AM-93-524

The crystal structure of spangolite, a complex copper sulfate sheet mineral

Frank C. Hawthorne, Mitsuyoshi Kimata, Raymond K. Eby

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 78, 5-6, 649-652.

Table 4. Anisotropic displacement factors for spangolite.

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cu1	132(6)	113(5)	204(7)	14(4)	14(4)	66(5)
Cu2	121(6)	109(6)	178(6)	2(4)	-11(4)	56(4)
S	363(17)	363(17)	122(16)	0	0	181(8)
Cl	325(16)	325(16)	389(25)	0	0	163(8)
Al	113(11)	113(11)	140(21)	0	0	57(6)
O1	463(60)	1042(99)	227(40)	21(50)	56(41)	394(67)
O2	279(40)	279(40)	76(41)	0	0	140(20)
O3	103(31)	164(32)	159(28)	24(25)	14(24)	49(27)
O4	157(32)	146(34)	166(29)	-16(24)	-2(27)	105(29)
O5	189(38)	177(37)	116(31)	5(23)	-22(24)	97(30)
O6	71(32)	120(33)	226(37)	-3(24)	-2(24)	46(26)
O7A	-	-	-	-	-	-
O7B	-	-	-	-	-	-

Table 4. Selected interatomic distances (Å) 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}
T(1)-O(1)	1.635(14)	1.614(15)	1.637(20)	1.603(18)	1.616(20)	1.643(22)	1.622(12)	1.630(17)	1.638(23)	1.616(21)	1.624(29)
T(1)-O(5)	1.578(17)	1.646(18)	1.599(20)	1.611(19)	1.624(20)	1.641(21)	1.618(14)	1.618(19)	1.587(25)	1.622(24)	1.627(31)
T(1)-O(6)	1.647(21)	1.627(22)	1.627(22)	1.616(25)	1.639(27)	1.626(29)	1.619(18)	1.614(25)	1.661(35)	1.585(33)	1.613(43)
T(1)-O(7)	1.627(8)	1.617(9)	1.629(11)	1.641(10)	1.641(11)	1.636(12)	1.638(7)	1.634(10)	1.631(12)	1.669(13)	1.668(17)
⟨T(1)-O⟩	1.622(8)	1.626(8)	1.623(9)	1.618(9)	1.630(10)	1.637(11)	1.624(7)	1.624(9)	1.629(12)	1.623(12)	1.633(16)
T(2)-O(2)	1.658(16)	1.650(18)	1.632(20)	1.651(20)	1.650(23)	1.629(25)	1.623(14)	1.627(20)	1.661(26)	1.652(22)	1.648(31)
T(2)-O(4)	1.576(14)	1.612(14)	1.585(18)	1.567(16)	1.637(22)	1.550(19)	1.586(11)	1.573(16)	1.568(21)	1.535(22)	1.467(29)
T(2)-O(5)	1.666(21)	1.660(22)	1.688(21)	1.689(24)	1.542(18)	1.696(28)	1.673(18)	1.687(25)	1.689(32)	1.677(30)	1.678(39)
T(2)-O(6)	1.645(18)	1.646(19)	1.661(19)	1.645(21)	1.682(26)	1.639(25)	1.661(16)	1.654(22)	1.647(29)	1.698(28)	1.703(37)
⟨T(2)-O⟩	1.636(9)	1.642(9)	1.642(10)	1.638(10)	1.628(11)	1.629(12)	1.636(7)	1.635(10)	1.641(14)	1.641(13)	1.624(17)
M(1)-O(1) ×2	2.068(15)	2.080(16)	2.093(20)	2.073(19)	2.058(20)	2.054(22)	2.077(14)	2.120(18)	2.134(25)	2.085(23)	2.055(30)
M(1)-O(2) ×2	2.033(20)	2.056(21)	2.042(18)	2.059(21)	2.066(23)	2.050(25)	2.066(17)	2.083(22)	2.044(28)	2.070(28)	2.088(36)
M(1)-O(3) ×2	2.123(15)	2.094(15)	2.121(16)	2.103(16)	2.091(18)	2.089(19)	2.120(13)	2.107(16)	2.086(20)	2.111(20)	2.143(28)
⟨M(1)-O⟩	2.075(7)	2.077(7)	2.085(7)	2.078(8)	2.072(8)	2.064(9)	2.088(6)	2.103(8)	2.088(10)	2.089(10)	2.095(13)
M(2)-O(1) ×2	2.137(16)	2.121(17)	2.095(18)	2.119(18)	2.096(20)	2.079(22)	2.131(14)	2.113(18)	2.106(24)	2.113(24)	2.143(31)
M(2)-O(2) ×2	2.102(18)	2.078(20)	2.094(22)	2.086(22)	2.073(23)	2.055(25)	2.113(16)	2.110(22)	2.114(29)	2.174(27)	2.166(34)
M(2)-O(4) ×2	2.059(18)	2.042(19)	2.046(18)	2.068(20)	2.063(23)	2.075(22)	2.037(16)	2.079(20)	2.088(26)	2.095(27)	2.102(36)
⟨M(2)-O⟩	2.099(7)	2.080(8)	2.078(8)	2.091(8)	2.077(9)	2.070(9)	2.094(6)	2.101(8)	2.103(11)	2.127(11)	2.137(14)
M(3)-O(1) ×4	2.083(15)	2.102(17)	2.075(17)	2.095(19)	2.069(21)	2.072(22)	2.095(14)	2.079(19)	2.135(25)	2.098(25)	2.102(32)
M(3)-O(3) ×2	2.027(23)	2.083(25)	2.020(27)	2.037(27)	2.040(30)	2.065(32)	2.070(21)	2.075(28)	2.038(35)	1.994(35)	2.028(46)
⟨M(3)-O⟩	2.064(7)	2.096(8)	2.057(8)	2.076(9)	2.059(10)	2.070(10)	2.087(7)	2.078(9)	2.103(12)	2.063(12)	2.077(15)

Table 4. (continued)

	KNi_0	KNi_{20}	KNi_{40}	KNi_{60}	KNi_{80}	KNi_{100}	KCo_{20}	KCo_{40}	KCo_{60}	KCo_{80}	KCo_{100}
M(4)–O(2) ×2	2.343(19)	2.343(21)	2.345(17)	2.321(23)	2.350(25)	2.374(27)	2.361(17)	2.329(23)	2.262(30)	2.351(30)	2.355(40)
M(4)–O(4) ×2	2.397(21)	2.357(22)	2.404(23)	2.390(22)	2.367(24)	2.337(25)	2.382(19)	2.354(24)	2.362(30)	2.334(28)	2.334(37)
M(4)–O(5) ×2	2.895(21)	2.844(23)	2.842(24)	2.844(25)	2.837(26)	2.776(28)	2.867(19)	2.830(25)	2.865(32)	2.834(31)	2.847(41)
M(4)–O(6) ×2	2.668(18)	2.656(18)	2.674(20)	2.676(22)	2.703(25)	2.684(26)	2.663(17)	2.642(23)	2.704(30)	2.648(28)	2.697(38)
⟨M(4)–O⟩	2.576(7)	2.550(7)	2.566(7)	2.558(8)	2.564(9)	2.543(9)	2.568(6)	2.539(8)	2.548(11)	2.542(10)	2.558(14)