

ANISOTROPIC DISPLACEMENT FACTORS (U_{ij}) FOR U ATOMS IN SCHOEPITE

FOR DEPOSIT

Site	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
$U(1)$	66(6)	107(6)	161(11)	-8(8)	25(7)	12(7)
$U(2)$	152(8)	70(7)	186(11)	34(7)	-36(9)	26(7)
$U(3)$	141(8)	63(7)	164(9)	29(8)	10(8)	28(7)
$U(4)$	133(8)	76(7)	156(9)	18(7)	-27(8)	9(8)
$U(5)$	82(6)	88(7)	132(10)	-26(8)	-30(7)	37(7)
$U(6)$	28(5)	76(7)	109(8)	-40(7)	-34(8)	25(5)
$U(7)$	48(6)	76(7)	128(8)	22(8)	-19(7)	23(6)
$U(8)$	23(5)	85(7)	145(9)	4(7)	-32(7)	0(7)

* $U_{ij} = U_{ij} \times 10^4 (\text{\AA}^2)$

Table with 48 columns and multiple rows, organized in groups of 12 columns each. Each group has a header row: h k l 10Fo 10Fc 10s. The data rows contain numerical values for these parameters across various indices (e.g., 13 8 8 2080 1998 132).

Table 6. Observed and calculated structure factors for SCHOEPITE

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
2	9	19	401	419	401	0	1	20	218	33	218	1	2	20	378	342	377	2	3	20	193	452	192
0	0	20	4100	4127	34	1	1	20	1538	1437	66	2	2	20	1144	1134	87	3	3	20	1815	1737	60
1	0	20	1773	1832	80	2	1	20	412	389	412	3	2	20	145	269	145	4	3	20	0	245	1
2	0	20	940	828	107	3	1	20	1401	1359	73	4	2	20	716	670	149	0	4	20	965	967	105
3	0	20	1542	1551	102	4	1	20	722	759	150	5	2	20	481	451	296	1	4	20	1492	1497	70
4	0	20	3898	3716	37	5	1	20	1676	1774	68	0	3	20	123	81	122	2	4	20	3788	3719	71
5	0	20	2016	2022	57	0	2	20	800	891	147	1	3	20	1406	1480	71	3	4	20	2180	2161	51
																		4	4	20	1003	1003	118
																		0	5	20	0	166	1
																		1	5	20	1180	1195	89
																		2	5	20	330	363	329
																		3	5	20	1418	1443	73
																		0	6	20	1732	1658	65
																		1	6	20	82	218	82

THE CRYSTAL STRUCTURE OF SCHOEPITE,
 $[(\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}](\text{H}_2\text{O})_{12}$

ROBERT J. FINCH¹, MARK A. COOPER AND FRANK C. HAWTHORNE

Department of Geological Sciences, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba R3T 2N2

RODNEY C. EWING

Department of Earth and Planetary Sciences, University of New Mexico, Albuquerque, New Mexico, 87131-1116, U.S.A.

ABSTRACT

Schoepite, $[(\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}](\text{H}_2\text{O})_{12}$, is orthorhombic, a 14.337(3), b 16.813(5), c 14.731(4) Å, V 3551(2) Å³, space group $P2_1ca$, $Z = 4$. The structure has been solved by direct methods and refined on F_o^2 to a weighted R index of 5.8% based on 4534 unique reflections measured with $\text{MoK}\alpha$ X-radiation on a single-crystal diffractometer (equivalent to an R index of 2.7% for $F_o > 4\sigma F_o$). The refinement indicates that the formula contains eight more H_2O groups per unit cell than previously assumed. The structure consists of neutral $[(\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}]$ sheets of edge- and corner-sharing $\text{U}\phi_7$ pentagonal dipyramids (ϕ : O, OH), hydrogen-bonded to each other through interstitial H_2O groups. These sheets are topologically identical to those found in fourmarierite. The $[(\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}]$ sheets are interleaved with almost planar sheets of interlayer H_2O groups. There are twelve symmetrically distinct H_2O groups in the interlayer sheet; these are arranged in two pentagonal rings with two linking H_2O groups. H-atom positions were not resolved, but an H-bonding scheme is suggested on the basis of stereochemical and bond-valence arguments. The structure displays strong $Pbca$ pseudosymmetry, especially among the U atoms. The lower symmetry is primarily due to H-bond interactions between interlayer H_2O groups and O(uranyl) atoms of the structural sheet.

Keywords: schoepite, crystal structure, uranium, hydrogen bonding, uranyl oxide hydrate.

SOMMAIRE

La schoepite, $[(\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}](\text{H}_2\text{O})_{12}$, est orthorhombique, a 14.337(3), b 16.813(5), c 14.731(4) Å, V 3551(2) Å³, groupe spatial $P2_1ca$, $Z = 4$. Nous en avons affiné la structure par méthodes directes en utilisant F_o^2 (4534 réflexions uniques mesurées avec rayonnement $\text{MoK}\alpha$ par diffractométrie sur cristal unique), jusqu'à un résidu R de 5.8% (l'équivalent d'un indice R de 2.7% pour $F_o > 4\sigma F_o$). L'affinement montre que la formule contient huit groupes H_2O de plus par maille élémentaire que la formule acceptée ne l'indique. La structure contient des feuillets $[(\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}]$ neutres de dipyramides pentagonales $\text{U}\phi_7$ à arêtes et à coins partagés (ϕ : O, OH), interliés entre eux par liaisons hydrogène assurées par les groupes H_2O interstitiels. Ces feuillets sont topologiquement identiques à ceux de la fourmarierite. Les feuillets $[(\text{UO}_2)_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}]$ sont intercalés avec des feuillets presque en plan de groupes H_2O . Il y a en tout douze groupes H_2O distincts dans ce feuillet interlié, agencés en deux anneaux pentagonaux liés par deux groupes H_2O . Nous n'avons pas affiné la position des atomes H, mais nous proposons quand même un schéma de liaisons hydrogène fondé sur arguments stéréochimiques et sur les valences de liaison. La structure montre une forte pseudo-symétrie $Pbca$, surtout parmi les atomes U. La symétrie inférieure est surtout due aux interactions des liaisons H entre les groupes H_2O des feuillets interliés et les atomes d'oxygène des groupes uranyle du feuillet structural.

(Traduit par la Rédaction)

Mots-clés: schoepite, structure cristalline, uranium, liaison hydrogène, oxyde d'uranyle hydraté.

INTRODUCTION

Schoepite was originally described by Walker (1923); its formula has been reported as $3\text{UO}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (Schoep 1932), $4\text{UO}_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ (Billiet & de Jong 1935,

Schoep & Stradiot 1947) and $\text{UO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (Christ & Clark 1960). The related mineral paraschoepite, $5\text{UO}_3 \cdot 9\frac{1}{2}\text{H}_2\text{O}$, was described by Schoep & Stradiot (1947). The relationship between paraschoepite and schoepite is uncertain (Christ & Clark 1960, Christ 1965). A third related mineral, metaschoepite, may be a lower hydrate than schoepite (Christ & Clark 1960). X-ray diffraction studies of synthetic UO_3 hydrates indicate only one phase related to schoepite; however,

¹ E-mail address: cfinch@cmt.anl.gov.