

AM-96-611

7038

Crystal structure of a $P2_1/m$ ferromagnesian cummingtonite at 140 K

Hexiong Yang and Joseph R. Smyth

For deposit: Table 3

81 March-April 1996

363-368

(Table 3 is for deposit)

Table 3. Atomic anisotropic ($\times 10^4$) displacement factors for NMNH 118125 cummingtonite at 295 and 140 K

		295 K	140 K	
			A set	B set
M1	β_{11}	21(2)		13(1)
	β_{22}	4(1)		2(1)
	β_{33}	36(5)		22(4)
	β_{12}	0		-1(1)
	β_{13}	8(2)		5(2)
	β_{23}	0		1(1)
M2	β_{11}	17(2)		14(1)
	β_{22}	4(1)		3(1)
	β_{33}	48(6)		22(4)
	β_{12}	0		-1(1)
	β_{13}	4(4)		2(2)
	β_{23}	0		0(1)
M3	β_{11}	20(3)		13(2)
	β_{22}	4(1)		3(1)
	β_{33}	46(8)		24(6)
	β_{13}	1(3)		2(2)
M4	β_{11}	24(1)		14(1)
	β_{22}	7(1)		4(1)
	β_{33}	56(3)		15(2)
	β_{12}	0		0(1)
	β_{13}	14(1)		6(1)
	β_{23}	0		0(1)
Si1	β_{11}	14(1)	8(2)	14(2)
	β_{22}	3(1)	2(1)	2(1)
	β_{33}	36(3)	20(4)	17(4)
	β_{12}	-1(1)	0(1)	-1(1)
	β_{13}	2(2)	-1(2)	4(2)
	β_{23}	-1(1)	0(1)	0(1)

Table 3. (continued 1)

Si2	β_{11}	12(1)	13(2)	8(1)
	β_{22}	3(1)	2(1)	3(1)
	β_{33}	34(3)	21(4)	15(2)
	β_{12}	-1(1)	-1(1)	-1(1)
	β_{13}	1(2)	1(2)	-3(1)
	β_{23}	0(1)	0(1)	1(1)
O1	β_{11}	13(3)	8(5)	19(5)
	β_{22}	5(1)	4(1)	1(1)
	β_{33}	45(9)	19(11)	44(11)
	β_{12}	0(1)	0(2)	1(2)
	β_{13}	4(4)	2(5)	5(6)
	β_{23}	-1(2)	-2(3)	4(3)
O2	β_{11}	16(3)	14(5)	9(5)
	β_{22}	5(1)	3(1)	3(1)
	β_{33}	57(9)	47(11)	43(10)
	β_{12}	0(1)	-2(2)	1(2)
	β_{13}	3(4)	10(5)	2(5)
	β_{23}	4(2)	0(3)	4(3)
O3	β_{11}	22(5)	24(8)	15(6)
	β_{22}	4(1)	4(2)	2(2)
	β_{33}	73(14)	35(17)	36(16)
	β_{13}	9(7)	10(8)	1(8)
O4	β_{11}	30(3)	10(5)	25(5)
	β_{22}	6(1)	2(1)	6(1)
	β_{33}	76(10)	47(10)	37(10)
	β_{12}	-4(1)	-2(2)	-3(2)
	β_{13}	5(5)	-5(5)	9(6)
	β_{23}	2(2)	3(3)	-4(3)

Table 3. (continued 2)

O5	β_{11}	19(3)	13(4)	16(4)
	β_{22}	9(1)	5(1)	3(1)
	β_{33}	65(10)	36(10)	25(10)
	β_{12}	-1(1)	-1(2)	1(2)
	β_{13}	5(4)	3(5)	1(5)
	β_{23}	14(2)	10(3)	2(3)
O6	β_{11}	22(3)	15(4)	11(4)
	β_{22}	13(1)	6(1)	6(1)
	β_{33}	77(10)	39(11)	29(10)
	β_{12}	3(2)	2(2)	2(2)
	β_{13}	-1(5)	-5(5)	-2(5)
	β_{23}	-12(3)	-4(3)	-3(3)
O7	β_{11}	27(5)	21(7)	12(7)
	β_{22}	2(1)	5(2)	2(2)
	β_{33}	125(16)	32(16)	58(16)
	β_{13}	10(7)	-2(8)	16(8)