

AM-93-536

The OH-F substitution in Ti-rich potassium richterite: Rietveld structure refinement and FTIR and micro-Raman spectroscopic studies of synthetic amphiboles in the system  $K_2O-Na_2O-CaO-MgO-SiO_2-TiO_2-H_2O-HF$

Giancarlo Della Ventura, Jean-Louis Robert, Jean-Michel Beny, Mati Raudsepp,  
Frank C. Hawthorne

For deposit: Tables 4-6

American Mineralogist, 78, 9-10, 982-989.



**Table 4.** Atomic positions: Ti-rich potassium-richterites

		rich <sub>58</sub>	rich <sub>59</sub>	rich <sub>60</sub>	rich <sub>61</sub>	rich <sub>62</sub>	rich <sub>63</sub>
O(1)	<i>x</i>	0.1113(12)	0.1134(13)	0.1135(13)	0.1118(13)	0.1104(14)	0.1125(14)
	<i>y</i>	0.0878(6)	0.0887(7)	0.0887(6)	0.0888(6)	0.0886(7)	0.0882(7)
	<i>z</i>	0.2141(22)	0.2197(26)	0.2173(26)	0.2130(24)	0.2162(26)	0.2203(27)
O(2)	<i>x</i>	0.1163(15)	0.1164(16)	0.1125(16)	0.1153(17)	0.1168(17)	0.1137(17)
	<i>y</i>	0.1713(6)	0.1720(7)	0.1700(7)	0.1700(7)	0.1697(7)	0.1701(7)
	<i>z</i>	0.7245(24)	0.7240(29)	0.7254(28)	0.7255(27)	0.7248(28)	0.7246(30)
O(3)	<i>x</i>	0.1063(15)	0.1072(17)	0.1044(16)	0.1040(16)	0.1025(17)	0.1001(18)
	<i>y</i>	0	0	0	0	0	0
	<i>z</i>	0.7174(36)	0.7188(41)	0.7149(40)	0.7163(38)	0.7164(39)	0.7177(41)
O(4)	<i>x</i>	0.3548(14)	0.3562(16)	0.3545(15)	0.3546(15)	0.3563(17)	0.3550(17)
	<i>y</i>	0.2474(6)	0.2480(7)	0.2467(7)	0.2472(6)	0.2470(7)	0.2482(7)
	<i>z</i>	0.7939(32)	0.7931(37)	0.7892(36)	0.7920(34)	0.7933(35)	0.7925(37)
O(5)	<i>x</i>	0.3398(15)	0.3357(16)	0.3375(16)	0.3383(16)	0.3361(16)	0.3367(17)
	<i>y</i>	0.1293(6)	0.1288(6)	0.1285(6)	0.1281(6)	0.1294(7)	0.1295(7)
	<i>z</i>	0.0980(31)	0.0945(34)	0.0953(33)	0.0957(31)	0.0948(33)	0.0920(35)
O(6)	<i>x</i>	0.3363(14)	0.3387(15)	0.3375(16)	0.3383(15)	0.3361(16)	0.3367(17)
	<i>y</i>	0.1162(6)	0.1152(7)	0.1158(7)	0.1160(6)	0.1166(7)	0.1167(7)
	<i>z</i>	0.5859(27)	0.5893(30)	0.5893(30)	0.5918(29)	0.5897(31)	0.5938(33)
O(7)	<i>x</i>	0.3304(17)	0.3296(18)	0.3316(18)	0.3326(18)	0.3340(19)	0.3329(19)
	<i>y</i>	0	0	0	0	0	0
	<i>z</i>	0.3071(39)	0.3115(45)	0.3146(44)	0.3105(42)	0.3196(43)	0.3141(45)
T(1)	<i>x</i>	0.2830(8)	0.2766(8)	0.2780(8)	0.2772(8)	0.2764(8)	0.2787(9)
	<i>y</i>	0.0850(3)	0.0853(4)	0.0857(4)	0.0856(3)	0.0846(4)	0.0852(4)
	<i>z</i>	0.3023(14)	0.3035(17)	0.2982(17)	0.2999(15)	0.2985(16)	0.3036(18)
T(2)	<i>x</i>	0.2830(8)	0.2843(8)	0.2827(9)	0.2844(9)	0.2815(9)	0.2832(10)
	<i>y</i>	0.1708(3)	0.1712(4)	0.1704(4)	0.1706(4)	0.1704(4)	0.1702(4)
	<i>z</i>	0.8091(15)	0.8103(16)	0.8111(16)	0.8118(15)	0.8102(17)	0.8066(18)

**Table 4.** (continued)

		rich <sub>58</sub>	rich <sub>59</sub>	rich <sub>60</sub>	rich <sub>61</sub>	rich <sub>62</sub>	rich <sub>63</sub>
M(1)	<i>x</i>	0	0	0	0	0	0
	<i>y</i>	0.0897(6)	0.0891(6)	0.0906(6)	0.0900(6)	0.0903(6)	0.0900(7)
	<i>z</i>	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
M(2)	<i>x</i>	0	0	0	0	0	0
	<i>y</i>	0.1797(6)	0.1789(6)	0.1785(6)	0.1789(6)	0.1796(6)	0.1796(7)
	<i>z</i>	0	0	0	0	0	0
M(3)	<i>x</i>	0	0	0	0	0	0
	<i>y</i>	0	0	0	0	0	0
	<i>z</i>	0	0	0	0	0	0
M(4)	<i>x</i>	0	0	0	0	0	0
	<i>y</i>	0.2770(4)	0.2768(5)	0.2763(5)	0.2762(5)	0.2757(5)	0.2765(5)
	<i>z</i>	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
A	<i>x</i>	0.0179(23)	0.0198(23)	0.0252(20)	0.0263(19)	0.0250(21)	0.0233(23)
	<i>y</i>	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
	<i>z</i>	0.0427(50)	0.0538(48)	0.0503(51)	0.0578(44)	0.0576(46)	0.0518(53)

Note: Isotropic displacement factors,  $B$  ( $\text{\AA}^2$ ): O(1)=O(2)=O(3)=O(4)=0.8; O(5)=O(6)=1.1; O(7)=1.2; T(1)=T(2)=0.4; M(1)=M(2)=M(3)=0.6; M(4)=0.90; A=2.3