AM-95-578

Crystal chemistry of the monazite and xenotime structures

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

For deposit: Tables 4 and 5

American Mineralogist, 80, 1-2, 21-26.

Table 4. Refined displacement parameters for $RE(PO_4)$ ($\beta \times 10^4$, $Å^2$)

Phases	Atoms	β(1,1)	β(2,2)	β(3,3)	β(1,2)	β(1,3)	β(2,3)
				Monazite Phases			
	RE	19.6(4)	16.5(4)	20.7(4)	0.3(8)	11.0(7)	6.4(8)
	P	16(2)	19(2)	20(2)	-3(4)	16(3)	-3(4)
Natural	O1	45(7)	33(6)	26(7)	10(10)	10(10)	0(1)
Monazite	O2	31(6)	34(6)	61(7)	-20(10)	50(10)	30(10)
	O3	33(6)	45(7)	39(7)	30(10)	40(10)	10(10)
	O4	32(6)	40(6)	40(7)	30(10)	40(10)	10(10)
	La	15.3(3)	13.0(3)	21.6(4)	0.2(4)	6.4(6)	4.1(4)
	P	13(1)	19(2)	23(2)	1(2)	7(3)	3(2)
$La(PO_4)$	O1	53(4)	50(4)	19(4)	12(8)	-7(7)	23(7)
	O2	33(4)	26(4)	49(5)	-12(6)	33(8)	15(6)
	O3	32(4)	33(4)	35(5)	16(7)	-11(8)	-6(7)
	O4	31(4)	25(4)	61(5)	32(7)	32(7)	-13(7)
	Ce	24.7(3)	21.2(3)	27.6(3)	-1.2(5)	9.8(5)	6.2(5)
	P	26(1)	29(1)	33(2)	-1(2)	13(2)	3(3)
$Ce(PO_4)$	O1	63(4)	53(5)	31(4)	14(8)	-11(7)	0(8)
	O2	42(4)	40(4)	61(5)	-12(7)	43(7)	24(8)
	O3	46(4)	47(4)	46(5)	28(7)	3(7)	-1(8)
	O4	41(4)	36(4)	62(5)	43(7)	44(7)	-1(8)
	Pr	20.5(3)	16.8(3)	23.4(3)	1.6(5)	8.8(5)	4.8(5)
	P	20(1)	19(2)	25(2)	3(2)	12(2)	0(3)
$Pr(PO_4)$	O1	50(4)	36(5)	29(4)	18(8)	9(7)	6(8)
	O2	37(4)	31(5)	52(4)	-1(7)	33(7)	25(8)
	O3	27(4)	44(4)	33(5)	28(8)	0(7)	-7(8)
	O4	25(4)	34(4)	50(5)	20(8)	27(7)	1(8)
	Nd	16.8(3)	14.2(3)	17.6(3)	0.3(6)	7.0(5)	5.6(6)
	P	16(1)	17(1)	20(2)	0(3)	9(2)	2(3)
$Nd(PO_4)$	O1	48(5)	36(5)	27(5)	17(9)	-3(9)	16(9)
	O2	31(5)	33(5)	46(5)	-7(9)	32(8)	19(9)
	O3	34(5)	33(5)	37(6)	27(9)	-1(9)	4(9)
	O4	28(5)	26(4)	43(5)	34(8)	33(8)	0(9)
	Sm	11.7(3)	10.6(3)	18.1(4)	1.9(7)	5.1(6)	6.8(7)
	P	11(2)	15(2)	20(2)	1(3)	12(3)	2(4)
$Sm(PO_4)$	O1	36(6)	27(6)	32(7)	10(10)	-10(10)	20(10)
	O2	30(5)	27(6)	53(6)	0(10)	45(9)	10(10)
	O3	23(60	38(6)	31(7)	30(10)	-10(10)	10(10)
	O4	32(5)	35(6)	40(6)	40(10)	49(9)	10(10)

	Eu	11.4(3)	9.3(3)	14.6(3)	1.1.(6)	7.9(5)	7.2(6)
	P	14(2)	15(2)	16(2)	4(30	12(3)	1(3)
$Eu(PO_4)$	O1	47(60	34(6)	31(6)	25(9)	-21(9)	22(9)
	O2	28(5)	33(5)	42(6)	-4(9)	53(8)	29(9)
	O3	38(5)	31(5)	23(6)	37(9)	7(9)	1(9)
	O4	18(5)	22(4)	56(6)	58(8)	46(8)	4(9)
	Gd	18.4(3)	16.1(3)	20.6(4)	1.1(7)	9,3(6)	6.9(8)
	P	25(2)	21(2)	21(2)	1(4)	8(3)	6(4)
$Gd(PO_4)$	O1	57(7)	38(6)	40(7)	30(10)	-10(10)	20(10)
	O2	34(6)	39(6)	52(7)	-10(10)	40(10)	10(10)
	O3	33(6)	41(6)	33(7)	20(10)	0(10)	0(10)
	O4	46(6)	28(6)	55(7)	50(10)	50(10)	0(10)
				Xenotime Phases			
	RE	24.8(8)	24.8(8)	29(1)	0	0	0
Natural	P	33(3)	33(3)	42(5)	0	0	0
Xenotime	O	33(6)	68(7)	63(8)	0	0	10(10)
	Tb	18.2(4)	18.2(4)	23.9(8)	0	0	0
$Tb(PO_4)$	P	22(2)	22(2)	31(5)	0	0	0
	O	43(6)	24(5)	34(5)	0	0	0(10)
	Dy	18.1(4)	18.1(4)	23.9(8)	0	0	0
$Dy(PO_4)$	P	22(3)	22(3)	32(5)	0	0	0
	O	42(6)	25(6)	39(6)	0	0	-10(10)
	Ho	2.8(6)	2.8(6)	3(1)	0	0	0
$Ho(PO_4)$	P	11(40	11(4)	26(7)	0	0	0
	O	34(9)	6(8)	30(10)	0	0	0(20)
	Er	21.4(7)	21.4(7)	29(1)	0	0	0
$Er(PO_4)$	P	24(4)	24(4)	37(8)	0	0	0
	O	40(10)	20(10)	50(10)	0	0	0(20)
	Tm	5.5(7)	5.5(7)	7(1)	0	0	0
$Tm(PO_4)$	P	6(4)	6(4)	13(8)	0	0	0
	O	40(10)	0(10)	20(10)	0	0	-10(20)
	Yb	15.4(8)	15.4(8)	20(3)	0	0	0
$Yb(PO_4)$	P	21(5)	21(5)	50(20)	0	0	0
	O	30(10)	30(10)	20(20)	0	0	-10(30)
	Lu	13.9(3)	13.9(3)	16.0(50	0	0	0
$Lu(PO_4)$	P	18(20	18(2)	19(3)	0	0	0
	O	40(5)	16(4)	37(6)	0	0	-10(10)