

## CRYSTAL STRUCTURE AND CRYSTAL CHEMISTRY OF LITHIUM-BEARING MUSCOVITE- $2M_1$

MARIA FRANCA BRIGATTI<sup>§</sup>

*Dipartimento di Scienze della Terra, Università di Modena e Reggio Emilia, Via S. Eufemia, 19, I-41100 Modena, Italy*

DANIEL E. KILE<sup>§</sup>

*U.S. Geological Survey, Denver Federal Center, Denver, Colorado 80225, U.S.A.*

MARCO POPPI<sup>§</sup>

*Dipartimento di Scienze della Terra, Università di Modena e Reggio Emilia, Via S. Eufemia, 19, I-41100 Modena, Italy*

### ABSTRACT

Crystal-structure refinements were done on Li-bearing muscovite- $2M_1$  crystals from microgranite and granitic pegmatite rocks in order to characterize their crystal chemistry and their relationships with muscovite and trioctahedral lithium-containing micas. In addition to the substitution mechanism  $[^6]Li^+ [^6]Al^{3+-1} [^4]Al^{3+-2} [^4]Si^{4+}_2$ , Li-bearing muscovite shows additional substitutions, such as mechanism  $[^6]Li^+ [^6]Fe^{2+} [^6]Al^{3+-1} [^6]\square_{-1}$ , indicating that the structure deviates from ideal dioctahedral character. Single-crystal X-ray-diffraction data were collected for five crystals in space group  $C2/c$ ; the agreement factor,  $R_{obs}$ , varies between 0.033 and 0.042. The mean tetrahedral cation–oxygen atom distances range from 1.637 to 1.646 Å and from 1.629 to 1.647 Å for T1 and T2 sites, respectively. Variation in  $\langle T-O \rangle$  distances is associated with the  $Li^+ / (Li^+ + Al^{3+})$  ratio, octahedral M2 site expansion ( $9.30 \leq \text{volume}_{M2} \leq 9.90 \text{ \AA}^3$ ) and reduction in size of the M1 site. Moreover, as the  $Li^+ / (Li^+ + Al^{3+})$  ratio increases, the silicate ring becomes less distorted ( $5.9 \leq \alpha \leq 11.4^\circ$ ), the basal oxygen-atom planes become less corrugated ( $0.147 \leq \Delta z \leq 0.232 \text{ \AA}$ ), and the interlayer separation narrows ( $3.337 \leq \text{interlayer separation} \leq 3.422 \text{ \AA}$ ).

**Keywords:** lithium, muscovite, crystal structure, crystal chemistry, octahedral occupancy.

### SOMMAIRE

Nous avons effectué des affinements de la structure cristalline de la muscovite lithinifère (polytype  $2M_1$ ) provenant de microgranite et de pegmatite granitique afin d'en caractériser la cristallochimie et les relations avec la muscovite et les micas trioctaédriques contenant le lithium. En plus du mécanisme de substitution  $[^6]Li^+ [^6]Al^{3+-1} [^4]Al^{3+-2} [^4]Si^{4+}_2$ , la muscovite lithinifère fait preuve de mécanismes additionnels, par exemple  $[^6]Li^+ [^6]Fe^{2+} [^6]Al^{3+-1} [^6]\square_{-1}$ , indication que la structure s'écarte d'un mica dicotaédrique idéal. Des données de diffraction X ont été prélevées sur cinq cristaux uniques répondant au groupe spatial  $C2/c$ ; le facteur de concordance,  $R_{obs}$ , varie entre 0.033 et 0.042. La distance moyenne entre le cation à coordination tétraédrique et l'oxygène varie entre 1.637 et 1.646 Å et entre 1.629 et 1.647 Å pour les sites T1 et T2, respectivement. La variation en distances  $\langle T-O \rangle$  dépend du rapport  $Li^+ / (Li^+ + Al^{3+})$ , de l'expansion du site octaédrique M2 ( $9.30 \leq \text{volume}_{M2} \leq 9.90 \text{ \AA}^3$ ) et de la réduction de la taille du site M1. De plus, à mesure que le rapport  $Li^+ / (Li^+ + Al^{3+})$  augmente, l'anneau de tétraèdres devient de moins en moins difforme ( $5.9 \leq \alpha \leq 11.4^\circ$ ), le plan des atomes d'oxygène définissant la base des tétraèdres devient moins ondulant ( $0.147 \leq \Delta z \leq 0.232 \text{ \AA}$ ), et la séparation inter-feuillet devient moins grande ( $3.337 \leq \text{séparation interfoliaire} \leq 3.422 \text{ \AA}$ ).

(Traduit par la Rédaction)

**Mots-clés:** lithium, muscovite, structure cristalline, cristallochimie, taux d'occupation du site octaédrique.

---

<sup>§</sup> *E-mail addresses:* brigatti@unimo.it, dekile@usgs.gov, marco.poppi@tetrapak.com