

Structure refinement and crystal chemistry of tokkoite and tinaksite from the Murun massif (Russia)
M. Lacialamita, E. Mesto, E. Kaneva, F. Pedrazzi, G. Scordari, N. Vladykin and E. Schingaro

TABLE 8a. Bond valence sum analyses for tok_1. Values are expressed in valence units.

	Si1	Si2	Si3	Si4	Si5	Si6	Si7	K1			M1		M2	M3	M4	Σ
								K10	K11	K12	Ca	Ti				
O1	0.95		0.97					0.05		0.06						2.12*
O2	1.08							0.10	0.03	0.09	0.67	0.49	0.30	0.34		2.12*
O3	1.05												0.30	0.30		1.99
O4	1.00	0.99														2.23
O5	1.10	1.10						0.10	0.03	0.04	0.69	0.29	0.31	0.33	0.31	2.14*
O6	1.06	1.06												0.33	0.30	2.00
O7	0.94	0.94	0.97					0.07		0.04						2.10*
O8			1.13											0.33	0.36	1.86
O9			0.98			0.98										2.14
O10				0.95		0.95			0.02	0.04						2.04*
O11				0.95			0.96	0.04	0.09	0.07						1.96*
O12				1.15					0.04		0.64	0.19				2.13*
O13				0.96									0.38			2.00*
O14					0.94								0.41	0.40		1.94
O15					1.14		0.96	0.05	0.11	0.03						1.98*
O16					0.94	0.95			0.03							2.02*
O17					1.13	1.13			0.03					0.35	0.37	1.89
O18(OH)							0.97		0.03	0.03						1.03*
O19							1.10				0.35	0.20	0.35			2.03*
O20(O, OH, F)											0.54	0.82	0.24			1.59*
Σ	4.08	4.09	4.04	4.00	3.98	4.01	3.99	0.63	0.61	0.54	3.28*	0.52	2.05	2.04	2.04	

*The total is a weighted sum, where the refined occupancies have been used as scale factors.

TABLE 8b. Bond valence sum analyses for tin_1. Values are expressed in valence units.

	Si1	Si2	Si3	Si4	Si5	Si6	Si7	K1		K2	M1		M2		M3	M4	H	Σ
								K10	K11		K12	Ti	Fe	Na				
O1	0.93		0.98					0.03	0.06	0.16		0.73	0.58	0.12	0.19			2.10*
O2	1.09							0.04	0.07									1.98*
O3	1.08														0.65	0.33		2.05
O4	0.95	0.96						0.07	0.07	0.11		0.57	0.64	0.08	0.12			2.10*
O5		1.09												0.15	0.23			1.90*
O6		1.06														0.32	0.67	2.06*
O7		0.93	0.96					0.05	0.07	0.14								2.08
O8			1.13			0.99				0.05					0.33	0.39		1.90
O9			0.98	0.96		0.95				0.17								2.14
O10				0.98					0.03	0.02								2.07*
O11				0.98			0.96	0.09	0.10	0.13								2.06*
O12				1.10				0.03	0.03	0.05								1.85*
O13				1.01	0.99			0.04		0.07	0.11	0.38	0.55		0.34			2.13*
O14					1.17									0.30	0.47	0.51		2.01*
O15					0.96		0.98	0.11	0.05	0.14								2.03*
O16					0.93	0.95		0.04	0.04	0.05	0.14							2.06*
O17						1.13				0.04	0.04				0.35	0.40		1.92
O18(OH)							1.00	0.02	0.04	0.02	0.09						0.74	1.85*
O19							1.07					0.49	0.41	0.24	0.37			1.97*
O20(O, OH, F)								0.17	0.17	0.12		0.97	0.41	0.14	0.22			
Σ	4.06	4.04	4.05	4.04	4.04	4.02	4.01	0.69	0.73	0.70	1.14	3.71*	0.31	1.30*	1.99	2.31		1.88*

*The total is a weighted sum, where the refined occupancies have been used as scale factors.