AM-87-337

Leiteite, $ZnAs_2O_4$: A novel type of tetrahedral layer structure with arsenite chains

Subrata Ghose, P. K. Sen Gupta, E. O. Schlemper

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 72, 5-6, 629-632.

For deposit

Leiteite, $ZnAs_2O_4$: A Novel type of Tetrahedral Layer Structure with Arsenite Chains[1]

Subrata Ghose
Mineral Physics Group
Department of Geological Sciences
University of Washington
Seattle, WA 98195

P. K. Sen Gupta
Department of Geology
Memphis State University
Memphis, TN 38152

E. O. Schlemper
Department of Chemistry
University of Missouri
Columbia, MO 65211

---

[1] Structural chemistry of copper and zinc minerals, Part VII.

Table 4. Leiteite, $ZnAs_2O_4$: Observed and calculated structure factors.

Abstract

Leiteite, $ZnAs_2O_4$ from Tsumeb, Namibia is monoclinic, a = 4.542(1), b = 5.022(1), c = 17.597(5)Å, β = 90.81(3)°, space group $P2_1/c$, Z = 2. The crystal structure has been determined by direct methods and refined by the method of least squares to a R factor of 0.048 based on 713 independent reflections measured on an automatic single crystal x-ray diffractometer. The crystal structure consists of open zinc tetrahedral sheets flanked by single arsenite chains on either side. The composite layers are cross-linked through weak (2.8-3.3Å) As-O bonds. Leiteite represents a new structure type. The average tetrahedral Zn-O distance is 1.99Å and the average As-O distances and O-As-O angles in the two distinct trigonal pyramidal arsenite groups are 1.79Å, 95.5° for As(1) and 1.78Å, 95.8° for As(2).

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR LEITITE

H	K	L	10FO	10FC
0	0	2	303	-350
0	1	1	718	725
1	0	0	55	-10
0	1	2	42	18
-1	0	2	84	-52
0	1	3	85	-97
1	1	0	287	242
-1	1	1	1088	1040
0	1	4	68	-51
1	1	1	979	-1021
-1	1	2	1804	1800
1	0	4	72	-74
1	1	2	2251	2311
-1	1	3	1032	-1013
1	1	3	916	950
0	1	5	696	-706
-1	1	4	1028	1091
1	1	4	523	538
0	1	6	86	-116
0	2	0	1412	-1368
0	2	1	72	-78
-1	1	5	906	949
-1	0	6	72	52
1	1	5	943	-868
0	2	2	1328	-1336
0	2	3	223	123
0	1	7	363	-391
0	0	8	256	321
1	1	6	532	-562
2	0	2	1598	1577
0	2	4	2018	2063
1	2	1	498	492
-1	2	2	86	53
-1	2	3	404	415
-2	1	1	171	193
1	2	3	352	377
2	1	1	596	520
0	2	5	161	-198
-1	1	7	887	-866
2	1	2	60	60
1	1	7	780	821
-1	0	8	113	145
-2	1	3	274	-261
1	2	4	70	33
2	1	3	82	85
0	2	6	508	527
-2	1	4	69	-31
-1	2	5	266	263

H	K	L	10FO	10FC
1	2	5	172	-179
-1	1	8	1450	-1475
1	1	8	1619	-1663
0	1	9	164	174
-2	0	6	774	-767
-2	1	5	487	-462
2	0	6	649	-646
2	1	5	238	-221
0	0	10	1159	1166
-2	1	6	77	-87
-1	1	9	732	737
1	1	9	664	-746
2	2	0	2723	-2672
-2	2	1	284	197
2	2	1	284	166
0	3	1	953	-948
0	1	10	140	196
-1	2	7	201	-198
-2	2	2	221	226
0	2	8	1027	1027
2	2	2	546	532
1	2	7	508	-510
0	3	2	109	-57
-2	2	3	81	-173
-2	1	7	107	-113
0	3	3	183	201
-2	0	8	946	-977
2	1	7	377	-373
-2	2	4	134	117
-1	1	10	838	-840
1	3	0	152	-137
2	0	8	1078	-1081
2	2	4	451	457
-1	3	1	610	691
0	3	4	95	-43
-1	2	8	88	-133
1	3	1	919	-783
1	1	10	404	-432
1	2	8	134	-168
-1	3	2	1720	-1745
0	2	9	106	-124
1	3	2	1389	-1359
0	1	11	447	486
-2	2	5	135	86
-1	3	3	600	-634
1	3	3	799	777
3	0	0	76	132
2	2	5	112	95

H	K	L	10FO	10FC
0	3	5	971	961
-3	0	2	125	-115
3	0	2	87	10
-1	3	4	626	-620
1	3	4	955	-980
0	0	12	1814	1826
-2	2	6	1985	1961
-1	2	9	338	-343
1	2	9	241	-251
-1	1	11	538	-599
2	2	6	1751	1776
3	1	0	525	462
-3	1	1	659	-711
0	2	10	2049	-2021
1	1	11	564	627
-1	3	5	752	652
-2	1	9	315	299
-3	1	2	1527	1498
1	3	5	586	-694
3	0	4	93	-17
-3	1	3	696	663
-2	2	7	68	-89
0	3	7	604	615
1	0	12	174	-145
2	2	7	146	-108
-1	3	6	156	142
-3	1	4	1150	1125
2	0	10	1905	2005
1	3	6	394	436
-1	2	10	60	-165
3	1	4	765	681
-1	1	12	853	924
-2	1	10	134	171
0	2	11	170	184
-3	1	5	738	-675
-2	2	8	224	-228
-2	3	1	695	-687
2	3	1	713	-712
1	1	12	1062	1118
-1	3	7	539	-578
3	1	5	644	662
-2	3	2	90	-86
2	1	10	83	101
2	2	8	547	-546
2	3	2	66	-112
1	3	7	663	631
-2	3	3	246	253
3	2	0	114	-35

H	K	L	10FO	10FC
3	1	6	867	-806
-2	3	4	91	-74
3	2	1	645	588
1	2	11	226	256
2	3	4	124	-56
-1	3	8	1400	1456
3	2	2	71	-120
-2	1	11	303	310
1	3	8	1063	1081
0	3	9	454	-439
-3	2	3	667	646
0	2	12	249	-270
-3	1	7	607	605
-1	1	13	458	533
-2	3	5	799	781
3	2	3	631	604
0	0	14	1008	-946
2	1	11	159	171
-3	0	8	144	179
0	4	0	1598	1587
2	3	5	751	763
1	1	13	521	-540
0	4	1	347	-304
3	1	7	641	-598
-2	0	12	381	396
0	4	2	441	-437
3	0	8	133	170
-1	3	9	442	506
0	4	3	113	170
-1	2	12	139	109
-2	2	10	646	-619
2	0	12	269	337
-3	2	5	378	386
1	3	9	597	-564
-3	1	8	1452	-1433
-1	0	14	111	-138
2	2	10	763	-714
1	4	0	153	96
-1	4	1	469	-487
1	4	1	554	-555
3	1	8	1304	-1352
-1	4	2	127	26
1	4	2	74	85
-2	3	7	419	420
-3	2	6	90	81
-1	4	3	912	-894
-1	1	14	737	805
1	4	3	909	-888

H	K	L	10FO	10FC
2	3	7	392	403
0	4	5	164	-157
3	2	6	107	8
-1	3	10	437	438
1	1	14	891	888
-3	1	9	497	-507
1	3	10	679	695
-3	2	7	283	-279
-1	2	13	254	248
0	3	11	705	-717
3	1	9	547	540
0	4	6	1103	-1097
1	2	13	402	404
3	2	7	575	-597
-1	4	5	234	-229
0	1	15	132	-157
1	4	5	120	-139
4	0	0	2035	1917
-3	1	10	833	-801
-4	0	2	144	-97
2	1	13	193	185
0	2	14	102	-65
-1	3	11	620	-553
-3	2	8	124	-109
4	0	2	481	-468
0	4	7	202	200
3	3	0	97	73
-3	3	1	594	-586
-1	4	6	131	-117
3	3	1	463	474
1	3	11	379	432
1	4	6	138	-89
-2	3	9	403	-412
-3	3	2	838	-854
-1	1	15	449	-455
-2	2	12	1312	-1278
3	3	2	1225	-1233
3	1	10	389	-396
1	1	15	463	459
-4	1	1	172	155
-3	3	3	604	603
2	3	9	262	-238
0	0	16	593	-594
2	2	12	1123	-1125
3	3	3	473	-478
2	4	0	504	499
-2	4	1	128	75
2	4	1	85	78

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR LEITITE

H	K	L	10FO	10FC
4	0	4	414	-428
-1	4	7	626	645
-4	1	3	85	-91
-3	3	4	722	-750
-2	4	2	984	968
0	4	8	374	373
1	2	14	121	158
2	4	2	496	475
1	4	7	663	682
-3	2	9	523	-517
3	3	4	337	-322
-3	1	11	547	521
-2	4	3	265	-220
2	4	3	281	-244
-1	3	12	651	-660
-2	3	10	90	-80
3	2	9	411	-391
-3	3	5	443	-492
1	3	12	848	-854
-2	4	4	845	-832
3	1	11	439	-469
3	3	5	539	523
2	3	10	110	-84
-4	0	6	1647	-1541
2	4	4	1273	-1282
0	3	13	242	-233
4	0	6	1246	-1276
-3	3	6	261	259
-1	1	16	173	190
4	1	5	204	-186
-2	4	5	158	169
2	4	5	203	200
3	3	6	200	210
-4	1	6	107	-82
-3	1	12	603	564
-1	2	15	188	168
3	2	10	88	-151
-2	3	11	653	-639
4	2	0	783	-753
1	2	15	111	88
-4	2	1	115	-43
4	2	1	153	-48
-2	4	6	240	-245
-1	4	9	649	661
-3	3	7	522	509
-1	3	13	475	467
-2	1	15	188	-245
-4	2	2	1030	-1060

H	K	L	10FO	10FC
1	4	9	616	630
2	3	11	620	-608
4	2	2	628	-595
3	1	12	1157	1095
1	3	13	362	-369
0	4	10	295	275
-4	2	3	191	93
3	3	7	427	-458
0	1	17	297	-274
-4	0	8	167	163
4	2	3	227	120
2	1	15	171	-136
-3	2	11	124	-124
-2	2	14	676	645
-4	2	4	973	999
-2	4	7	96	-106
0	2	16	1132	1149
0	3	14	81	-30
-3	3	8	803	828
2	4	7	96	-107
4	2	4	1502	1450
2	2	14	885	872
4	0	8	522	572
0	5	1	676	667
3	2	11	225	220
-3	1	13	411	-457
-2	0	16	1406	-1317
0	5	2	130	93
-4	2	5	103	-67
-1	1	17	315	344
3	3	8	919	958
0	5	3	164	-152
1	1	17	338	-355
4	2	5	103	-93
-2	4	8	780	-787
-1	3	14	819	-836
2	0	16	1229	-1152
3	1	13	364	385
-4	2	6	516	521
1	3	14	593	-591
1	5	0	216	-208
2	4	8	323	-324
-2	1	16	126	-109
-3	3	9	536	-516
-3	2	12	95	62
-1	5	1	530	550
0	5	4	128	83
1	5	1	331	-288

H	K	L	10FO	10FC
-1	5	2	534	537
1	5	2	891	908
-4	1	9	139	125
4	2	6	303	293
3	3	9	364	395
-1	5	3	552	-531
1	5	3	359	346
3	4	0	120	138
3	2	12	149	73
0	5	5	755	-754
-3	4	1	333	-341
3	4	1	537	-516
1	4	11	162	-149
0	3	15	476	443
-4	0	10	473	477
-2	4	9	240	230
-3	4	2	132	-9
3	0	14	154	-161
-3	1	14	829	860
-1	5	4	543	542
1	5	4	193	175
2	4	9	232	219
-3	4	3	732	-737
0	4	12	758	729
-3	3	10	551	546
3	4	3	687	-707
4	0	10	587	567
-3	4	4	115	-65
-1	5	5	341	322
-3	2	13	315	287
-1	3	15	309	-317
3	1	14	806	743
1	5	5	463	-491
-4	2	8	823	809
3	3	10	173	182
3	4	4	156	-69
-4	3	1	394	-407
1	3	15	430	369
4	3	1	451	-430
-1	4	12	90	-17
-2	4	10	1005	974
1	2	17	229	-244
-3	4	5	255	-262
-2	1	17	145	-164
0	5	7	384	-384
4	2	8	348	323
3	2	13	445	457
-1	5	6	298	-310

H	K	L	10FO	10FC
2	4	10	1232	1198
-2	2	16	333	353
4	3	3	246	224
-3	3	11	290	324
0	4	13	156	-190
-4	3	4	108	-82
-3	1	15	278	323
-4	2	9	157	-114
-3	4	6	131	-139
2	2	16	353	365
-2	5	1	756	738
2	5	1	637	609
4	3	4	90	-104
-1	5	7	426	-437
3	3	11	474	-432
-2	5	2	108	95
0	5	8	103	-122
2	5	2	183	100
1	5	7	331	307
-4	3	5	479	484
-2	4	11	191	-204
4	2	9	200	-112
3	1	15	397	-349
-4	0	12	947	1022
2	5	3	351	-342
-3	4	7	511	498
-1	4	13	590	-574
4	3	5	417	420
4	1	11	168	154
2	4	11	178	-193
1	4	13	571	-582
-2	5	4	151	94
1	3	16	158	-162
3	4	7	601	610
-4	2	10	1229	-1205
-3	3	12	651	-640
2	5	4	83	85
-1	5	8	461	-466
1	5	8	730	-744
5	1	0	271	210
0	5	9	360	360
-5	1	1	450	440
-5	0	4	141	-139
5	1	1	491	-410
4	0	12	772	794
-5	1	2	892	918
-2	3	15	384	387
-2	5	5	722	-699

H	K	L	10FO	10FC
0	4	14	608	-593
3	3	12	563	-537
2	5	5	734	-756
4	2	10	1329	-1331
-5	1	3	459	-457
-3	1	16	203	283
-4	3	7	279	285
-2	4	12	126	129
0	3	17	419	401
2	3	15	293	274
5	1	3	445	415
-5	1	4	882	891
-1	5	9	449	457
-3	2	15	299	293
4	3	7	216	237
1	5	9	262	-262
5	1	4	478	424
-5	0	6	92	-95
-3	3	13	255	-279
-3	4	9	544	582
-5	1	5	393	408
-1	3	17	367	326
3	2	15	178	170
-2	5	7	537	-520
1	3	17	267	-289
5	1	5	461	-416
3	4	9	439	473
2	5	7	339	-335
3	3	13	385	376
0	4	15	142	133
-1	5	10	406	-426
1	5	10	167	-133
-5	2	1	219	233
5	2	1	330	313
-4	2	12	323	-292
-4	3	9	151	-191
5	1	6	486	-496
0	5	11	641	616
-4	0	14	463	-504
-3	1	17	273	-319
-5	2	3	450	482
-5	1	7	406	-383
2	5	8	163	-93
-1	4	15	373	-330
-5	0	8	109	81
3	4	10	85	60
-3	3	14	481	-475
5	2	3	443	461

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR LEITITE

H	K	L	10FO	10FC
4	3	9	353	-343
4	4	0	1229	1252
1	4	15	343	-300
-4	4	1	250	-239
4	4	1	254	-212
-4	4	2	142	49
5	1	7	355	375
-1	5	11	218	-190
3	1	17	312	306
4	4	2	338	-346
4	0	14	793	-810
3	5	0	213	197
0	6	0	119	-130
-3	5	1	300	-264
0	6	1	108	-50
3	5	1	466	484
1	5	11	445	445
-2	5	9	220	243
-3	5	2	599	638
-5	1	8	960	-978
3	3	14	550	-540
-5	2	5	186	180
0	6	2	417	-394
3	5	2	393	380
-2	4	14	236	238
2	5	9	519	517
-3	5	3	279	274
-4	4	4	115	56
0	4	16	107	-108
0	6	3	230	289
3	5	3	412	-416
-2	3	17	410	394
4	4	4	295	-325
3	4	11	142	-161
5	1	8	928	-962
-3	5	4	127	122
1	6	0	204	-83
0	6	4	554	560
-1	6	1	498	496
1	6	1	458	453
-4	4	5	180	-130
3	5	4	323	329
-1	6	2	142	-46
-5	1	9	396	394
2	3	17	400	356
-3	3	15	391	351
-1	5	12	524	533

H	K	L	10FO	10FC
4	4	5	86	-107
-3	5	5	368	-405
-4	3	11	397	-404
-1	6	3	855	825
1	5	12	247	250
1	6	3	831	820
0	6	5	189	-178
-5	2	7	328	-323
3	5	5	282	246
-4	4	6	1004	-1033
-3	4	12	130	-9
-1	6	4	123	72
5	1	9	290	-333
1	6	4	164	76
3	3	15	225	-242
4	4	6	801	-854
4	3	11	293	-299
-4	2	14	233	-221
5	2	7	404	-361
3	2	17	256	-234
-5	1	10	618	-634
3	5	6	266	-293
-1	6	5	186	166
-4	4	7	201	200
1	6	5	220	205
-2	5	11	605	584
5	3	0	338	-325
-5	3	1	287	310
-4	0	16	301	-308
5	3	1	467	-440
-3	5	7	298	249
-1	5	13	175	202
-5	3	2	576	-634
4	4	7	129	175
2	5	11	581	563
5	3	2	743	-698
0	6	7	97	71
4	2	14	171	154
1	5	13	343	-324
-1	6	6	173	101
-5	3	3	300	-316
5	2	8	199	-145
5	1	10	201	-202
-3	3	16	197	-187
3	5	7	327	-361
1	6	6	141	110
-3	4	13	467	-464

H	K	L	10FO	10FC
5	3	3	399	400
-1	4	17	221	205
-5	2	9	382	-396
-5	3	4	408	-433
-5	1	11	288	-320
1	4	17	256	253
2	6	0	710	-726
-3	5	8	559	-592
4	0	16	256	-282
-2	6	1	228	288
2	6	1	235	318
5	3	4	250	-260
4	4	8	351	387
3	4	13	517	-511
-1	6	7	645	-639
-2	6	2	199	195
0	6	8	368	361
-2	4	16	634	-599
1	6	7	575	-600
2	6	2	281	296
-5	3	5	348	383
3	5	8	261	-269
5	2	9	299	-318
-2	6	3	98	-32
2	6	3	88	-23
5	3	5	273	-275
5	1	11	331	331
-1	5	14	221	242
2	4	16	742	-695
-2	6	4	144	-126
-5	3	6	149	-165
1	5	14	436	434
-3	5	9	199	-195
1	6	8	86	-103
-5	1	12	443	456
0	6	9	213	-274
5	3	6	453	491
-2	6	5	156	185
-3	3	17	185	-219
3	5	9	314	351
2	6	5	140	121
-5	3	7	292	-282
0	5	15	404	-379
-4	4	10	230	234
-2	5	13	268	217
-4	2	16	810	796
-2	6	6	541	533

H	K	L	10FO	10FC
-1	6	9	614	-618
5	1	12	681	702
5	3	7	295	332
1	6	9	596	-594
3	3	17	273	237
2	6	6	481	480
6	0	0	532	511
4	4	10	391	394
0	6	10	611	-585
-6	0	2	944	895
-1	5	15	346	-328
-5	3	8	633	683
3	5	10	228	-253
6	0	2	226	230
-5	1	13	240	250
1	5	15	170	140
-4	5	1	672	692
4	5	1	502	471
-3	4	15	348	-321
-2	6	7	197	-252
-4	5	2	184	86
4	2	16	866	791
4	5	2	137	124
2	6	7	152	-258
-6	0	4	531	-528
5	3	8	482	495
4	5	3	235	-232
6	1	2	93	158
-3	5	11	317	365
-6	1	3	126	122
6	0	4	1098	-1158
-5	3	9	188	228
3	4	15	204	-210
-4	5	4	109	106
0	6	11	205	214
6	1	3	189	-183
5	1	13	286	-292
-2	6	8	147	-137
4	5	4	154	71
-4	3	15	236	237
3	5	11	162	-130
2	6	8	231	-238
-4	5	5	578	-585
-6	0	6	434	-423
5	4	0	123	80
-5	4	1	171	-189

H	K	L	10FO	10FC
5	3	9	302	-336
-5	1	14	584	629
5	4	1	394	-396
-4	4	12	778	737
-1	5	16	175	153
4	5	5	676	-721
-1	6	11	93	108
-3	6	1	307	324
-5	3	10	326	314
3	6	1	376	357
-5	4	3	518	-541
-4	5	6	107	-72
-3	5	12	154	187
6	0	6	172	-156
-3	6	2	108	-75
6	1	5	99	-85
4	3	15	327	327
5	4	3	508	-507
-6	1	6	112	-75
-5	2	13	304	300
-3	6	3	608	612
4	4	12	552	557
-2	5	15	339	-318
3	6	3	587	597
-6	2	1	206	105
3	5	12	425	441
6	2	1	174	97
5	1	14	508	555
-3	6	4	109	86
-6	2	2	166	-119
-4	5	7	485	-505
-5	4	5	212	-232
0	5	17	414	-372
2	5	15	514	-492
6	2	2	296	332
-6	0	8	689	-705
-5	3	11	307	-323
4	5	7	212	-219
-3	6	5	111	147
5	2	13	317	302
-5	1	15	271	-270
0	7	1	515	-505
3	6	5	110	82
-3	5	13	312	-285
0	7	2	132	-67
6	2	4	359	386