

CRYSTALLOGRAPHIE. **La structure de la Monazite.** — par *M. P. Kokoros**. Ἀνεκρινώθη ὑπὸ τοῦ κ. Γ. Γεωργαλά.

La Monazite, (Ce, La, Di) PO₄ appartient, au point de vue cristallochimique, à un groupe de substances de composition simple, donnée par la formule générale MRO₄, où R représente un des cations Cl⁷⁺, J⁷⁺, Ru⁷⁺, Re⁷⁺, Mn⁷⁺, S⁶⁺, Se⁶⁺, Te⁶⁺, Cr⁶⁺, Mo⁶⁺, W⁶⁺, U⁶⁺, P⁵⁺, As⁵⁺, V⁵⁺, et M un cation d'une valence convenable pour neutraliser la valence négative du radical RO₄, auquel ce cation est attaché. Les membres de ce groupe ont été depuis longtemps l'objet d'un examen au moyen des rayons X et la structure de la plupart d'entre eux a été complètement déterminée. Ils se partagent en quatre types de structure. Les plus fréquents sont ceux de la Baryte (BaSO₄) et de la Scheelite (CaWO₄), puis vient celui de la Wolframite (Fe, Mn)WO₄ et enfin le type le plus rare, celui de l'Anhydrite (CaSO₄). Un trait commun de toutes ces structures est que les ions O²⁻ sont disposés autour des cations R aux sommets d'un tétraèdre presque régulier, si le cation R est petit (P, As etc), ou plus ou moins déformé, s'il est plus gros (W, Mo, U).

Parmi les substances de ce groupe il y a des corps qui n'appartiennent à aucun de ces quatre types mentionnés. Tel est le cas de la Monazite et de la Crocoïte, dont la structure, la même pour ces deux minéraux, n'a pas été déterminée jusqu' à présent. La détermination de cette structure — étant pas dépourvue d'intérêt cristallochimique, nous avons entrepris la recherche röntgenographique de ce minéral, afin de compléter la liste des structures du groupe MRO₄. Dans le travail présent est exposé le résultat de cette recherche.

Au début de ce travail les dimensions de la maille et le groupe spatial de la monazite étaient déjà connus, par un travail antérieur de Gliszczynski¹. Les difficultés apportées par la guerre à la circulation des journaux et publications scientifiques ne me permettent pas de savoir si, sur ces entre-faites, un autre travail relatif n'a pas été publié quelque part.

Le matériel employé pour les radiogrammes a été préparé d'un gros cristal de monazite, limité par les faces (100), (101) et (110). Nous avons

* Π. ΚΟΚΚΟΡΟΥ. — Ἡ κρυσταλλική δομή τοῦ μοναζίτου.

¹ S. von GLISZCZYNSKI, Beitrag zur «Isomorphie» von Monazit und Krokoit. Eine kritische Stellungnahme, Z. Kristallogr. 101 (1939) 1.

taillé de ce cristal des coupes prismatiques d'une épaisseur de 0,5 - 0,7 mm et d'une longueur de 3 mm environ, parallèles aux arêtes [010], [001] et [101]. Avec ces préparations a été exécutée une série de diagrammes de rotation et du type Weissenberg des lignes équatoriales correspondantes, en employant une anticathode de Cu. L'absorption du minéral étant très intense pour la radiation $\text{Cu}_{K\alpha}$, la forme extérieure de la préparation exerçait une influence remarquable sur l'intensité des rayons diffractés. Pour éviter le plus possible cette influence gênante, nous avons préparé aussi des préparations en forme de cylindre, dont l'axe était parallèle aux mêmes arêtes [010], [001] et [101] et nous avons obtenu avec ces derniers des diagrammes du même type, qui furent comparés avec les premiers en ce qui concernait l'intensité du noircissement des tâches.

Les dimensions de la maille et le groupe spatial tirés de la mesure de ces diagrammes se trouvent en accord parfait avec les valeurs données par Gliszczynski.

$a_0 = 6.78$, $b_0 = 6.99$, $c_0 = 6.45$, $\beta = 104^\circ$ (d'après le diagramme de Weissenberg. A comparer à la valeur cristallométrique $\beta = 103^\circ - 40'$).

Indices de tâches signalées: hkl pour tout ordre

h0l seulement pour $h+1 = 2n$

0k0 » » $k = 2n$

d'où il s'ensuit comme groupe spatial le C_{2h}^5 . Le nombre des molécules contenues dans la maille est égal à 4.

Détermination de la structure. Selon les données concernant les indices des faisceaux observés la position des éléments de symétrie spatiale par rapport aux axes cristallographiques est la suivante: Les plans de symétrie parallèles à (010) passant par $y = \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$ sont des plans à glissement $\frac{a+c}{2}$; les axes hélicoïdaux parallèles à [010] ont les positions: $\frac{1}{4}, y, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, y, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, y, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, y, \frac{3}{4}$.

Puisque la maille élémentaire contient 4 molécules de CePO_4 , il s'agit de distribuer dans l'espace enveloppé par elle 4 atomes de Ce, 4 atomes de P et 16 atomes de O. Nous avons tenté d'abord, en opérant comme il suit, de déterminer approximativement la position des atomes les plus lourds, du Ce, dont la contribution à l'intensité des faisceaux diffractés est la dominante. Parmi les faisceaux diffractés, dont la présence n'était pas exclue pour le groupe C_{2h}^5 , il y en a quelques uns dont l'intensité est presque nulle et qui par conséquent n'apparaissent pas dans les diagrammes. Le facteur de stru-

cture F correspondant à ces faisceaux est égal à zéro. Si la valeur de l'angle θ pour un tel faisceau est grande, la contribution des atomes légers de l'oxygène et du phosphore est très petite, à cause de la diminution rapide du pouvoir diffracteur des atomes en fonction de $\frac{\sin\theta}{\lambda}$. Même pour le cas peu probable dans lequel les ondes diffractées par les atomes de O et de P seraient toutes en concordance de phase et au maximum de leur amplitude par rapport à l'origine du réseau, la somme de leur valeur de F ne pourrait pas dépasser une valeur déterminée p. ex. 30. Puisque la valeur observée de F du faisceau considéré est nulle, la valeur absolue de F_{Ce} due aux atomes du Ce, ne peut pas dépasser 30. Alors si l'intensité d'un faisceau avec une valeur θ grande est nulle, on peut exclure pour les atomes du Ce toutes ces positions qui amèneraient à une valeur F_{Ce} plus grande que 30. En rassemblant les données d'une telle investigation pour quatre ou cinq faisceaux de cette espèce on peut trouver la position des atomes du Ce. Par exemple, pour déterminer la position du Ce dans une projection du réseau parallèle à l'axe b nous avons employé le diagramme du type Weissenberg de la ligne équatoriale, qui a été obtenu en tournant le cristal autour de l'axe b et qui par conséquent contient les tâches à indices $(h0l)$. Dans ce diagramme n'apparaissent pas les tâches à indices (406) , (703) , (800) , (105) . On a pour la valeur du facteur de structure

$$S = \sum_n f_n \cos 2\pi (hx + lz)$$

Les valeurs de S ont été calculées, pour le faisceau (406) , pour des valeurs de $2\pi x$ et $2\pi z$ comprises entre 0° et 180° par intervalles de 6° . Le résultat a été transféré dans un dessin de projection du réseau parallèle à b , en marquant en noir toutes les positions interdites, c.a.d. celles pour lesquelles la valeur de S était plus grande que 30, et en laissant en blanc les positions permises. En répétant cette même opération pour les autres faisceaux, (703) , (800) et (104) deux places seulement sont restées en blanc sur le dessin, symétriques au point $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}$, avec les coordonnées $2\pi x = 78^\circ$, $2\pi z = 144^\circ$ et $2\pi x = 102^\circ$, $2\pi z = 36^\circ$. Ce sont les positions du Ce par rapport aux axes a et c . En opérant de la même manière pour les faisceaux à indices $(hk0)$, qui n'apparaissent pas dans le diagramme de Weissenberg obtenu par rotation autour de l'axe a , c. a. d. des (620) , (630) , (640) et (800) nous avons déterminé la projection du Ce sur (001) parallèle à c . Les coordonnées obtenues sont $2\pi x = 78^\circ$, $2\pi y = 60^\circ$. Ainsi les trois coordonnées du Ce sont : $2\pi x = 78^\circ$, $2\pi y$

$=60^\circ$, $2\pi z = 144^\circ$. Ce résultat, basé seulement sur les intensités d'un petit nombre de faisceaux diffractés, fut contrôlé au moyen d'une autre méthode en employant les données concernant l'intensité de tous les faisceaux diffractés contenus dans les diagrammes de Weissenberg c. a. d. par une synthèse selon Patterson.

Si on considère une projection des éléments de symétrie sur (001) parallèlement à l'axe c , un atome de Ce de coordonnées x, y se répète par les éléments de symétrie du groupe C_{2h}^5 aux positions: $(180 - x)$ $(180 - y)$, $180 - x)$ $(180 + y)$ et \bar{y}, \bar{x} . Dans la projection correspondante des séries des

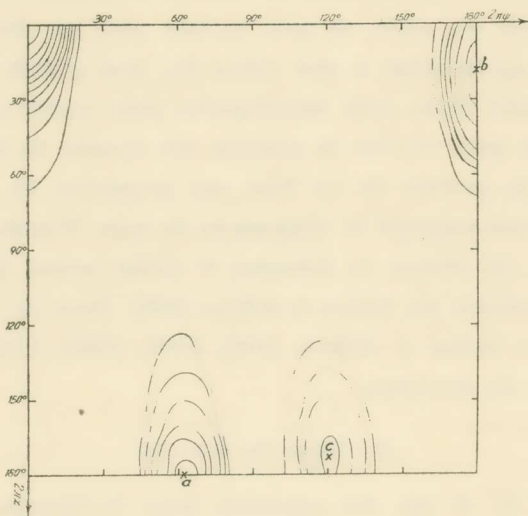


Fig. 1. - Synthèse selon Patterson en projection sur (001) parallèlement à [001].

$F^2(hk0)$ doivent apparaître 3 maxima, dont deux, ayant la valeur $2Z_{Ce}^2$ auront les coordonnées: 1) $x' = 180^\circ$, $y' = 180^\circ - 2\pi y$ et 2) $x' = 180^\circ - 2\pi x$, $y' = 180^\circ$ et encore un de valeur Z_{Ce}^2 à coordonnées $x' = 2\pi x$, $y' = 2\pi y$. Puisqu'il s'agit de trouver la position de ces maxima intenses on pourrait exécuter le calcul d'une synthèse selon Patterson à deux dimensions à base de valeurs relatives de F_{hk0}^2 , tirées de la mesure du noircissement des tâches du diagramme. Cette mesure fut exécutée par comparaison visuelle directe des tâches avec les bandes précisément photométrées d'une échelle obtenue sur un film photographique par exposition à l'action des rayons X. Le résultat de ce calcul est représenté par la fig. 1, où les maxima exigés apparaissent dans les positions:

$$\begin{array}{lll} \text{a) } 2\pi x' = 180^\circ & \text{b) } 2\pi x' = 20^\circ & \text{c) } 2\pi x' = 170^\circ \\ 2\pi y' = 60^\circ & 2\pi y' = 180^\circ & 2\pi y' = 120^\circ \end{array}$$

Les coordonnées du Ce tirées de ces valeurs sont : $2\pi x = 80^\circ$, $2\pi y = 60^\circ$ en accord avec les valeurs citées plus haut. Selon le maximum c la valeur de $2\pi x$ doit être égale à 85° . Ce petit déplacement peut être attribué à l'influence de l'effet de l'absorption. Deux autres projections selon Patterson sont représentées dans les fig. 2 et 3. Celle de la fig. 2 est une projection sur (001) parallèlement à [101], où figurent 3 maxima A, B, C avec les coordonnées :

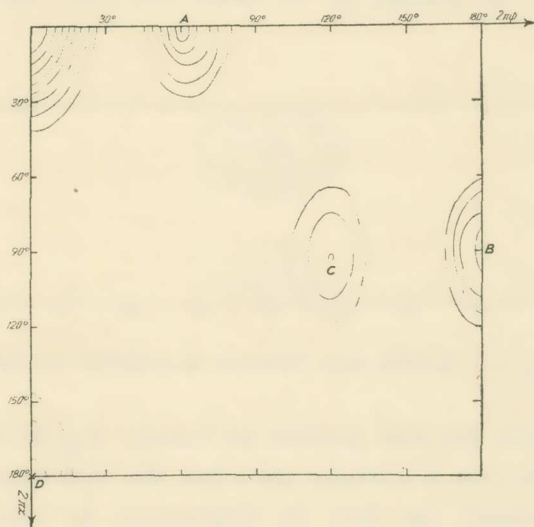


Fig. 2. - Synthèse selon Patterson en projection sur (001) || [101].

$$\begin{array}{lll} \text{A) } 2\pi x' = 0 & \text{B) } 2\pi x' = 90^\circ & \text{C) } 2\pi x' = 90^\circ \\ 2\pi y' = 60^\circ & 2\pi y' = 180^\circ & 2\pi y' = 120^\circ \end{array}$$

Ces maxima sont corrélatifs et peuvent être expliqués par une position du Ce par rapport aux axes $x = (100)$, $z = [\bar{1}01]$, $x = 45^\circ$ ou $180 - 45^\circ$, $y = 60^\circ$. Nous retrouvons encore une fois la même valeur de $y = 60^\circ$. De la valeur de $x = 45^\circ$ on peut tirer la valeur de z en considérant quel changement subissent les coordonnées x, y, z d'un point, si les axes a et b restant les mêmes on remplace l'axe c [001] par l'axe [101]. On trouve pour les nouvelles coordonnées $x' y' z' : y' = y, z' = z, x' = x + z$. Si on pose dans cette dernière relation $x' = 180^\circ + 45^\circ$ et $x = 80^\circ$ on trouve $z = 145^\circ$, la même valeur trouvée

auparavant. Un quatrième maximum D ($2\pi x' = 180^\circ$, $2\pi y' = 0^\circ$) peut être attribué à des vecteurs entre Ce et P ou C et O.

La fig. 3 représente une projection selon Patterson sur (010). Il y a trois maxima :

$$A) 2\pi x' = 180^\circ, 2\pi z' = 0^\circ$$

$$B) 2\pi x' = 202^\circ, 2\pi z' = 70^\circ$$

$$C) 2\pi x' = 15^\circ, 2\pi z' = 67^\circ$$

Le maximum A ne peut pas être attribué à un vecteur entre deux atomes Ce, parce que la position de Ce serait : $2\pi x = 90^\circ$, $2\pi z = 0^\circ$ ou $2\pi x = 0^\circ$

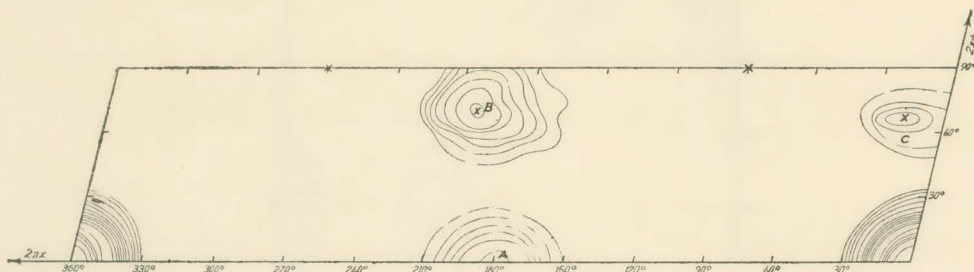


Fig. 3. - Synthèse selon Patterson en projection sur (010).

$2\pi z = 90^\circ$. Mais pour une telle position les valeurs F_{800} et F_{008} seraient très élevées tandis que c'est le contraire qui a lieu, des tâches des faisceaux (800) et (008) n'apparaissant pas dans les diagrammes. Le maximum B au contraire peut être expliqué pour des positions du Ce : $2\pi x = 101^\circ$, $2\pi z = 35^\circ$ ou $2\pi x = 79^\circ$, $2\pi z = 145^\circ$. Cette dernière position se trouve en accord parfait avec les données des deux autres projections. De cette coïncidence des valeurs tirées de diagrammes divers et par voies diverses on peut conclure que les coordonnées $2\pi x = 78^\circ$, $2\pi \phi = 60^\circ$, $2\pi z = 144^\circ$ donnent pour une première approximation sa position vraie dans le réseau.

La position des autres atomes fut déterminée après la distribution des atomes du Ce dans l'intérieur de la maille, en admettant que les ions O^{2-} forment un tétraèdre presque régulier autour des cations P^{5+} à arêtes égales à peu près à 2.60 Å° comme il a été trouvé chez tous les phosphates dont la structure est connue.

En cherchant une position raisonnable de ce tétraèdre dans le réseau on doit prendre en considération que ses sommets comme représentant des

centres des ions O^{2-} , doivent se tenir à une distance des centres de symétrie de la maille plus grande que $1,30 \text{ \AA}$, cette valeur étant égale au rayon de l'ion O^{2-} , ces mêmes sommets doivent aussi se trouver à une distance

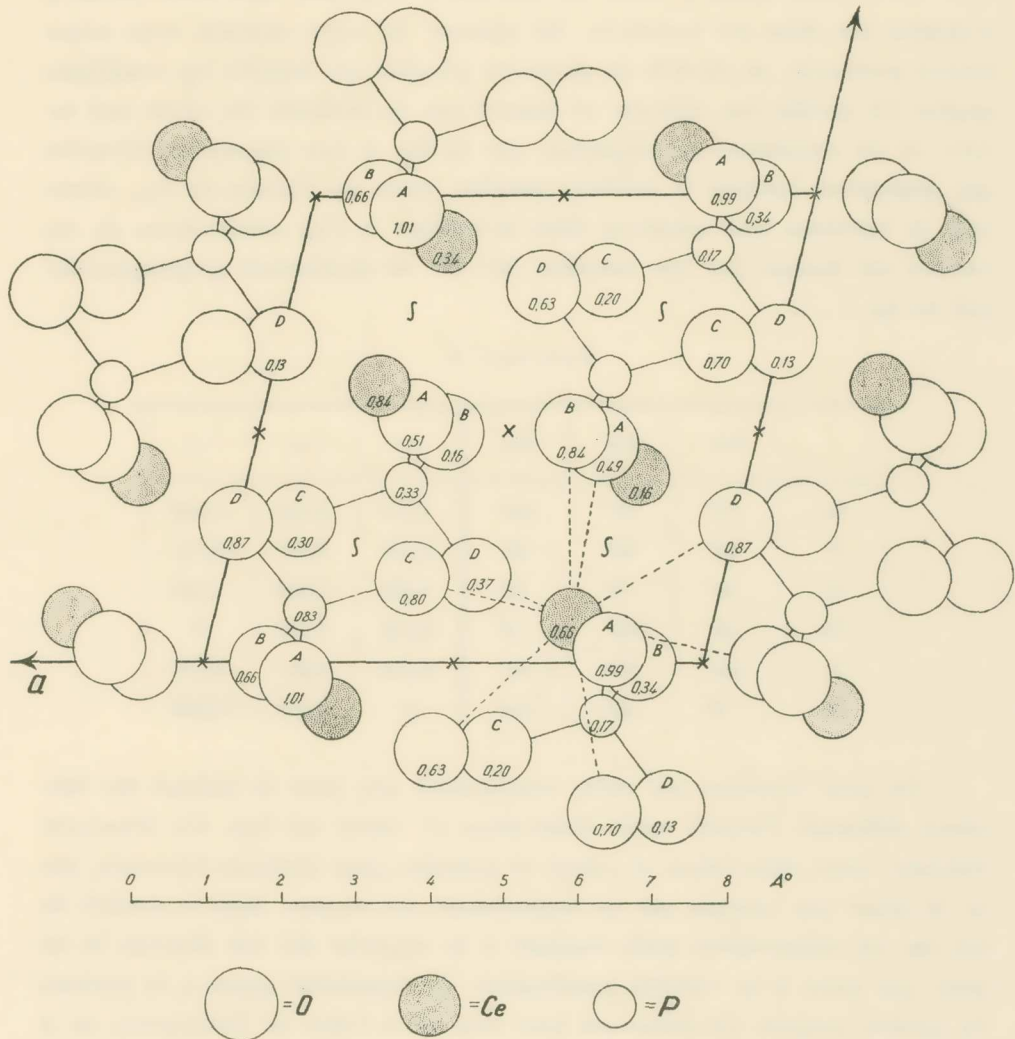


Fig. 4. - Projection du réseau de la Monazite sur (010).

des centres des atomes de Ce, qui ne peut pas devenir plus petite que $2,50 \text{ \AA}$, valeur qui égale la somme des rayons des ions Ce^{3+} et O^{2-} . Pour déterminer l'espace permis pour la disposition des tétraèdres PO_4 sous ces conditions on doit tracer dans l'espace à l'intérieur de la maille deux groupes de

sphères, les unes ayant un rayon de 1.30 \AA et comme centres les centres de symétrie de la maille, les autres avec un rayon de 2.50 \AA et comme centres les centres des ions Ce^{3+} . Les tétraèdres doivent se placer dans l'intervalle de l'espace compris entre les sphères, à condition que leurs sommets n'entrent pas dans ses domaines. En opérant de cette manière nous avons trouvé seulement un modèle de structure possible qui remplit les conditions posées. Ce modèle fut éprouvé et achevé par la méthode de «trial and error». Il est représenté en projection par la fig. 4. Les paramètres définitifs qui permettent l'accord le meilleur possible entre les valeurs de F_{hkl} observées et calculées sont contenus dans le tableau I. Une comparaison de ces valeurs est donnée par les tableaux II-IV et représentée graphiquement par les fig 5 - 7.

TABLEAU I.

	$2\pi x$	$2\pi y$	$2\pi z$	x/a	y/b	z/c
Ce	77°	57°	146°	0,214	0,158	0,406
P	63°	60°	-40°	0,175	0,167	-0,111
O_A	70°	-3°	10°	0,194	-0,008	0,028
O_B	45°	123°	0°	0,125	0,342	0
O_C	134°	72°	-65°	0,372	0,20	-0,181
O_D	0°	48°	-110°	0	0,133	-0,306

On peut constater par cette comparaison que pour la plupart des faisceaux diffractés l'accord entre observation et calcul est bon. Un désaccord frappant entre observation et calcul se présente pour quelques faisceaux, qui ne se laisse pas corriger par un déplacement des atomes. Mais le nombre de ces cas est relativement petit comparé à la majorité des cas discutés et ne peut pas nuire à la validité justificative de l'ensemble quant à la justesse du modèle proposé. Ce désaccord peut être dû à l'effet de l'absorption et à l'influence de la forme extérieure des préparations déjà mentionnées. L'accord satisfaisant de l'ensemble entre les valeurs observées et calculées est illustré d'une façon convaincante par les figures 5, 6 et 7. Comme on peut constater l'allure des deux courbes est dans son ensemble la même.

Discussion de la structure. La structure est représentée en projection sur (010) par la fig. 4 et les distances entre cations et anions voisins est

TABLEAU II.

Indices	F _{hko} obs.	F _{hko} calc.	Indices	F _{hko} obs.	F _{hko} calc.	Indices	F _{hko} obs.	F _{hko} calc.
110	19	+ 49	150	0	+ 3	170	24	- 37
020	80	-109	430	0	+ 15	550	36	+ 45
200	112	-196	510	71	+103	270	53	- 47
120	119	-193	250	91	+ 91	460	60	+ 55
210	63	- 94	520	38	- 37	710	22	- 53
220	34	+ 60	440	67	- 56	640	0	0
130	21	- 38	350	28	- 39	720	0	- 22
310	36	- 68	060	190	+177	370	53	- 66
230	23	- 18	160	30	+ 33	080	0	- 15
320	108	+121	530	122	-145	730	58	+107
040	115	-130	600	25	+ 13	560	0	+ 20
140	120	+147	260	157	-128	180	124	-115
400	90	+ 71	610	90	-111	650	92	+104
330	95	+ 87	450	116	-118	280	0	+ 18
410	138	+126	540	43	+ 21	470	53	+ 69
240	79	+ 79	620	0	0	800	0	- 28
420	0	- 15	360	30	- 38			
340	116	- 82	630	0	- 11			

TABLEAU III.

Indices	F _{hkl} obs.	F _{hkl} calc.	Indices	F _{hkl} obs.	F _{hkl} calc.	Indices	F _{hkl} obs.	F _{hkl} calc.
101	79	- 88	303	88	+ 86	404	99	-124
111	28	+ 82	313	48	+ 60	414	17	- 23
020	80	-109	242	0	- 22	424	46	+ 57
121	0	+ 30	151	67	- 81	353	31	- 62
202	0	- 8	323	0	- 35	171	17	+ 34
131	20	+ 38	333	0	+ 9	430	0	- 3
212	119	-197	060	190	+177	272	47	- 89
222	0	- 20	252	75	+156	363	40	+ 67
040	115	-130	161	47	- 57	444	31	+ 84
141	29	+ 64	262	0	+ 16	080	0	- 15
232	0	- 24	343	31	- 68			

TABLEAU IV.

Indices	F ^{hol} obs.	F ^{hol} calc.	Indices	F ^{hol} obs.	F ^{hol} calc.	Indices	F ^{hol} obs.	F ^{hol} calc.	Indices	F ^{hol} obs.	F ^{hol} calc.
101̄	50	+ 81	400	90	+ 71	501	130	-138	305	34	- 49
101	79	- 88	402̄	102	+155	305̄	72	- 93	406	100	-141
200	112	-196	004	73	-118	105	0	- 32	602	78	+112
002	56	+128	204	88	+ 88	602	136	-138	701	20	+ 79
202̄	116	-183	303	88	+ 86	600	25	+ 13	206	40	+ 58
301̄	40	- 54	501	28	- 32	206	138	+194	107	46	- 50
103	94	+201	402	82	-108	006	106	-100	307	28	+ 22
202	0	- 8	204	142	+130	505	40	+ 86	701	64	+100
301	126	+117	404	28	+ 21	404	99	-124	107	66	+ 97
103	92	-109	105	36	+ 58	503	46	- 46	606	56	+ 68
303̄	118	-143	503̄	56	+ 90	604	34	- 75			

TABLEAU V.

	Atomes voisins	Distance		Atomes voisins	Distance
Ce	2 O _A	2,42 ; 2,67	P	O _A	1,49
	3 O _B	2,48 ; 2,71 ; 2,85		O _B	1,50
	2 O _C	2,46 ; 2,65		O _C	1,52
	3 O _D	2,50 ; 2,64 ; 3.		O _D	1,52

donnée par le tableau V. Le tétraèdre PO₄ est presque régulier avec une distance moyenne P - O égale à 1,50 Å°. Les anions O²⁻ entourant les cations Ce³⁺ sont disposés irrégulièrement autour de ces derniers et à distances différentes. A cause de cela le nombre des anions les plus proches qui contribuent à la neutralisation de la valence du Ce³⁺ ne peut pas être déterminé nettement. Si les anions O²⁻ qui se trouvent à une distance du Ce³⁺ égale à 3 Å° peuvent encore être comptés parmi les «plus proches» il y a dix anions O²⁻ au voisinage immédiat du Ce³⁺ c. a. d. 2O_A, 3O_B, 3O_C et 2O_D. La neutralisation de la valence est parfaite si on compte huit anions O²⁻ parmi les «plus proches» en excluant les plus éloignés O_B et O_C à des distances 2,85 et 3 Å°. Ainsi à chaque cation Ce³⁺ seront subordon-

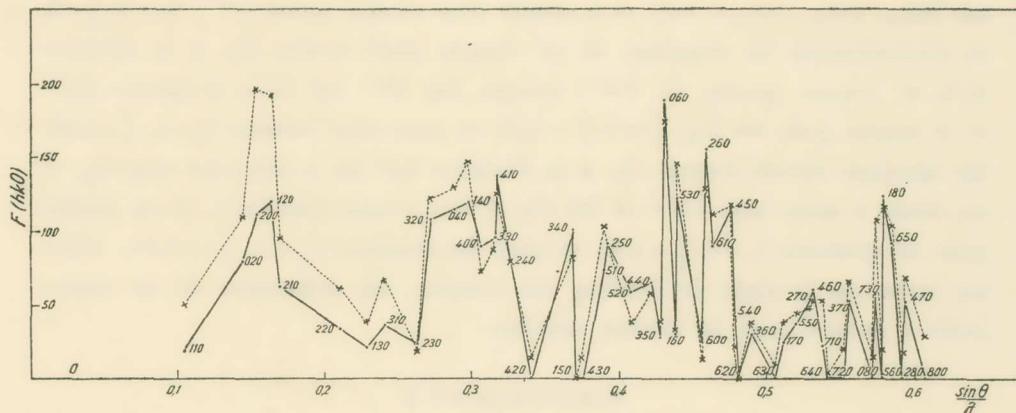


Fig. 5.

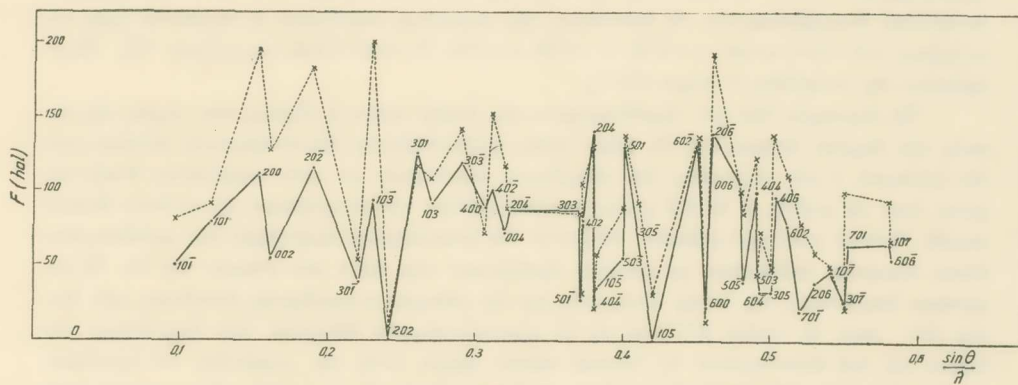


Fig. 6.

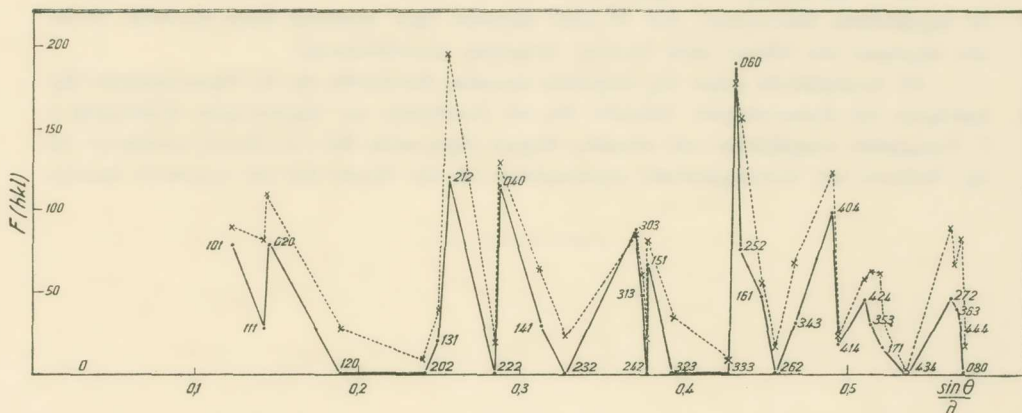


Fig. 7.

nés $2O_A$, $2O_B$, $2O_C$ et $2O_D$ et il résulte pour chaque anion O^{2-} : $\frac{5}{4} + 2 \cdot \frac{3}{8} = 2$, la neutralisation est complète. Si on compte aussi l'anion O_B à la distance $2,85 \text{ \AA}$ comme proche du Ce^{3+} chaque ion O^{2-} est lié à 3 cations Ce^{3+} et il résulte pour les O_B : $\frac{5}{4} + 3 \cdot \frac{3}{9} = 2,25$ et pour ceux restant $\frac{5}{4} + 2 \cdot \frac{3}{9} = 1,90$. En ajoutant encore l'anion O_C à la distance 3 \AA on a alors les ions O_A et O_C reliés à deux ions Ce^{3+} et les O_B et O_D à trois ions Ce^{3+} . Il en résulte pour les premiers $\frac{5}{4} + 2 \cdot \frac{3}{10} = 1,85$ et pour les derniers $\frac{5}{4} + 3 \cdot \frac{3}{10} = 2,15$. Dans les deux cas la règle de Pauling est remplie, les différences de la valeur juste 2 restant dans les limites usuelles.

Π Ε Ρ Ι Λ Η Ψ Ξ

Ἐμελετήθη ἀκτινογραφικῶς ὁ τύπος δομῆς τοῦ ὀρυκτοῦ μοναζίτου βάσει σειρᾶς ἀκτινογραφημάτων τύπου Weissenberg διὰ στροφῆς περὶ τοὺς ἄξονας a, b καὶ $[\bar{1}01]$, χρησιμοποιοθεύσης ἀκτινοβολίας Cu. Αἱ διαστάσεις τῆς κυψελίδος εὐρέθησαν ἐν συμφωνίᾳ πρὸς τὰς μετρήσεις τοῦ Gliszczynski $a = 6,78$, $b = 6,99$, $c = 6,45$. $\beta = 104^\circ$. Ὁμὰς συμμετρίας C_{2h} . Περιεχόμενον τῆς κυψελίδος 4 μόρια $CePO_4$.

Ὡς ἀφετηρία διὰ τὸν προσδιορισμὸν τῆς δομῆς ἐτέθη ἡ εὕρεσις κατ' ἀρχὰς τῆς θέσεως τῶν βαρέων ἀτόμων τοῦ Ce. Πρὸς τοῦτο ἠκολουθήθησαν δύο ἀνεξάρτητοι ἀλλήλων τρόποι λογισμοῦ, ὁ μὲν στηριχθεὶς ἐπὶ εὐαρίθμων ἀνακλάσεων μὲ τιμὴν παράγοντος δομῆς περὶπου ἴσην τῷ μηδενί, ὁ δὲ διὰ χρησιμοποίησεως ὅλων τῶν ἀνακλάσεων εἰς σύνθεσιν διπλῶν σειρῶν Fourier κατὰ τὴν μέθοδον Patterson. Τὰ ἀποτελέσματα ἀμφοτέρων τῶν μεθόδων ἀπολύτως σύμφωνα καθώρισαν μὲ μεγάλην προσέγγισιν τὴν θέσιν τῶν ἀτόμων τοῦ Ce. Ἡ περαιτέρω διερεύνησις τῆς δομῆς ἐστηρίχθη εἰς τὴν ἐκδοχὴν τετραεδρικῆς διατάξεως τῶν ἰόντων O^{2-} περὶ τὸ κατιὸν P^{5+} καὶ εἰς τὰ κρυσταλλοχημικὰ δεδομένα τῶν διαστάσεων τῶν ἰόντων καὶ τοῦ ἀπαιτουμένου δι' ἕκαστον αὐτῶν χώρου ἐντὸς τῆς κυψελίδος. Τὸ προκύψαν, κατόπιν δοκιμαστικῶν λογισμῶν, ὀριστικὸν πρότυπον δομῆς παρέχει ἐκτὸς ὀλίγων ἀσυμφωνιῶν ἐν τῷ συνόλῳ ἱκανοποιητικὴν συμφωνίαν μεταξὺ ὑπολογιζομένων καὶ παρατηρουμένων ἐντάσεων.

Τὰ O τῆς ὁμάδος PO_4 σχηματίζουν περὶ τὸ ἄτομον τοῦ P τετράεδρον κανονικόν. Τὸ Ce περιβάλλεται ἀκανονίστως ἀπὸ 10 κατὰ μέγιστον ὄρον γειτονικά ἰόντα ὀξυγόνου. Ὁ κανὼν κορεσμοῦ τῶν σθενῶν κατὰ Pauling πληροῦται ἱκανοποιητικῶς.

Τὸ πειραματικὸν μέρος τῆς παρουσίας ἐξετελέσθη εἰς τὸ Ὀρυκτολογικὸν Ἔργαστήριον τοῦ Πανεπιστημίου Ἀθηνῶν. Εἰς τὸν Διευθυντὴν τοῦ Ἐργαστηρίου Καθηγητὴν κ. Γ. Γεωργαλᾶν ἐκφράζονται καὶ ἐντεῦθεν θερμαὶ εὐχαρισταὶ διὰ τὴν εὐγενῆ φιλοξενίαν καὶ τὴν διάθεσιν τῶν ἀκτινογραφικῶν μηχανημάτων καὶ τῶν ὕλικῶν διὰ τὴν παροῦσαν ἔρευναν.