2	-1	12	1433	1430	25
2	2	12	1242	1257	11	2	2	12	1242	1257	11
2	3	12	149	164	14	2	3	12	149	164	14
3	-1	12	110	101	16	3	-1	12	110	101	16
4	-2	12	1254	1249	36	4	-2	12	1254	1249	36
5	-3	12	155	161	14	5	-3	12	155	161	14
5	-1	12	1188	1165	21	5	-1	12	1188	1165	21
0	2	13	155	159	20	0	2	13	155	159	20
0	0	14	1171	1169	11	0	0	14	1171	1169	11
1	1	14	1097	1109	16	1	1	14	1097	1109	16
2	-1	14	1098	1108	10	2	-1	14	1098	1108	10