

7194

Bottinoite, $\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6[\text{Sb}(\text{OH})_6]_2$: Crystal structure, twinning and hydrogen-bond model

Paola Bonazzi and Fiorenzo Mazzi

For deposit: Tables 4 and 5

81 November-December 1996

1494-1500

AM-96-628

ND 96

Bonazzi + Mazzi

Tables 4+5

MSNO. 7194

Table 4. Anisotropic displacement parameters for synthetic (a) and natural (b) bottinoite.

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{12}	U_{13}	U_{23}
a)						
Sb1	0.017(1)	0.017(1)	0.003(1)	0.008(1)	0.0	0.0
Sb2	0.010(1)	0.010(1)	0.006(1)	0.005(1)	0.0	0.0
Sb3	0.005(1)	0.005(1)	0.042(1)	0.002(1)	0.0	0.0
Ni1	0.010(1)	0.005(1)	0.031(1)	0.004(1)	0.000(1)	-0.003(1)
Ni2	0.013(1)	0.020(1)	0.001(1)	0.009(1)	-0.001(1)	-0.004(1)
O1	0.028(8)	0.005(5)	0.058(9)	0.010(6)	-0.007(8)	0.005(6)
O2	0.021(7)	0.046(9)	0.001(5)	0.003(2)	-0.004(5)	0.004(6)
O3	0.018(7)	0.012(7)	0.042(8)	-0.005(6)	-0.015(6)	-0.013(6)
O4	0.015(6)	0.023(7)	0.006(5)	0.011(6)	-0.008(4)	-0.002(5)
O5	0.017(6)	0.019(6)	0.007(5)	0.010(5)	-0.004(4)	-0.002(5)
O6	0.025(7)	0.011(5)	0.022(6)	0.017(5)	-0.001(5)	-0.001(5)
O7	0.043(9)	0.021(6)	0.030(7)	0.028(7)	-0.009(7)	0.000(5)
O8	0.027(7)	0.029(7)	0.004(4)	0.018(6)	-0.002(4)	-0.005(5)
O9	0.012(6)	0.011(6)	0.050(9)	0.006(5)	0.009(6)	-0.014(6)
O10	0.020(8)	0.020(8)	0.015(6)	0.009(6)	-0.005(5)	0.003(6)
O11	0.031(8)	0.007(5)	0.015(6)	0.014(6)	-0.011(6)	-0.008(5)
O12	0.031(8)	0.039(9)	0.021(7)	0.027(8)	-0.024(6)	-0.016(7)
O13	0.022(8)	0.057(9)	0.006(5)	0.021(8)	0.011(6)	0.008(7)
O14	0.013(7)	0.013(6)	0.015(6)	0.006(5)	0.003(5)	0.014(5)
O15	0.026(8)	0.027(9)	0.012(6)	0.005(7)	0.000(6)	0.018(6)
O16	0.015(8)	0.054(9)	0.048(9)	0.026(8)	0.009(8)	0.034(9)
O17	0.013(5)	0.040(7)	0.007(4)	0.000(5)	0.003(4)	0.003(5)
O18	0.003(4)	0.027(7)	0.045(8)	-0.004(4)	-0.009(5)	-0.009(6)

Table 4 (i)

Sb4	0.014(1)	0.014(1)	0.002(1)	0.007(1)	0.0	0.0
Sb5	0.010(1)	0.010(1)	0.018(1)	0.005(1)	0.0	0.0
Sb6	0.008(1)	0.008(1)	0.018(1)	0.004(1)	0.0	0.0
Sb7	0.008(1)	0.009(1)	0.018(1)	0.003(1)	0.001(1)	0.003(1)
Sb8	0.014(1)	0.014(1)	0.002(1)	0.008(1)	-0.001(1)	0.000(1)
O19	0.029(8)	0.010(6)	0.031(7)	0.009(6)	0.002(6)	0.006(5)
O20	0.018(7)	0.018(7)	0.019(6)	0.005(5)	0.007(5)	0.007(5)
O21	0.005(5)	0.007(5)	0.004(4)	0.001(4)	0.000(4)	0.004(4)
O22	0.025(7)	0.030(8)	0.013(5)	0.024(7)	-0.009(6)	-0.012(6)
O23	0.022(6)	0.006(5)	0.007(5)	0.008(5)	0.005(5)	0.001(4)
O24	0.017(7)	0.014(6)	0.022(6)	-0.004(5)	-0.002(6)	0.006(5)
O25	0.031(7)	0.033(8)	0.018(6)	0.030(7)	-0.011(5)	-0.002(5)
O26	0.012(6)	0.016(6)	0.006(5)	0.010(5)	0.001(4)	-0.002(5)
O27	0.005(5)	0.029(8)	0.017(6)	0.009(6)	0.006(5)	-0.003(6)
O28	0.007(6)	0.020(7)	0.009(5)	0.006(5)	-0.005(5)	0.005(5)
O29	0.020(7)	0.006(5)	0.017(6)	0.011(5)	0.000(5)	-0.003(4)
O30	0.012(6)	0.009(6)	0.017(6)	0.002(5)	0.005(5)	0.007(5)
O31	0.003(5)	0.016(6)	0.007(5)	-0.005(4)	-0.004(4)	0.005(5)
O32	0.018(7)	0.029(9)	0.018(6)	0.013(7)	-0.005(6)	-0.004(6)
O33	0.031(8)	0.014(6)	0.004(4)	0.009(6)	-0.005(5)	0.003(5)
O34	0.022(7)	0.036(9)	0.034(8)	0.023(7)	-0.013(7)	-0.009(7)
O35	0.004(4)	0.019(6)	0.007(5)	0.004(4)	0.004(4)	-0.002(4)
O36	0.010(6)	0.016(7)	0.024(7)	0.004(6)	-0.006(6)	0.007(6)

b)

Sb1	0.016(1)	0.016(1)	0.005(2)	0.008(1)	0.0	0.0
Sb2	0.008(1)	0.008(1)	0.001(1)	0.004(1)	0.0	0.0
Sb3	0.004(1)	0.004(1)	0.065(1)	0.002(1)	0.0	0.0
Ni1	0.009(2)	0.007(2)	0.036(1)	0.002(2)	-0.001(1)	-0.008(1)
Ni2	0.020(2)	0.036(3)	0.002(1)	0.016(2)	0.006(2)	0.002(2)

Table 4 (ii)

01	0.035(9)	0.004(8)	0.041(9)	0.009(9)	-0.015(9)	-0.006(9)
02	0.040(9)	0.037(9)	0.006(8)	0.019(9)	0.008(8)	-0.004(9)
03	0.016(9)	0.010(9)	0.036(9)	-0.007(9)	-0.013(9)	-0.007(9)
04	0.019(9)	0.015(8)	0.001(7)	0.006(7)	0.000(6)	0.000(6)
05	0.018(9)	0.016(9)	0.007(8)	0.006(8)	0.005(7)	0.003(6)
06	0.025(9)	0.012(9)	0.021(9)	0.017(9)	-0.001(7)	-0.001(7)
07	0.093(9)	0.029(8)	0.032(8)	0.053(9)	0.039(9)	0.015(9)
08	0.046(9)	0.024(7)	0.007(7)	0.024(9)	0.000(8)	-0.004(7)
09	0.024(9)	0.008(8)	0.041(9)	0.005(8)	0.023(9)	0.009(8)
010	0.015(9)	0.015(9)	0.033(9)	0.001(9)	-0.013(9)	0.003(9)
011	0.008(9)	0.004(9)	0.045(9)	-0.003(8)	-0.010(9)	-0.002(9)
012	0.011(9)	0.023(9)	0.039(9)	0.010(9)	-0.006(9)	-0.013(9)
013	0.022(9)	0.057(9)	0.009(9)	0.021(9)	0.011(9)	0.008(9)
014	0.009(9)	0.014(9)	0.019(9)	0.004(8)	-0.005(7)	0.004(7)
015	0.016(8)	0.029(9)	0.016(8)	0.005(9)	0.010(8)	0.019(8)
016	0.015(9)	0.054(9)	0.048(9)	0.026(8)	0.009(8)	0.034(9)
017	0.012(7)	0.026(9)	0.010(7)	0.008(7)	-0.002(6)	-0.002(6)
018	0.018(8)	0.036(9)	0.012(8)	0.008(7)	-0.008(7)	-0.002(7)
Sb4	0.012(1)	0.012(1)	0.011(2)	0.006(1)	0.0	0.0
Sb5	0.015(1)	0.015(1)	0.011(1)	0.007(1)	0.0	0.0
Sb6	0.003(1)	0.003(1)	0.019(1)	0.001(1)	0.0	0.0
Sb7	0.012(1)	0.008(1)	0.020(1)	0.003(1)	0.003(1)	0.002(1)
Sb8	0.014(1)	0.005(1)	0.003(1)	0.000(1)	0.002(1)	0.001(1)
019	0.022(8)	0.005(7)	0.037(9)	0.008(7)	0.011(9)	0.009(7)
020	0.020(9)	0.020(9)	0.020(9)	0.012(8)	0.014(8)	-0.002(8)
021	0.007(7)	0.007(7)	0.006(6)	0.000(6)	0.001(6)	0.004(5)
022	0.023(9)	0.027(9)	0.009(8)	0.018(9)	-0.008(7)	-0.015(7)
023	0.016(8)	0.005(7)	0.012(7)	0.005(7)	0.001(6)	-0.006(6)
024	0.016(9)	0.024(9)	0.044(9)	0.018(9)	0.001(9)	0.008(9)
025	0.026(9)	0.020(9)	0.018(8)	0.018(9)	-0.008(8)	0.006(8)

table 4 (iii)

026	0.010(8)	0.014(9)	0.005(7)	0.007(8)	0.003(6)	-0.004(6)
027	0.005(8)	0.029(9)	0.017(8)	0.009(8)	0.006(7)	-0.003(7)
028	0.014(9)	0.013(9)	0.011(7)	0.013(8)	-0.005(7)	-0.007(7)
029	0.023(9)	0.006(8)	0.024(9)	0.004(8)	0.005(8)	0.003(7)
030	0.009(8)	0.003(8)	0.020(9)	0.000(7)	0.006(7)	0.005(7)
031	0.008(9)	0.020(9)	0.008(7)	0.009(8)	-0.001(7)	0.008(7)
032	0.025(9)	0.031(9)	0.019(9)	0.011(9)	-0.008(9)	0.005(9)
033	0.031(9)	0.014(9)	0.003(7)	0.009(9)	-0.005(7)	0.003(6)
034	0.030(8)	0.021(9)	0.012(7)	0.016(7)	-0.011(7)	-0.005(7)
035	0.018(8)	0.013(9)	0.004(7)	0.003(7)	0.001(6)	0.002(6)
036	0.013(9)	0.015(9)	0.015(7)	0.003(8)	0.001(7)	0.001(8)

Note: the form of the anisotropic displacement factor is
 $\exp[-2\pi^2(h^2a^*{}^2U_{11} + k^2b^*{}^2U_{22} + l^2c^*{}^2U_{33} + 2hka^*b^*U_{12} + 2hla^*c^*U_{13} + 2klb^*c^*U_{23})]$.

Table 4 (iv)