

AM-93-527

Site occupancies in monoclinic amphiboles: Rietveld structure refinement of
synthetic nickel magnesium cobalt potassium richterite

Giancarlo Della Ventura, Jean-Louis Robert, Mati Raudsepp, Frank C. Hawthorne

For deposit: Tables 3, 4, and 5

American Mineralogist, 78, 5-6, 633-640.

Table 3. Atomic positions for synthetic potassium-richterites.

		KNi ₀	KNi ₂₀	KNi ₄₀	KNi ₆₀	KNi ₈₀	KNi ₁₀₀	KCo ₂₀	KCo ₄₀	KCo ₆₀	KCo ₈₀	KCo ₁₀₀
O(1)	x	0.1079(17)	0.1101(19)	0.1074(21)	0.1096(22)	0.1058(24)	0.1050(27)	0.1083(15)	0.1094(21)	0.1130(28)	0.1067(26)	0.1066(35)
	y	0.0880(8)	0.0888(9)	0.0888(10)	0.0885(10)	0.0882(11)	0.0889(12)	0.0887(8)	0.0884(10)	0.0909(13)	0.0897(14)	0.0890(18)
	z	0.2149(32)	0.2154(34)	0.2082(35)	0.2160(37)	0.2131(39)	0.2124(42)	0.2138(28)	0.2062(37)	0.2089(51)	0.2101(49)	0.2166(61)
O(2)	x	0.1136(20)	0.1146(22)	0.1159(24)	0.1152(24)	0.1184(26)	0.1169(30)	0.1184(17)	0.1178(24)	0.1121(31)	0.1223(27)	0.1227(38)
	y	0.1716(8)	0.1727(9)	0.1713(9)	0.1725(10)	0.1711(10)	0.1697(11)	0.1721(7)	0.1742(10)	0.1735(12)	0.1737(13)	0.1722(17)
	z	0.7176(35)	0.7238(38)	0.7225(11)	0.7228(41)	0.7310(42)	0.7329(44)	0.7233(31)	0.7224(42)	0.7124(59)	0.7163(54)	0.7199(65)
O(3)	x	0.1078(21)	0.1067(20)	0.1069(21)	0.1067(22)	0.1045(25)	0.1071(28)	0.1087(18)	0.1059(22)	0.1026(27)	0.0978(28)	0.1085(42)
	y	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	z	0.7236(51)	0.7095(56)	0.7234(59)	0.7191(60)	0.7150(67)	0.7132(71)	0.7158(46)	0.7106(61)	0.7137(77)	0.7161(76)	0.7256(98)
O(4)	x	0.3542(19)	0.3572(18)	0.3568(19)	0.3556(20)	0.3590(22)	0.3593(25)	0.3574(16)	0.3574(21)	0.3549(25)	0.3578(25)	0.3607(36)
	y	0.2486(8)	0.2502(8)	0.2475(9)	0.2471(10)	0.2457(11)	0.2455(11)	0.2485(7)	0.2467(9)	0.2470(12)	0.2448(13)	0.2413(18)
	z	0.7854(46)	0.7801(48)	0.7940(48)	0.7892(48)	0.7919(50)	0.7855(52)	0.7876(40)	0.7820(52)	0.7808(66)	0.7786(61)	0.7867(74)
O(5)	x	0.3345(20)	0.3417(21)	0.3420(21)	0.3426(21)	0.3434(23)	0.3470(25)	0.3395(18)	0.3424(23)	0.3428(29)	0.3433(26)	0.3427(34)
	y	0.1300(8)	0.1316(9)	0.1304(9)	0.1299(10)	0.1310(10)	0.1333(10)	0.1308(7)	0.1315(10)	0.1313(12)	0.1302(12)	0.1317(16)
	z	0.0945(40)	0.0951(42)	0.1028(44)	0.1035(46)	0.1050(49)	0.1093(53)	0.0965(35)	0.1024(46)	0.1006(59)	0.1037(58)	0.1025(75)
O(6)	x	0.3399(19)	0.3377(20)	0.3413(21)	0.3396(21)	0.3396(24)	0.3375(26)	0.3390(17)	0.3392(23)	0.3413(29)	0.3414(26)	0.3443(35)
	y	0.1159(8)	0.1170(10)	0.1152(10)	0.1159(10)	0.1154(11)	0.1168(12)	0.1162(7)	0.1177(10)	0.1166(14)	0.1150(13)	0.1133(17)
	z	0.6030(39)	0.5987(40)	0.6003(45)	0.5997(47)	0.6011(51)	0.5993(55)	0.5955(34)	0.5954(46)	0.6083(66)	0.5877(63)	0.5956(83)
O(7)	x	0.3271(23)	0.3297(25)	0.3287(26)	0.3330(27)	0.3322(31)	0.3336(32)	0.3308(21)	0.3302(27)	0.3270(34)	0.3342(35)	0.3325(48)
	y	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	z	0.3072(60)	0.3095(59)	0.2999(58)	0.3112(58)	0.3046(61)	0.3137(62)	0.3091(50)	0.3072(63)	0.3066(78)	0.3111(71)	0.3202(85)
T(1)	x	0.2761(9)	0.2761(11)	0.2757(11)	0.2747(12)	0.2723(11)	0.2744(13)	0.2747(8)	0.2763(11)	0.2806(16)	0.2719(12)	0.2726(16)
	y	0.0859(4)	0.0849(5)	0.0856(5)	0.0855(5)	0.0851(6)	0.0852(6)	0.0855(4)	0.0856(5)	0.0867(7)	0.0859(7)	0.0864(9)
	z	0.3013(20)	0.3030(21)	0.3023(21)	0.3048(22)	0.3014(22)	0.3027(23)	0.3012(17)	0.3037(23)	0.3025(31)	0.3010(27)	0.3008(33)
T(2)	x	0.2843(10)	0.2844(12)	0.2839(13)	0.2853(14)	0.2871(14)	0.2849(15)	0.2851(9)	0.2846(13)	0.2822(18)	0.2912(14)	0.2912(19)
	y	0.1710(4)	0.1715(5)	0.1698(5)	0.1699(5)	0.1705(6)	0.1708(6)	0.1710(4)	0.1707(5)	0.1714(7)	0.1699(7)	0.1710(9)
	z	0.8024(20)	0.8034(22)	0.8038(23)	0.8048(23)	0.8067(24)	0.8055(27)	0.8022(17)	0.8040(24)	0.8040(33)	0.8074(28)	0.8051(35)

Table 3. (continued)

		KNi ₀	KNi ₂₀	KNi ₄₀	KNi ₆₀	KNi ₈₀	KNi ₁₀₀	KCo ₂₀	KCo ₄₀	KCo ₆₀	KCo ₈₀	KCo ₁₀₀
M(1)	x	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	y	0.0895(7)	0.0901(6)	0.0899(5)	0.0895(5)	0.0899(5)	0.0895(5)	0.0902(5)	0.0907(6)	0.0895(7)	0.0920(7)	0.0899(8)
	z	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
M(2)	x	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	y	0.1798(7)	0.1790(7)	0.1790(7)	0.1788(6)	0.1785(6)	0.1784(6)	0.1800(6)	0.1792(7)	0.1797(8)	0.1805(7)	0.1808(9)
	z	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
M(3)	x	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	y	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	z	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
M(4)	x	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	y	0.2761(6)	0.2763(7)	0.2750(8)	0.2748(8)	0.2734(8)	0.2740(9)	0.2757(6)	0.2758(8)	0.2732(10)	0.2763(10)	0.2742(14)
	z	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
A	x	0.0213(26)	0.0183(35)	0.0149(42)	0.0176(37)	0.0227(33)	0.0231(34)	0.0178(29)	0.0189(37)	0.0146(43)	0.0243(34)	0.0202(48)
	y	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
	z	0.0270(80)	0.0378(83)	0.0303(98)	0.0396(81)	0.0402(81)	0.0380(88)	0.0321(72)	0.0343(93)	0.0572(85)	0.024(11)	0.012(15)

Note: Isotropic displacement factors, B (\AA^2): O(1)=O(2)=O(3)=O(4)=0.8; O(5)=O(6)=1.1; O(7)=1.2; T(1)=T(2)=0.4; M(1)=M(2)=M(3)=0.6; M(4)=0.90; A=2.3