AM-81-158

American Mineralogist, Volume 66, pages 561-567, 1981

Refinement of the crystal structure of kanonaite, $(Mn^{3+},Al)^{[6]}(Al,Mn^{3+})^{[5]}O[SiO_4]$

ZDENĚK WEISS

Coal Research Institute
71607 Ostrava-Radvanice, Czechoslovakia

S. W. BAILEY

Department of Geology and Geophysics
University of Wisconsin-Madison
Madison, Wisconsin 53706, U.S.A.

AND MILAN RIEDER

Institute of Geological Sciences, Charles University
12843 Praha 2, Czechoslovakia

Abstract

Kanonaite is orthorhombic and isotypic with andalusite. The space group is *Pnnm*; the cell data are $a = 7.959(2)$ Å, $b = 8.047(2)$ Å, $c = 5.616(1)$ Å. Refinement of 472 independent intensities yielded a distribution of manganese between a six-coordinated $M(1)$ ($Mn_{0.74}$ $Al_{0.26}$) and a five-coordinated $M(2)$ ($Mn_{0.12}Al_{0.88}$) position. Mean interatomic distances are $M(1)-O = 2.003$ Å, $M(2)-O = 1.850$ Å, $Si-O = 1.630$ Å.

The Jahn–Teller bipyramidal distortion of $M(1)$ octahedra in kanonaite is surpassed by very few Mn^{3+} octahedra in compounds whose structures have been refined. Si tetrahedra appear more regular in kanonaite than in andalusite and $M(2)$ polyhedra in both structures are about equally irregular.

Possessing analogously distorted Al(1) octahedra that share opposite short edges, andalusite displays features common to structures with oxygen-coordinated Mn^{3+}, and apparently invites relatively easy substitution in the andalusite–kanonaite series. Other evidence notwithstanding, the substitution is coupled with marked changes of intensities in the powder pattern.

Introduction

Kanonaite $(Mn^{3+}_{0.76}\ Fe^{3+}_{0.02}Al_{1.23})SiO_5$, is a recently described mineral related to andalusite by the substitution $Al \rightleftharpoons Mn^{3+}$ (Vrána *et al.*, 1978). The composition of the original material is not that of an end member, the mole fraction of $Mn^{3+}AlSiO_5$ being 0.76. But the mineral is the richest in manganese of any of the natural or synthetic andalusite-type phases found or grown to date.

X-ray data indicated kanonaite to be isotypic with andalusite. Thus Mn^{3+} and Al can enter the six-coordinated $M(1)$ and/or the five-coordinated $M(2)$ position. Vrána *et al.* (1978) assigned all manganese to the six-coordinated position, chiefly because the intensities measured on precession photographs compared favorably to those calculated for the structure of andalusite (Burnham and Buerger, 1961) with an appropriate quantity of Mn^{3+} in octahedra; models with manganese distributed equally between six- and five-coordinated positions and with all manganese in five-fold coordination had to be rejected. Octahedral coordination of manganese was further supported by a subnormal magnetic moment (3.15 Bohr magnetons per one manganese atom) not explicable in terms of a five-fold coordination.

However, *some* manganese could reside in the five-coordinated position. To check this possibility and to study in detail the distortions of the coordination polyhedra, a structure refinement of the type material was essential.

0003–004X/81/0506–0561$02.00

h	k	l	FO	FC
0	0	2	88,8	85,5
0	0	4	366,6	365,6
0	0	6	37,9	36,9
1	0	1	145,9	133,3
1	0	3	66,8	67,0
1	0	5	69,2	70,3
1	0	7	15,2	14,1
2	0	0	29,2	30,5
2	0	2	56,0	-62,4
2	0	4	23,1	22,7
2	0	6	59,4	-58,4
3	0	1	78,8	-74,5
3	0	3	73,3	-73,6
3	0	5	24,5	-24,6
3	0	7	39,4	-39,7
4	0	0	160,1	140,6
4	0	2	238,1	-230,5
4	0	4	94,0	93,4
4	0	6	97,3	-96,3
5	0	1	72,9	-72,0
5	0	3	73,9	-74,4
5	0	5	25,8	-25,9
5	0	7	41,7	-42,4
6	0	0	83,8	-85,0
6	0	2	161,7	-162,7
6	0	4	51,8	-52,1
6	0	6	92,2	-94,4
7	0	1	35,6	36,6
7	0	3	21,6	20,5
7	0	5	31,9	30,8
8	0	0	175,7	177,0

h	k	l	FO	FC
8	0	2	22,7	-23,7
8	0	4	127,5	132,7
9	0	1	45,4	45,8
9	0	3	28,3	28,3
10	0	2	50,1	-52,5
11	0	1	13,7	-12,9
0	1	1	118,3	-109,5
0	1	3	110,2	-108,3
0	1	5	22,4	-22,1
0	1	7	59,7	-55,1
1	1	0	179,0	160,3
1	1	1	89,1	-73,4
1	1	2	165,9	-159,7
1	1	3	37,2	-32,0
1	1	4	88,5	86,5
1	1	5	43,8	-44,3
1	1	6	76,9	-75,1
1	1	7	14,7	-13,7
2	1	0	108,4	105,0
2	1	1	9,1	-6,0
2	1	2	101,6	98,5
2	1	3	10,3	-9,5
2	1	4	58,6	59,0
2	1	6	42,9	41,9
3	1	0	216,1	200,5
3	1	1	115,3	106,8
3	1	2	66,9	-61,2
3	1	3	76,8	74,2
3	1	4	122,4	123,8
3	1	5	74,1	75,4
3	1	6	33,5	-34,0

h	k	l	FO	FC
3	1	7	34,7	35,4
4	1	0	63,3	57,2
4	1	1	91,8	84,8
4	1	2	32,9	30,9
4	1	3	37,7	37,4
4	1	4	30,4	30,8
4	1	5	61,7	61,8
4	1	6	11,7	13,2
5	1	0	152,4	146,9
5	1	1	108,2	-102,6
5	1	2	86,6	-79,8
5	1	3	78,7	-76,6
5	1	4	100,5	99,8
5	1	5	72,6	-72,2
5	1	6	46,5	-44,1
5	1	7	34,9	-35,2
6	1	0	34,1	-34,0
6	1	1	17,9	18,7
6	1	2	14,5	-13,2
6	1	4	27,2	-25,3
6	1	5	16,1	15,5
7	1	0	25,0	23,5
7	1	1	41,2	42,0
7	1	2	115,1	-114,2
7	1	3	29,0	29,4
7	1	4	20,6	19,7
7	1	5	33,6	34,3
7	1	6	66,4	-66,6
8	1	1	31,5	-33,9
8	1	3	44,4	-44,5
9	1	0	28,5	28,0
9	1	1	18,5	-18,5
9	1	2	94,5	-98,3
9	1	4	24,4	23,5
11	1	0	51,7	52,6
11	1	1	40,5	40,7
0	2	0	26,8	23,0
0	2	2	221,5	-213,6
0	2	4	16,2	15,4
0	2	6	111,9	-108,1
1	2	0	101,6	-91,7
1	2	1	11,6	8,5
1	2	2	118,8	98,6
1	2	3	15,5	-15,4
1	2	4	48,1	-49,3
1	2	5	16,3	16,1
1	2	6	23,7	23,8
1	2	7	18,3	-17,4
2	2	0	270,3	253,0
2	2	1	37,7	-43,6
2	2	2	76,3	-73,0
2	2	3	36,5	-38,5
2	2	4	159,5	157,2
2	2	5	31,2	-31,5
2	2	6	27,5	-26,7
2	2	7	20,3	-19,0
3	2	0	186,3	149,0
3	2	1	10,7	10,3
3	2	2	19,1	-21,2
3	2	3	10,9	-9,5
3	2	4	60,7	63,2
3	2	5	19,6	19,6

h	k	l	FO	FC
3	2	6	14,3	-13,1
3	2	7	13,9	-13,4
4	2	0	38,1	38,2
4	2	1	20,6	18,3
4	2	2	163,3	-155,3
4	2	3	11,4	11,7
4	2	4	23,8	23,8
4	2	5	10,1	9,1
4	2	6	92,4	-86,5
5	2	0	33,0	32,3
5	2	2	134,5	128,5
5	2	3	12,2	-12,9
5	2	4	25,8	25,8
5	2	5	12,5	12,7
5	2	6	64,5	61,2
6	2	0	162,5	162,1
6	2	1	39,7	40,0
6	2	2	34,6	-35,1
6	2	3	37,2	36,4
6	2	4	118,5	118,8
6	2	5	25,4	24,2
6	2	6	18,7	-17,7
7	2	0	41,9	40,2
7	2	2	24,9	-25,5
7	2	3	12,7	-12,9
7	2	4	29,2	28,1
7	2	6	14,3	-13,1
8	2	0	13,6	15,8
8	2	1	12,9	-12,9
8	2	2	99,9	-101,8
8	2	3	13,0	-12,3

h	k	l	FO	FC
8	2	4	12,4	11,8
9	2	0	79,6	-80,2
9	2	2	26,2	-28,6
9	2	4	60,4	-60,3
10	2	0	92,7	95,2
10	2	1	27,9	-27,2
10	2	2	13,2	-14,2
10	2	3	21,3	-22,0
11	2	0	15,1	-14,9
0	3	1	101,2	97,8
0	3	3	72,2	72,4
0	3	5	55,8	54,9
0	3	7	25,8	25,8
1	3	0	139,7	131,9
1	3	1	86,9	83,4
1	3	2	133,5	-123,8
1	3	3	81,1	80,2
1	3	4	91,9	92,5
1	3	5	51,2	50,3
1	3	6	56,0	-55,9
1	3	7	44,9	45,3
2	3	0	39,2	37,9
2	3	1	8,0	7,2
2	3	2	40,5	41,4
2	3	3	30,0	-29,0
2	3	4	24,7	26,6
2	3	5	22,5	24,1
2	3	6	21,0	21,2
2	3	7	28,6	-28,3
3	3	0	81,4	70,9
3	3	1	85,5	-74,0

h	k	l	FO	FC
3	3	2	176,7	-172,2
3	3	3	69,1	-66,4
3	3	4	47,8	47,6
3	3	5	38,5	-38,2
3	3	6	85,4	-85,9
3	3	7	35,0	-35,9
4	3	0	21,9	20,4
4	3	1	63,0	-62,2
4	3	2	10,9	10,7
4	3	3	52,7	-53,2
4	3	4	10,9	11,8
4	3	5	29,5	-30,3
4	3	7	27,5	-27,1
5	3	0	75,2	74,2
5	3	1	42,4	40,0
5	3	2	94,1	-95,5
5	3	3	41,0	41,6
5	3	4	52,1	51,8
5	3	5	23,2	24,3
5	3	6	53,5	-54,0
6	3	0	11,1	-11,2
6	3	3	24,2	-25,5
6	3	4	9,9	-9,2
6	3	5	14,3	13,6
7	3	0	144,3	147,0
7	3	1	48,6	-47,2
7	3	2	23,2	-22,3
7	3	3	45,2	-46,4
7	3	4	107,1	108,0
7	3	5	29,6	-30,5
8	3	1	41,7	43,3
8	3	3	32,4	33,8
8	3	5	30,7	31,1
9	3	0	86,6	85,2
9	3	1	57,3	57,2
9	3	2	10,5	-11,5
9	3	3	53,6	53,7
9	3	4	65,5	66,6
0	4	0	75,3	-60,6
0	4	2	145,8	-145,8
0	4	6	65,6	-66,0
1	4	0	50,8	42,0
1	4	1	75,5	-72,4
1	4	2	18,8	-16,9
1	4	3	72,0	-72,6
1	4	4	19,0	21,9
1	4	5	24,2	-24,8
1	4	7	41,0	-40,2
2	4	0	73,4	66,8
2	4	1	43,9	42,0
2	4	2	278,1	-271,0
2	4	3	31,6	32,0
2	4	4	36,0	36,3
2	4	5	20,8	21,3
2	4	6	142,7	-134,0
2	4	7	13,8	13,3
3	4	0	9,9	-6,4
3	4	1	61,3	60,7
3	4	2	42,9	42,1
3	4	3	31,7	31,9
3	4	5	45,7	46,4
3	4	6	20,9	19,9

h	k	l	FO	FC
4	4	0	209,3	215,6
4	4	2	99,7	98,7
4	4	4	155,8	156,6
4	4	6	48,3	47,4
5	4	0	15,6	-15,8
5	4	1	60,9	62,9
5	4	2	42,5	-44,0
5	4	3	38,7	39,6
5	4	4	12,7	-12,3
5	4	5	44,4	46,1
5	4	6	23,6	-23,0
6	4	0	107,7	113,0
6	4	1	23,4	-23,5
6	4	2	113,1	-110,3
6	4	3	19,4	-19,6
6	4	4	74,1	76,7
6	4	5	15,2	-14,0
6	4	6	65,4	-66,9
7	4	0	27,1	-27,5
7	4	1	26,8	-26,4
7	4	3	34,6	-34,6
7	4	4	19,6	-19,3
8	4	0	59,3	60,1
8	4	1	9,9	-9,1
8	4	2	15,9	-15,1
8	4	4	47,7	50,1
9	4	0	11,4	13,5
9	4	1	29,2	-29,4
9	4	3	32,2	-32,3
10	4	0	22,2	20,5
10	4	2	98,5	-101,7

h	k	l	FO	FC
0	5	1	55,6	52,4
0	5	3	26,3	28,2
0	5	5	32,9	34,4
1	5	0	149,6	134,5
1	5	1	111,1	-104,7
1	5	2	82,5	-79,3
1	5	3	101,1	-102,3
1	5	4	90,9	91,4
1	5	5	59,7	-58,5
1	5	6	46,3	-44,6
1	5	7	57,4	-57,2
2	0	0	111,0	-102,8
2	5	1	24,0	23,2
2	5	2	96,5	-97,9
2	5	4	66,4	-67,4
2	5	5	27,5	27,7
2	5	6	53,9	-48,4
3	5	0	74,4	69,9
3	5	1	21,5	18,1
3	5	2	121,4	-122,1
3	5	3	28,9	29,3
3	5	4	52,5	50,9
3	5	6	66,3	-66,5
4	5	0	50,1	-51,1
4	5	1	48,8	-50,4
4	5	2	27,2	-27,8
4	5	3	49,5	-50,9
4	5	4	32,1	-33,3
4	5	5	21,1	-21,6
4	5	6	14,7	-14,4
5	5	0	58,2	56,7

h	k	l	FO	FC
5	5	1	20,6	-17,4
5	5	2	93,7	-96,2
5	5	3	24,8	-25,6
5	5	4	42,2	43,6
5	5	6	53,8	-55,6
6	5	0	38,1	37,4
6	5	2	22,9	22,7
6	5	3	15,0	-14,6
6	5	4	28,2	27,0
6	5	5	10,8	11,1
7	5	0	87,6	90,0
7	5	1	68,1	66,7
7	5	2	44,2	-44,1
7	5	3	65,1	65,8
7	5	4	67,2	69,1
7	5	5	38,9	39,4
8	5	1	17,6	17,8
8	5	2	23,7	24,6
9	5	0	75,8	75,2
9	5	1	56,2	-54,7
9	5	2	22,2	-21,3
9	5	3	54,6	-53,4
0	6	0	101,6	98,7
0	6	2	147,0	-147,2
0	6	4	62,7	63,8
0	6	6	81,2	-82,8
1	6	0	63,8	59,9
1	6	2	17,9	-17,9
1	6	4	42,1	41,2
1	6	5	16,6	16,5
2	6	0	141,2	133,1
2	6	1	36,2	36,2
2	6	3	30,6	30,8
2	6	4	101,9	100,8
2	6	5	23,1	23,2
3	6	0	71,9	-68,3
3	6	3	17,8	-17,4
3	6	4	43,5	-43,3
4	6	0	38,8	38,4
4	6	2	154,9	-159,2
4	6	4	23,8	24,8
4	6	6	92,2	-94,8
5	6	0	18,6	-17,0
5	6	2	61,2	-62,4
5	6	3	9,6	-9,8
5	6	4	12,9	-12,9
6	6	0	91,9	91,5
6	6	1	32,0	-31,1
6	6	3	26,7	-27,5
6	6	4	70,4	71,9
6	6	5	19,2	-19,4
7	6	0	40,5	-40,6
7	6	1	16,9	16,5
7	6	4	29,5	-30,4
8	6	0	29,8	28,7
8	6	2	96,8	-98,6
9	6	0	61,5	58,9
9	6	2	32,0	31,5
0	7	1	26,0	-26,4
0	7	3	42,7	-44,9
1	7	0	96,8	91,8
1	7	1	57,9	57,2

h	k	l	FO	FC
1	7	2	76,2	-76,5
1	7	3	48,1	48,0
1	7	4	63,5	66,0
1	7	5	41,2	39,3
1	7	6	43,7	-45,5
2	7	3	10,8	-10,4
3	7	0	118,9	111,7
3	7	1	43,0	-41,5
3	7	2	32,7	-33,1
3	7	3	35,7	-35,8
3	7	4	81,2	83,0
3	7	5	30,2	-31,1
4	7	1	56,3	55,9
4	7	3	29,2	28,5
4	7	5	49,5	51,5
5	7	0	77,4	75,3
5	7	1	51,8	49,2
5	7	2	64,2	-67,4
5	7	3	40,8	42,6
5	7	4	55,8	57,9
5	7	5	33,3	34,8
6	7	1	11,1	-10,8
6	7	3	13,3	-12,0
7	7	1	46,1	-45,4
7	7	2	89,1	-89,7
7	7	3	38,1	-38,9
8	7	1	16,7	-15,7
0	8	0	234,6	221,3
0	8	2	22,2	23,0
0	8	4	167,6	164,9
1	8	0	59,9	-57,7

h	k	l	FO	FC
1	8	1	35,3	35,7
1	8	3	18,4	19,0
1	8	4	42,7	-41,8
1	8	5	31,4	31,8
2	8	0	20,1	20,9
2	8	1	39,7	-40,4
2	8	2	72,2	-73,9
2	8	3	32,3	-33,6
2	8	4	14,9	16,1
2	8	5	24,1	-25,6
3	8	0	18,5	19,2
3	8	1	24,1	-24,0
3	8	2	20,5	-20,8
3	8	3	29,9	-30,3
3	8	4	15,1	14,9
4	8	0	87,5	81,0
4	8	2	80,5	-80,2
4	8	4	62,7	64,4
5	8	1	22,5	-22,5
5	8	2	36,8	36,7
5	8	3	27,7	-29,3
6	8	0	21,5	-21,4
6	8	1	30,5	29,0
6	8	2	91,2	-94,8
6	8	3	25,2	26,1
7	8	0	46,5	43,1
7	3	1	18,4	16,6
7	8	2	16,9	17,3
0	9	1	25,8	-26,3
0	9	3	32,7	-32,5
1	9	0	56,4	53,3

h	k	l	FO	FC
1	9	1	11,9	-11,7
1	9	2	67,7	-70,2
1	9	4	40,1	42,5
2	9	0	69,3	64,8
2	9	1	11,5	11,1
2	9	2	63,9	66,5
2	9	4	48,9	48,7
3	9	0	72,3	67,9
3	9	1	76,1	73,4
3	9	2	47,9	-50,4
3	9	3	55,3	57,6
3	9	4	51,9	53,6
4	9	0	31,4	31,5
4	9	2	24,8	25,3
5	9	0	66,7	65,6
5	9	1	59,5	-58,7
5	9	2	38,1	-38,3
5	9	3	43,3	-45,3
6	9	0	36,1	-35,2
6	9	1	20,0	18,7
6	9	2	18,9	-17,7
0	10	0	27,7	-27,9
0	10	2	89,9	-93,6
1	10	2	15,0	16,0
2	10	0	103,1	104,2
2	10	1	23,0	-21,4
2	10	2	42,9	-43,5
2	10	3	18,9	-18,1
3	10	1	12,9	12,2
3	10	2	18,1	-16,8
4	10	0	15,7	13,0
4	10	2	46,4	-49,4
5	10	0	21,8	22,3
0	11	1	27,7	28,9
1	11	0	41,7	40,8
1	11	1	25,1	25,6
2	11	1	11,6	-10,0
0	0	2	88,8	85,5
0	0	4	366,6	365,6
0	0	6	37,9	36,9