

AM-92-505

Crystal chemistry of vesuvianite: Site preferences of square-pyramidal coordinated sites

Makio Ohkawa, Akira Yoshiasa, Setsuo Takeno

For deposit: Tables 5, 6, and 7

American Mineralogist, 77, 9-10, 945-953, pp 33-39, 1-53

Table 5. Anisotropic thermal parameters ($\times 10^5$) for vesuvianites

1 Sauland (Cu-vesuvianite)

Atom	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ca1	134(5)	98(5)	155(9)	0	0	0
Ca2	60(2)	85(2)	104(4)	9(2)	-5(3)	0(3)
Ca3	85(3)	80(3)	259(5)	15(2)	-42(3)	-24(3)
C	74(6)	74	224(20)	0	0	0
B	45(7)	45	476(27)	0	0	0
AlFe	51(6)	59(6)	89(11)	-4(3)	9(4)	-2(4)
A	59(5)	49(5)	146(8)	-2(4)	3(5)	12(5)
Si1	55(4)	55	97(11)	0	0	0
Si2	48(3)	57(3)	91(6)	3(5)	-3(3)	5(3)
Si3	100(3)	51(3)	84(6)	0(3)	4(3)	-2(3)
O1	91(8)	63(8)	100(14)	1(7)	6(9)	6(9)
O2	74(8)	74(8)	152(15)	-3(7)	-40(9)	9(9)
O3	81(8)	58(8)	99(14)	6(7)	-10(9)	-2(9)
O4	79(9)	63(8)	109(15)	7(7)	-6(9)	7(9)
O5	78(9)	118(9)	147(15)	36(7)	16(10)	11(10)
O6	229(11)	85(9)	156(16)	32(8)	18(11)	35(10)
O7	83(9)	131(10)	162(15)	17(7)	17(10)	25(10)
O8	68(8)	73(8)	138(15)	8(7)	23(9)	9(9)
O9	98(7)	98	107(19)	-15(10)	-4(10)	4
O10	157(15)	157	464(42)	0	0	0
O11	106(9)	102(9)	148(16)	-3(7)	-11(9)	-3(8)

Table 5. (cont.)

2 Sanpo

Atom	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ca1	118(5)	66(5)	103(8)	0	0	0
Ca2	59(2)	84(2)	131(5)	7(2)	-7(3)	1(3)
Ca3	93(3)	88(3)	277(5)	19(2)	-47(3)	-22(3)
C	87(7)	87	394(24)	0	0	0
B	60(5)	60	833(28)	0	0	0
AlFe	76(3)	60(3)	109(6)	-8(2)	18(3)	-6(3)
A	48(5)	35(5)	124(8)	6(4)	2(5)	7(5)
Si1	59(4)	59	91(11)	0	0	0
Si2	50(3)	57(3)	117(6)	1(3)	-4(3)	6(3)
Si3	99(3)	46(3)	105(6)	-3(3)	5(3)	-4(3)
O1	103(9)	68(8)	134(15)	8(7)	-2(10)	10(9)
O2	83(8)	78(9)	174(16)	-7(7)	-31(9)	0(9)
O3	90(8)	57(8)	137(15)	-4(7)	-2(9)	-5(9)
O4	84(9)	61(8)	140(16)	1(7)	-9(9)	12(9)
O5	75(8)	119(9)	156(16)	36(7)	15(9)	-10(10)
O6	222(11)	81(9)	185(16)	37(8)	27(11)	42(10)
O7	70(8)	112(9)	178(16)	9(7)	-1(10)	11(10)
O8	62(8)	73(8)	168(16)	4(7)	23(9)	9(9)
O9	124(8)	124	115(20)	-26(11)	-6(11)	6
O10	63	63	1966(81)	0	0	0
O11	54(8)	79(8)	91(14)	-9(7)	-5(9)	-6(9)

Table 5. (cont.)

3 Jinmu

Atom	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ca1	119(7)	76(7)	122(11)	0	0	0
Ca2	63(3)	84(3)	123(6)	5(2)	-9(4)	3(4)
Ca3	91(3)	86(3)	285(7)	15(3)	-41(4)	-27(4)
C	91(9)	91	329(30)	0	0	0
B	75(7)	75	847(36)	0	0	0
AlFe	63(4)	63(4)	107(8)	-1(3)	5(5)	2(4)
A	49(6)	63(6)	141(11)	2(6)	-8(7)	6(8)
Si1	64(5)	64	117(15)	0	0	0
Si2	57(4)	63(4)	110(7)	0(3)	-3(5)	4(5)
Si3	94(4)	46(4)	112(7)	1(4)	5(5)	1(5)
O1	121(11)	63(10)	122(19)	-6(10)	-3(13)	-2(13)
O2	85(11)	89(11)	153(21)	1(9)	-20(13)	12(13)
O3	83(11)	64(10)	153(19)	11(9)	6(13)	12(13)
O4	90(11)	58(11)	141(21)	7(9)	-6(12)	3(13)
O5	74(11)	102(12)	212(22)	25(10)	6(13)	-10(14)
O6	204(13)	88(12)	162(21)	24(10)	24(15)	35(13)
O7	79(11)	154(13)	225(22)	32(10)	29(14)	55(15)
O8	49(10)	75(11)	178(20)	-2(9)	19(12)	3(13)
O9	121(10)	121	127(26)	-26(15)	-6(14)	6
O10	108(19)	108	1501(104)	0	0	0
O11	121(12)	117(12)	195(22)	-17(9)	5(13)	-25(12)

Table 5. (cont.)

4 Chichibu

Atom	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ca1	178(13)	127(12)	190(20)	0	0	0
Ca2	133(6)	156(6)	236(11)	8(5)	-0(7)	3(7)
Ca3	170(7)	198(7)	598(17)	24(6)	-86(8)	-104(9)
C	131(15)	131	399(52)	0	0	0
B	104(18)	104	377(55)	0	0	0
AlFe	136(10)	132(10)	221(17)	4(7)	15(10)	2(9)
A	144(13)	132(12)	188(19)	6(10)	-7(14)	11(14)
Si1	129(10)	129	160(28)	0	0	0
Si2	128(8)	139(9)	224(15)	5(7)	9(9)	7(9)
Si3	188(9)	118(8)	215(15)	10(7)	-12(9)	-0(9)
O1	172(22)	162(22)	175(37)	-8(18)	24(24)	6(23)
O2	186(23)	155(23)	309(43)	-5(19)	-70(26)	-0(25)
O3	163(23)	139(21)	201(36)	-14(18)	5(27)	2(27)
O4	140(22)	139(21)	268(42)	4(18)	-13(24)	-7(24)
O5	147(22)	220(25)	276(41)	40(19)	7(25)	-23(27)
O6	307(28)	163(24)	291(42)	10(21)	21(29)	0(25)
O7	116(21)	259(26)	360(44)	7(19)	2(26)	11(29)
O8	132(21)	171(22)	323(42)	12(18)	29(24)	37(25)
O9	209(20)	209	219(52)	-16(28)	-23(27)	23
O10	220(31)	220	662(112)	0	0	0
O11	183(23)	144(21)	240(37)	-2(19)	28(25)	-44(24)

Table 6. Cation-oxygen interatomic distances (\AA)

	1 Sauland	2 Sanpo	3 Jinmu	4 Chichibu
Ca1 - O1 x4	2.328(2)	2.336(2)	2.325(4)	2.340(6)
O2 x4	2.523(2)	2.531(2)	2.521(3)	2.515(5)
mean	2.426	2.434	2.423	2.427
Ca2 - O1	2.484(2)	2.493(2)	2.488(3)	2.469(5)
O2	2.422(2)	2.441(2)	2.429(3)	2.420(5)
O3	2.378(2)	2.377(2)	2.378(4)	2.377(6)
O4	2.446(2)	2.461(2)	2.453(3)	2.445(5)
O5	2.433(3)	2.427(3)	2.422(5)	2.450(6)
O5	2.331(2)	2.346(2)	2.341(4)	2.329(5)
O6	2.928(2)	2.921(2)	2.929(4)	3.001(6)
O8	2.321(2)	2.332(2)	2.333(3)	2.328(5)
mean	2.468	2.475	2.472	2.477
Ca3 - O3	2.455(2)	2.442(2)	2.441(4)	2.424(5)
O6	2.473(2)	2.537(2)	2.483(4)	2.450(6)
O6	2.969(2)	3.045(2)	2.984(4)	2.925(6)
O7	2.568(3)	2.543(3)	2.565(5)	2.605(7)
O7	2.507(2)	2.503(2)	2.536(4)	2.541(6)
O7	2.361(2)	2.369(2)	2.375(3)	2.396(5)
O8	2.595(2)	2.612(2)	2.591(4)	2.602(6)
O10	2.558(3)	2.644(2)	2.596(5)	2.559(7)
O11	2.475(2)	2.438(2)	2.466(3)	2.509(5)
mean	2.551	2.570	2.560	2.557

Table 6. (cont.)

C -	06 x4	2.288(3)	2.270(3)	2.303(4)	2.298(7)
	09 x4	2.633(3)	2.697(3)	2.654(4)	2.602(6)
	mean	2.461	2.484	2.478	2.450
B -	06 x4	2.063(3)	2.087(2)	2.087(4)	2.038(7)
	010	2.199(6)	2.423(11)	2.278(14)	2.020(15)
	mean	2.090	2.154	2.125	2.034
AlFe	-01	1.896(2)	1.947(2)	1.923(3)	1.925(5)
	02	1.886(3)	1.915(3)	1.901(4)	1.922(6)
	03	1.935(2)	1.968(2)	1.958(3)	1.966(5)
	04	2.055(3)	2.077(2)	2.068(4)	2.070(6)
	05	1.965(2)	1.989(2)	1.982(3)	2.004(5)
	011	1.908(2)	1.919(2)	1.934(3)	1.937(5)
	mean	1.941	1.969	1.961	1.971
A	-04 x2	1.942(2)	1.944(2)	1.950(3)	1.933(5)
	08 x2	1.865(2)	1.874(2)	1.871(3)	1.872(5)
	011 x2	1.876(3)	1.872(2)	1.871(4)	1.870(6)
	mean	1.894	1.897	1.897	1.892
Si1 -	01 x4	1.643(2)	1.638(2)	1.643(3)	1.631(5)

Table 6. (cont.)

Si2 - 02	1.642(2)	1.645(2)	1.648(3)	1.630(5)
03	1.640(2)	1.641(2)	1.645(3)	1.634(5)
04	1.682(2)	1.681(2)	1.676(3)	1.675(5)
07	1.615(2)	1.615(2)	1.620(3)	1.628(5)
mean	1.645	1.645	1.647	1.642
Si3 - 05	1.637(2)	1.637(2)	1.637(3)	1.623(5)
06	1.604(2)	1.609(2)	1.608(3)	1.612(5)
08	1.621(2)	1.627(2)	1.625(3)	1.625(5)
09	1.659(3)	1.659(3)	1.664(4)	1.655(6)
mean	1.630	1.633	1.633	1.629
010-010	2.772(10)	2.400(20)	2.656(25)	2.737(27)