

Acta Crystallographica Section B

**Structural
Science**

ISSN 0108-7681

Editor: **Carolyn P. Brock**

Structure of phuralumite

P. Piret, J. Piret-Meunier and J.-P. Declercq

This electronic document was scanned from an archival copy of material deposited to accompany a paper published in an IUCr journal. In many cases the only accessible copy was a microfilm of a poor-quality original.

34417.34417

Structure of Phuralumite

by PAUL PIRET, JACQUELINE PIRET-MEUNIER AND JEAN-PAUL DECLERCK

Laboratoire de Chimie Physique et de Cristallographie,
 Université de Louvain, 1, place Louis Pasteur, B 1348 Louvain-
 la-Neuve, Belgium.

Abstract. $Al_2[(UO_2)_2(PO_4)_2(OH)_2](OH)_4 \cdot 10 H_2O$ (a mineral from Kobokobo, Kivu, Zaïre), monoclinic, $P2_1/a$, $a = 13.836(6)$, $b = 20.918(6)$, $c = 9.428(3)$ Å, $\beta = 112.44(3)^\circ$, $Z = 4$, $V = 2522$ Å³, $D_m = 3.5$, $D_x = 3.52$ g cm⁻³. Structure type: phosphuranylite. The $[(UO_2)_2(PO_4)_2(OH)_2]_n^{2n-}$ layers are connected principally by Al_2O_4 groups, composed by two octahedra and two trigonal bipyramids sharing edges.

Amurakumite

	0,0,L	1,1,L	2,2,L	3,3,L	4,4,L	5,5,L	6,6,L	7,7,L	8,8,L	9,9,L	0,10,L	0,11,L	0,12,L	0,13,L	0,14,L	0,15,L	0,16,L	0,17,L	0,18,L	0,19,L	0,20,L	0,21,L	0,22,L	0,23,L				
1	1145	1067	1338	1361	1382	-711	0,11,L	1	2635	-2508	1	1193	-1034	1	934	962	1	1520	-1658	0	1520	-1658	1	684	-522	0,21,L		
2	945	1010	-2179	2317	329*	-371	0,12,L	2	1337	-246	2	136*	-246	2	2692	2939	2	684	-522	2	1161	-1102	1	414*	-392	1	414*	-392
3	911	-675	-2483	2529	1462	1341	0,13,L	3	1699	-1637	3	185*	-333	3	698	627	3	2289	-2306	3	2289	-2306	2	2360	2447	2	2360	2447
4	5178	-5652	0,4,L	0,4,L	256*	248	0,14,L	4	159*	82	4	3336	-3260	4	944	890	4	511	365	4	511	365	3	442*	-230	3	442*	-230
5	1483	1547	0,4,L	0,4,L	340*	208	0,15,L	5	620	558	5	1271	1028	5	460*	500	5	245*	-190	5	245*	-190	4	463*	355	4	463*	355
6	300*	250	0,4,L	0,4,L	1562	-1493	0,16,L	6	677	-697	6	1044	959	6	320*	238	6	1853	1706	6	1853	1706	7	2701	2464	7	2701	2464
7	1859	-1945	0,4,L	0,4,L	1405	-1359	0,17,L	7	618	-548	7	506	494	7	820	753	7	2701	2464	7	2701	2464	0	1528	1647	0	1528	1647
8	535	698	0,4,L	0,4,L	0,8,L	0,8,L	0,18,L	8	1274	-1154	8	1419	1416	8	966	902	8	1423	1313	8	1423	1313	1	576	-537	1	576	-537
9	3410	-3357	0,4,L	0,4,L	3142	3424	0,19,L	9	1274	-1154	9	1293	-1261	9	139*	172	9	1423	1313	9	1423	1313	2	488*	295	2	488*	295
1	2573	2859	0,5,L	0,5,L	852	-881	0,20,L	0	3142	3424	0	1483	1557	0	1483	1557	0	1483	1557	0	1483	1557	3	1385	1436	3	1385	1436
2	1830	-1866	0,5,L	0,5,L	185*	-333	0,21,L	1	852	-881	1	665	674	1	1698	1725	1	934	962	1	934	962	4	944	890	4	944	890
3	203*	-55	0,5,L	0,5,L	697	-679	0,22,L	2	185*	-333	2	2162	2073	2	3866	3432	2	934	962	2	934	962	5	1244	1331	5	1244	1331
4	4604	-4642	0,5,L	0,5,L	697	-679	0,23,L	3	697	-679	3	845	-808	3	1253	1109	3	934	962	3	934	962	6	173*	131	6	173*	131
5	6193	-6833	0,5,L	0,5,L	3336	-3260	0,24,L	4	3336	-3260	4	1975	-1400	4	1111	1116	4	934	962	4	934	962	7	2701	2464	7	2701	2464
6	750	-800	0,5,L	0,5,L	1271	1028	0,25,L	5	1271	1028	5	204*	139	5	460*	500	5	934	962	5	934	962	8	1528	1647	8	1528	1647
7	926	-842	0,5,L	0,5,L	1044	959	0,26,L	6	1044	959	6	139*	172	6	320*	238	6	934	962	6	934	962	9	929	934	9	929	934
8	2492	2434	0,5,L	0,5,L	1419	1416	0,27,L	7	1419	1416	7	1641	1534	7	820	753	7	934	962	7	934	962	10	329*	314	10	329*	314
9	2293	2598	0,5,L	0,5,L	1293	-1261	0,28,L	8	1293	-1261	8	890	744	8	966	902	8	934	962	8	934	962	11	123*	92	11	123*	92
0	7301	-10581	0,6,L	0,6,L	1483	1557	0,29,L	9	1483	1557	9	890	744	9	966	902	9	934	962	9	934	962	12	604	588	12	604	588
1	2371	-2618	0,6,L	0,6,L	665	674	0,30,L	0	6414	-6902	0	139*	172	0	320*	238	0	934	962	0	934	962	13	500*	442	13	500*	442
2	971	-1047	0,6,L	0,6,L	890	744	0,31,L	1	601	-539	1	1641	1534	1	820	753	1	934	962	1	934	962	14	113*	79	14	113*	79
3	694	699	0,6,L	0,6,L	204*	139	0,32,L	2	601	-539	2	890	744	2	966	902	2	934	962	2	934	962	15	241*	125	15	241*	125
4	4260	4608	0,6,L	0,6,L	139*	172	0,33,L	3	422	-401	3	1641	1534	3	966	902	3	934	962	3	934	962	16	1382	1461	16	1382	1461
5	454	-259	0,6,L	0,6,L	890	744	0,34,L	4	422	-401	4	890	744	4	966	902	4	934	962	4	934	962	17	598	557	17	598	557
6	947	-826	0,6,L	0,6,L	6902	-6902	0,35,L	5	668	-540	5	890	744	5	966	902	5	934	962	5	934	962	18	159*	345	18	159*	345
7	1139	1197	0,6,L	0,6,L	601	-539	0,36,L	6	1286	-1062	6	1641	1534	6	966	902	6	934	962	6	934	962	19	1370	-1499	19	1370	-1499
8	120*	-224	0,6,L	0,6,L	422	-401	0,37,L	7	559	503	7	1641	1534	7	966	902	7	934	962	7	934	962	20	275	256	20	275	256
9	2820	2656	0,6,L	0,6,L	1167	1020	0,38,L	8	942	-835	8	890	744	8	966	902	8	934	962	8	934	962	21	0	275	21	0	275
0	3370	-3299	0,7,L	0,7,L	2740	2720	0,39,L	9	1945	1767	9	1641	1534	9	966	902	9	934	962	9	934	962	22	19	19	22	19	19
1	2495	2603	0,7,L	0,7,L	668	-540	0,40,L	0	2427	-2219	0	890	744	0	966	902	0	934	962	0	934	962	23	2610	-2740	23	2610	-2740
2	797	-768	0,7,L	0,7,L	1286	-1062	0,41,L	1	125*	238	1	139*	172	1	966	902	1	934	962	1	934	962	24	210*	-271	24	210*	-271
3	3316	3494	0,7,L	0,7,L	559	503	0,42,L	2	994	894	2	1641	1534	2	966	902	2	934	962	2	934	962	25	0	275	25	0	275
4	5395	5736	0,7,L	0,7,L	942	-835	0,43,L	3	2471	2264	3	890	744	3	966	902	3	934	962	3	934	962	26	19	19	26	19	19
5	573	460	0,7,L	0,7,L	1945	1767	0,44,L	4	1054	969	4	1641	1534	4	966	902	4	934	962	4	934	962	27	19	19	27	19	19
6	573	460	0,7,L	0,7,L	1945	1767	0,45,L	5	304*	-107	5	890	744	5	966	902	5	934	962	5	934	962	28	19	19	28	19	19
			0,7,L	0,7,L	1945	1767	0,46,L	6	1580	-1544	6	1641	1534	6	966	902	6	934	962	6	934	962	29	19	19	29	19	19
			0,7,L	0,7,L	1945	1767	0,47,L	7	1734	-1614	7	890	744	7	966	902	7	934	962	7	934	962	30	19	19	30	19	19
			0,7,L	0,7,L	1945	1767	0,48,L	8	1065	-1015	8	1641	1534	8	966	902	8	934	962	8	934	962	31	19	19	31	19	19
			0,7,L	0,7,L	1945	1767	0,49,L	9	1065	-1015	9	1641	1534	9	966	902	9	934	962	9	934	962	32	19	19	32	19	19
			0,7,L	0,7,L	1945	1767	0,50,L	0	1065	-1015	0	1641	1534	0	966	902	0	934	962	0	934	962	33	19	19	33	19	19

1,14,L	0	553	-167	-1	1707	-1618	-2	2234	-2393	5	980	4	1734	1877
	1	319*	-249	0	319*	345	-1	1791	-1840	6	2451	5	1117	-962
	2	220*	-31	1	157*	222	0	1200	-1102	7	4255	6	1877	1896
	3	2836	2926	2	535	605	1	177*	505	8	389	7	4044	4078
	4	376*	-463	3	601	-483				9	1060	8	123*	308
	5	860	-824	4	2018	-2024		2,0,L				9	640	693
	6	169*	-259	5	308*	-62								
		1,17,L			1,20,L									
	0	687	-185				-10	930	-802		1184		2,4,L	
	1	1030	973	-5	375*	211	-9	338*	-412	-10	119*	-10	1062	-1095
	2	168*	219	-4	176*	-56	-7	3620	-3872	-8	3978	-9	120*	254
	3	2785	-2925	-3	405*	-164	-6	380	160	-7	3513	-8	2857	-3136
	4	1701	1644	-2	762	-782	-5	2076	-2180	-6	372	-7	2982	-3233
	5	1219	1093	-1	2293	-2497	-4	2223	2285	-5	2195	-6	369	336
	6	904	919	0	151*	-422	-3	2224	2552	-4	2578	-5	1657	-1648
	7	2211	2110	-1	150*	-219	-2	2193	-2457	-3	2344	-4	3141	3077
		1,15,L		1	562	-557	0	1056	1182	-1	1052	-2	2826	-2717
	-7	1589	-1507	2	1641	-1633	1	1005	1194	0	408	-1	330	475
	-6	1919	2071	3	155*	251	2	7980	9252	1	2169	0	220*	-242
	-5	1211	1085	4	1842	2016	3	1584	1544	2	9762	1	602	542
	-4	690	-612	5	444*	-103	4	840	958	3	2004	2	6572	6455
	-3	907	922	6	735	710	5	761	-718	4	1376	3	992	1032
	-2	3593	-2911		1,21,L		6	4152	-4308	5	1458	4	1063	1118
	-1	766	-107	-4	180*	-209	7	543	-487	6	3325	5	536	-433
	0	2590	2247	-3	692	736	8	450	-455	7	497	6	3539	-3645
	1	560	343	-2	2646	2640	9	1361	-1359	8	290*	7	122*	123
	2	2383	2391	-1	1900	1815				9	1132	8	127*	-151
	3	416*	292	0	783	584		2,1,L				9	970	-947
	4	2220	-2239	-2	678	328	-10	1140	-1041					
	5	475*	346	0	405*	312	-9	325*	43	-10	871		2,5,L	
	6	1608	-1502	1	293*	295	-8	1844	1880	-9	214*	-9	345*	503
	7	752	609	2	596	-587	-7	2426	-2631	-8	1374	-8	1590	1600
		1,16,L		3	2671	-2740	-6	1345	-1271	-7	1678	-7	2003	-2129
	-7	1238	-1207	4	340*	-391	-5	1472	1526	-6	1071	-6	1361	-1190
	-6	1251	-1235	5	252*	-161	-4	693	762	-5	1318	-5	663	542
	-5	1564	1540		1,19,L		-3	8334	9410	-4	220*	-4	656	627
	-4	414*	464	0	1203	1175	-2	3057	3461	-3	6678	-3	4016	4195
	-3	795	921	1	172*	24	-1	393	453	-2	3057	-2	2381	2400
	-2	1359	1253	2	1849	-1835	0	1554	1634	-1	518	-1	519	521
	-1	2999	-3139	3	2007	-2175	1	4211	-4730	0	627	0	93*	93
					1,23,L		2	1202	-1226	1	3540	1	2834	-2777
							3	1236	1282	2	2533	2	917	-790
							4	2416	-2549	3	1988			

3	2219	2311	4	231*	208	7	1353	-1307	2,12,L	-3	1111	969	2,17,L	-7	514*	628
4	878	-962	5	1996	-1790	8	342*	-293	-8	266*	-13	3684	-5	1746	-1585	
5	1122	1027	6	987	987				-7	144*	67	2055	-6	1648	-1593	
6	1286	-1325	7	2142	2171		2,10,L		-6	1122	1058	843	-4	620	-514	
7	3103	-3096	8	247*	119	-9	676	-766	-5	2550	2505	1348	-2	2048	-1936	
8	260*	-274				-8	684	803	-4	2523	2055	-293	-2	150*	-266	
				2,9,L		-7	546	467	-3	427*	146	307	-1	970	-746	
			-9	256*	357	-6	1061	-1169	-2	1753	-1642	1407	0	2468	-2546	
			-8	1194	-1196	-5	1356	-1156	-1	3610	-3437	-451	1	150*	378	
			-7	1526	-1685	-4	3202	-2770	0	2619	-2508	146	2	150*	274	
			-6	520	367	-3	138*	-149	1	942	-941	156	3	1248	1278	
			-5	579	571	-2	1934	1966	2	506*	300	1107	4	3095	3201	
			-4	1396	1380	-1	2881	2816	3	357*	88	1126	5	167*	226	
			-3	1440	1275	0	2683	2727	4	134*	-152	1156	6	1162	1080	
			-2	1811	-1759	1	367	255	5	1173	-1168	1107				
			-1	1330	-1334	2	1281	-1212	6	138*	-437	1126				
			0	2122	-2135	3	219*	77	7	151*	95	265				
			1	366	-251	4	705	-715		2,13,L		2737				
			2	3406	3391	5	1583	1573				153				
			3	1272	1207	6	1338	1239				429				
			4	651	625	7	132*	58				-1983				
			5	1275	-1112	8	1192	-1054				-3252				
			6	1916	-1983							-969				
			7	316*	-265		2,11,L					-831				
			8	1056	952							870				
				2,9,L								2,16,L				
			-9	1069	1043	-9	1794	-1700				870				
			-8	1038	1097	-8	811	-796				870				
			-7	543	-662	-7	624	607				870				
			-6	2123	-2313	-6	2003	2081				870				
			-5	1311	-1155	-5	2036	1718				870				
			-4	1541	-1403	-4	1434	1299				870				
			-3	1338	2066	-3	465	-426				870				
			-2	1392	1327	-2	280*	36				870				
			-1	187*	115	-1	284*	391				870				
			0	1459	-1511	0	1765	1530				870				
			1	1679	-1788	1	1612	1557				870				
			2	871	-834	2	123*	29				870				
			3	1792	1774	3	2419	-2007				870				
			4	1473	1375	4	3442	-2947				870				
			5	1799	1824	5	1376	-1403				870				
			6	430	-335	6	581	-502				870				
			7	361*	181	7	728	654				870				
			8	261*	-285	8	577	410				870				
				2,7,L								870				
			-9	843	-793							870				
			-8	1427	-1430							870				
			-7	1493	1681							870				
			-6	1205	1117							870				
			-5	217*	304							870				
			-4	1536	1386							870				
			-3	3957	-3993							870				
			-2	1441	-1444							870				
			-1	110*	-104							870				
			0	106*	-113							870				
			1	3497	3272							870				
			2	457	499							870				
			3	1166	-1264							870				

-7	620	514	6,4,L	-6	577	416	-1	273*	-277	6	424*	-385	-4	526	-583	6,16,L
-6	741	-655		-5	1586	-1392	0	2175	2274	-2	132*	-242	-3	132*	-242	
-5	814	816		-4	3025	3127	1	1911	1537	-2	2509	-2563	-1	2702	-2754	1430
-4	4698	-4921		-3	3283	3435	2	932	-777	-9	465*	-546	0	1473	-1522	2830
-3	2669	-2762		-2	94*	-87	3	721*	-261	-8	370*	423	1	1004	-1070	1268
-2	768	-752		-1	1044	1074	4	1924	-1995	-7	161*	213	2	963	913	1342
-1	980	-856		0	2920	-3021	5	581	-594	-6	623	-530	3	1172	1104	90
0	4017	4315		1	3233	-3202	6	1218	1131	-5	923	-772	4	295*	-370	-856
1	3302	3443		2	1085	-978	-4	823	-698	-4	823	-698	5	697	564	1644
2	415	374		3	2065	2155	-3	883	741	-2	2637	2465*	6,14,L		651	-628
3	1679	1517		4	213*	250	-2	195*	-269	-1	2327	2101		1934	-1796	-478
4	2227	-2237		5	138*	-154	-1	1338*	-271	0	2692	2342	-8	438*	226	1075
5	229*	281		6	2136	-2181	-7	634	-561	1	138*	-271	-7	1934	-2467	-3002
6	2261	2325		7	138*	-154	-8	1308	-1228	2	522	-514	-6	2551	-2467	1050
7	225*	326		-10	1003	-941	-3	990	-952	3	1405	-1449	-5	1859	-1835	-886
-10	822	606		-9	1125	1006	-2	1195	-1197	4	131*	-110	-4	1171	-1474	
-9	1430	-1568		-8	2700	2401	-1	1848	-1942	5	527	463	-3	1364	93	500*
-8	3119	-3142		-7	431	449	0	1465	-1212	6	217*	175	-2	207*	218	1864
-7	564	-802		-6	756	548	1	1595	1223	6,12,L			-1	1093	-1079	493*
-6	1399	-1213		-5	2021	-1637	2	890	759	-9	516*	-438	1	363*	203	590
-5	1710	1829		-4	2445	-2526	3	1449	1490	-8	182*	-117	2	1675	1737	1244
-4	3523	3717		-3	960	1026	4	124*	-238	-9	1667	1676	3	2464	2498	155*
-3	336	-300		-2	544	-503	5	1312	-1246	-8	2491	2234	4	1671	1576	2689
-2	469	-459		-1	1730	1690	6	657	-644	-5	2491	2234	5	1203	1140	2091
-1	719	-840		0	1021	-990	-5	2121	2136	-4	266*	366	0	270*	370	754
0	1068	-1098		1	2783	-2892	-4	266*	366	-4	370*	-74	1	363*	203	1889
1	4278	4506		2	885	-720	-3	370*	-74	-3	370*	-74	2	1675	1737	1726
2	865	360		3	1299	-1318	-2	923	-750	-2	923	-750	3	2464	2498	2091
3	743	758		4	396	393	-1	720	709	-7	178*	-76	4	1671	1576	775
4	394	-391		5	2314	2301	0	135*	347	-6	1316	-1347	5	819	-748	1726
5	2980	-2919		6	1007	851	1	201*	-258	-4	922	949	6	1177	-1254	447*
6	1376	-1363		6+8,L			2	1082	-1017	-3	321*	288	-3	447*	-394	897
7	204*	-215		-4	825	630	3	2462	-2416	-2	2895	2957	-2	856	897	1473
-10	191*	255		-3	1131	1037	4	1689	-1726	-1	2561	2638	-1	1339	-1473	478
-9	2130	2098		-2	1244	986	5	1163	-1081	0	1407	1427	0	149*	478	866
-8	148*	96		-1	418*	270	0	1905	-1679	1	1192	1252	1	726	782	866
-7	1709	-1640		-7	1666	1606	1	935	-759	2	524	-608	2	506	539	866
				-6	632	581	2	1285	1278	3	1086	-1045	3	2582	2554	866
				-5	2149	1840	3	991	999	4	306*	379	4	879	-903	866
				-4	1939	-1614	4	2045	2059	-8	1186	-999	-8	1186	-999	866
				-3	1924	-1938	5	541	486	-7	178*	-76	-7	178*	-76	866
				-2	905	-929	-8	690	571	-6	1316	-1347	-6	1316	-1347	866
							-7	311*	-78	-5	819	-748	-5	819	-748	866
							-6	1402	1381	0	922	949	-4	922	949	866
							-5	1178	1117	3	321*	288	-3	321*	288	866
							6,13,L			-2	2895	2957	-2	2895	2957	866
							6,10,L			-1	2561	2638	-1	2561	2638	866
							6,15,L			0	1407	1427	0	1407	1427	866
							6,18,L			1	1192	1252	1	1192	1252	866
							6,17,L			2	524	-608	2	524	-608	866
										3	1086	-1045	3	1086	-1045	866
										4	306*	379	4	306*	379	866

