

**Kristalografsko proučavanje strukturne desimetrizacije granata grosularsko-andraditske izomorfne serije; Crystallographic study of the structural dissymmetrization of the garnets of grossular-andradite isomorphous series.**

Pavle I. Tančić



**Дигитални репозиторијум Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду**

**[ДР РГФ]**

Kristalografsko proučavanje strukturne desimetrizacije granata grosularsko-andraditske izomorfne serije; Crystallographic study of the structural dissymmetrization of the garnets of grossular-andradite isomorphous series. | Pavle I. Tančić | Универзитет у Београду | 2016-09-21 | |

<http://dr.rgf.bg.ac.rs/s/repo/item/0004024>

**UNIVERZITET U BEOGRADU  
RUDARSKO-GEOLOŠKI FAKULTET**

Mr Pavle I. Tančić, *dipl. ing. geol.*

**KRISTALOGRAFSKO PROUČAVANJE  
STRUKTURNE DESIMETRIZACIJE  
GRANATA GROSULARSKO-  
ANDRADITSKE IZOMORFNE SERIJE**

**Doktorska disertacija**

Beograd, 2016.

**UNIVERSITY OF BELGRADE  
FACULTY OF MINING AND GEOLOGY**

M.Sc. Pavle I. Tančić, *grad. eng. geol.*

**CRYSTALLOGRAPHIC STUDY OF THE  
STRUCTURAL DISSYMMETRIZATION  
OF THE GARNETS OF GROSSULLAR-  
ANDRADITE ISOMORPHOUS SERIES**

**Doctoral Dissertation**

Belgrade, 2016.

**MENTOR:**

Prof. Dr Aleksandar Kremenović  
Rudarsko-geološki fakultet u Beogradu  
Uža naučna oblast: Kristalografija

**ČLANOVI KOMISIJE:**

Dr Predrag Vulić, naučni saradnik  
Rudarsko-geološki fakultet u Beogradu  
Uža naučna oblast: Kristalografija

Dr Bratislav Antić, naučni savetnik  
Institut za nuklearne nauke "Vinča" u Beogradu  
Uža naučna oblast: Fizika kondenzovane materije

**Datum odbrane:** \_\_\_\_ . \_\_\_\_ . 2016. god.

**Ova Doktorska disertacija posvećena je:**

*Velikom čoveku i stručnjaku,  
Mom prijatelju i mentoru,  
† Prof. Dr Radovanu Dimitrijeviću (1947-2010).  
Neka mu je večna Slava i Hvala!*

*Svima onima koji se bore za osnovne ljudske i moralne vrednosti,  
za slobodu, istinu i pravdu... i*

*Srbskom narodu.*

**Zahvalnost:**

*Ovim putem koristim priliku da se zahvalim svom mentoru prof. Dr Aleksandru Kremenoviću na izuzetnom zalaganju, podršci i pomoći, kako u toku izrade samoga rada, tako i prilikom obrade i vrlo detaljnog sređivanja podataka.*

*Takođe želim da se zahvalim i Dr Predragu Vuliću na izuzetnom zalaganju, podršci i pomoći, kako u toku izrade samoga rada, tako i prilikom naše dugogodišnje naučne saradnje.*

*Želim da se zahvalim i Dr Bratislavu Antiću na pomoći i korisnim sugestijama, prof. Dr Reinhard-u Kaindl-u na spektroskopskim Raman proučavanjima, kao i B.Sc. Bernhard-u Sartory-u na EMPA analizama.*

*Zahvaljujem se i M.Sc. Maji Poznanović na izvršenim hemijskim analizama, kao i Dr Volker-u Kahlenberg-u koji je omogućio sva analiziranja koja su izvršena u Institutu für Mineralogie und Petrographie (Innsbruck, Austrija).*

*Želim da se zahvalim i svima onima koji su na bilo koji način doprineli da se ovaj rad privede kraju, a posebnu zahvalnost dugujem svojoj porodici, prijateljima i kolegama na dugogodišnjoj podršci, razumevanju i strpljenju.*

## REZIME

U ovoj Doktorskoj disertaciji proučavano je pet različitih zona makroskopski zonarnog grandita sa lokaliteta Meka Presedla (Kopaonik, Srbija). Pomoću hemijske i elektronske analize mikroprobe preračunati su relativno visoko homogeni sastavi zona, t.j.:  $\text{Grs}_{64\pm 1}\text{Adr}_{36\pm 1}\text{Sps}_2$  (A),  $\text{Grs}_{62\pm 1}\text{Adr}_{38\pm 1}\text{Sps}_2$  (B),  $\text{Grs}_{59\pm 2}\text{Adr}_{40\pm 2}\text{Sps}_2$  (C),  $\text{Grs}_{58\pm 2}\text{Adr}_{41\pm 2}\text{Sps}_2$  (D) i  $\text{Grs}_{58\pm 1}\text{Adr}_{41\pm 1}\text{Sps}_2$  (E). Glavne promene u sastavima izražene formulom:  $\text{Ca}_{2,93-2,97}\text{Mn}_{0,05-0,06}\text{Mg}_{0,00-0,01}\text{Al}_{1,14-1,26}\text{Fe}^{3+}_{0,72-0,83}\text{Ti}_{0,00-0,02}\text{Si}_{2,97-3,02}\text{O}_{12}$  ukazuju da je jedina značajnija varijacija ustanovljena samo kod Al-Fe<sup>3+</sup> raspodela u oktaedarskom položaju. Ovakav hemijski sastav je potvrđen i sa matematičkim proračunima iz IC i Raman analiza. Urađena je takođe i karakterizacija zona Raman spektroskopskom metodom, ukazujući na dva tipa promena. Brojne strukture su određene Rietveld metodom. Ustanovljena je desimetrizacija u *Fddd* ili *R $\bar{3}c$*  prostornim grupama, pri čemu je prva prostorna grupa znatno verovatnija. Na taj način, ovi rezultati se mogu svrstati u samo nekoliko publikovanih radova u svetu u kojima je desimetrizacija grandita nesumnjivo dokazana, a prvi rad takve vrste sa podacima koji su dobijeni rendgenskom difrakcionom analizom praha. Pojedina značajna odstupanja u okviru među-jonskih rastojanja ukazuju da se rotacija tetraedra, poliedarske distorzije i najverovatnije valence poliedara razlikuju između zona. Uslovi postanka su procenjeni na:  $t \sim 650-690$  (715) °C,  $p = 2-3$  kbara i  $X_{\text{CO}_2} \geq 0,6$ . Dobijeni rezultati argumentovano ukazuju da je desimetrizacija prouzrokovana pre svega termodinamikom i kinetikom postanka grandita, a ne njegovim sastavom.

**Ključne reči:** Makroskopski zonarni grandit, hemijska analiza, elektronska analiza mikroprobe, Raman, Rietveld, struktura, desimetrizacija, prostorna grupa

**Naučna oblast:** Geonauke

**Uža naučna oblast:** Kristalografija

**UDK broj:** 679.875:548 (497)(043.3)

## ABSTRACT

In this Doctoral Dissertation it was studied five different zones of the macroscopically zoned grandite from the Meka Presedla locality (Kopaonik Mt., Serbia). With the chemical and electron microprobe analyses it was recalculated relatively high homogeneity composition levels of the zones, i.e.:  $\text{Grs}_{64\pm 1}\text{Adr}_{36\pm 1}\text{Sps}_2$  (A),  $\text{Grs}_{62\pm 1}\text{Adr}_{38\pm 1}\text{Sps}_2$  (B),  $\text{Grs}_{59\pm 2}\text{Adr}_{40\pm 2}\text{Sps}_2$  (C),  $\text{Grs}_{58\pm 2}\text{Adr}_{41\pm 2}\text{Sps}_2$  (D) and  $\text{Grs}_{58\pm 1}\text{Adr}_{41\pm 1}\text{Sps}_2$  (E). Main compositional variations represented by formulae:  $\text{Ca}_{2,93-2,97}\text{Mn}_{0,05-0,06}\text{Mg}_{0,00-0,01}\text{Al}_{1,14-1,26}\text{Fe}^{3+}_{0,72-0,83}\text{Ti}_{0,00-0,02}\text{Si}_{2,97-3,02}\text{O}_{12}$  indicate that the only significant variation was established for Al-Fe<sup>3+</sup> distribution within the octahedral position. Such chemical composition was also confirmed with mathematical calculations from IR and Raman analysis. Also, zones were characterized with Raman spectroscopical method, indicating two types of variation. Numerous structures were refined with Rietveld method. It was established dissymmetrization into *Fddd* or *R $\bar{3}c$*  space groups, whereby is the first one space group with quite more probability. In this way, these results may be seen in only a few published papers in the World in which the grandite dissymmetrization was undoubtedly proven, and the first work of its kind with the data obtained by X-ray powder diffraction analysis. Some major differences within the inter-ionic distances indicate that the tetrahedron rotations, polyhedral distortions and most probably valences of the polyhedrons differs across the zones. Formation conditions were estimated to:  $t \sim 650-690$  (715) °C,  $p = 2-3$  kbars and  $X_{\text{CO}_2} \geq 0.6$ . The obtained results reasonably indicate that dissymmetrization was caused primarily by thermodynamic and kinetic of the grandite formation, and not by composition.

**Key words:** Macroscopically zoned grandite, chemical analysis, electron microprobe analysis, Raman, Rietveld, structure, dissymmetrization, space group



**Scientific field:** Geosciences

**Narrow scientific field:** Crystallography

**UDK number:** 679.875:548 (497)(043.3)

## SADRŽAJ

1. Uvod.....	1
2. Opšte osobine grupe granata.....	6
3. Prethodna proučavanja desimetrizacije pojedinih grandita.....	15
4. Prethodna proučavanja makroskopski zonarnog grandita sa Meke Presedle.....	22
5. Primjenjene metode proučavanja.....	33
5.1. Priprema uzoraka.....	33
5.2. Elektronska analiza mikroprobe (EMPA).....	34
5.3. Hemijske analize.....	34
5.4. Spektroskopska Raman proučavanja.....	35
5.5. Određivanje strukture grandita Rietveld-ovom metodom.....	35
6. Rezultati i diskusija.....	40
6.1. EMPA proučavanja i hemijske analize.....	40
6.2. Određivanje sastava grandita pomoću IC rezultata.....	50
6.3. Spektroskopska Raman proučavanja.....	51
6.4. Određivanje strukture grandita Rietveld-ovom metodom.....	55
6.4.1. Određivanje strukture bez geometrijskih ograničenja.....	56
6.4.2. Analiza dubleta pojedinih pikova.....	60
6.4.3. Kriterijumi za određivanje prostorne grupe kristalne strukture.....	66
6.4.4. Određivanje strukture sa geometrijskim ograničenjima.....	71
6.4.5. Dodatni kriterijumi za određivanje prostorne grupe kristalne strukture.....	84
7. Zaključak.....	92
8. Literatura.....	95
9. Prilozi.....	107
Biografija autora.....	352

## 1. UVOD

Ispunivši sve uslove, na predlog † prof. Dr Radovana Dimitrijevića, a uz saglasnost mentora prof. Dr Aleksandra Kremenovića, pristupio sam izradi Doktorske disertacije na temu:

### **„Kristalografsko proučavanje strukturne desimetrizacije granata grosularsko-andraditske izomorfne serije”.**

Osnovni razlog izrade Doktorske disertacije sa navedenom tematikom je da postoji vrlo izražena dilema oko pravog uzroka optičke anizotropije granata grosularsko-andraditske izomorfne serije (tzv. grandita), odnosno da ne postoji širok konsenzus oko ovog pitanja.

Naime, iako je već više od jednog veka veoma dobro poznato da se granditi vrlo često karakterišu optičkom anizotropijom (Brauns, 1891; Palache i dr., 1951; Deer i dr., 1982; itd.), koja ukazuje pre svega na neteseralnu kristalizaciju minerala, situacija kod ove grupe je mnogo kompleksnija. Literaturni podaci ukazuju na ukupno pet mogućih uzroka optičke anizotropije:

1. bližnjenje (Ingerson i Barksdale, 1943; Brown i Mason, 1994);
2. zamenjivanje  $\text{Ca}^{2+}$  sa katjonima retkih zemalja (Blanc i Maisonneuve, 1973);
3. neteseralna raspodela  $\text{OH}^-$  grupa pri hidro-granatskom zamenjivanju (Aines i Rossman, 1984; Rossman i Aines, 1986; Allen i Buseck, 1988; Andrut i dr., 2002);
4. zaostali napon prouzrokovan razlikama između kristalnih rešetki na granicama različitih sastava, blizanaca ili zrna (Chase i Lefever, 1960; Lessing i Standish, 1973; Kitamura i Komatsu, 1978; Foord i Mills, 1978; McAloon i Hofmeister, 1993 i 1995; Hofmeister i dr., 1998; Shtukenberg i dr., 2001; Antao i Klincker, 2013; Antao, 2013); i
5. različita raspodela  $\text{Fe}^{3+}$  i  $\text{Al}^{3+}$  u oktaedarskim položajima (Takéuchi i Haga, 1976; Takéuchi i dr., 1982; Gali, 1983; Akizuki, 1984 i 1989; Allen i Buseck, 1988; Hatch i Griffen, 1989; Kingma i Downs, 1989; Griffen i dr., 1992; Akizuki i dr., 1998; Shtukenberg i dr., 2001, 2002, 2005 i 2006; Frank-Kamenetskaya i dr., 2007).

Osim prethodno navedene dileme, trebalo bi takođe napomenuti da postoji očigledan nedostatak, odnosno mali broj prethodno objavljenih radova u kojima je određena struktura grandita (posebno njegovih intermedijarnih članova), a naročito kristalnih struktura koje su urađene rendgenskom difrakcionom analizom praha (XRPD). Ovde bi trebalo istaći da je još manji broj radova u kojima je razmatrana njihova desimetrizacija, a pogotovo u kojima je ova pojava i nedvosmisleno utvrđena.

S tim u vezi, još je indikativnije da je desimetrizacija grandita sa nešto većom sigurnošću utvrđena samo kod pet uzoraka (tri u  $Fddd$  i dva u  $I\bar{1}$  prostornoj grupi-u daljem tekstu uglavnom označeno sa skraćenicom: p.g.), a sa relativno nešto manjom sigurnošću samo kod dva uzorka (u  $I\bar{1}$  p.g.), i to rendgenskom difrakcijom sa monokristala. Kod uvarovita je desimetrizacija utvrđena za još dodatnih šest uzoraka (jedan u  $Fddd$  i pet u  $I\bar{1}$  p.g.), takođe rendgenskom difrakcijom sa monokristala.

Konačno, čak je i utvrđena desimetrizacija kod ovako malog broja uzoraka kritikovana i stavljena pod osnovanu sumnju (Rossmanith i Armbruster, 1995; Antao i Klincker, 2013; Antao, 2013), čime se ova problematika čini još komplikovanijom.

U vezi sa prethodno navedenim, primarni zadatak je, pre svega, kristalografsko proučavanje strukture Rietveld-ovom metodom, t.j. utvrđivanje egzaktne prostorne grupe u kojoj kristališe jedan krupni makroskopski zonarni grandit sa Meke Presedle na Kopaoniku, odnosno njegovih pet različitih makroskopski vidljivih zona. Na takav način bi se egzaktno utvrdilo da li je kod ovog uzorka prisutna desimetrizacija ili ne.

Po našim saznanjima, do sada još uvek ne postoji ni jedan rad u kome je dokazana desimetrizacija grandita rendgenskom difrakcionom analizom praha (XRPD). Ukoliko bi se ovakvim proučavanjima iz XRPD analiza eventualno dokazala desimetrizacija grandita, to bi imalo i veliki značaj, jer bi se po prvi put objavili podaci sa ovakvom tematikom i podacima.

Drugi postavljeni zadatak je utvrđivanje homogenosti ovih pet granditskih zona u smislu njihovih hemijskih sastava (primenom hemijskih i elektronskih analiza mikroprobe; i dopunskim matematičkim proračunima iz infracrvenih-IC, Raman i XRPD rezultata), kao i karakterizacija spektroskopskom Raman metodom.

U tom smislu, bilo je neophodno i da se izvrše dodatna strukturalna ispitivanja zona da bi se utvrdilo da li predstavljaju mešavine dve faze grandita koje kristališu u istim  $Ia\bar{3}d$  i različitim  $P4_132$  i  $Ia\bar{3}d$  teseralnim p. g.; ili ne. Na takav način bi se

egzaktno utvrdilo da li se eventualno utvrđena desimetrijacija uzorka može dovesti u realnu sumnju ako postoje izražene „mikro“ pod-zone različitog sastava, odnosno ako su ove zone nehomogene.

Treći postavljeni zadatak je procena uslova postanka grandita, odnosno njemu pripadajućih proučavanih zona.

Impresivna veličina ovog individualnog kristala (oko 8 cm), kao i njegove makroskopski vidljive široke zone, pružila je izvanrednu mogućnost za proučavanja koja u ranijem periodu nisu mogla biti primenjena na manjim uzorcima kristala i/ili sa mnogo manjim debljinama zona različitih hemijsko-strukturnih karakteristika (Tančić, 2008; Tančić i dr., 2012a). Makroskopski zonarni minerali ovakvih dimenzija su veoma retka pojava kako u svetu, tako i u Srbiji, tako da svaki novi pronalazak ove vrste zaslužuje dužnu pažnju. S tim u vezi, a obzirom na prethodno objašnjenu kompleksnost, mišljenja smo da bi trebalo koristiti što više adekvatnih i međusobno korelativnih metoda proučavanja.

Tako su prethodnim proučavanjima na ovom uzorku bile primenjene optičko mikroskopske, rendgenske (XRPD), hemijske SEM-EDS (skenirajuća elektronska mikroskopija-energetski disperzivna spektroskopija X-zracima), spektroskopske (IC) i strukturne Rietveld metode u  $Ia\bar{3}d$  p.g., i to kao mono faze i mešavine dve faze (Tančić, 2008). Ove metode su tom prilikom dodatno kombinovane i sa proučavanjima koja se inače vrlo retko primenjuju: poliedarske distorzije, tetraedarska rotacija, razmatranje sastava tetraedra, kvadratna izduženja i uglovna odstupanja tetraedra i oktaedra, kao i mikrostrukturne karakteristike (Tančić, 2008).

Na osnovu tako dobijenih podataka utvrđene su sličnosti i razlike između različitih zona, odnosno osnovni uzroci makroskopske zonarnosti. Dokazano je da su proučavane zone međusobno hemijski-strukturno različite. Evidentne su i ciklične varijacije između zona. Takođe, pretpostavljeno je da postoji najmanje pet generacija postanka granata koje su po svojoj prirodi oscilatorno zonarne.

Mikroskopskim proučavanjima utvrđeno je da ispitivani grandit pokazuje blagu anizotropiju sa karakterističnim sektorskim pomračenjima. Četiri (od prethodno utvrđenih pet) mogućih uzroka optičke anizotropije su razmatrana, a prva tri (t.j. bližnjenje; zamenjivanje kalcijuma sa katjonima retkih zemalja; i neteseralna raspodela OH<sup>-</sup> grupa pri hidro-granatskom zamenjivanju) su u potpunosti odbačena kao

mogućnost. Obzirom da su srednja maksimalna naprezanja mnogo veća u zonama B i D u odnosu na zone A, C i E, pretpostavljeno je da bi naprezanja mogla biti jedan od mogućih uzroka optičke anizotropije ovog grandita (Tančić, 2008).

Druga realna mogućnost je da je optička anizotropija proučavanog grandita prouzrokovana petim mogućim uzrokom, t.j. da njegova struktura uopšte ne pripada prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$  koja nominalno pripada granatima, već nekoj od podgrupa ove prostorne grupe. Moguće potvrde ovakvoj pretpostavci su prethodno utvrđene činjenice (Tančić, 2008), t.j.:

1. da su sa aspekta granditskih struktura (prostorna grupa  $Ia\bar{3}d$ ) zone A i C neuređene; zona B je delimično neuređena; dok su zone D i E uređene; kao i

2. da su u svim granatskim zonama manje ili više vidljivi dubleti pojedinih difrakcionih maksimuma, naročito sa Milerovim indeksima  $hkl$  (12 2 2) i (8 8 8), a koji se ne mogu objasniti i rešiti određivanjem struktura ovih zona kao mešavina dve faze granata koji kristališu u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$ .

Da bi se postavljeni zadatak realizovao, u ovoj Doktorskoj disertaciji primenjene su sledeće metode proučavanja:

- klasična hemijska analiza,
- EMPA,
- IC spektroskopija,
- Ramanova spektroskopija, i
- XRPD.

Takođe, veoma detaljno je proučena struktura granata Rietveld-ovom metodom u 20 različitih prostornih grupa (kao i mešavina faza) koje, ili predstavljaju podgrupe prostorne grupe  $Ia\bar{3}d$ , ili se navode u literaturi kao teoretski moguće prostorne grupe u kojoj kristališu minerali ove izomorfne serije. Izvršena su i dodatna strukturna ispitivanja zona da bi se utvrdilo da li one predstavljaju mešavine dve faze grandita koji kristališu u teseralnim prostornim grupama  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$ , i  $P4_132$  i  $Ia\bar{3}d$ ; ili ne.

Sva proučavanja strukture su obavljena bez geometrijskih ograničenja (engleski: constraints), dok su za 7 najinteresantnijih i najznačajnijih prostornih grupa i mešavina uvedena i dodatna geometrijska ograničenja za pojedina rastojanja i parametre zauzeća.

Osim ovoga, preliminarno su razmatrane i neke druge strukture u još 21 različitih mogućih prostornih grupa, kao i 6 mešavina faza.

Sva primenjena proučavanja su međusobno korelativna, tako da se dobijeni rezultati jednom metodom mogu upoređivati sa svim ostalim rezultatima drugih metoda.

Klasične hemijske analize su izvršene u Geološkom zavodu Srbije u Beogradu.

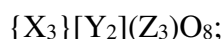
EMPA i spektroskopska Raman proučavanja su izvršena u Institutu für Mineralogie und Petrographie, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck (Innsbruck, Austrija).

Proučavanja strukture minerala Rietveld-ovom metodom su izvršena na Departmanu za Mineralogiju, Kristalografiju, Petrologiju i Geohemiju u okviru Rudarsko-geološkog fakulteta u Beogradu, kao i u Geološkom zavodu Srbije u Beogradu.

## 2. OPŠTE OSOBINE GRUPE GRANATA

Strukturu granata je po prvi put odredio Menzer (1926 i 1928), i to za varijetet grosular rendgenskom metodom praha, a kasnije je ustanovljen i izomorfno-izostrukturalni odnos između grosulara i ostalih prirodnih granata.

Većina prirodnih granata ima unutrašnje centriranu rešetku i kristališe u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$  (Palache i dr., 1951; Skinner, 1956; Novak i Gibbs, 1971; Meagher, 1980; Deer i dr., 1982; Rossmanith i Armbruster, 1995; Grew i dr., 2013; itd.). Veoma često se javljaju u kristalnim oblicima gde preovlađuju forme rombdodekaedra ili ikositetraedra ili njihovih kombinacija. Njihova strukturna formula može se predstaviti izrazom:



gde su X, Y i Z položaji koji zauzimaju različiti katjoni. U *Tabeli 1* prikazane su vrste najčešćih prirodnih granata (Novak i Gibbs, 1971).

*Tabela 1. Najčešći prirodni granati.*

naziv granata	hemijska formula	jedinična ćelija (Å)
<b>piralspiti</b>		
<b>pirop</b>	$Mg_3Al_2(SiO_4)_3$	11,46
<b>almandin</b>	$Fe_3Al_2(SiO_4)_3$	11,53
<b>spesartin</b>	$Mn_3Al_2(SiO_4)_3$	11,62
<b>ugranditi</b>		
<b>uvarovit</b>	$Ca_3Cr_2(SiO_4)_3$	11,97
<b>grosular</b>	$Ca_3Al_2(SiO_4)_3$	11,85
<b>andradit</b>	$Ca_3Fe_2(SiO_4)_3$	12,05

Geller (1960) je ustanovio da sledeći katjoni mogu ući u odgovarajuće položaje:

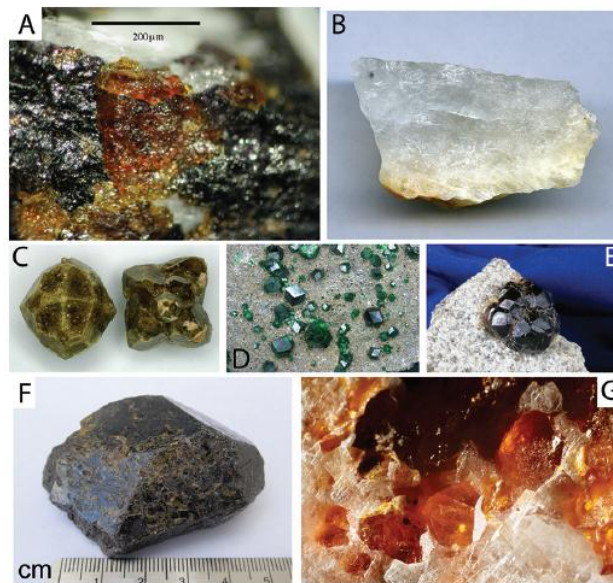
X:  $Ca^{2+}$ ,  $Mn^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ;

Y:  $Mn^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Al^{3+}$ ,  $Cr^{3+}$ ,  $Fe^{3+}$ ,  $Si^{4+}$ ,  $Ti^{4+}$ ; i

Z:  $Al^{3+}$ ,  $Fe^{3+}$ ,  $Si^{4+}$ ,  $Ti^{4+}$ ;

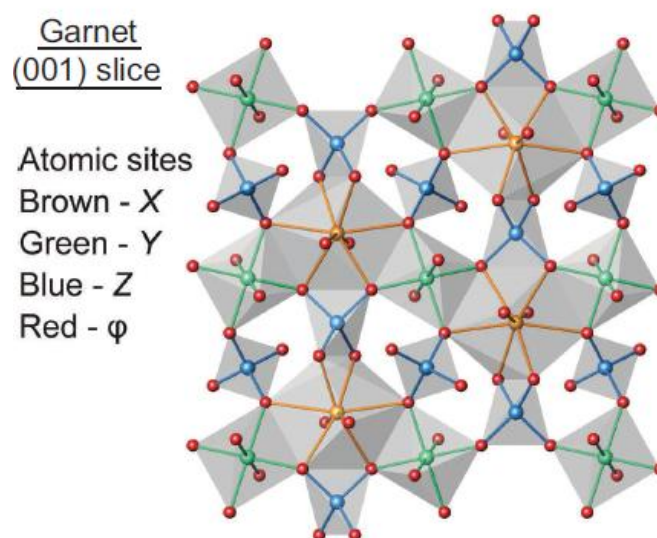
tako da, pored najčešćih prirodnih granata prikazanih u *Tabeli 1*, postoji veoma širok dijapazon variranja hemijskog sastava i još čitav niz ređih vrsta granata (*Slika 1*, Grew i dr., 2013) koje ovde nećemo navoditi.



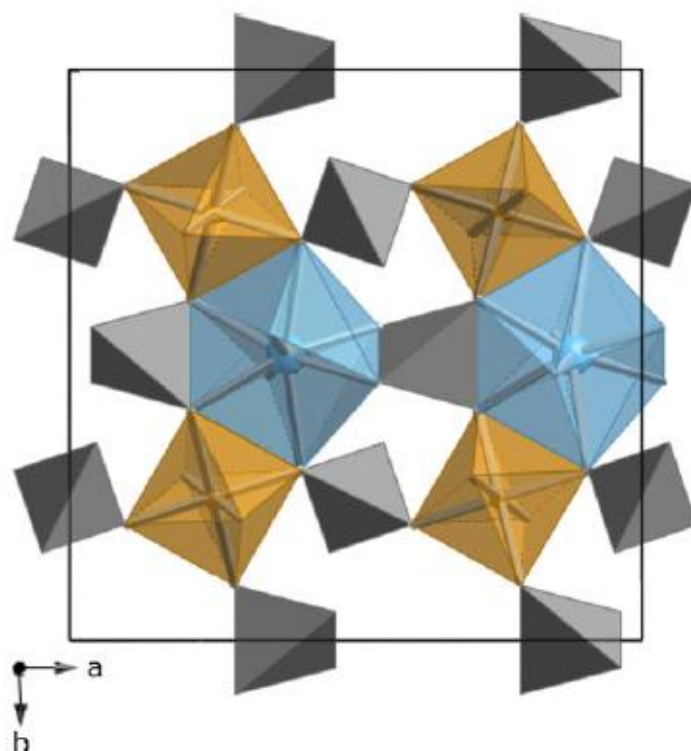


Slika 1. Fotografije reprezentativnih granata. A: Holtstamit; B: Kriolitionit; C: Grosular; D: Uvarovit; E: Almandin; F: Šorlomit; i G: Manganberzelit (Grew i dr., 2013).

U strukturi granata postoje tri različite koordinacije anjona (kiseonika) oko različitih katjona [Slika 2 (označen sa  $\varphi$ ) i 3]. X katjoni se nalaze u nepravilnoj heksaedarskoj, odnosno trigon-dodekaedarskoj koordinaciji; Y katjoni u oktaedarskoj koordinaciji; dok su Z katjoni okruženi sa četiri kiseonika (tetraedarska koordinacija).



Slika 2. Deo strukture granata projektovane duž [001] (Grew i dr., 2013).



Slika 3. Projekcija strukture granata duž c-ose koja prikazuje  $ZO_4$  tetraedre (sivo),  $YO_6$  oktaedre (žuto) i  $XO_8$  dodekaedre (plavo) koji se javljaju u obliku deformisane kocke (Antao i Klincker, 2013).

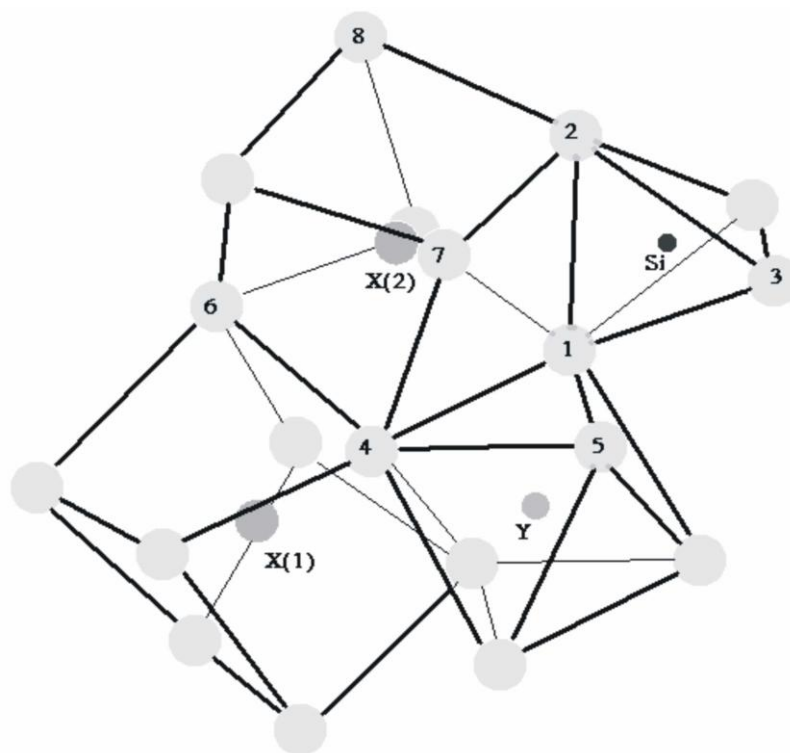
Kiseonik se nalazi u okruženju dva X, jednog Y i jednog Z katjona koji čine gotovo pravilnu tetraedarsku koordinaciju.

Obzirom da tetraedri u kojima kod prirodnih granata dominira  $Si^{4+}$  nemaju zajedničke rogljeve, granati su klasifikovani kao nezosilikati.

Simetrija kristalografskog položaja diktira stepen pravilnosti njihovih koordinacija. Svi katjoni (X, Y i Z, Slika 2) se nalaze u specijalnim položajima, dok je kiseonik u opštem položaju i njegove koordinate zavise od vrste granata (Tabela 2 i Slika 4).

Tabela 2. Struktura granata.

atom	položaj	simetrija kristalografskog položaja	koordinate	koordinacija
<b>X</b>	24c	$\bar{2}22$	$\frac{1}{8}, 0, \frac{1}{4}$	8
<b>Y</b>	16b	$\bar{3}$	0, 0, 0	6
<b>Z</b>	24d	$\bar{4}$	$\frac{3}{8}, 0, \frac{1}{4}$	4
<b>O</b>	96h	$\bar{1}$	x, y, z	4



Slika 4. Deo strukture granata (Novak i Gibbs, 1971).

Ako se posmatraju samo  $ZO_4$  tetraedri i  $YO_6$  oktaedri, može se videti da postoji njihovo uzajamno vezivanje, odnosno da tetraedar deli isti rogalj sa oktaedrom. Kao posledica varijacija u hemizmu, ponašanje poliedara je u geometrijskom smislu različito.  $ZO_4$  tetraedar se uslovno može nazvati „sfenoidom“ zbog izduženja koje je paralelno sa osom simetrije  $\bar{4}$ . Usled toga, javljaju se dve Si-O veze različitih dužina. Od šest O-O veza (ivica poliedra), dve O(1)-O(2) su zajedničke sa trigonododekaderskim poliedrom X katjona, iste su dužine, a kraće od ostalih. Četiri veze iste dužine [t.j. O(1)-O(3) i njeni simetrijski ekvivalenti], ovaj poliedar ne deli ni sa jednim drugim.

Distorzija tetraedarskog poliedra posledica je prvenstveno veličine radijusa X katjona, t.j. njegove promene kao posledica izomorfizma. Usled toga je izraženija kod piropa nego kod grosulara. Dužina veze Si-O menja se sa sastavom, mada još uvek ne postoji jasna korelacija između dužine veze Si-O i veličine X i Y katjona. Novak i Gibbs (1971) su utvrdili da je ovaj opseg dužina između  $1,628(2)\text{Å}$  kod almandina i  $1,655(2)\text{Å}$  kod goldmandita, a da je dobijena srednja vrednost iz devet analiziranih uzoraka granata  $1,641\text{Å}$ .

Postoje dva nejednaka O-Si-O ugla u tetraedru. Pored ovih varijacija u geometriji tetraedra, zapažena je i njegova rotacija oko ose simetrije  $\bar{4}$  u piralspitskim granatima. Ova rotacija utiče na povećanje trigon-dodekaedarskog poliedra i uzrokuje promene u distorziji oktaedarskog poliedra.

Oktaedarski položaj u strukturi granata mogu da zauzmu katjoni veličine između približno 0,5 i 0,8Å (Novak i Gibbs, 1971). U ovom opsegu postoji međuzavisnost između radijusa Y i njemu pridruženog X katjona. Bez obzira na hemijski sastav, YO<sub>6</sub> koordinacija retko odstupa od pravilnog oktaedra. Od dvanaest O-O veza (ivica poliedra), šest O(1)-O(4) su zajedničke sa trigon-dodekaedarskim poliedrom X katjona i iste su dužine, dok šest veza iste dužine [O(1)-O(5) i njeni simetrijski ekvivalenti], ovaj poliedar ne deli ni sa jednim drugim. Postoje samo dva nejednaka O-Y-O ugla usled položaja koji ima tačkastu simetriju  $\bar{3}$ . Razlike između ovih uglova ne odstupaju za više od  $\pm 2^\circ$  u odnosu na ugao u pravilnom oktaedru.

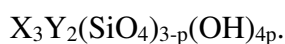
Distorzija poliedra delimično zavisi od radijusa X katjona. Kod Al granata javlja se najmanja distorzija za srednje vrednosti  $r_x$  ( $r_x$ -srednja vrednost radijusa svih katjona koji zauzimaju položaj X).

U granatima u kojima položaj Y zauzima Al postoji uticaj radijusa X katjona na veličinu oktaedra. Tako, pirop ( $r_x=0,89\text{Å}$ ) ima dužinu veze Al-O 1,886Å, dok se kod grosulara ( $r_x=1,12\text{Å}$ ) ona povećava na 1,924Å. Za granate u kojima je X=Ca, utvrđena je linearna zavisnost između radijusa Y katjona i dužine veze Y-O (Novak i Gibbs, 1971).

Katjoni koji najčešće zauzimaju centar XO<sub>8</sub> dodekaedarskog koordinacionog poliedra u granatima su Mg<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Mn<sup>2+</sup> i Ca<sup>2+</sup>. Zemann (1962) je pretpostavio da je opseg radijusa jona koji ulaze u X položaj 0,8-1,1Å. Najveći mogući radius X katjona zavisi od veličine katjona koji zauzima položaj Y u strukturi. U skladu sa tim, Novak i Gibbs (1971) su ustanovili da veći  $r_y$  ( $r_y$ -srednja vrednost radijusa svih katjona koji zauzimaju položaj Y) povećava dozvoljenu gornju granicu za  $r_x$  na oko 1,5Å. Postoje dve simetrijski neekvivalentne veze: X(1)-O(4) i X(2)-O(4). Kod svih granata veza X(2)-O(4) je značajno duža, kao posledica geometrijskih ograničenja zbog dužina veza Y-O i O-O u okolnim oktaedrima. Srednja vrednost dužine X-O veze se povećava sa povećanjem  $r_x$  u svim Al granatima. Pored toga, postoji i zavisnost dužina ovih veza sa radiusom Y katjona, jer povećanje  $r_y$  utiče na povećanje Y-O dužine veze.

Posebno interesantna pojava jeste ulazak vodonika u strukturu granata. Pretpostavka da H<sub>2</sub>O ulazi u vidu molekulske grupe je odbačena, jer nije bila u skladu sa rezultatima dobijenim proučavanjima rendgenskom i neutronsom difrakcijom, kao i IC spektroskopijom. Zaključeno je da vodonik ulazi u strukturu u obliku (OH)<sub>4</sub> grupe i to u vidu tetraedra gde je svaki od 4 kiseonika vezan za jedan vodonik.

Dužina O-H veze iznosi 0,965Å i karakteristična je za strukture minerala u kojima OH<sup>-</sup> grupe nisu povezane vodoncima u tetraedar, a prisutna je i slaba O-H...O interakcija, t.j. vodonična veza (Lager i dr., 1987). Na takav način se zamenjuje SiO<sub>4</sub> tetraedar u strukturi, tako da opšta formula hidrogranata ima oblik:



Vodonici zauzimaju opšti položaj i pri tome se značajno povećava rastojanje od Si u središtu tetraedra (Si-O do 1,931Å), a što uzrokuje i značajno povećanje dimenzija jediničnih ćelija. Cheng i dr. (1990) su pokazali da d-vrednost ravni sa *hkl* (420) raste sa porastom hidro-grosularske, t.j. hibšitske komponente.

U prirodi se granati retko mogu naći u hemijski čistom stanju, odnosno kao krajnji članovi, već se najčešće javljaju u vidu serija čvrstih rastvora. Unutar grupa (Tabela 1) moguće je gotovo neograničeno izomorfno mešanje, dok je između predstavnika različitih grupa ova pojava ograničena. Granati su važna grupa minerala i stabilni su u širokom opsegu pritiska, temperature i hemijskog sastava.

Grosular-andraditska serija



u kontaktno-metamorfnim i drugim stenama javlja se često u obliku zonarnih kristala (Lessing i Standish, 1973; Murad, 1976; Allen i Buseck, 1988; Jamtveit, 1991; Jamtveit i dr., 1993 i 1995; Ivanova i dr. 1998).

Kao što su pokazali Lessing i Standish (1973), Jamtveit (1991), Jamtveit i dr. (1993) i Jamtveit i dr. (1995), sastav čvrstog rastvora kao što je grosularsko-andraditski binarni sistem može biti veoma osetljiv na male promene u sastavu hidrotermalnog fluida i samim tim obezbeđuje kontinualni zapis o hidrotermalnim procesima koji su se odigrali između sedimentih stena i granodiorita.

„Oscilatorna“ zonarnost minerala, kao dosta česta pojava u mineralogiji (Shore i Fowler, 1996), javlja se u različitim geološkim sredinama, od nisko temperaturne dijagenese (Reeder i Prosky, 1986; Reeder i Grams, 1987) do visoko temperaturnih

uslova magmatske kristalizacije (Sibley i dr., 1976). Promene sastava koje se javljaju između jezgra i oboda zrna minerala sadrže važne podatke o kinetici i dinamici procesa rasta kristala. Minerali koji imaju zonalne karakteristike pružaju dokaze o kvazicikličnim smenjivanjima u hemijskom sastavu slojeva rasta od desetak nm do nekoliko  $\mu\text{m}$  debljine. Ovi slojevi su uglavnom paralelni sa kristalografskim ravnima malih Milerovih indeksa.

Iako se koristi termin „oscilatorni“, ova promenljivost u debljinama i sastavima zona nije neophodno regularna. Koncentracija različitih inkluzija ili mikro-strukturnih karakteristika kao što su: dislokacije, tačkasti defekti, veličine zrna ili napona, takođe se mogu menjati preko ili između slojeva rasta, tako da bi eksperimentalna ispitivanja zonalnih minerala, usled njihove kompleksnosti, trebalo da budu vrlo složena i sa različitim metodama, jer u velikoj meri zavise od veličine kristala i debljine, t.j. širine zona.

Takođe, granati sastava grosular-andradit vrlo često se karakterišu optičkom anizotropijom (Brauns, 1891; Palache i dr., 1951; Deer i dr., 1982).

Kod granata veoma važnu ulogu mogu da imaju poliedarske distorzije i rotacija tetraedra. Struktura granata može se okarakterisati sa tri poliedra koja su međusobno povezana zajedničkim ivicama: (Z)-tetraedar, [Y]-oktaedar i {X}-dodekaedar (*Slike 2-4*). Dakle, ukoliko se u nekom položaju dogodi zamena nekog jona, geometrija ostala dva poliedra se takođe mora prilagoditi da bi se obezbedilo smanjenje napona (tzv. relaksacija). Na primer, [Y]-oktaedar deli šest (od svojih dvanaest) ivica sa {X}-dodekaedrom, tako da promena geometrije oktaedra utiče na geometriju dodekaedra, i obrnuto.

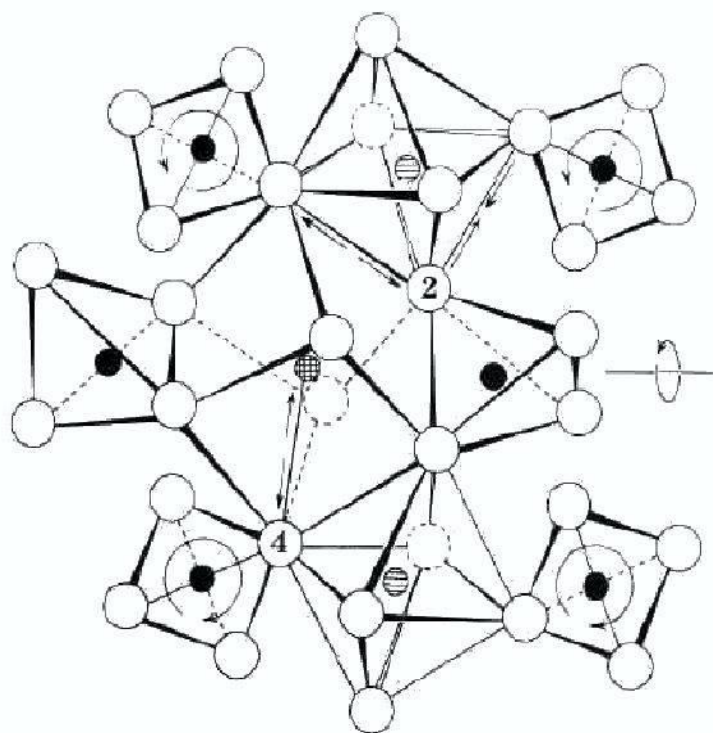
Osim ovakvih poliedarskih distorzija, relaksacija u strukturi granata se takođe može postići rotacijom tetraedra. Da bi jasno izrazili ovu rotaciju, Born i Zemann (1964) su definisali poziciju ugla ( $\alpha$ ) kao manjeg od dva ugla između tetraedarske O-O ivice normalne na  $\bar{4}$  osu simetrije i dve kristalografske ose normalne na  $\bar{4}$  osu simetrije. Tom prilikom su izmerene vrednosti  $\alpha$  za pirop od  $28,3^\circ$  i za grosular od  $25,4^\circ$ . Ostale objavljene vrednosti su:  $24,66^\circ$  za sintetički grosular (Geiger i Armbruster, 1997);  $25,60^\circ$ - $25,98^\circ$  za intermedijarni grosularsko-uvarovitski čvrsti rastvor (Wildner i Andrut, 2001);  $26,50^\circ$  za sintetički teseralni uvarovit (Andrut i Wildner, 2002);  $27,0^\circ$  za

spesartin i  $27,4^\circ$  za almandin (Novak i Gibbs, 1971); kao i  $27,18^\circ$  za sintetički andradit (Armbruster i Geiger, 1993).

Euler i Bruce (1965) su proučavali koordinate kiseonika u granatima. Kao rezultat tih proučavanja dobijeno je da se parametri kiseonika mogu definisati tzv. „polarnim” koordinatama koji opisuju veličinu ( $p$ ), oblik ( $\sigma$ ) i orijentaciju ( $\varphi$ ) kiseonikovog oktaedra. Ovaj koordinacioni poliedar je pravilan isključivo ukoliko je  $\sigma=\sigma_0=\cos^{-1}(1/\sqrt{3})=54,75^\circ$ ; najnepravilniji oblik dodekaedra zahteva da je  $p=0,1686$ ; a tetraedar je pravilan ukoliko je  $p=0,1470$  (sa  $\sigma=\sigma_0$  i  $\varphi=0$ ). Kasnije su Basso i dr. (1983) definisali još jednu „polarnu” koordinatu kiseonikovog atoma ( $\Phi_{ox}$ ).

Robinson i dr. (1971) su odredili da su kvadratna izduženja i uglovna odstupanja između veza linearno povezani kod deformisanih oktaedarskih i tetraedarskih koordinacionih poliedara, kao i da obe vrednosti prikazuju promene u dužinama veza i uglovima između veza. Kvadratno izduženje pruža kvantitativnu meru poliedarske distorzije i nezavisno je od efektivne veličine poliedra. Takođe, distorzija  $\text{SiO}_4$  tetraedra u granatu je zavisna od efektivne veličine  $\{X\}$  katjona u graničnom dodekaedru.

Meagher (1975) je proučavao pirop i grosular u pogledu uticaja temperature na ugao  $\alpha$ . Ustanovljeno je da se ugao  $\alpha$  tetraedra u piropu ravnomerno smanjuje od  $27,5(2)^\circ$  do  $26,9(2)^\circ$  sa porastom temperature u opsegu od  $25^\circ$  do  $750^\circ\text{C}$ .  $\text{SiO}_4$  tetraedar rotira na takav način da utiče na oktaedar tako što se zajednička ivica oktaedra izdužuje u većoj meri nego ivica koja nije zajednička, smanjujući oktaedarsko uglovno naprezanje. Ove strukturne promene su na neki način slične onima koje bi se pojavile kao rezultat neprekidnog porasta srednjeg  $\{X\}$ -O rastojanja usled hemijske zamene. Na primer, kao što tetraedar u piropu rotira ka manjim uglovima  $\alpha$  tetraedarskih pozicija sa porastom temperature, slična rotacija se javlja kod  $\{X_3\}[\text{Al}_2](\text{Si}_3)\text{O}_{12}$  granata sa porastom srednjeg radijusa  $\{X\}$  katjona. U strukturi granata rotacija tetraedra oko  $\bar{4}$  ose simetrije u smeru smanjivanja ugla  $\alpha$  efektivno povećava veličinu dodekaedra, odnosno takva rotacija tetraedra prouzrokuje isti efekat kao i promene u hemijskom sastavu jonskim izmenama (Slika 5). Ustanovljeno je da se kod grosulara ova rotacija ne događa. Međutim, kasnije su Rodehorst i dr. (2002) dobili nešto drugačije rezultate, t.j. da kod grosulara postoji mala tetraedarska rotacija, zbog toga što se  $y$  i  $z$  koordinate kiseonika malo pomeraju u temperaturnom opsegu između 103 i 498 K (odnosno, između  $-165^\circ$  i  $225^\circ\text{C}$ ).



Slika 5. Deo strukture granata koji prikazuje kako rotacija tetraedra utiče na relativne dužine  $[Al]O_6$  i  $\{X\}O_8$  poliedarskih ivica. Tetraedar je prikazan da rotira ka manjim  $\alpha$  vrednostima. Obratiti pažnju na veći porast  $\{X\}-O(4)$  rastojanja u poređenju sa  $\{X\}-O(2)$  sa tetraedarskom rotacijom (Meagher, 1975).

Ohashi i dr. (1995) su poredili odnose rastojanja oktaedarsko-dodekaedarske zajedničke ivice ( $O^v \cdots O^v$ ) sa rastojanjima dodekaedarsko-dodekaedarske zajedničke ivice ( $O^v \cdots O^{ix}$ ), kako bi izrazili njihovu zavisnost sa promenama tetraedarskog pozicionog ugla ( $\alpha$ ) za čitav niz različitih granata. Utvrđeno je da postoji linearna zavisnost ovakvih odnosa rastojanja sa uglom  $\alpha$  za određene vrste granatskih izomorfni serija, kao i odstupanja u zavisnosti od granatskih hemijskih sastava. Ovde bi trebalo napomenuti da je njihovo ( $O^v \cdots O^v$ ) rastojanje adekvatno  $O(1)-O(4)$ , dok je ( $O^v \cdots O^{ix}$ ) adekvatno  $O(4)-O(6)$  rastojanju oznaka atoma koje su prikazali Novak i Gibbs (1971).



### 3. PRETHODNA PROUČAVANJA DESIMETRIZACIJE POJEDINIH GRANDITA

Kada je kristalna struktura granata prvi put bila određena od strane Menzer-a (1926 i 1928), određena je u teseralnoj simetriji u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$ . Od tada, pa do danas, kod nekih vrsta granata je utvrđeno da postoji birefrakcija koja bi logično trebalo da ukazuje na neteseralnu simetriju.

Među silikatnim granatima postoji samo nekoliko primera-grupa kod kojih je simetrija niža od  $Ia\bar{3}d$  sigurno potvrđena.

Jedna od takvih skupina neteseralnih granata pripada majoritskoj grupi (Smith i Mason, 1970), čija je karakteristika da sadrže stehiometrijski više Si na 12 O atoma, i da se Si nalazi u koordinaciji četiri i šest. Takvi primeri se mogu naći u kristalima granata sintetisanim na visokim pritiscima i temperaturama, a koji kristališu u prostornoj grupi  $I4_1/a$ :  $Mn_4Si_4O_{12}$  (Fujino i dr., 1986),  $Mg_4Si_4O_{12}$  (Angel i dr., 1989; Heinemann i dr., 1997),  $(Ca_{0,49}Mg_{2,51})(MgSi)Si_3O_{12}$  (Hazen i dr., 1994), itd. Ekvivalenti ovakvih uzoraka u prirodi još uvek nisu pronađeni (Grew i dr., 2013).

Slične karakteristike sa majoritskom grupom imaju i neki sintetički germanati, kao što su:  $CdGeO_3$  (Prewit i Sleight, 1969),  $Ca_3Mn_2Ge_3O_{12}$  (Heinemann i Miletich, 2000),  $CaGeO_3$  (Nakatsuka i dr., 2005), itd.

Ako je  $Mn^{3+}$  prisutan u oktaedarskoj koordinaciji, može se pojaviti tzv. „Jahn–Teller“-ova distorzija koja je pronađena kod krajnjeg člana varijeteta hidrogranata-henritermijerita,  $Ca_3Mn^{3+}_2(SiO_4)_2(OH)_4$  (Aubry i dr., 1969; Armbruster i dr., 2001), kao i kod njegovog Al-preovlađujućeg analoga-holtstamita,  $Ca_3(Al,Mn^{3+})_2(SiO_4)_{3-x}(H_4O_4)_x$  (Hålenius i dr., 2005). Ove mineralne vrste kristališu u prostornoj grupi  $I4_1/acd$ .

U vezi sa prethodnim, relativno skoro su Boiocchi i dr. (2012) objavili rad o skoro „čistom“ spesartinu (koji sadrži samo 0,09 Fe i 0,04 Ca p.f.u.-engleski: per formula unit, odnosno po jedinici formule), ali koji ima „samo“ 2,52 Si p.f.u. (ovaj manjak je popunjen sa OH i F u skoro podjednanim količinama). Obzirom da kristališe u p.g.  $I4_1/acd$ , ovaj spesartin je prvi primer takve simetrije koji ne sadrži  $Mn^{3+}$ , a desimetrizacija je pripisana (OH, F)<sub>4</sub> grupama.

Dakle, granati iz grupe majorita i henritermijerita (kao i njihovih analoga) pokazuju vrlo značajna odstupanja dimenzija jedinične ćelije u odnosu na teseralnu simetriju, i zbog toga se ovakav tip simetrije može lako i jednostavno identifikovati.

S druge strane, Marezio i dr. (1978) su predložili da su svi oksidni granati neteseralni na osnovu upoređenja intenziteta i pojava dodatnih refleksija (uočenih rendgenskom metodom difrakcije sa monokristala), a koje su zabranjene u teseralnoj  $Ia\bar{3}d$  p.g. Po njima, prava simetrija granata je  $R\bar{3}$ , uključujući i prirodne Mn i Cr silikatne granate.

Takođe, dokumentovano je da i sintetički granati sastava  $A_3B_5O_{12}$ , kao što su npr.:  $Y_3Fe_5O_{12}$ ,  $Gd_3Ga_5O_{12}$ ,  $Y_3Ga_5O_{12}$ ,  $Y_3Al_5O_{12}$ ,  $Er_3Ga_5O_{12}$ , i sl., imaju  $R\bar{3}$  simetriju (Dong i Lu, 1991; Rodić i dr., 1999), a koja proizilazi usled raspodele katjona u A i B položajima i usled sprezanja magnetne i elastične energije, t.j. pojave magnetostrikcije.

Što se tiče grandita, situacija kod ove grupe je mnogo kompleksnija, jer postoji čak pet mogućih uzroka optičke anizotropije, od kojih je peti možda i najvažniji (t.j. različita raspodela  $Fe^{3+}$  i  $Al^{3+}$  u oktaedarskim položajima).

S tim u vezi, ovde navodimo kratak prikaz relevantnih literaturnih podataka koje možemo podeliti u tri glavne grupe:

1. publikacije koje obuhvataju, pre svega, rendgenske metode proučavanja;
2. publikacije kod kojih nedostaju rendgenske metode proučavanja, pa je desimetrizacija određena indirektno (uglavnom optičkom mikroskopijom); i
3. publikacije koje razmatraju desimetrizaciju strukture putem teorije, matematičkih proračuna, kompjuterskih simulacija, i sl.

Takéuchi i Haga (1976) su metodom rendgenske difrakcije sa monokristala proučavali anizotropni grandit sastava  $Gr_{86}Adr_{32}$  (Munam, Severna Koreja; Napomena: skraćenice imena minerala u daljem tekstu su po nomenklaturi date od strane Whitney and Evans, 2010), i prvi utvrdili da kod silikatnih granata postoji katjonska raspodela koja snižava njihovu simetriju do  $Fddd$ ,  $I2_1/c$  ili  $I\bar{1}$  strukture.

Takéuchi i dr. (1982) su metodom rendgenske difrakcije sa monokristala proučavali anizotropne grandite sastava  $Adr_{58}Gr_{42}$  (ICDD-PDF 85-1370; Kamaishi, Japan),  $Gr_{87}Adr_{33}$  (ICDD-PDF 85-0500 i ICDD-PDF 85-1369; Munam, Severna Koreja; isti uzorak kao i Takéuchi i Haga, 1976), kao i  $Gr_{80}Adr_{20}$  (ICDD-PDF 85-

1370; Moravia, Čehoslovačka). Dva uzorka ( $\text{Adr}_{58}\text{Grs}_{42}$  i  $\text{Grs}_{80}\text{Adr}_{20}$ ) kristališu u  $Fddd$  p.g., dok je za  $\text{Grs}_{67}\text{Adr}_{33}$  utvrđena  $I\bar{1}$  p.g.

Hirai i Nakazawa (1986) su snimali precesione fotografije uzorka sastava  $\text{Adr}_{50}\text{Grs}_{45}\text{Sps}_5$  (Mul-Kum, Južna Koreja). Tom prilikom je uočena serija zabranjenih refleksija u teseralnoj  $Ia\bar{3}d$  p.g., tako da su  $Fddd$  ili  $C2/c$  p.g. pretpostavljene kao adekvatne.

Allen i Buseck (1988) su vrlo detaljno proučili anizotropni  $\text{Grs}_{90}\text{Adr}_6\text{Alm}_4$  uzorak (Eden Mills, Vermont, SAD) pomoću optičke mikroskopije, XRPD, metodom rendgenske difrakcije sa monokristala, IC spektroskopijom i transmissionom elektronskom mikroskopijom (TEM-Transmission electron microscopy, i to sledećim metodama: HRTEM-High-resolution transmission electron microscopy-transmisiona elektronska mikroskopija visoke rezolucije, SAED-Selected area electron diffraction-elektronska difrakcija izabrane oblasti, CBED-Convergent beam electron diffraction-difrakcija konvergentnog snopa elektrona); kao i  $\text{Grs}_{99}\text{Adr}_1$  uzorak (Asbestos, Kanada) IC metodom. Oba uzorka su iz metasomatskih rodingita (t.j. nastalih na  $<300$  °C), i sadrže 0,10-0,23 tež.%  $\text{H}_2\text{O}$ .

Kod grandita iz Eden Mills-a utvrđeno je da rendgenska difrakciona analiza praha (XRPD) i TEM (HRTEM, SAED, CBED) nisu pokazale nikakav dokaz o odstupanju od teseralne simetrije. Sa druge strane, ostale metode (t.j. optička mikroskopija, rendgenska difrakcija sa monokristala i IC), jesu. Zaključeno je da je ovaj uzorak trikliničan (p.g.  $I\bar{1}$ ), i to uglavnom na osnovu Hamilton-ovog (1965) testa (trebalo bi napomenuti da se kod ovog testa upoređuju R-faktori dobijeni iz dva različita modela koji imaju različit broj stepena slobode). Međutim, utvrđeno je i da precesione fotografije ne pokazuju dodatne refleksije, širenje pikova, a ni dublete difrakcionih maksimuma karakteristične kako za bližnjenje, tako i za narušavanje  $Ia\bar{3}d$  simetrije. Prisutne su obe raspodele: Ca-Fe u dodekaedarskim i Al-Fe u oktaedarskim položajima. Ovaj uzorak je takođe proučavan pre i posle žarenja na temperaturama do 870 °C. Posle žarenja, postaje skoro potpuno izotropan i bez hidroksilne komponente; a vrednosti R-faktora su skoro identične za  $I\bar{1}$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g., ukazujući da je struktura bliža teseralnoj nego što je to bio slučaj pre žarenja. Drugi uzorak (Asbestos, Kanada) takođe pokazuje neteseralnu raspodelu OH grupa (IC).

Kingma i Downs (1989) su proučili anizotropni  $\text{Adr}_{94}\text{Grs}_{5}\text{Sps}_1$  grandit (Sonoma Range, Nevada, SAD) metodom rendgenske difrakcije sa monokristala. Na osnovu Hamilton-ovog testa, zaključeno je da je ovaj uzorak trikliničan (p.g.  $I\bar{1}$ ) sa različitom Fe i Al raspodelom u osam simetrijski jedinstvenih oktaedarskih položaja.

Shtukenberg i dr. (2002, 2005 i 2006) i Frank-Kamenetskaya i dr. (2007) su pomoću matematičkih proračuna, EMPA, optičke mikroskopije i metodom rendgenske difrakcije sa monokristala proučavali anizotropne grandite sastava  $\text{Grs}_{92}\text{Adr}_8$  i  $\text{Adr}_{58}\text{Grs}_{42}$  (Bazhenovskoe, Rusija); kao i  $\text{Grs}_{77}\text{Adr}_{23}$  (Dinaboko, Mali). Prvi uzorak pokazuje vrlo slabu birefrakciju ( $\Delta n=0,0002$ ), dok ostala dva pokazuju jaku ( $\Delta n \geq 0,007$ ). Na osnovu broja dodatnih refleksija karakterističnih za narušavanje  $Ia\bar{3}d$  simetrije, zauzeća kristalografskih položaja i međuatomskih rastojanja, zaključeno je da je  $\text{Grs}_{92}\text{Adr}_8$  teseralan (p.g.  $Ia\bar{3}d$ ),  $\text{Grs}_{77}\text{Adr}_{23}$  trikliničan (p.g.  $I\bar{1}$  ili  $II$ ) i pseudorombičan, dok je  $\text{Adr}_{58}\text{Grs}_{42}$  rombičan (p.g.  $Fddd$ ).

Akizuki (1984 i 1989) i Akizuki i dr. (1998) su metodama optičke mikroskopije određivali simetriju raznih grandita. Na primer,  $\text{Grs}_{86}\text{Adr}_{14}$  (Eden Mills, Vermont, SAD) i „narandžasti“ grosular (Jeffrey Mine, Asbestos, Kanada) su monoklinični;  $\text{Grs}_{80}\text{Adr}_{20}$  (Fujikaramari, Japan) i  $\text{Adr}_{80}\text{Grs}_{20}$  (Kamihogi, Japan) su triklinični; dok su „bezbojni“ i „zeleni“ grosular (Jeffrey Mine, Asbestos, Kanada) rombični.

Gali (1983) je pokazao da se kod anizotropnih grandita različite p.g. mogu proizvesti iz srednjih vrednosti podataka difrakcionih intenziteta koji su dobijeni iz različitih kristalnih fragmenata. Raspodela Al i Fe u čvrstom rastvoru je kontrolisana rastom  $\{110\}$  pljosni. Obzirom da je ova raspodela asimetrična, osam neekvivalentnih koordinacionih poliedara Al i Fe sa različitim orijentacijama se razvija u toku procesa rasta. Simetrija kristala koji raste na takav način je  $I\bar{1}$ , što se smatra pravom, t.j. osnovnom simetrijom anizotropnih grandita. Sve centrosimetrične podgrupe p.g.  $Ia\bar{3}d$  se zatim mogu proizvesti iz takvih fragmenata kristala koji imaju morfologiju  $\{110\}$ .

Hatch i Griffen (1989) su na osnovu teorijske analize grupa (koja je zasnovana na tzv. Landau-ovom formalizmu) pokazali da se fazne transformacije, odnosno prelazi od p.g.  $Ia\bar{3}d$  ka njenim podgrupama mogu pojaviti na tri različita načina, pri čemu primitivna jedinična ćelija ostaje sačuvana:

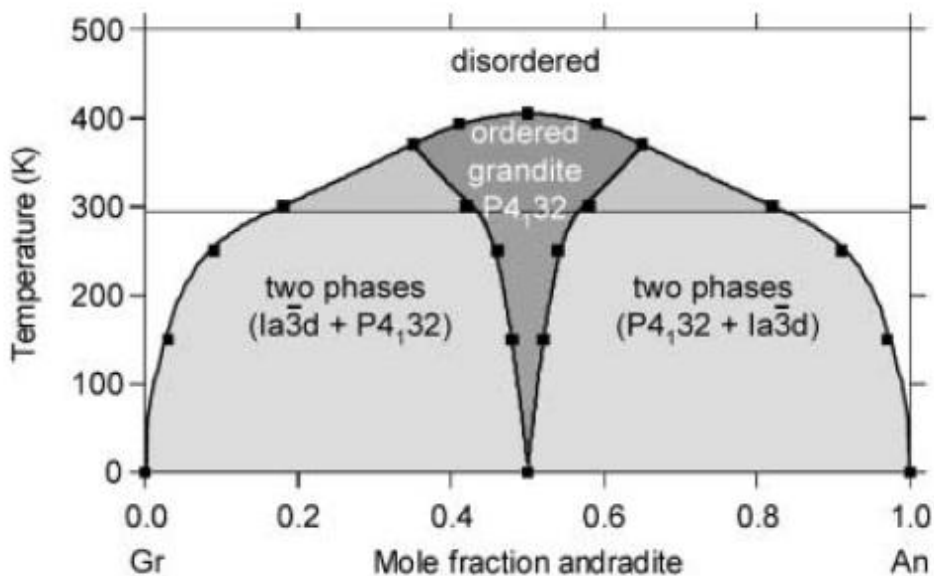
- $T_{2g}$  fazni prelaz koji vodi ka prostornim grupama  $R\bar{3}c$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$ ;

- $T_{1g}$  fazni prelaz koji vodi ka prostornim grupama  $R\bar{3}$ ,  $I4_1/a$ ,  $I2/c$  i  $I\bar{1}$ ; i

-E<sub>g</sub> fazni prelaz koji vodi ka prostornim grupama  $I4_1/acd$  i  $Ibca$ .

Po ovim autorima,  $C2/c$  je ista p.g. kao i  $I2/c$ , samo sa različitim izborom  $a$ -ose. Osnovu mehanizma prelaza čini Al-Fe<sup>3+</sup> raspodela u oktaedarskom položaju, a jedan od glavnih pokretača fazne transformacije je temperatura. Ovde bi još trebalo napomenuti da su ovi autori pošli od p.g.  $Ia\bar{3}d$  ka njenim podgrupama, za razliku od Gali-ja (1983) kod kojeg je polazna osnova bila p.g.  $I\bar{1}$ .

Becker i Pollok (2002) su izvršili određene matematičke proračune i tzv. „Monte Karlo“ simulacije za grosularsko-andraditske čvrste rastvore, u cilju boljeg razumevanja: promene sadržaja Al i Fe<sup>3+</sup>; termodinamičkih procesa; hemijskih karakteristika; struktura; kao i stabilnosti u svakoj fazi ponaosob. Po tim proračunima, postoji uređena struktura sa Al i Fe<sup>3+</sup> u odnosu 1:1, u kojoj se Al- i Fe-oktaedri smenjuju duž glavnih teseralnih kristalografskih osa. Iako je ovakav uređeni grandit energetski u prednosti u odnosu na 1:1 mešavinu krajnjih članova grosulara i andradita, ovakva struktura je stabilna samo na temperaturama ispod ~500 K (t.j. ispod ~227 °C). Na višim temperaturama nastaje kompletna serija čvrstih rastvora između grosulara i andradita koju karakteriše neuređenost (Slika 6). Ovakvi proračuni su takođe pokazali da postoje praznine u mešljivosti (engleski: gaps) između grosulara i grandita, kao i između grandita i andradita samo ispod ~430 K (~157 °C).



Slika 6. Fazni dijagram za nisko-temperaturni grosularsko-andraditski čvrsti rastvor do 500 K (Becker i Pollok, 2002).

Osim za grandite, publikovani su i neki podaci za ugrandite. Tako su Andrut i Wildner (2001 i 2002), Wildner i Andrut (2001) i Andrut i dr., (2002) vrlo detaljno optičkom mikroskopijom, EMPA, IC, TEM (SAED), UV-VIS absorpcionom spektroskopijom i rendgenskom metodom difrakcije sa monokristala, kao i raznim matematičkim proračunima, proučavali anizotropne uzorke sastava uvarovit-grosular sa 48-71 mol.% uvarovitske komponente sa lokaliteta Saranov, Veselovsk i Saranka (Ural, Rusija). Ovi uvaroviti se odlikuju jakom birefrakcijom (0,006) i rombdodekaedarskom morfologijom. IC spektri ukazuju na OH grupe u strukturi. Utvrđeno je da pet uzoraka kristališu u  $I\bar{1}$  p.g., dok jedan uzorak ima simetriju  $Fddd$ .

Ovde bi trebalo napomenuti da postoje i podaci o desimetrizaciji nekih uzoraka piralspitsko-granditskog sastava. Na primer, Dempsey (1980) je rendgenskom metodom difrakcije sa monokristala proučavao sintetički granat sastava pirop-grosular ( $Py_{90}Gr_{10}$ ) i ustanovio da je Ca-Mg raspodela prouzrokovala promenu strukture, verovatno do  $I2_13$  p.g. Uzorak je izotropan.

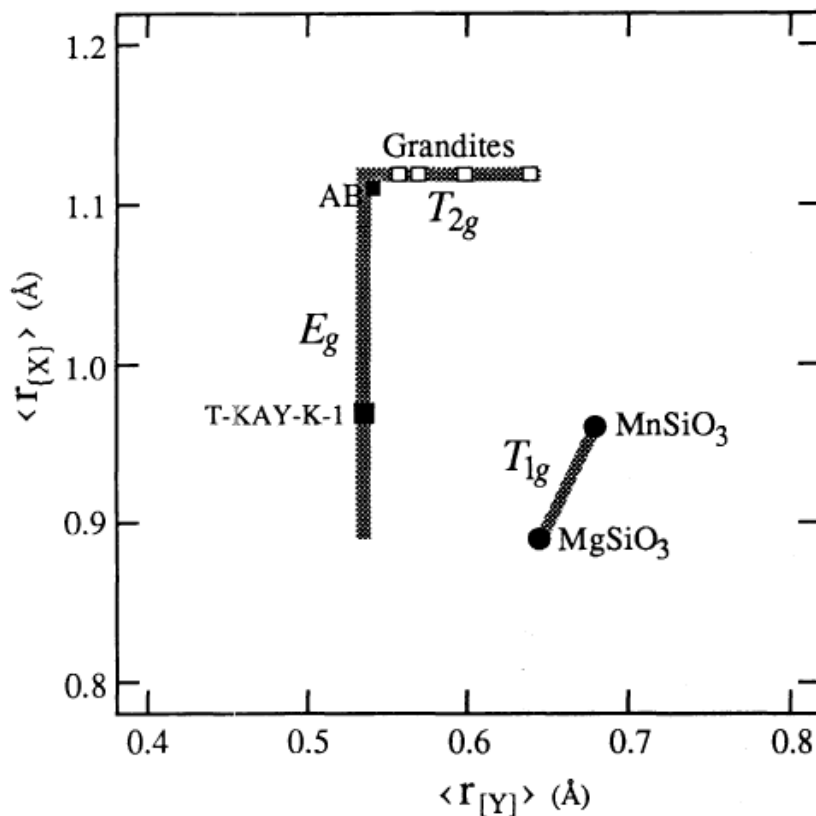
Griffen i dr. (1992) su proučavali prirodni anizotropni uzorak piralspitsko<sub>75</sub>-granditskog<sub>25</sub> sastava rendgenskom metodom difrakcije sa monokristala, EMPA, Mössbauer spektroskopijom i IC metodom. Utvrđeno je da je uzorak bez vode i da kristališe u p.g.  $I4_1/acd$ , a na osnovu Hamilton-ovog testa (t.j. ima najniže R-faktore u odnosu na  $Ia\bar{3}d$ ,  $I4_1/a$ ,  $Fddd$ ,  $I\bar{1}$  i  $Ibca$  p.g.). Međutim, utvrđeno je i da precesione fotografije ne pokazuju bližnjenje, neteseralne parametre ćelije, a ni dodatne refleksije za narušavanje  $Ia\bar{3}d$  p.g. Kao glavni uzrok birefrakcije i desimetrizacije navodi se različita raspodela katjona u dodekaedarskom položaju, t.j. da su u jednom (X1) prisutne piralspitske ( $Fe^{2+}$ , Mg i Mn) komponente, dok je u drugom (X2) prisutna granditska (Ca) komponenta. Uzrok ovakve raspodele ovi autori vide u specifičnim uslovima geneze postanka, pri visokim pritiscima (0,8-1,2 GPa) i relativno niskoj temperaturi (200-400 °C).

Raspodela srednjih radijusa katjona u X i Y položajima u publikovanim radovima (do 1992. god.) za neteseralne granate različitih sastava (Takéuchi i dr., 1982; Fujino i dr., 1986; Allen i Buseck, 1988; Kingma i Downs, 1989; Angel i dr., 1989; i Griffen i dr., 1992) prikazana je skupno na *Slici 7*.

Rezultati za nekoliko proučavanih uzoraka (t.j. konkretno za grandite: Allen i Buseck, 1988; Kingma i Downs, 1989; kao i za piralspite-grandite: Dempsey, 1980; i

Griffen i dr., 1992) su oštro kritikovani i stavljeni pod osnovanu sumnju od strane Rossmanith-a i Armbruster-a (1995), koji su smatrali da prilikom određivanja tih struktura nije uzeta u razmatranje, pre svega, pojava tzv. “Umweganregung”-a (t.j. višestrukih difrakcija kod rendgenskog Mo i Cu zračenja sa monokristala). Dodatni argumenti za kritiku su bili, između ostalog, i nepostojanje zabranjenih refleksija koji narušavaju p.g.  $Ia\bar{3}d$ , kao i upotrebu Hamilton-ovog testa kao preovlađujućeg u izboru prostorne grupe.

Antao i Klincker (2013) i Antao (2013) dodatno kritikuju i sve preostale prethodne radove vezane za desimetrizaciju ugrandita, ukazujući da anizotropiju granata prvenstveno prouzrokuje napon između više faza različitog sastava (t.j. uzrok 4). Samim tim, ovi autori zaključuju da je rendgenska metoda difrakcije sa monokristala neadekvatna za određivanje takvih uzoraka jer su više-fazni, pa je u tom smislu mnogo adekvatnija rendgenska difrakciona analiza praha (XRPD).



Slika 7. Raspodela srednjih radijusa katjona u X i Y položajima neteseralnih granata. Sive trake predstavljaju opsege veličina u serijama čvrstih rastvora  $Ca_3(Al,Fe^{3+})_2Si_3O_{12}$  ( $T_{2g}$ );  $(Ca,Fe^{2+},Mg,Mn)_3Al_2Si_3O_{12}$  ( $E_g$ ); i  $(Mn,Fe^{2+},Mg)SiO_3$  ( $T_{1g}$ ) (Griffen i dr., 1992).

#### **4. PRETHODNA PROUČAVANJA MAKROSKOPSKI ZONARNOG GRANDITA SA MEKE PRESEDLE**

Dominantan položaj Kopaonika u morfološkoj i geološkoj građi Srbije, kao i mnogobrojne rudne pojave na ovim prostorima, uticali su da je oduvek bio u centru pažnje velikog broja kako naših, tako i stranih geologa i istraživača koji su dali veliki broj publikacija. Prve opširnije i potpunije podatke o geološkoj građi Kopaonika dao je Urošević (1908).

Raznovrsnim proučavanjima Kopaoničke oblasti (geološka, metalogenetska, mineraloška i sl.) kasnije su se bavili Stefanović i Pavlović (1960), Milovanović i Ćirić (1960-1963 i 1965-1966), Ćirić i Karamata (1962), Radukić (1965), Mičić i dr. (1972), Poharc (1972), Knežević-Đorđević i Đorđević (1973), Mičić (1974), itd.

Kontaktno-metamorfne stene i pojave na Kopaoniku, nastale delovanjem granodioritskog plutona na različite sedimentne i druge stene, brojne su i raznovrsne. Petrografski prikaz ovih stena tercijarne starosti, kao i detaljan opis karaktera njihovih promena, odnosa prema plutonu, lokacije, itd., prikazane su u monografiji Geologija Srbije-Metamorfizam (Aleksić i dr., 1987).

Pojedina detaljnija mineraloško-petrološka proučavanja na području Meke Presedle prethodno su izvršili Dimitrijević i Dragić (1957), Radukić (1965), Poharc (1972), Knežević-Đorđević i Đorđević (1973), Poharc i dr. (1977), Tančić (1990), Tančić i Dimitrijević (1992), Dimitrijević i Tančić (1998), Tančić (2008) i Tančić i dr. (2012a).

Sa ove lokalnosti Poharc i dr. (1977) su prethodno proučili dva uzorka grandita sa sastavima koji približno odgovaraju srednjim članovima ( $Grs_{55}Adr_{36}$  i  $Adr_{48}Grs_{42}$ ); Tančić (1990) i Dimitrijević i Tančić (1998) su proučili dva uzorka hidrograndita sastava koji su nešto bliži krajnjim članovima ( $Grs_{80}Adr_{20}$  i  $Adr_{62}Grs_{38}$ ); dok je Radukić (1965) proučio dva uzorka granata pretežno andraditskog tipa ( $Adr_{75}Grs_{25}$  i  $Adr_{67}Grs_{33}$ ), ali sa lokalnosti koja je bliža Mrkonju nego Mekoj Presedli.



Velike razlike u sastavu proučavanih grandita, kao i drugih mineralnih vrsta-grupa koje se javljaju zajedno u paragenezi: t.j. epidoti, skapoliti, feldspati, pirokseni, amfiboli, itd. (Tančić 1990; Tančić i Dimitrijević, 1992; Dimitrijević i Tančić, 1998), smatramo vrlo značajnim, jer očigledno ukazuju na veliku raznovrsnost i veoma širok dijapazon pojavljivanja granata iz serije grosular-andradit, a istovremeno i na složenost genetskih uslova (promene p-T uslova kristalizacije, priliv određenih hemijskih komponenti, fazne ravnoteže, itd.) u kojima su nastali. Obzirom na do sada dobijene rezultate, takođe se može očekivati i nalazak krajnjih članova ove serije.

Shodno tome, precizna odredba svih pomenutih minerala je vrlo važna, jer zajedno sa petrografskim poznavanjem odnosa na terenu može značajno doprineti boljem razumevanju i rekonstrukciji termodinamičkih zbivanja izazvanih kontaktom granodioritskog plutona i okolnih stena.

Makroskopski zonarni grandit proučavan u ovom radu je prethodno analiziran sledećim međusobno korelativnim metodama: mikroskopska, rendgenska, hemijska (SEM-EDS) i spektroskopska (IC); dok je njegova struktura proučavana Rietveld-ovom metodom u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$  (Tančić, 2008). Takođe, izvršena su i proučavanja: stepena poliedarskih distorzija, stepena rotacije tetraedra, katjonskog sastava tetraedra, kvadratnih izduženja tetraedra i oktaedra, kao i mikrostrukture.

Mikroskopskim proučavanjima utvrđeno je da granat pokazuje blagu anizotropiju sa karakterističnim sektorskim pomračenjima (*Slika 6*; Tančić, 2008). Nebližnjen je, čime je isključena ova prva mogućnost kao uzrok optičke anizotropije. Pri manjem mikroskopskom uvećanju, na prvi pogled se čini da je granat u formi jednog monomineralnog zonarnog zrna. Sadrži brojne frakture i pukotine u obliku mreže koje su ispunjene neprovidnim mineralom, verovatno limonitom  $[\text{FeO}(\text{OH}) \times n\text{H}_2\text{O}]$ . Pri većim uvećanjima može se bolje i jasnije videti da je ovaj granat u formi kriptokristalastih lamelarnih agregata. Uzorak je uglavnom homogenog faznog sastava, t.j. sastoji se od granata koji dominira i sa vrlo malom količinom akscesorno uklopljenih skapolita, plagioklasa i nekoliko zrna alterisanog piroksena. Bliže obodu količina skapolita raste do oko 5-6 %.

Rendgenskim XRPD proučavanjima utvrđeno je da se zone A-D sastoje od monomineralnog granata grosularsko-andraditskog tipa, dok se zona E takođe sastoji od granata grosularsko-andraditskog tipa koji dominira nad skapolitom koga ima nekoliko

% (Tabele 3-7, Slike 7-11; Tančić, 2008). U okviru ovih proučavanja ustanovljene su značajne razlike u intenzitetima mnogih refleksija granata koje, zajedno sa različitim d-vrednostima i dimenzijama jediničnih ćelija, pokazuju da se radi o zonama različitih hemijsko-strukturnih karakteristika različitog sadržaja  $\text{Al}^{3+}$  i  $\text{Fe}^{3+}$ . Tako se d-vrednosti i izračunate dimenzije jediničnih ćelija (pomoću programa LSUCRIPC; Garvey, 1987) povećavaju od zone A do zone D [ $a_0$  od 11,9167(7) do 11,940(1)Å], a zatim opadaju u zoni E [ $a_0=11,9260(7)$ Å].

U svim granatskim zonama vidljivi su dubleti, odnosno razdvajanja pojedinih difrakcionih maksimuma (engleski: splitting), pogotovo na većim vrednostima  $2\theta$ , a što je konstatovano rendgenskim XRPD proučavanjima. Najkarakterističnije refleksije takvog tipa su (12 2 2) i (8 8 8) na  $\sim 105-106^\circ$  i  $126,5-127,5^\circ$  (Slika 13; Tančić, 2008). Ovakvi dubleti mogu nastati iz dva razloga: 1. Proučavane zone predstavljaju mešavine nekoliko (t.j. dve) mikro-zona različitih granatskih tipova koje kristališu u p.g.  $Ia\bar{3}d$ ; ili 2. Proučavani granati kristališu u nekoj od podgrupa  $Ia\bar{3}d$  p.g..

SEM-EDS proučavanja ukazuju da su zone granata uglavnom grosularsko-andraditskog tipa sa oko 98 at. %  $\text{Ca}^{2+}$  u {c} položaju (oznake Geller-a, 1967). Sadržaji  $\text{Mn}^{2+}$ , a pogotovo  $\text{Mg}^{2+}$  katjona, su veoma niski, a njihove promene su obrnuto proporcionalne sadržaju  $\text{Ca}^{2+}$ , usled njihovog međusobnog zamenjivanja (Tabele 9 i 10, Slika 15; Tančić, 2008). Ovaj uzorak granata je značajno zonaran u raspodeli katjona koji zauzimaju položaj [a]. Naime, sadržaj  $\text{Al}^{3+}$  blago opada od zone 1 do zone 2; zatim blago raste od zone 2 do zone 3; posle toga značajno konstantno opada sve do zone 6 sa razlikom od 6,06 at. %; i najzad blago raste u obodnim zonama 7 i 8. Za ukupnu sumu  $\text{Fe}^{3+}$  i  $\text{Ti}^{4+}$  ustanovljena je obrnuto proporcionalna zavisnost, jer oni zamenjuju  $\text{Al}^{3+}$ . Sadržaj  $\text{Cr}^{3+}$  je vrlo nizak i sa zanemarljivim promenama.

Dobijeni rezultati potvrđuju da postoji izražena zonarnost grandita, kao i da su značajne ciklične varijacije prisutne u raspodeli katjona u položaju [a]:  $\text{Grs}_{57-64}\text{Adr}_{36-43}$  (Tabela 9; Tančić, 2008) odnosno  $\text{Grs}_{55-62}\text{Adr}_{34-43}\text{SpS}_2\text{Alm}_{0-2}$  (Tabela 10; Tančić, 2008); a što je u vrlo dobroj saglasnosti sa  $\text{Grs}_{57-68}\text{Adr}_{32-43}$  (rendgenska XRPD proučavanja, Tabela 8; Tančić, 2008); i  $\text{Grs}_{60-67}\text{Adr}_{33-40}$  (strukturna Rietveld proučavanja, Tabela 14; Tančić, 2008).

Povišeni sadržaji  $\text{Fe}^{3+}$  i  $\text{Ti}^{4+}$  katjona se očigledno poklapaju sa makroskopski vidljivim tamnijim zonama granata (Slika 5; Tančić, 2008). Takođe, ovakva

proučavanja su pokazala da kod ovog granata ne postoje elementi retkih zemalja koji bi zamenili  $\text{Ca}^{2+}$  jone, čime je isključena druga mogućnost kao uzročnik optičke anizotropije.

Dobijeni rezultati izmerenih položaja IC absorpcionih traka (*Tabela 11, Slika 16*; Tančić, 2008) su u svim zonama međusobno veoma slični, i odgovarajući za seriju grosular-andradit (Moenke, 1962; Plusnina, 1967; Moore i dr., 1971; Gadsden, 1975; itd.). U granatskoj zoni E (obodu) prisutna je mala količina skapolita.

U oblastima od oko  $3500\text{-}3660\text{ cm}^{-1}$  koje su karakteristične za prisustvo  $\text{H}_2\text{O}$  i/ili  $\text{OH}^-$  grupa u strukturama granata (Hsu, 1980; Rossman i Aines, 1991; Andrut i Wildner, 2001 i 2002; itd.) očigledno je da nema vidljivih absorpcionih traka. Prisutna je samo široka absorpciona traka na oko  $3440\text{ cm}^{-1}$ , koja je karakteristična za slabo vezanu  $\text{H}_2\text{O}$ , i često prisutna usled adsorbovane  $\text{H}_2\text{O}$  (Rossman i Aines, 1991). Spektroskopskim IC proučavanjima; razmatranjem sastava tetraedra; kao i pomoću  $d_{420}$  vrednosti utvrđeno je da su proučavane zone bez vode, odnosno  $\text{OH}^-$  grupa u strukturi granata. Na takav način isključena je treća mogućnost kao uzročnik optičke anizotropije grandita.

Ovakvi spektri (iako mikroskopski anizotropnih uzoraka) su karakteristični za izotropne izometrične granate sa prisustvom  $\leq 17$  IC absorpcionih traka u skladu sa  $Ia\bar{3}d$  prostornom grupom (McAloon i Hofmeister, 1993). Objašnjavajući optičku anizotropiju kod granata, ovi autori više daju prednost naprezanjima u rešetci kao uzroku, nego Al-Fe raspodeli.

Međusobnim poređenjem grafičkih rezultata profilnog Rietveld utičnjavanja (*Slike 17-21*; Tančić, 2008) može se videti da većina intenziteta opada od zone A ka zoni E, t.j. od jezgra ka obodu. Druga karakteristika je da su neki intenziteti različiti za zone A i C u poređenju sa zonama B, D i E, posebno u oblasti opsega Bragg-ovih  $2\theta$  uglova od oko  $87^\circ$  do  $107^\circ$ . Utvrđeno je da se dimenzije jediničnih ćelija (*Tabela 12*; Tančić, 2008) povećavaju od zone A do zone D [ $a_0$  od  $11,9188(6)$  do  $11,9342(8)\text{Å}$ ], a zatim opadaju u zoni E [ $a_0=11,9287(6)\text{Å}$ ]. Ovim strukturnim proučavanjima utvrđeno je takođe da je u zoni E sadržaj granata  $94,0(3,0)\%$  a skapolita  $6,2(5)\%$ , što je u vrlo dobroj saglasnosti sa mikroskopskim i XRPD proučavanjima. Skapolit ima sledeće dimenzije jedinične ćelije:  $a_0=12,130(2)\text{Å}$ ;  $c_0=7,568(1)\text{Å}$ ; i  $V_0=1113,7(3)\text{Å}^3$ ; sa odnosima  $\text{Ca}:\text{Na}=76(6):24(6)$  i  $\text{Cl}:\text{C}=92(2):8(2)$ , što odgovara graničnoj oblasti sastava mizonit-mejonit.

Kroz različite zone od jezgra ka obodu, proučavani parametri imaju različite oblike promena (SoV-Shape of variations, *Tabela 12*; Tančić, 2008) što ukazuje na njihovu kompleksnost, kvaziciklične promene i oscilatornu zonarnost. Koordinate kiseonika od zone do zone takođe variraju (*Tabela 13, Slika 22*; Tančić, 2008). U A i C zonama postoje generalno suprotne razlike u SoV u odnosu na B i D zone, što je najverovatnije posledica intenzivnih hemijsko-strukturnih promena između zona.

Rietveld-ovim proučavanjima mnogo jasnije se mogu videti dubleti refleksija (12 2 2) i (8 8 8), a koji se nikako ne mogu prikazati kao da pripadaju samo jednoj fazi koja kristališe u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$  (*Slika 23*; Tančić, 2008).

Dobijeni rezultati međuatomskih rastojanja i uglova (*Tabela 15, Slika 24*; Tančić, 2008) pokazuju da postoji značajno velika deformisanost Si-O tetraedra u zonama A-C, a koji je uglavnom u skladu sa literaturnim podacima u zonama D i E. Kod Y-O oktaedra takođe postoji značajno velika distorzija u zonama A i C, i vrlo dobro slaganje za zone B, D i E. Generalno, promene u oktaedarskim položajima su obrnuto proporcionalne sa onima u tetraedarskim položajima (*Slika 24*; Tančić, 2008).

Kod X-O dodekaedra, rastojanje X(1)-O(4) i razlika  $\Delta(X-O)$  su očekivani samo za zone D i E, dok je X(2)-O(4) rastojanje u dobroj saglasnosti samo za zonu B. Za ostala rastojanja uglavnom dobro slaganje je takođe u zonama D i E; delimično dobro u zoni B; dok su značajne distorzije konstatovane u A i C zonama. Rastojanje O(4)-O(7) je u dobroj saglasnosti samo u zoni D. Osim navedenog, u zonama B i C je ustanovljena jedna neobična karakteristika za granditsku grupu granata, t.j. rastojanja O(4)-O(7) su duža nego O(4)-O(6), umesto da je obrnuto. Uglovi dodekaedra su uglavnom u dobroj saglasnosti za zone D i E, delimično dobroj za zonu B, dok su značajne distorzije ponovo prisutne u zonama A i C.

Takođe, poređenjem srednjih O-O rastojanja sa onima za grandite (Novak i Gibbs, 1971), može se videti da su: u tetraedru ona manja u zonama A i C, a veća u zoni B; u oktaedru su veća u zonama A i C; i u dodekaedru su manja samo u zoni B, isto kao i srednje X-O rastojanje. Nasuprot tome, sva ostala srednja rastojanja i svi srednji O-Si-O, O-Y-O i O-X(2)-O uglovi su u svim zonama u vrlo dobroj saglasnosti sa literaturnim podacima (Novak i Gibbs, 1971) i vrlo slični jedni drugima. Postoji samo malo odstupanje u zoni C za O-X(2)-O ugao.

Kao što je pokazao Geller (1967), stvarne vrednosti rastojanja i uglova između jona nisu striktno ona za pojedinačna rastojanja između katjona i kiseonika, zbog toga što minerali nemaju idealne formule. Stoga, usled velike jedinične ćelije koje poseduju granati, male promene kod kiseonikovih pozicionih parametara mogu prouzrokovati značajne razlike u rastojanjima između jona. Međutim, mišljenja smo da ustanovljene distorzije u A i C zonama značajno, dok u zoni B delimično, prevazilaze takve razlike.

Dodatni problem predstavlja i to što se promene izračunatih sadržaja za Ca i Al Rietveld-ovom metodom ne slažu sa hemijskim i rendgenskim (t.j. iz dimenzija jediničnih ćelija), kao ni sa dobijenim vrednostima iz dimenzija jediničnih ćelija Rietveld-ovom metodom (*Tabele 8, 9, 10, 13 i 14, Slika 15*; Tančić, 2008), a naročito u zonama A i C (*Slika 25*; Tančić, 2008). Pretpostavljeno je da su uzrok ovakvoj pojavi promene u strukturi granata, t.j. poliedarske distorzije tetraedra i/ili oktaedra i/ili dodekaedra, a što je takođe razmatrano.

Dakle, sa aspekta granditskih struktura, može se zaključiti da su zone A i C veoma neuređene; zona B je delimično neuređena; dok su zone D i E uređene. Prema tome, zone A i C (kao i delimično B) imaju više karakteristika koje su sličnije piralspitskim nego granditskim vrstama granata.

Pojedine slične karakteristike sa ispitivanim strukturama u ovom radu pronađene su samo kod proučavanih almandina iz lokalnosti Brčela i Brijega u Crnoj Gori (Vulić, 1999), kod kojih takođe postoje mnoga značajna odstupanja u odnosu na literaturne podatke. Kod ovih almandina značajan problem je takođe predstavljalo i utačnjavanje pojedinih refleksija koje se nisu dobro uklapale u p. g.  $Ia\bar{3}d$ , pa je pretpostavljeno da se struktura može opisati u nekoj drugoj prostornoj grupi niže simetrije.

Pretpostavljeno je da postoje sledeći faktori koji su mogli uticati na konstatovane distorzije: 1. Ispitivane zone predstavljaju mešavine nekoliko (t.j. dve) mikro-zone različitih granatskih tipova koje kristališu u  $Ia\bar{3}d$  p. g.; 2. Prisutni su rotacija tetraedra i poliedarske distorzije; 3. Postoji mogućnost da tetraedar nije u potpunosti  $SiO_4$  sastava; 4. Prisutno je zaostalo naprezanje strukture prouzrokovano razlikama između jediničnih ćelija na granicama zona različitih sastava, blizanaca ili zrna; 5. Ispitivani granati kristališu u nekoj od podgrupa prostorne grupe  $Ia\bar{3}d$ ; i 6. Različite kombinacije Faktora 1-5.

Poređenjem srednjih vrednosti za  $R_B$  i  $R_F$  faktore izračunatih kao mešavine dve granatske mikro-zone (*Tabela 16*; Tančić, 2008) sa odgovarajućim za granate koji su određeni kao jedna faza (*Tabela 12*; Tančić, 2008), konstatovano je da su veći za zone A, B i E, slični za zonu D, a manji samo za zonu C. Takođe, izmereni međuatomski uglovi i rastojanja (*Tabela 17*; Tančić, 2008) pokazuju još veća neslaganja i distorzije, kao i standardne devijacije, u odnosu na pojedinačne faze (*Tabela 15*; Tančić, 2008) i literaturne podatke. Prema tome, određivanjem struktura ovih zona kao mešavina dve faze granata koji kristališu u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$  ne mogu se objasniti problemi prethodno utvrđenih neslaganja i dubleta pikova. Dodatna karakteristika koja potvrđuje ovakvu tvrdnju je da je najjača refleksija (4 2 0), kao i mnoge druge, bez vidljivih dubleta (*Slike 26-31*; Tančić, 2008), a što bi bilo neophodno za ispunjenje faktora 1.

U okviru faktora 2 proučavana su katjon-katjon međuatomska rastojanja, uglovi oko kiseonika, poliedarske distorzije i rotacija tetraedra.

Sva rastojanja između Si, Y i X katjona se nalaze u očekivanom opsegu između grosulara i andradita (*Tabela 18*; Tančić, 2008), usled činjenice da se svi ovi joni nalaze u specijalnim položajima u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$ . Njihove promene su vrlo slične i u saglasnosti sa promenama dimenzija jediničnih ćelija i hemijskog sastava. Rastojanja sa X-katjonom takođe ukazuju na relativno konstantan sadržaj kalcijuma i izmenjenog mangana, u saglasnosti sa prethodnim rezultatima.

Uglovi Y-O-Si su skoro isti u svim zonama, u dobroj saglasnosti sa literaturnim podacima, i sa vrlo malim odstupanjem samo za zonu C (*Tabela 19*; Tančić, 2008). Za sve ostale izmerene uglove uglavnom dobra korelacija je utvrđena za zone D i E, dok zone A-C pokazuju veća ili manja neslaganja. Naime, uglovi Y-O-X(1) i Y-O-X(2) su uglavnom manji u zonama A i C, a veći u zoni B. Uglovi X(1)-O-Si su veći u zonama A-C, a X(2)-O-Si su veći u zonama B i D. Uglovi X(1)-O-X(2) su skoro isti u svim zonama, u dobroj saglasnosti sa literaturnim podacima, i sa malim odstupanjem samo kod zone B.

Rezultati poliedarskih distorzija (*Tabela 20*; Tančić, 2008) pokazuju da je uglavnom dobra korelacija ponovo ustanovljena kod D i E zone, dok zone A-C pokazuju veća ili manja neslaganja sa literaturnim podacima. Naime, naprezanja veza [O(1)-O(3)]-[O(1)-O(2)] su veća za A-C zone, a [O(1)-O(5)]-[O(1)-O(4)] su manja za zone A i C i veća za zonu B. Naprezanja uglova [O(1)-Si-O(2)]-109,47° su manja, a

[O(1)-Si-O(3)]-109,47° veća za A-C zone. Naprežanja uglova [O(1)-Y-O(4)]-90,00° i [O(1)-X(2)-O(4)]-69,45° su veća za A i C zone a manja za zonu B, suprotno naprežanju ugla [O(1)-X(2)-O(2)]-69,45°. Naprežanja uglova [O(4)-X(2)-O(6)]-71,70° su manja za A i C zone, a [O(4)-X(2)-O(7)]-71,70° su veća za B zonu i manja za C zonu.

Izračunate vrednosti za rotaciju tetraedra ( $\alpha_1$ ), veličinu ( $p_1$ ), oblik ( $\sigma_1$ ), orijentaciju ( $\varphi_1$ ), polarnu koordinatu ( $\Phi_{ox1}$ ) i odnos [O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)] dodatno potvrđuju da su zone A-C značajno različite u odnosu na D i E zone, a takođe i u odnosu na granate iz literaturnih podataka (*Tabela 21*; Tančić, 2008).

Takođe, iz ovih rezultata, kao i iz *Slike 32* (Tančić, 2008) može se mnogo jasnije uočiti da kod zone D postoji isti trend kao kod zone B, dok kod zone E postoji isti trend kao kod zona A i C, a što je bilo mnogo manje uočljivo prethodnim proučavanjima usled značajno manje rotacije u zonama D i E. Zato se može zaključiti da se rotacija tetraedra u zonama A, C i E povećava u pravcu koji je više karakterističan za andraditsko–piropsko–almandinske vrste, dok se u B i D zonama ova rotacija smanjuje u suprotnom pravcu koji je više karakterističan za grosularsko–Mn-grosularsko–spesartinske vrste (*Slika 32*; Tančić, 2008).

Obzirom na konstatovane distorzije i odstupanja, razmatrana je i hipotetička situacija sa „idealnim” koordinatama kiseonika ( $x_2$ ,  $y_2$  i  $z_2$ ), dimenzijama jediničnih ćelija ( $a_{02}$ ), rotacijama tetraedra ( $\alpha_2$ ), veličine ( $p_2$ ), oblika ( $\sigma_2$ ) orijentacije ( $\varphi_2$ ) i  $\Phi_{ox2}$ , saglasno hemijskom sastavu (*Tabela 22*; Tančić, 2008). Dodatno su takođe izračunate i dimenzije jediničnih ćelija ( $a_{02}'$ ) iz jednačine koju su prikazali Basso i dr. (1984).

Dobro je poznato da se koordinate kiseonika povećavaju od grosulara ka andraditu (Novak i Gibbs, 1971). Prema tome, u skladu sa hemijskim sastavom trebalo bi očekivati da izmerene koordinate kiseonika približno rastu od zone A do zone D, a da zatim opadaju do zone E. Ali, ovi parametri kiseonika odstupaju u većoj ili manjoj meri, što je očigledno prouzrokovano ustanovljenim poliedarskim distorzijama.

Izračunate razlike između „realnih” i „idealnih” podataka (*Tabela 23*; Tančić, 2008) pokazuju da su najveća odstupanja parametra x u A i B zonama; parametra y u C-E zonama; a parametra z u A i C zonama, što je u dobroj saglasnosti sa distorzijama  $\alpha$ ,  $p$ ,  $\sigma$ ,  $\varphi$  i  $\Phi_{ox}$ . Najveće razlike u dimenzijama jediničnih ćelija ( $\Delta a_0$  i  $\Delta a_{02}'$ ) su u zoni E, što je očigledno prouzrokovano značajnijim prisustvom skapolita od 5-6 %.

Izračunate vrednosti poliedarskih zapremina tetraedara (*Tabela 24*; Tančić, 2008) potvrđuju da su Si-O(1), O(1)-O(2), O(1)-O(3) i srednja O-O rastojanja manja u zonama A i C, i uglavnom veća u zoni B. Dobijene vrednosti kvadratnih izduženja i uglovnih odstupanja imaju isti SoV kao ugao O(1)-Si-O(3) a suprotno uglu O(1)-Si-O(2), i u dobroj saglasnosti sa rezultatima naprezanja veze [O(1)-O(3)]-[O(1)-O(2)], naprezanja ugla [O(1)-Si-O(2)]-109,47° i orijentacije- $\varphi$ .

Izračunate vrednosti poliedarskih zapremina oktaedara (*Tabela 24*; Tančić, 2008) potvrđuju da su Y-O(1), O(1)-O(4), O(1)-O(5) i srednja O-O rastojanja veća u zonama A i C i delimično manja u zoni B. Dobijene vrednosti kvadratnih izduženja i uglovnih odstupanja imaju isti SoV kao ugao O(1)-Y-O(4) a suprotno uglu O(1)-Y-O(5) i rezultatima naprezanja veze [O(1)-O(5)]-[O(1)-O(4)], a u dobroj saglasnosti su sa naprezanjem ugla [O(1)-Y-O(4)]-90,00°, rotacije tetraedra ( $\alpha$ ), veličine ( $p$ ), oblika ( $\sigma$ ) i odnosa [O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)].

Parametar  $\sigma$  se odnosi na tetraedarsko-oktaedarske, a  $\varphi$  na tetraedarsko-dodekaedarske distorzije. Može se zaključiti da je promena  $\sigma$  u saglasnosti sa SoV tetraedarsko - oktaedarskih promena, t.j. da je rotacija tetraedra u pravcu koji je karakterističan za andraditsko – piropsko – almandinske vrste u zonama A i C (i delimično E) uticala na oktaedar na takav način da se više ili manje povećao u pravcu koji je karakterističan za andradit. Sa druge strane, rotacija tetraedra u pravcu koji je karakterističan za grosularsko – Mn-grosularsko – spesartinske vrste u B (i delimično D) zonama je uticala na oktaedar na takav način da se više ili manje smanjio u suprotnom pravcu koji je više karakterističan za grosular – Mn-grosular (*Slike 33 i 34*; Tančić, 2008). Dobijene vrednosti kvadratnih izduženja, kao kvantitativnog merila poliedarskih distorzija (Robinson i dr., 1971), kao i uglovnih promena dodatno potvrđuju takva zapažanja.

Odnos [O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)] u zonama A i C je u velikoj meri različit u odnosu na ostale tipove granata (*Slika 32*; Tančić, 2008). Obzirom da je rotacija tetraedra ( $\alpha_1$ ) u ovim zonama slična andraditu, neslaganja su uglavnom prouzrokovana distorzijama oktaedra i dva dodekaedra. Naime, porast zajedničke oktaedarsko-dodekaedarske O(1)-O(4) ivice i smanjenje zajedničke dodekaedarsko-dodekaedarske O(4)-O(6) ivice (*Slika 33*; Tančić, 2008) je značajno uticalo na njihov odnos.



Dobijenim rezultatima poliedarskih distorzija i pomeranja zajedničkih O(1) i O(4) atoma kiseonika mogu se dodatno objasniti, kao i potvrditi razlike između izračunatih sadržaja Ca i Al dobijenih pomoću hemijske analize i Rietveld-ovog metoda, posebno u zonama A i C (*Slika 25*; Tančić, 2008). Naime, u ovim zonama porast ugla  $\alpha$  predstavlja pomeranje zajedničkog O(1) kiseonikovog atoma prema Si sa istovremenim pomeranjem zajedničkog O(4) kiseonikovog atoma u suprotnom pravcu prema X(1) sa povećanjem O(1)-O(4) i smanjenjem X(1)-O(4) i O(4)-O(6) rastojanja.

Dakle, rotacija tetraedra u pravcu povećanja  $\alpha$  dovodi do smanjenja veličine dodekaedra, što je u vrlo dobroj saglasnosti sa ispitivanjima koje je sproveo Meagher (1975), samo u suprotnom smeru (t.j. u smeru opadanja temperature); zatim, distorzija SiO<sub>4</sub> tetraedra u granatima je zavisna od efektivne veličine {X} katjona u dodekaedru sa kojim se graniči (Robinson i dr, 1971); i najзад, deformacija tetraedra mora biti istovremena sa zamenom jona u {c} položaju (Hammonds i dr., 1998).

U zoni B zajednički kiseonikov O(1) atom je pomeren u suprotnom pravcu od Si sa smanjenjem ugla  $\alpha$  i O(1)-O(4) rastojanja, ali takođe sa istovremenim smanjenjem X(1)-O(4) i O(4)-O(6) rastojanja. Istovremeno, drugi procesi su se takođe dogodili u zonama A, B i C, t.j. neuobičajene karakteristike i neslaganja rastojanja O(4)-O(7), uglova O(1)-Si-O(2) i O(1)-Si-O(3), orijentacije ( $\varphi$ ), kvadratnog izduženja i uglovnog variranja sa literaturnim podacima (Novak i Gibbs, 1971). Prema tome, na takav način se može objasniti velika neuređenost u zonama A i C; delimična neuređenost u zoni B; i njihova pojedina svojstva koja su više karakteristična za pirlalpite nego za grandite.

Takođe, svi prethodno prezentirani rezultati su dovoljni da bi se potvrdilo i da su između zona prisutne međusobne interakcije, t.j. da poliedarske distorzije koje postoje u jednoj zoni utiču na susedne zone (*Slika 35*; Tančić, 2008). Rotacija tetraedra najviše utiče na distorziju oktaedra, nešto manje na distorziju X(2) dodekaedra, a najmanje na najudaljeniji X(1) dodekaedar. Samim tim je očigledno da su ovi faktori mogli uticati na konstatovane distorzije.

U okviru faktora 3 proučavana je mogućnost da tetraedar nije u potpunosti SiO<sub>4</sub> sastava, t.j. SiO<sub>4</sub> ↔ O<sub>4</sub>H<sub>4</sub> i Ti<sup>4+[6]</sup>+B<sup>3+[4]</sup>=Al<sup>3+[6]</sup>+Si<sup>4+[4]</sup> substitucije (*Tabele 25 i 26*; Tančić, 2008). Dobijeni rezultati su veoma slični i u opsegu procenjenih standardnih devijacija u poređenju sa adekvatnim. Osnovna razlika je u značajnom snižavanju R<sub>B</sub> i R<sub>F</sub> faktora u zoni A i razumnih parametara zauzeća, što bi moglo ukazivati na delimičnu

zamenu Si sa 4H i/ili B u ovoj zoni. Obzirom da je prethodno dokazano da ne postoji zamena Si sa H, ulazak bora bi trebalo proveriti nekim budućim proučavanjima.

Sa druge strane, a na osnovu strukturnih formula izračunatih na osnovu 12 kiseonikovih atoma, može se zaključiti da u ispitivanim granatskim zonama ne postoje dokazi za još opštiju „zamenu” vodonikom u ostalim {c} i [a] položajima kao što su utvrdili Basso i dr. (1984), zbog toga što su ovi položaji gotovo u potpunosti „zauzeti” elementima koji uobičajeno ulaze u strukturu grandita.

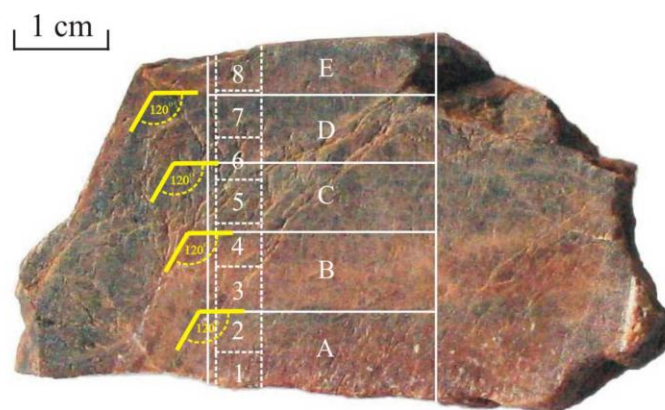
U okviru faktora 4 urađene su analize širenja difrakcionih maksimuma, kako izotropno, tako i anizotropno (*Tabele 28 i 29, Slike 36-38; Tančić, 2008*). Obzirom da većina intenziteta opada od jezgra ka obodu, onda je to u saglasnosti sa izračunatim dimenzijama kristalita koji pokazuju vrlo slične promene (opadaju od oko 2000 do 900Å, t.j. od 0,2 do 0,09 μm). Srednje maksimalno naprezanje je mnogo veće u zonama B i D u odnosu na zone A, C i E. Dobijene vrednosti ovih mikrostrukturnih parametara su takođe u vrlo dobroj saglasnosti sa podacima koje su objavili Dapiaggi i dr. (2005). Ovakva različita naprezanja bi možda mogla biti jedan od uzroka optičke anizotropije ovog granata, a u skladu sa prethodnim ispitivanjima. Utačnjeni koeficijenti sfernih harmonika i parametri naprezanja različito variraju i takođe potvrđuju ranije konstatovane različite karakteristike svih proučavanih zona, pri čemu su obrnuto proporcionalni koeficijenti K41 i K81 i parametri S\_400 i S\_220.

Sinteza dobijenih rezultata ukazala je i na različite p-T-X uslove postanka zona ovog granata. Naime, značajne promene Al<sup>3+</sup>-Fe<sup>3+</sup> sastava između jezgra i oboda ukazuju na promene u sastavima hidrotermalnih rastvora koji su do zone D imali karakteristike povećanja sadržaja gvožđa u odnosu na aluminijum, a da je pri kraju kristalizacije došlo do obrnutog trenda ( $\nearrow$ ). Obzirom da je utvrđeno da ne postoji SiO<sub>4</sub>↔O<sub>4</sub>H<sub>4</sub> zamena, ovaj podatak je iskorišćen da se utvrdi da su sve zone nastale iznad 420 °C (Hsu, 1980), jer mineralne parageneze područja Meke Presedle ne ukazuju da pritisak značajnije odstupa od 2 kbara (Aleksić i dr., 1987). Rotacija tetraedra u smeru smanjenja ugla α u zonama B i D je verovatno izazvana porastom temperature, dok je rotacija tetraedra u smeru povećanja ugla α u zonama A, C i E verovatno izazvana snižavanjem temperature. Istovremeni porast sadržaja andraditske komponente sa povećanjem temperature u zonama B i D koincidira sa porastom naprezanja ( $\nearrow$ ) i očigledno utiče na mnoge parametre u ovim zonama.




## 5. PRIMENJENE METODE PROUČAVANJA

### 5.1. PRIPREMA UZORAKA

Za proučavanja izvršena u ovom radu izabran je uzorak koji je prethodno analiziran drugim korelativnim metodama (Tančić, 2008; Tančić i dr. 2012a). Ovde bi trebalo napomenuti da je primarno taj makrokristal bio u obliku pesnice sa prečnikom od oko 8 cm. Ovaj makro-kristal je prvo isečen na  $\frac{1}{2}$  i  $\frac{1}{4}$ . Zatim je ta  $\frac{1}{4}$  uzorka isečena na paralelne delove debljine od oko 0,5 cm. Najveći središnji deo i svih pet makroskopski vizuelno različitih ispitivanih zona od jezgra ka rubu (obodu) je prikazan na *Slici 8*.



#### LEGENDA-LEGEND:

-  Ceo uzorak ispitivan mikroskopskom metodom  
Whole sample investigated with the microscopic method
-  Zone ispitivane SEM-EDS metodom  
Zones investigated with the SEM-EDS method
-  Zone ispitivane XRPD, IC i Rietveld metodima  
Zones investigated with the XRPD, IR and Rietveld methods

*Slika 8. Proučavani uzorak sa označenim zonama i metodama ispitivanja (Tančić, 2008). Obratiti pažnju da su proučavane zone u ravni rombdodekaedra (110).*

Ceo isečak, širine oko 0,5 cm i dužine oko 3,3 cm duž oblasti predstavljene isprekidanim linijama (*Slika 8*), proučavan je elektronskom analizom mikroprobe (EMPA).

Zone predstavljene punim linijama i A-E oznakama (*Slika 8*) su prvo isečene na jedan veći deo (paralelno duž pravaca jezgro-obod); zatim je ovaj deo pažljivo isečen na pet manjih delova duž pravaca koji su paralelni sa makroskopski vidljivim romb-dodekaedarskim (110) granicama. Tako dobijeni uzorci su sprášeni sa alkoholom u ahatnom avanu i dalje proučavani hemijskim analizama, Raman i Rietveld metodama.

## 5.2. ELEKTRONSKA ANALIZA MIKROPROBE (EMPA)

Elektronska analiza mikroprobe (EMPA) izvršena je na sobnoj temperaturi pomoću JEOL JXA 8100 Superprobe EMPA instrumenta. Elektronski snop je ubrzavan pod naponom od 15 keV i strujom koja je bila podešena na 10 nA. Pet spektrometara instrumenta bila su opremljena sa 5 različitih kristala: *LDE1* ( $2d=6,01$  nm) za kiseonik; *LDE2* ( $2d=9,81$  nm) i *TAP* ( $2d=2,57$  nm) za Si, Al, Na i Mg; *PETJ* ( $2d=0,87$  nm) za Ca, K, Ti i Cr; i *LiF* ( $2d=0,40$  nm) za Fe i Mn. Analiziranje je izvršeno u intervalima na svakih 100  $\mu\text{m}$ , duž pravca dužine 32,6 mm od jezgra do oboda. Dakle, ukupno 327 rezultata tačkastih analiza je dobijeno. Sve analize koje su imale sume ispod 96-97 % smatrane su kao moguće pukotine, a samim tim i odbačene iz budućih proučavanja.

## 5.3. HEMIJSKE ANALIZE

Hemijske analize su izvršene na uzorcima koji su razlagani smešom  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  i  $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$  (2:1) na temperaturi od 1000 °C, a takođe i kombinovanjem  $\text{HClO}_4$  i  $\text{HF}$  (2:1) kiselina, i uparavanjem do suva. Posle toga,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  i elementi retkih zemalja (REE) analizirani su atomskom absorpcionom spektrofotometrijom (AAS, Perkin-Elmer 6500; opremljenim sa grafitnom kivetom za određivanje REE). Fero ( $\text{Fe}^{2+}$ ) komponenta je određivana brzom permanganometrijskom titracijom, posle razlaganja sa  $\text{H}_2\text{SO}_4$  i  $\text{HF}$  (1:2) kiselinama, u inertnoj atmosferi kako bi se izbegla njegova oksidacija. Sadržaji

B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> su analizirani pomoću UV/VIS spektrometra (Perkin-Elmer λ15; metod sa karminskom kiselinom) na uzorcima razlaganim sa Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> na 1000 °C. Gubitak žarenja-G.Ž. je određivan standardnom procedurom, t.j. merenjima težine uzoraka pre i posle 1-časovnog žarenja na 1000 °C.

#### **5.4. SPEKTROSKOPSKA RAMAN PROUČAVANJA**

Konfokalni Raman spektri su dobijeni pomoću HORIBA JOBIN YVON LabRam-HR 800 Raman mikro-spektrometra. Uzorci su pobuđivani na sobnoj temperaturi sa emisionim snopom Ar<sup>+</sup>-lasera od 515 nm, na 30 mW, kroz OLYMPUS objektiv uvećanja 100×. Laserska tačka na površini je bila prečnika od ~1 μm i snage ~5 mW. Svetlo je rasuto holografskom rešetkom od 1800 proreza/mm. Spektarska rezolucija od ~1,8 cm<sup>-1</sup> je eksperimentalno određena merenjem tzv. "Rayleigh linije". Rasuto svetlo je prikupljano sa elektrodom CCD detektora. Konfokalni otvor je podešen na 400 μm. Snimljen je nepolarizovan spektar. Bazna linija spektra je korigovana oduzimanjem linearnih i kvadratnih polinomskih funkcija, i prilagođena Voigt-ovim funkcijama. Položaj traka je kalibrisan redovnim podešavanjem nultog položaja rešetke i kontrolisan merenjem Rayleigh linije (100) poliranog monokristala silicijuma. Preciznost položaja Raman traka je bila bolja od 0,5 cm<sup>-1</sup>. Opseg merenja je iznosio od 100-1200 cm<sup>-1</sup>.

#### **5.5. ODREĐIVANJE STRUKTURE GRANDITA RIETVELD-OVOM METODOM**

Rendgenska proučavanja su obavljena na automatskom difraktometru za prah PHILIPS, tip PW-1710. Upotrebljena je dugo-fokusna (LFF) bakarna anoda (U = 40 kV i I = 30 mA), pri čemu je korišćeno monohromatsko Kα zračenje (talasnih dužina λ<sub>Kα1</sub> = 1,54060Å i λ<sub>Kα2</sub> = 1,54438Å) i Xe proporcionalni brojač. Difrakcioni podaci su prikupljeni sa korakom 0,02° i u sledećim različitim ugaonim opsezima ugla 2θ koji su bili neophodni za različita specifična proučavanja:

1. od  $4^\circ$  do  $135^\circ$  i zadržavanjem brojača u vremenu od 12,9 sekundi/korak za proučavanje struktura grandita Rietveld-ovom metodom; i

2. od  $29^\circ$  do  $45^\circ$  (refleksije 4 0 0; 4 2 0; 3 3 2; 4 2 2; 4 3 1; 5 2 1 i 4 4 0) sa zadržavanjem brojača u vremenu od 67,1 sekundi/korak; od  $45^\circ$  do  $56^\circ$  (refleksije 6 1 1; 6 2 0; 4 4 4; 5 4 3 i 6 4 0) sa zadržavanjem brojača u vremenu od 78,15 sekundi/korak; od  $85^\circ$  do  $107^\circ$  (refleksije 10 4 0; 10 4 2; 8 8 0; 8 8 4; 12 2 0 i 12 2 2) sa zadržavanjem brojača u vremenu od 54,2 sekundi/korak; i od  $125,5^\circ$  do  $129^\circ$  (refleksija 8 8 8) sa zadržavanjem brojača u vremenu od 51,0 sekundi/korak (izuzetno samo u ovom slučaju je korak iznosio  $0,01^\circ$ ). Ovakvi specifični uslovi su bili neophodni da bi se videlo da li u zoni A ima razdvajanja ovih difrakcionih maksimuma ili ne. Refleksije su označene sa *hkl*-ovima koji pripadaju  $Ia\bar{3}d$  p.g.

Za merenje ugaonih položaja difraktovanih maksimuma i njima pripadajućih intenziteta, primenjen je bazni program PW-1877, dok je preciznost instrumenta kontrolisana pre i posle eksperimenta pomoću metalnog Si praha.

Kristalne strukture granditskih zona su određivane korišćenjem Rietveld-ove profilne metode i programa Fullprof (Rodriguez-Carvajal, 1990).

Izvršena su proučavanja dva tipa kristalnih struktura:

1. U svim prostornim grupama (osim za mešavine 2 teseralne granditske faze) zone granata A-D su određivane kao jednofazne, dok je zona granata E određivana kao mešavina dve faze, t.j. kao granat i skapolit, zbog toga što je u ovoj zoni količina skapolita najveća; i

2. U teseralnim prostornim grupama  $P4_132$  (213) +  $Ia\bar{3}d$  (230) (Becker i Pollok, 2002); i  $Ia\bar{3}d$  (230) +  $Ia\bar{3}d$  (230); zone granata A-D su određivane kao mešavine dve faze grandita, dok je zona granata E određivana kao mešavina tri faze, t.j. dve granditske i jedne skapolitske faze. Brojevi prikazani u zagradama iza p.g. odgovaraju dodeljenom broju prostorne grupe iz knjige: International tables for X-ray crystallography, vol. A (Hahn, 1983).

Osnovna proučavanja su izvršena u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$  (230). U ovoj prostornoj grupi,  $Ca^{2+}$  i  $Mn^{2+}$  se nalaze u dodekaedarskom  $24c$  položaju sa lokalnom simetrijom  $222$ ,  $Si^{4+}$  se nalaze u tetraedarskom  $24d$  položaju sa lokalnom simetrijom  $\bar{4}$ ,  $Al^{3+}$  i  $Fe^{3+}$  se nalaze u oktaedarskom  $16a$  položaju sa lokalnom simetrijom  $\bar{3}$ , a samo

$O^{2-}$  se nalaze u opštem  $96h$  položaju sa lokalnom simetrijom  $\bar{1}$  i tri stepena slobode (Tabela 2).

Pseudo-Voigt-ov oblik pika je izabran. U poslednjem ciklusu određivanja zona granata A-D, 117 parametara je varirano: jedan faktor skale, jedna nulta tačka, tri parametra za opis polu-širina refleksije (U, V i W), jedan parametar mešanja Lorencovog i Gausovog profila (X), dva parametra asimetrije ( $As_1$  i  $As_2$ ), jedan ukupni temperaturni parametar (B), jedan parametar za preferentnu orijentaciju, jedan parametar za dimenzije jediničnih ćelija ( $a_0$ ) i jedna stotina parametara za opis bazne linije. Preostali varirani parametri su: tri parametra za slobodne koordinate kiseonikovih jona (x, y i z) i dva parametra zauzeća u dodekaedarskim i oktaedarskim položajima.

Za zonu granata E, dodatna 23 parametra su varirana za skapolit: jedan faktor skale, jedan parametar mešanja Lorencovog i Gausovog profila (X), dva parametra za dimenzije jediničnih ćelija ( $a_0$  i  $c_0$ ), parametri dve slobodne koordinate za Ca-Na jone, pet slobodnih koordinata za Si-Al jone, deset slobodnih koordinata za kiseonikove jone i dva parametra zauzeća za Ca-Na i Cl-C jone.

Za mešavine granata, dodatnih 8 parametara je varirano za drugu fazu granata koja takođe kristališe u p.g.  $Ia\bar{3}d$  (230): jedan faktor skale, jedan parametar mešanja Lorencovog i Gausovog profila (X), jedan parametar za dimenzije jediničnih ćelija ( $a_0$ ), tri parametra za slobodne koordinate kiseonikovih jona (x, y i z) i dva parametra zauzeća u dodekaedarskim i oktaedarskim položajima.

U skladu sa snižavanjem simetrije od prostorne grupe  $Ia\bar{3}d$  (230) pa nadalje, logično dolazi do povećanja broja jona u specijalnim i opštim položajima. Shodno tome, dolazi i do povećanja broja slobodnih koordinata i parametara zauzeća, a takođe se povećava i broj variranih parametara jedinične ćelije. Znači, adekvatno proučavanjem prostornim grupama, sledeći broj parametara u poslednjem ciklusu je variran:

1. U teseralnoj p. g.  $Ia\bar{3}d$  (230), 117 u A-D zonama i 140 u zoni E;
2. U teseralnim p. g. koje predstavljaju mešavine  $Ia\bar{3}d$  (230) +  $Ia\bar{3}d$  (230), 125 (t.j. 117 + 8) u A-D zonama i 148 u zoni E;
3. U teseralnoj p. g.  $I\bar{4}3d$  (220), 122 u A-D zonama i 145 u zoni E;
4. U teseralnoj p. g.  $I4_132$  (214), 123 u A-D zonama i 146 u zoni E;
5. U teseralnoj p. g.  $P4_132$  (213), 135 u A-D zonama i 158 u zoni E;

6. U teseralnim p. g. koje predstavljaju mešavine  $P4_132$  (213) +  $Ia\bar{3}d$  (230), 143 (t.j. 135 + 8) u A-D zonama i 166 u zoni E;
7. U teseralnoj p. g.  $Ia\bar{3}$  (206), 123 u A-D zonama i 146 u zoni E;
8. U teseralnoj p. g.  $I2_13$  (199), 134 u A-D zonama i 157 u zoni E;
9. U romboedarskoj p. g.  $R\bar{3}c$  (167), 134 u A-D zonama i 157 u zoni E;
10. U romboedarskoj p. g.  $R\bar{3}$  (148), 155 u A-D zonama i 178 u zoni E;
11. U tetraedarskoj p. g.  $I4_1/acd$  (142), 127 u A-D zonama i 150 u zoni E;
12. U tetraedarskoj p. g.  $I4_1/a$  (88), 142 u A-D zonama i 165 u zoni E;
13. U rombičnoj p. g.  $Ibca$  (73), 143 u A-D zonama i 166 u zoni E;
14. U rombičnoj p. g.  $Fddd$  (70), 144 u A-D zonama i 167 u zoni E;
15. U rombičnoj p. g.  $Pbca$  (61), 177 u A-D zonama i 200 u zoni E;
16. U monokliničnoj p. g.  $I2/a$  (15), 176 u A-D zonama i 199 u zoni E;
17. U monokliničnoj p. g.  $I2/b$  (15), 175 u A-D zonama i 198 u zoni E;
18. U monokliničnoj p. g.  $I2/c$  (15), 176 u A-D zonama i 199 u zoni E;
19. U monokliničnoj p. g.  $C2/c$  (15), 175 u A-D zonama i 198 u zoni E; i
20. U trikliničnoj p. g.  $I\bar{1}(2)$ , 145 u A-D zonama i 168 u zoni E. Ovde bi trebalo napomenuti da je umesto jedne stotine parametara za opis bazne linije, korišćeno šest Chebyshev-ljevih polinomnih parametara, kao i da je izostavljen region  $2\theta$  od  $4^\circ$ - $10^\circ$ .

Sva navedena proučavanja struktura grandita Rietveld-ovom metodom vršena su u prvom delu bez ikakvih geometrijskih ograničenja (constraints). U drugom delu proučavanja su, shodno problematici i hemijskom sastavu, kod p.g.  $Ia\bar{3}d$  (230),  $R\bar{3}c$  (167),  $R\bar{3}$  (148),  $Fddd$  (70),  $C2/c$  (15) i  $I\bar{1}(2)$ ; kao i kod mešavine  $Ia\bar{3}d$  (230) +  $Ia\bar{3}d$  (230); uvedena geometrijska ograničenja za Si-O, Al-O i Ca-O rastojanja; i za Al-Fe i Ca-Mn parametre zauzeća. Svi uglovi su tretirani bez geometrijskih ograničenja.

Na taj način, i adekvatno proučavanjem prostornim grupama, sledeći broj parametara u poslednjem ciklusu je variran:

1. U teseralnoj p. g.  $Ia\bar{3}d$  (230), 115 u A-D zonama i 138 u zoni E;
2. U teseralnim p. g. koje predstavljaju mešavine  $Ia\bar{3}d$  (230) +  $Ia\bar{3}d$  (230), 122 (t.j. 116 + 6) u A-D zonama i 145 u zoni E;
3. U romboedarskoj p. g.  $R\bar{3}c$  (167), 131 u A-D zonama i 154 u zoni E;
4. U romboedarskoj p. g.  $R\bar{3}$  (148), 151 u A-D zonama i 174 u zoni E;
5. U rombičnoj p. g.  $Fddd$  (70), 140 u A-D zonama i 162 u zoni E;



6. U monoklinočnoj p. g.  $C2/c$  (15), 169 u A-D zonama i 192 u zoni E; i

7. U trikliničnoj p. g.  $I\bar{1}(2)$ , 135 u A-D zonama i 158 u zoni E. Ovde je takođe umesto jedne stotine parametara za opis bazne linije, korišćeno šest Chebyshev-ljevih polinomnih parametara, a i izostavljen je region uglova  $2\theta$  od  $4^\circ$ - $10^\circ$ .

Sve vrednosti standardnih devijacija su množene sa vrednostima SCOR (Berar i Lelann, 1991).

Osim navedenih proučavanja, preliminarno su razmatrane i neke druge strukture u još 21 različitih mogućih prostornih grupa, i to: teseralna:  $P2_13$  (198); romboedarske:  $P\bar{3}c$  (165);  $R3c$  (161);  $R32$  (155);  $P\bar{3}$  (147) i  $R3$  (146); tetragonalna:  $I\bar{4}2d$  (122); rombične:  $Pnnn$  (48);  $Iba2$  (45);  $Fdd2$  (43);  $I2_12_12_1$  (24);  $F222$  (22) i  $P2_12_12_1$  (19); monoklinočne:  $P2_1/c$  (14);  $P2/c$  (13);  $C2/m$  (12);  $C1c1$  (9);  $I1c1$  (9);  $C121$  (5) i  $I121$  (5); i triklinična:  $P\bar{1}(2)$ . Takođe, preliminarno je razmatrano 6 mešovina faza: teseralna  $Ia\bar{3}d$  (230) + romboedarska  $R\bar{3}c$  (167); teseralna  $Ia\bar{3}d$  (230) + rombična  $Fddd$  (70); romboedarska  $R\bar{3}c$  (167) + rombična  $Fddd$  (70); romboedarska  $R\bar{3}c$  (167) + romboedarska  $R\bar{3}c$  (167); tetragonalna  $I4_1/acd$  (142) + tetragonalna  $I4_1/acd$  (142) i tetragonalna  $I4_1/a$  (88) + tetragonalna  $I4_1/a$  (88). Ova razmatranja, iako detaljna, su vršena više informativno, odnosno isključivo sa svrhom da se proveriti da li eventualno neka od ovih prostornih grupa ili mešovina faza pokazuju bolje vrednosti statističkih pokazatelja nego prethodnih 20. Kako to nije bio slučaj, rezultati ovih ispitivanja neće biti prikazani ovom prilikom.

Na taj način, ukupno je razmatrano 54 različitih varijanti i mogućnosti sa ciljem određivanja egzaktno prostorne grupe kristalizacije proučavanog grandita.

Za kompletne finalne Rietveld-ove plotove (Poglavljja 6.4.1. i 6.4.4.) korišćen je on-line program plotCIF sa: <http://publCIF.iucr.org/services/tools/pdcifplot.php> internet adrese. Izmereni intenziteti prikazani su plavom bojom, izračunati intenziteti prikazani su crvenom bojom, razlika između izmerenih i izračunatih intenziteta prikazana je crnom bojom, dok su zelenim vertikalnim crtama prikazane pozicije refleksija.

Kod finalnih Rietveld-ovih plotova koji obuhvataju samo pojedine ugaone oblasti u svrhu njihovih međusobnih upoređivanja (Poglavlje 6.4.5.), izmereni intenziteti prikazani su crvenom bojom, izračunati intenziteti prikazani su crnom bojom, razlika između izmerenih i izračunatih intenziteta prikazana je plavom bojom, dok su zelenim vertikalnim crtama prikazane pozicije refleksija .

## 6. REZULTATI I DISKUSIJA

### 6.1. EMPA PROUČAVANJA I HEMIJSKE ANALIZE

Dobro je poznato da zonarni minerali mogu biti veoma kompleksnog sastava. Jedan karakteristični uzorak grandita sa Meke Presedle koji ima brojne makroskopski vidljive „mikro” zone prethodno je prikazan u radovima Tančić (2008; *Slika 4C*) i Tančić i dr. (2012a; *Slika 3*). Za EMPA proučavanja u ovom radu izabran je vrlo uzan interval od 100  $\mu\text{m}$ . Takođe, pojedini adekvatno odabrani elementi su dodatno proveravani i verifikovani pomoću dopunskih klasičnih hemijskih analiza (*Tabela 3*). Na primer, ovim putem je utvrđeno da su FeO sadržaji vrlo niski, t.j. da se almandinska komponenta može zanemariti (uglavnom <1 mol. %). Prema tome, celokupni Fe sadržaji određeni putem EMPA su izračunati kao Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (*Tabela 4*) zauzimajući samo oktaedarski [a] položaj (*Tabela 5*).

*Tabela 3. Sadržaji Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, FeO, REE, B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> i gubitka žarenja G.Ž. (u tež. %) u zonama A-E, određeni hemijskim analizama.*

	<b>A (jezgro)</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>	<b>E (obod)</b>
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	13,50	13,32	12,67	12,12	12,35
<b>Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	12,04	12,44	13,11	13,47	13,37
<b>FeO</b>	0,34	0,32	0,28	0,08	0,05
<b>REE</b>	n. d.	n. d.	n. d.	n. d.	n. d.
<b>B<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	n. d.	n. d.	n. d.	n. d.	n. d.
<b>G.Ž.</b>	0,17	0,20	0,14	0,11	0,19

n. d. - nije detektovano

Izmereni minimalni, maksimalni, prosečni i srednji sadržaji oksida u A-E zonama su prikazani u *Tabeli 4*. Kompletne promene glavnih i sporednih komponenata prikazane su na *Slici 9*.

Iz dobijenih rezultata može se videti da su ove promene u sastavima, generalno, uglavnom postepene, i sa samo nekoliko značajnijih oštih diskontinuiteta. Dobijeni Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> i Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sadržaji (*Tabela 4*) su u vrlo dobroj saglasnosti sa hemijskim (*Tabela 3*), kao i prethodnim SEM-EDS analizama (*Tabela 9, Slika 15; Tančić, 2008*).

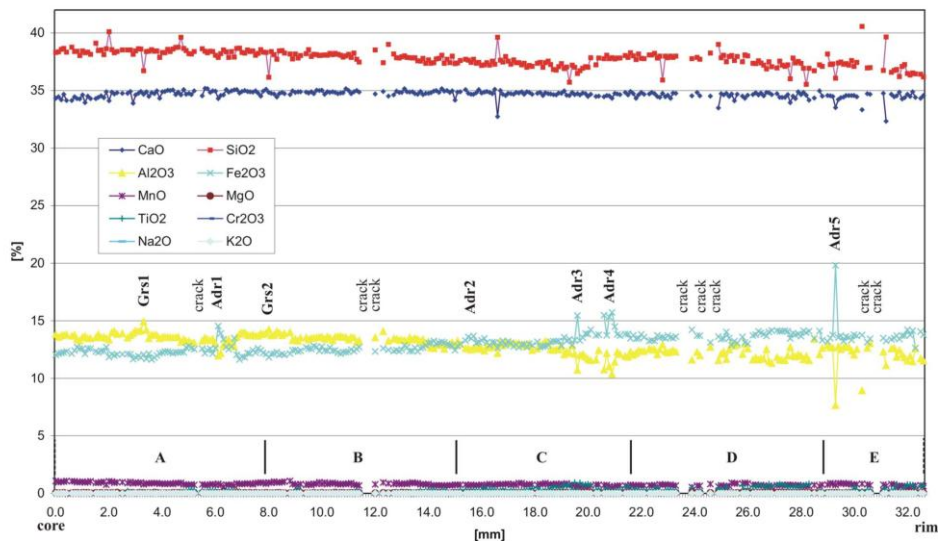
Tabela 4. Minimalni, maksimalni, prosečni i srednji hemijski sadržaji  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{MnO}$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$  i  $\text{K}_2\text{O}$  (u tež. %) u zonama A-E, određeni sa EMPA.

		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>SiO<sub>2</sub></b>	<b>Minimalni</b>	36,17	37,33	35,72	35,91	35,53
	<b>Maksimalni</b>	40,11	39,01	39,62	39,01	40,57
	<b>Prosečni</b>	38,39	37,95	37,43	37,65	37,09
	<b>Srednji</b>	38,40	37,98	37,41	37,77	37,00
<b>TiO<sub>2</sub></b>	<b>Minimalni</b>	0,00	0,00	0,11	0,03	0,00
	<b>Maksimalni</b>	0,35	0,40	0,94	0,81	0,82
	<b>Prosečni</b>	0,07	0,09	0,37	0,41	0,35
	<b>Srednji</b>	0,03	0,07	0,31	0,39	0,28
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	<b>Minimalni</b>	11,95	12,55	10,36	11,32	7,65
	<b>Maksimalni</b>	14,92	14,08	13,24	13,00	13,42
	<b>Prosečni</b>	13,58	13,38	12,41	12,16	12,04
	<b>Srednji</b>	13,58	13,41	12,52	12,19	12,38
<b>Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*</b>	<b>Minimalni</b>	11,63	12,03	12,63	12,87	12,62
	<b>Maksimalni</b>	14,53	13,24	15,72	14,22	19,81
	<b>Prosečni</b>	12,32	12,55	13,40	13,64	13,79
	<b>Srednji</b>	12,24	12,46	13,23	13,65	13,67
<b>Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	<b>Minimalni</b>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	<b>Maksimalni</b>	0,05	0,04	0,06	0,05	0,03
	<b>Prosečni</b>	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
	<b>Srednji</b>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
<b>MgO</b>	<b>Minimalni</b>	0,00	0,01	0,02	0,02	0,02
	<b>Maksimalni</b>	0,11	0,08	0,10	0,10	0,09
	<b>Prosečni</b>	0,04	0,04	0,06	0,06	0,06
	<b>Srednji</b>	0,04	0,05	0,06	0,06	0,06
<b>MnO</b>	<b>Minimalni</b>	0,56	0,64	0,52	0,53	0,52
	<b>Maksimalni</b>	1,09	1,09	0,89	0,93	0,89
	<b>Prosečni</b>	0,88	0,82	0,74	0,71	0,73
	<b>Srednji</b>	0,88	0,81	0,74	0,70	0,73
<b>CaO</b>	<b>Minimalni</b>	33,89	34,17	32,74	33,49	32,34
	<b>Maksimalni</b>	35,19	35,17	35,10	34,90	34,96
	<b>Prosečni</b>	34,70	34,84	34,71	34,57	34,42
	<b>Srednji</b>	34,76	34,85	34,73	34,62	34,54
<b>Na<sub>2</sub>O</b>	<b>Minimalni</b>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	<b>Maksimalni</b>	0,05	0,05	0,04	0,05	0,07
	<b>Prosečni</b>	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
	<b>Srednji</b>	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01
<b>K<sub>2</sub>O</b>	<b>Minimalni</b>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	<b>Maksimalni</b>	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
	<b>Prosečni</b>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
	<b>Srednji</b>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

\* - Ukupan sadržaj Fe izračunat je kao  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , u skladu sa hemijskim analizama (Tabela 3)

Na osnovu srednjih hemijskih sastava, izračunate su strukturne formule i sadržaji Ca, Mn, Mg, Al, Fe i Ti (Tabela 5). Jedina značajno veća promena u hemizmu postoji između  $\text{Al}_2\text{O}_3$  i  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  sadržaja, koji su u međusobno inverznom odnosu; dok ostale hemijske komponente pokazuju beznačajne promene. Naime, sadržaj  $\text{Al}^{3+}$  katjona

opada od zone A (jezgro) do zone D sa razlikom od 6,06 at. %; i konačno blago raste u zoni E (obod). Sadržaji Ca i Si su skoro konstantni, i u opsegu od  $\pm 1$  at. %.

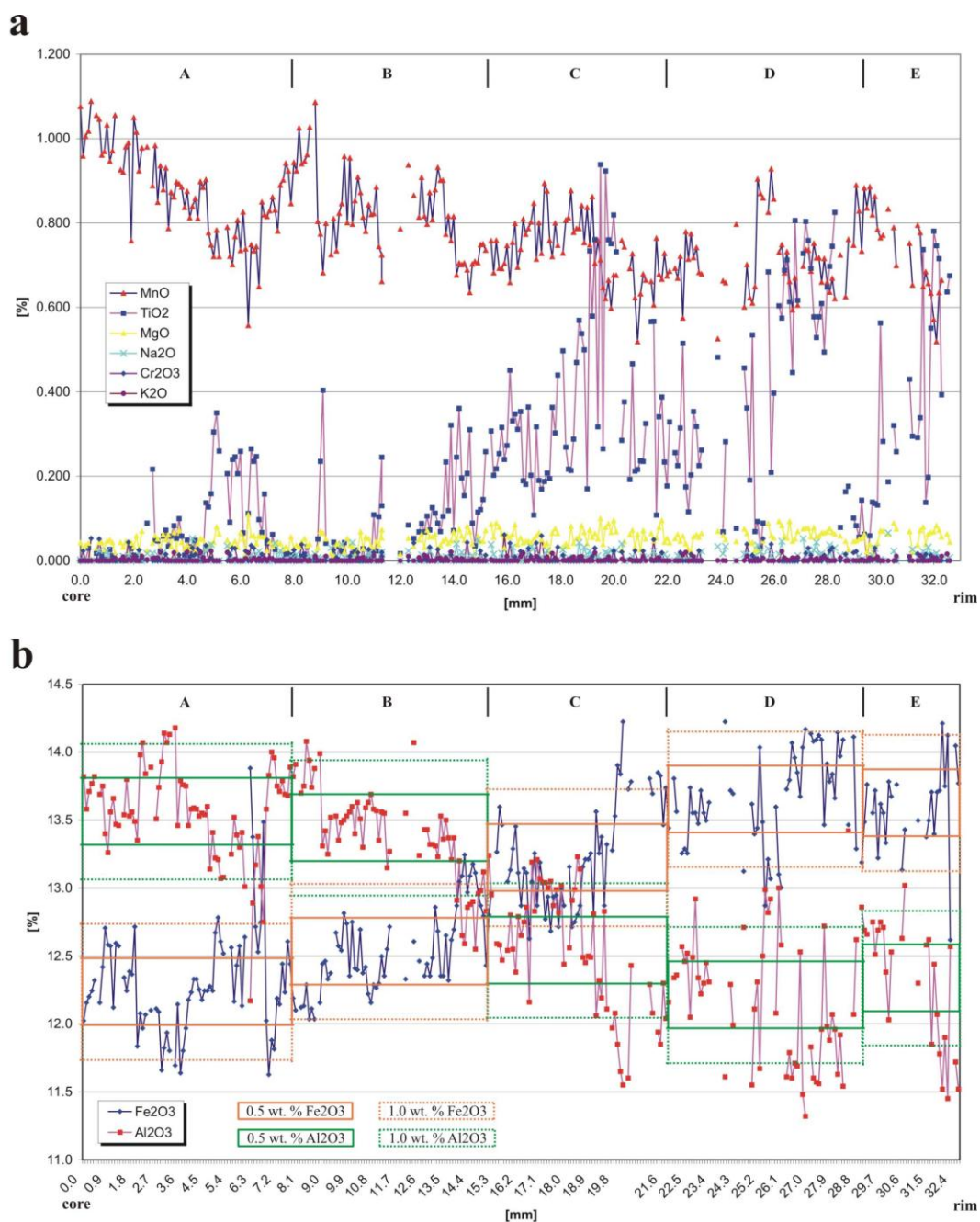


Slika 9. Kompletna EMPA glavnih i sporednih komponenta (u tež. %) od jezgra ka obodu. Oznake: „Grs”-tačke sa najvećim  $Al^{3+}$  sadržajima; i „Adr”- tačke sa najvećim  $Fe^{3+}$  sadržajima. Položaji mehanički izdvojenih A-E zona, kao i najizraženijih pukotina su takođe prikazani (Tančić i dr., 2012a).

Tabela 5. Strukturne formule izračunate na osnovu 12 kiseonikovih atoma; i izračunati sadržaji Ca, Mn, Mg, Al, Fe i Ti (u at. %) u zonama A-E.

	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
<b>Si</b>	<b>3,02</b>		<b>3,00</b>		<b>2,99</b>		<b>3,00</b>		<b>2,97</b>	
<b>Ca</b>	2,93	<b>2,99</b>	2,95	<b>3,01</b>	2,97	<b>3,03</b>	2,95	<b>3,01</b>	2,97	<b>3,03</b>
<b>Mn</b>	0,06		0,05		0,05		0,05		0,05	
<b>Mg</b>	0,00		0,01		0,01		0,01		0,01	
<b>Al</b>	1,26		1,25		1,18		1,14		1,17	
<b>Fe</b>	0,72	<b>1,98</b>	0,75	<b>2,00</b>	0,80	<b>2,00</b>	0,82	<b>1,98</b>	0,83	<b>2,02</b>
<b>Cr</b>	0,00		0,00		0,00		0,00		0,00	
<b>Ti</b>	0,00		0,00		0,02		0,02		0,02	
<b>Ca</b>	<b>97,99</b>		<b>98,01</b>		<b>98,02</b>		<b>98,01</b>		<b>98,02</b>	
<b>Mn</b>	<b>2,01</b>		<b>1,66</b>		<b>1,65</b>		<b>1,66</b>		<b>1,65</b>	
<b>Mg</b>	<b>0,00</b>		<b>0,33</b>		<b>0,33</b>		<b>0,33</b>		<b>0,33</b>	
<b>Al</b>	<b>63,64</b>		<b>62,50</b>		<b>59,00</b>		<b>57,58</b>		<b>57,92</b>	
<b>Fe</b>	<b>36,36</b>		<b>37,50</b>		<b>40,00</b>		<b>41,41</b>		<b>41,09</b>	
<b>Ti</b>	<b>0,00</b>		<b>0,00</b>		<b>1,00</b>		<b>1,01</b>		<b>0,99</b>	

Uveličane promene sporednih MnO, TiO<sub>2</sub>, MgO, Na<sub>2</sub>O, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> i K<sub>2</sub>O komponenta prikazane su na Slici 10a.



Slika 10. Uveličana EMPA od jezgra ka obodu (u tež. %): a) Sporednih MnO, TiO<sub>2</sub>, MgO, Na<sub>2</sub>O, Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> i K<sub>2</sub>O sadržaja; i b) Glavnih Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> i Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sadržaja kojima su dodati opsezi od 0,50 i 1,00 tež. %, t.j. približno odgovarajućim ±1 i ±2 mol. % vrednostima granditskog nivoa homogenosti (Tančić i dr., 2012a).

Sadržaji MnO oscilatorno variraju u opsegu od 0,5-1,1 tež. %, a suprotno CaO sadržajima, usled njihovog zamenjivanja. Sadržaj TiO<sub>2</sub> ciklično raste od jezgra prema obodu od 0-0,9 tež. %, uglavnom prateći sadržaj Fe<sup>3+</sup> katjona, i dostižući svoj

maksimum u zoni D. Istovremeno povišeni sadržaji  $Ti^{4+}$  i  $Fe^{3+}$  očigledno koincidiraju sa tamnijim bojama C-E zona koje su makroskopski vidljive na *Slici 8*. Sadržaji  $MgO$ ,  $Na_2O$ ,  $Cr_2O_3$  i  $K_2O$  su beznačajni i u opsegu od 0-0,1 tež. %.

Znači, granatske zone su granditskog tipa sastava  $Grs_{58-64}Adr_{36-41}Sps_2$ , odnosno sa:  $Ca_{2,93-2,97}Mn_{0,05-0,06}Mg_{0,00-0,01}Al_{1,14-1,26}Fe^{3+}_{0,72-0,83}Ti_{0,00-0,02}Si_{2,97-3,02}O_{12}$  sastavima; i u vrlo dobroj saglasnosti sa prethodnim proučavanjima (Tančić, 2008):  $Grs_{57-64}Adr_{36-43}$  (SEM-EDS),  $Grs_{55-62}Adr_{34-43}Sps_2Alm_{0-2}$  (hemijska an.),  $Grs_{57-68}Adr_{32-43}$  (XRPD) i  $Grs_{60-67}Adr_{33-40}$  (Rietveld). Ovi sastavi se blago razlikuju duž makroskopski vidljivih različitih zona, pružajući dokaze o kvazicikličnim promjenama oscilatorno zonarne prirode.

Prikazane zonarne varijacije mogu se objasniti cikličnim promjenama hidrotermalnih rastvora, koje uglavnom obuhvataju porast sadržaja Fe u kombinaciji sa opadanjem sadržaja Al. Ovo je u saglasnosti sa prethodnim proučavanjima (Lessing i Standish 1973; Jamtveit 1991; Jamtveit i dr. 1993, 1995). Stoga, ove promene od jezgra ka obodu mogu ukazivati na blago ubrzani rast kristala i/ili na blago ubrzane promene u sastavima hidrotermalnih rastvora. Sa ove tačke gledišta, kontinuirani rast kristala se čini više verovatnijim, nego rast kristala sa prekidima.

Nivo homogenosti zona A-E proveravan je na takav način što su dodavani 0,5 i 1,0 tež. % opsezi  $Al_2O_3$  i  $Fe_2O_3$  sadržaja, t.j. adekvatno približnim  $\pm 1$  and  $\pm 2$  mol. % sadržajima granditske komponente na *Slici 10b*. Na osnovu broja analiziranih tačaka u okviru navedenih opsega (*Tabela 6*), ustanovljeno je da su zone A, B i E relativno nešto više homogene od zona C i D. Prema tome, granditske komponente duž zona variraju od 85 do 90 % u okviru opsega  $\pm 2$  mol. % nivoa homogenosti, dok razlike do 100 % pretežno pripadaju prethodno navedenim oštrim diskontinuitetima. Sledeći prilično slični granditski sastavi su izračunati:  $Grs_{64\pm 1}Adr_{36\pm 1}Sps_2$  (A);  $Grs_{62\pm 1}Adr_{38\pm 1}Sps_2$  (B);  $Grs_{59\pm 2}Adr_{40\pm 2}Sps_2$  (C);  $Grs_{58\pm 2}Adr_{41\pm 2}Sps_2$  (D); i  $Grs_{58\pm 1}Adr_{41\pm 1}Sps_2$  (E). Dakle, proučavani granat se može smatrati kao relativno visoko homogen u kome se velika većina sastava nalazi u okviru regiona mešljivosti  $0,58\pm 2 < X_{Grs} < 0,64\pm 1$ .

*Tabela 6. Približna zastupljenost analiziranih tačaka (u %) u okviru sastava  $Al_2O_3$  i  $Fe_2O_3$  opsega (u mol. %) u zonama A-E.*

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
od 0 do $\pm 1$ mol. %	60	65	45	45	75
od $\pm 1$ do $\pm 2$ mol. %	30	25	40	40	15
<b>Ukupno</b>	<b>90</b>	<b>90</b>	<b>85</b>	<b>85</b>	<b>90</b>

Pod određenim P-T uslovima sledeće nemešljivosti (engleski: gaps) grandita su prethodno objavljene u literaturi:

(i)  $0,50 < X_{\text{Grs}} < 0,80$  na  $\sim 300$  °C i  $P \geq 3$  kbar; i  $0,53 < X_{\text{Grs}} < 0,63$  na  $\leq 500$  °C i  $P \geq 3$  kbar (Huckenholz i Fehr, 1982);

(ii)  $0,66 < X_{\text{Grs}} < 0,94$  na 322 °C, sa kritičnom temperaturom od 444 °C za  $X_{\text{Grs}}=0,82$  (Engi i Wersin, 1987);

(iii)  $0,50 < X_{\text{Grs}} < 0,75$  na  $\sim 200-420$  °C i  $P \sim 1$  kbar (Manning i Bird, 1990); i

(iv)  $0,10 < X_{\text{Grs}} < 0,35$  i/ili  $0,65 < X_{\text{Grs}} < 0,80$  na  $\sim 300-400$  °C i  $P \sim 500$  bara (Jamtveit, 1991).

Sa ciljem da se proveri proučavani grandit na ovakve nemešljivosti, sastavi sa najvećim  $\text{Al}^{3+}$  (tačke Grs1-2) i  $\text{Fe}^{3+}$  (tačke Adr1-5) sadržajima su odabrani (Slika 9). Njihove strukturne formule; kao i izračunati sadržaji Ca, Mn, Mg, Al, Fe i Ti prikazani su u Tabelama 7 i 8.

Tabela 7. Hemijski sastavi (u tež. %); strukturne formule izračunate na osnovu 12 kiseonikovih atoma; i izračunati sadržaji Ca, Mn, Mg, Al, Fe i Ti (u at. %); u tačkama Grs1 i Grs2. Izračunati Si i hidro-granatski (Hgr) sadržaji su takođe prikazani.

	Tačka Grs1		Tačka Grs1 <sup>1</sup>			Tačka Grs2		Tačka Grs2 <sup>1</sup>			
<b>SiO<sub>2</sub></b>	36,72	<b>2,91</b>	36,72	2,84	<b>3,00</b>	36,17	<b>2,91</b>	36,17	2,84	<b>3,00</b>	
<b>H<sub>2</sub>O</b>	n. d.	n. c.	1,22 <sup>1</sup>	0,16 <sup>2</sup>		n. d.	n. c.	1,22 <sup>1</sup>	0,16 <sup>2</sup>		
<b>TiO<sub>2</sub></b>	0,03	0,00	<b>2,11</b>	0,03	0,00	0,01	0,00	<b>2,07</b>	0,01	0,00	<b>2,02</b>
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	14,92	1,39		14,92	1,36	14,24	1,35		14,24	1,32	
<b>Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*</b>	12,07	0,72		12,07	0,70	11,81	0,72		11,81	0,70	
<b>Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	0,00	0,00		0,00	0,00	0,02	0,00		0,02	0,00	
<b>MgO</b>	0,06	0,01	<b>3,00</b>	0,06	0,01	0,03	0,00	<b>3,06</b>	0,03	0,00	<b>2,98</b>
<b>MnO</b>	0,79	0,05		0,79	0,05	0,94	0,06		0,94	0,06	
<b>CaO</b>	34,68	2,94		34,68	2,87	34,84	3,00		34,84	2,92	
<b>Na<sub>2</sub>O</b>	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.			
<b>K<sub>2</sub>O</b>	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.			
<b>Total</b>	<b>99,27</b>	<b>120</b>	<b>100,49</b>	<b>120</b>	<b>98,06</b>	<b>120</b>	<b>99,28</b>	<b>120</b>			
<b>Ca</b>	<b>98,00</b>		<b>97,95</b>			<b>98,04</b>		<b>97,99</b>			
<b>Mn</b>	<b>1,67</b>		<b>1,71</b>			<b>1,96</b>		<b>2,01</b>			
<b>Mg</b>	<b>0,33</b>		<b>0,34</b>			<b>0,00</b>		<b>0,00</b>			
<b>Al</b>	<b>65,88</b>		<b>66,02</b>			<b>65,22</b>		<b>65,35</b>			
<b>Fe</b>	<b>34,12</b>		<b>33,98</b>			<b>34,78</b>		<b>34,65</b>			
<b>Ti</b>	<b>0,00</b>		<b>0,00</b>			<b>0,00</b>		<b>0,00</b>			
<b>Si</b>	n. c.		<b>94,67</b>			n. c.		<b>94,67</b>			
<b>Hgr</b>	n. c.		<b>5,33</b>			n. c.		<b>5,33</b>			

\* - Ukupan sadržaj Fe izračunat je kao Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

n. d. - nije detektovano

n. c. - nije izračunato

<sup>1</sup> - Izračunato preko manjka Si

<sup>2</sup> - ¼H

Tabela 8. Hemijski sastavi (u tež. %); strukturne formule izračunate na osnovu 12 kiseonikovih atoma; i izračunati sadržaji Ca, Mn, Mg, Al, Fe i Ti (u at. %); u tačkama Adr1, Adr2, Adr3, Adr4 and Adr5.

	Tačka Adr1		Tačka Adr2		Tačka Adr3		Tačka Adr4		Tačka Adr5	
<b>SiO<sub>2</sub></b>	37,88	<b>3,02</b>	37,73	<b>2,99</b>	36,49	<b>2,97</b>	37,86	<b>3,04</b>	36,07	<b>2,99</b>
<b>TiO<sub>2</sub></b>	0,07	0,00	0,25	0,02	0,26	0,02	0,22	0,01	0,14	0,01
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	11,95	1,11	12,64	1,18	10,72	1,03	10,36	0,98	7,65	0,75
<b>Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*</b>	14,53	0,87	13,67	0,82	15,46	0,95	15,72	0,95	19,81	1,24
<b>Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
<b>MgO</b>	0,05	0,01	0,08	0,01	0,04	0,00	0,06	0,01	0,05	0,01
<b>MnO</b>	0,83	0,06	0,69	0,05	0,65	0,04	0,52	0,04	0,73	0,05
<b>CaO</b>	34,29	2,92	34,68	2,94	34,72	3,02	34,33	2,95	33,52	2,98
<b>Na<sub>2</sub>O</b>	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,04	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.
<b>K<sub>2</sub>O</b>	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.	0,00	n. c.
<b>Total</b>	<b>99,60</b>	<b>120</b>	<b>99,74</b>	<b>120</b>	<b>98,38</b>	<b>120</b>	<b>99,07</b>	<b>120</b>	<b>97,97</b>	<b>120</b>
<b>Ca</b>	<b>97,66</b>		<b>98,00</b>		<b>98,69</b>		<b>98,33</b>		<b>98,03</b>	
<b>Mn</b>	<b>2,01</b>		<b>1,67</b>		<b>1,31</b>		<b>1,33</b>		<b>1,64</b>	
<b>Mg</b>	<b>0,33</b>		<b>0,33</b>		<b>0,00</b>		<b>0,33</b>		<b>0,33</b>	
<b>Al</b>	<b>56,06</b>		<b>58,42</b>		<b>51,50</b>		<b>50,52</b>		<b>37,50</b>	
<b>Fe</b>	<b>43,94</b>		<b>40,59</b>		<b>47,50</b>		<b>48,97</b>		<b>62,00</b>	
<b>Ti</b>	<b>0,00</b>		<b>0,99</b>		<b>1,00</b>		<b>0,52</b>		<b>0,50</b>	

\* - Ukupan sadržaj Fe izračunat je kao Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

n. c. - nije izračunato

Iz dobijenih rezultata je očigledno da se većina sastava nalazi u okviru prethodno definisanog regiona čvrstog rastvora od  $0,58 \pm 2 < X_{\text{Grs}} < 0,64 \pm 1$ , bez praznina (gaps), i sa samo tri odstupanja (tačke Adr3-5) koje se nalaze blizu granica zona od oko  $0,38 < X_{\text{Grs}} < 0,52$ .

Značajan manjak Si (~3 at. %) u Grs1-2 tačkama u okviru A-B zona (Tabela 7) može biti prouzrokovan sa O<sub>4</sub>H<sub>4</sub>, B<sup>3+</sup>, ♂ (vakancije), Al<sup>3+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Fe<sup>2+</sup> i/ili Ti<sup>4+</sup> zamenama sa Si<sup>4+</sup> (Geller 1967; Huggins i dr. 1977a,b; Aines i Rossman 1984; Locock i dr. 1995; Rossman i Aines 1986; Lager i dr. 1987, 1989; Allen i Buseck 1988; Amthauer i Rossman 1998; Andrut i Wildner 2002; Andrut i dr. 2002). Takođe je objavljeno da Si može biti zamenjen sa S (Rinaldi i Passaglia 1989) i P (Brunet i dr. 2006; i citirana literatura u okviru tog rada).

Zbog toga što bor, sumpor i fosfor nisu detektovani; a da su u ovoj oblasti Fe<sup>2+</sup> i Ti<sup>4+</sup> prisutni sa isuviše niskim sadržajima; jedini preostali uzroci manjka Si mogu biti njegova zamenjivanja sa O<sub>4</sub>H<sub>4</sub>, ♂ (vakancije), Al<sup>3+</sup> i/ili Fe<sup>3+</sup>. Izračunata hidro-granatska komponenta može biti oko 5 mol. %. Međutim, ustanovljeni gubici žarenjem (G.Ž., Tabela 3) su suviše niski i trebalo bi da budu adekvatni akcesornim Fe-hidroksidima i skapolitu; dok višak Al<sup>3+</sup> i Fe<sup>3+</sup> u [a] položaju ukazuje da bi ove komponente



najverovatnije mogle da zamene Si u tetraedru, prvenstveno zadovoljavajući stehiometrijske razloge. Međutim, bez obzira koji je uzrok deficita Si, ove tačke sadrže  $X_{\text{Grs}} = 0,65-0,66$ ; adekvatno gornjoj granici prethodno određene oblasti sastava.

Slično, tačke Adr1-2 (*Tabela 8*) sadrže  $X_{\text{Grs}} = 0,56-0,58$ , što je adekvatno donjoj granici oblasti. Sa druge strane, tri preostale analize (t.j. Adr3-5; *Tabela 8*) ne pripadaju ovom regionu, zato što imaju  $0,38 < X_{\text{Grs}} < 0,52$  sastave.

Prema tome, sve analize od jezgra do oboda se nalaze u okviru  $0,38 < X_{\text{Grs}} < 0,66$  opsega, t.j. velika većina se nalazi u okviru diskutovanog uskog  $0,58 \pm 2 < X_{\text{Grs}} < 0,64 \pm 1$  regiona, sa samo tri izuzetka (t.j. tačke Adr3-5) koji su u okviru  $0,38 < X_{\text{Grs}} < 0,52$ .

Sve tačke Adr1-5 predstavljaju oštre diskontinuitete u sastavu sa uglavnom rastućom andraditskom komponentom ka obodu, i koje se argumentovano mogu smatrati kao međufazne granice (Jamtveit, 1991). Naime, ove tačke su veoma blizu A-E makroskopski vidljivih različitih zona, koje su kasnije mehanički razdvojene (*Slike 8 i 9*). Da je to tačno, potvrđuju i vrlo mala odstupanja (t.j. ispod ~1-2 mm; *Slika 9*) koja su prvenstveno nastala usled sfernog oblika mega kristala, odnosno iz objektivne nemogućnosti da se još preciznije iseku ispitivane zone po makroskopski vidljivim granicama između njih.

Iz prethodno navedenog može se zaključiti da su sve granditske zone nastale u uslovima potpune mešljivosti, što je u saglasnosti sa rezultatima Huckenholz-a i Fehr-a (1982), Engi-a i Wersin-a (1987), Manning-a i Bird-a (1990), Jamtveit-a (1991), i Becker-a i Pollok-a (2002). Dakle, dokazano je da ove zone predstavljaju pre čvrste rastvore nego mešavine.

IC trake su skoro nepromenljive između zona i adekvatne hemijskim sastavima (Tančić, 2008). Obzirom da su IC spektri bez traka u oblasti od oko 3500-3660  $\text{cm}^{-1}$ , a što je karakteristično za prisustvo  $\text{H}_2\text{O}$  i/ili  $\text{O}_4\text{H}_4$  u strukturi granata, to dokazuje da ih treba smatrati isključivo bezvodnim. To je takođe u saglasnosti sa proračunima iz  $d_{420}$  vrednosti (*Tabela 27*; Tančić, 2008), i sa rombdodekaedarskom morfologijom proučavanog mega kristala (*Slika 8*), kao što su obrazlagali Rinaldi i Passaglia (1989).

Uzimajući u obzir prethodno dobijene sastave proučavanog grandita, njihove nivoe homogenosti i mešljivost, kao i IC i hemijske rezultate, t.j. da su dominantno bezvodni, mogu se razmotriti i uslovi njegovog postanka.

Temperature postanka iznad maksimalno dozvoljene donje granice od ~600 °C, sa najverovatnijim vrednostima od ~650-690 °C (kao i ~700-715 °C za tačke Adr3-5); i pritisci od 2-3 kbara su izračunati korišćenjem jednačina Huckenholz-a i Fehr-a (1982). Tako dobijene vrednosti su i u vrlo dobroj saglasnosti sa podacima koje su objavili Dasgupta i Pal (2005).

Sa druge strane, ustanovljena granditska anizotropija (Tančić, 2008) ograničava gornju temperaturu postanka najviše do 720 °C (Milke, 2004). Ove karakteristike dodatno ukazuju i da je za grandit ovakvog sastava aktivnost  $X_{CO_2}$  iznosila minimum ~0,6 po podacima koje su prikazali Taylor i Liou (1978).

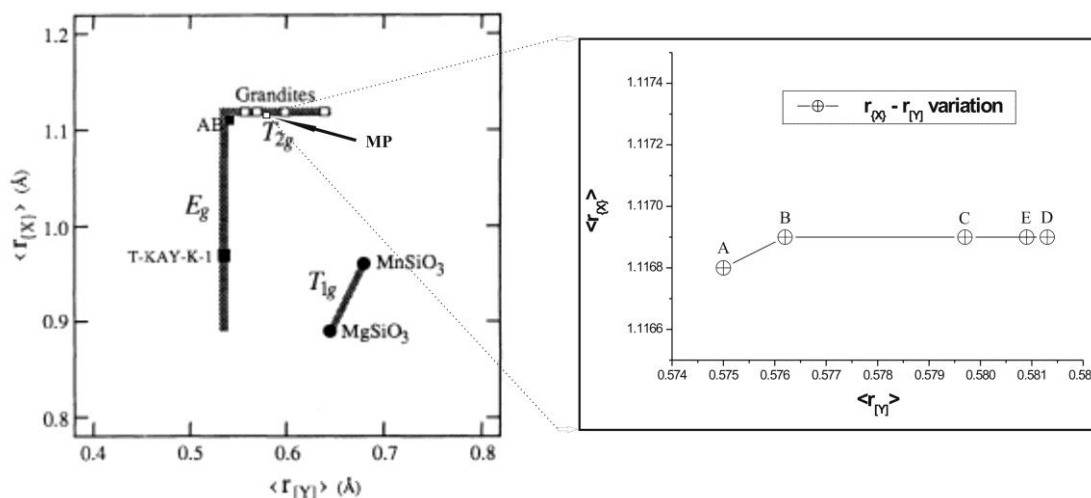
Nadalje, skoro nepromenljivi sadržaji Ca i Mn (*Tabele 4 i 5; Slike 9 i 10a*) argumentovano ukazuju da je pritisak između jezgra i oboda bio nepromenljiv (Hermann i Green, 2001). Konačno, Al-Fe<sup>3+</sup> promene (*Tabele 3-5; Slike 9 i 10b*) ukazuju da je temperatura najverovatnije rasla od zone A (jezgro) do D, i opadala u zoni E (obod); slično podacima koje su dali Hermann (2002) i Kohn (2003). Dobijeni rezultati su u saglasnosti sa ostalim podacima sa lokaliteta Meke Presedle (Aleksić i dr., 1987). Male količine skapolita i plagioklasa mogle su neznatno da utiču na ove uslove nastanka. Međutim, ovo je izvan opsega sadašnjeg proučavanja.

Na osnovu sadržaja {X} katjona: Ca, Mn i Mg, kao i [Y] katjona: Al, Fe i Ti u zonama A-E (*Tabela 5*), izračunate su vrednosti za  $r_x$  i  $r_y$  na osnovu njihovih jonskih radijusa u dodekaedarskom i oktaedarskom položaju (Shannon i Prewitt, 1969), koji su prikazani u *Tabeli 9*.

*Tabela 9. Izračunate vrednosti za  $r_x$  i  $r_y$  u zonama A-E (u Å).*

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
$r_x$	1,1168	1,1169	1,1169	1,1169	1,1169
$r_y$	0,5750	0,5762	0,5797	0,5813	0,5809

Ovako dobijene vrednosti za  $r_x$  i  $r_y$  su dodate na *Sliku 7*, kako bi se uočio položaj našeg proučavanog grandita (MP) u odnosu na ostale vrste neteseralnih granata i prikazane zajedno sa njima na *Slici 11*.



Slika 11. Raspodela srednjih radijusa katjona u X i Y položajima neteseralnih granata sa položajem grandita proučavanog u ovom radu (MP).

Izračunate vrednosti za srednji radijus katjona u položaju {X}:  $r_x=1,1168-1,1169$ ; kao i za srednji radijus katjona u položaju [Y]:  $r_y=0,5750-0,5813$  (Tabela 9), omogućili su da se odredi položaj našeg proučavanog grandita (MP) u odnosu na ostale vrste neteseralnih granata (Slika 11). Obzirom na položaj na kome se nalaze, ovakvi rezultati nagoveštavaju mogućnost T<sub>2g</sub> prelaza, t.j. fazne transformacije koje vode od  $Ia\bar{3}d$  p.g. ka  $R\bar{3}c$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$  p.g., a shodno proučavanjima koje su izvršili Griffen i dr. (1992).

## 6.2. ODREĐIVANJE SASTAVA GRANDITA POMOĆU IC REZULTATA

U ovom Poglavlju razmatrana je teoretska mogućnost određivanja sastava grandita na osnovu IC rezultata (*Tabela 11, Slika 16*; Tančić, 2008) pomoću jednačine linearne zavisnosti (Tančić, 2005).

Na primer, može se pretpostaviti da su pozicije IC traka spektra grosulara i andradita (kao krajnjih članova izomorfne serije) linearno, ili skoro linearno, međusobno korelisane (Kobayashi i Shoji, 1987; McAloon i Hofmeister, 1995; Boffa Ballaran i Woodland, 2006).

Prema tome, neke od tih najizraženijih traka u okviru nižeg spektralnog opsega granatskih zona (t.j. N<sup>o</sup>: 5, 6, 8 i 10), su iskorišćene za približnu odredbu grosularskih sadržaja (*Tabela 10*), a na osnovu odgovarajućih podataka (Moore i dr. 1971) za grosularske (Gr-90) i andraditske (An-94) uzorke. Ovakvi preračuni su doveli do Gr<sub>59-64</sub>Adr<sub>36-41</sub> sastava, što je u vrlo dobroj saglasnosti sa EMPA (*Tabela 5*), kao i prethodnim hemijskim, SEM-EDS, rendgenskim (XRPD) i Rietveld rezultatima (Tančić, 2008). U zoni E je malo veće odstupanje najverovatnije usled prisustva skapolita, iako se od odabranih granatskih traka jedino N<sup>o</sup> 5 preklapa sa skapolitskim.

*Tabela 10. Izračunati sadržaji grosulara u A-E zonama iz odgovarajućih položaja traka (u cm<sup>-1</sup>) iz grosularskog (Gr-90) i andraditskog (An-94) uzorka; za detalje videti Moore i dr. (1971).*

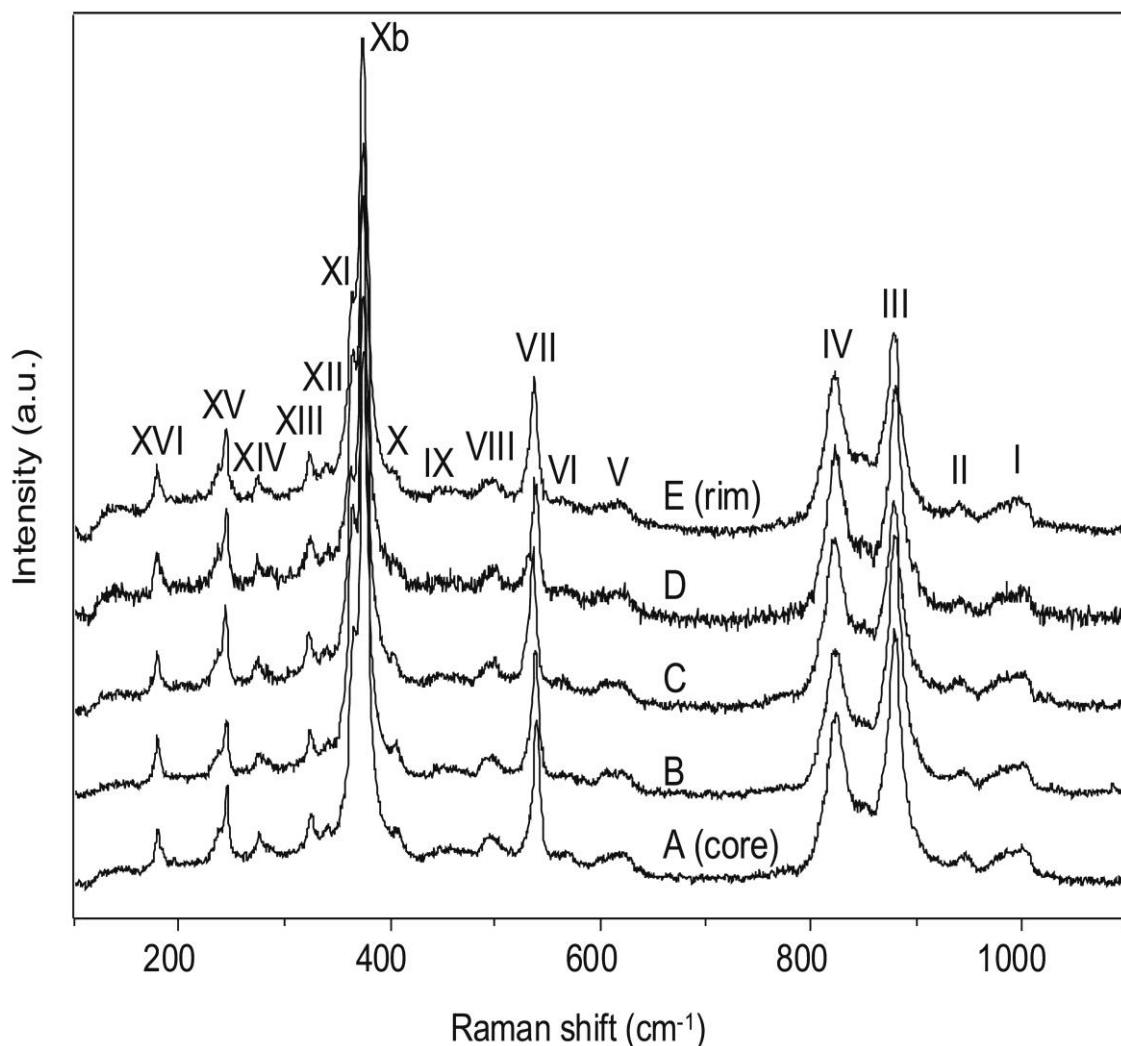
Traka N <sup>o</sup>	Moore i dr. (1971)		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
	Gr-90	An-94	Grs	Grs	Grs	Grs	Grs
5	619	591	64,0	64,0	64,0	61,0	64,0
6	544	512	62,5	57,2	57,2	57,2	62,5
8	473	439	69,3	64,4	64,4	64,4	64,4
10	451	400*	58,8	52,3	52,3	52,3	58,8
<b>Srednja vrednost (mol. %)</b>			<b>63,6</b>	<b>59,5</b>	<b>59,5</b>	<b>58,7</b>	<b>62,4</b>

\* - An-93 (Moore i dr. 1971)

Samim tim, ovakva mogućnost određivanja sastava grandita na osnovu IC rezultata je pokazala visok potencijal sličnih odredbi kako ove, tako i mnogih drugih izomorfni serija ostalih mineralnih vrsta, a što bi trebalo ubuduće dodatno proučiti.

### 6.3. SPEKTROSKOPSKA RAMAN PROUČAVANJA

Raman spektri granata iz zona A-E su prikazani na *Slici 12*, dok su položaji glavnih Raman traka prikazani u *Tabeli 11*. Glavne trake su obeležene u skladu sa oznakama Pinet-a i Smith-a (1993), koji su proučavali prirodne članove grosularsko-andraditskih čvrstih rastvora.



*Slika 12. Raman spektri proučavanih A-E granatskih zona. Glavne trake su obeležene u skladu sa oznakama Pinet-a i Smith-a (1993). Svi spektri su korigovani na baznu liniju i podešavani na približno podjednaku intenzitet trake X (Tančić i dr., 2012a).*

Tabela 11. Raman pomeranja (u  $\text{cm}^{-1}$ ) šesnaest traka granata iz zona A-E. Za upoređenje, tri granatske analize (G13, G03 i G17) date od strane Pinet-a i Smith-a (1993) su prikazane. Srednje vrednosti grosularske (Grs) i andraditske (Adr) komponente (u mol. %), dobijene EMPA proučavanjima (Tabela 5), su takođe prikazane.

Traka	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	G13	G03	G17
I	1002	1002	1002	1002	1000	993	n. d.	999
II	879	879	878	879	878	878	878	877
III	848	848	845	848	848	844	839	846
IV	823	822	821	822	821	825	817	820
V	614	613	610	613	611	620	619	620
VI	569	569	564	568	566	567	558	560
VII	538	537	534	537	535	540	533	532
VIII	496	495	495	496	495	495	499	n. d.
IX	454	452	453	n. d.	453	440	n. d.	457
X	405	404	402	404	399	401	396	399
Xb	374	374	373	374	373	372	369	372
XI	363	363	361	363	362	365	359	362
XII	339	337	336	340	337	338	336	337
XIII	324	323	322	323	322	325	319	328
XIV	274	274	273	274	273	273	270	272
XV	244	243	242	243	243	242	n. d.	242
XVI	178	178	177	177	177	177	176	178
Grs	<b>63,6</b>	<b>62,5</b>	<b>59,0</b>	<b>57,6</b>	<b>57,9</b>	<b>61,3</b>	<b>56,7</b>	<b>54,3</b>
Adr	<b>36,4</b>	<b>37,5</b>	<b>40,0</b>	<b>41,4</b>	<b>41,1</b>	<b>32,2</b>	<b>43,3</b>	<b>45,0</b>

n. d. - nije detektovano

Generalno, položaji 16 Raman traka u spektrima granata iz zona A-E su skoro konstantni, slično IC rezultatima. Blaga odstupanja između zona, kao i u odnosu na položaje traka grosularsko-andraditskih uzoraka (G13, G03 i G17) koje su analizirali Pinet i Smith (1993), uglavnom se mogu pripisati malim razlikama u grosularskoj i andraditskoj komponenti.

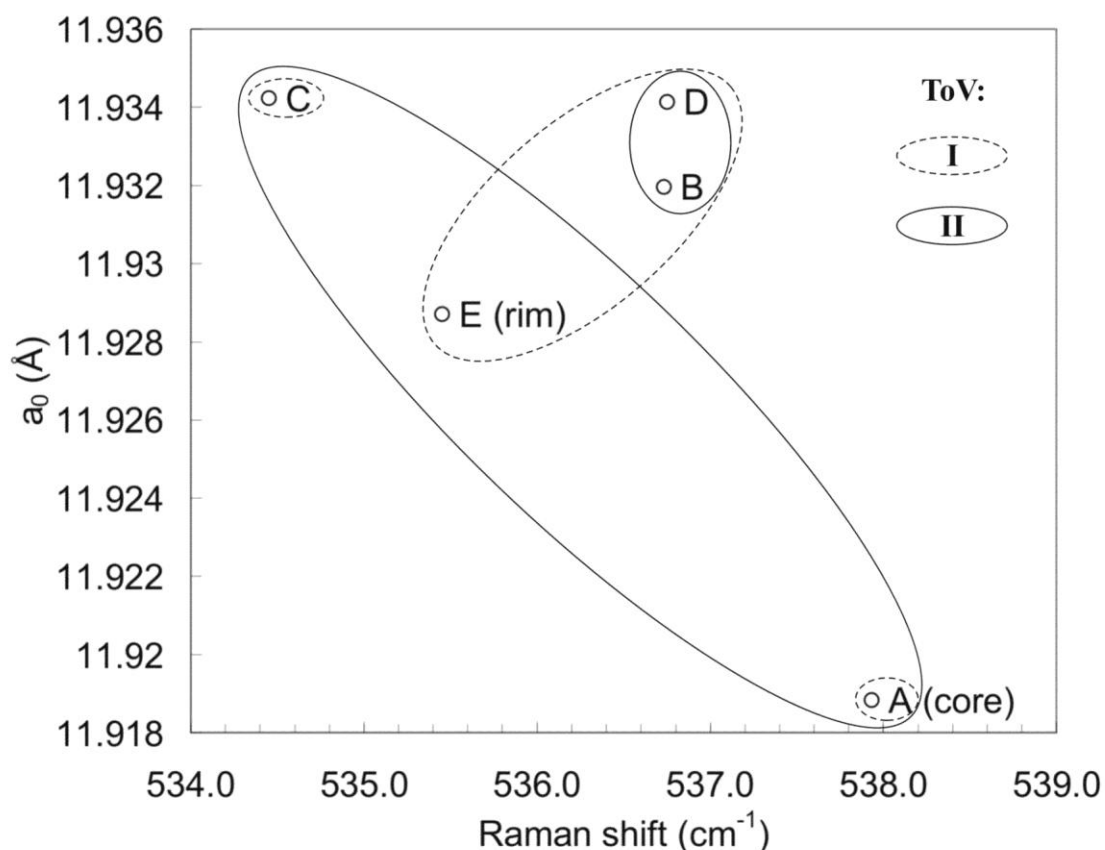
Na primer, položaj Raman trake X je u sasvim dobroj korelaciji sa uglavnom opadajućom vrednosti grosularske komponente od jezgra ka obodu (Tabela 11). Pojavljivanje traka V, VI, VIII i IX kod grosularsko-andraditskih spektara smatra se kao indikator, odnosno kao „hemijski marker” za ulazak  $\text{Fe}^{3+}$  u strukturu kristala. Prema tome, ove trake su prilično slične trakama u referentnim uzorcima, i adekvatne sastavima dobijenim prethodnim hemijskim i rendgenskim analizama, kao i IC proučavanjima.

Zavisnost pomeranja Raman trake VII u odnosu na dimenziju jedinične ćelije  $a_0$  (Tančić, 2008) prikazana je na *Slici 13*. Jasno su vidljiva dva trenda zavisnosti (ToV-type of variation), u vrlo dobroj saglasnosti sa prethodnim rezultatima (Tančić, 2008):

1. Proporcionalna linearnost za zone B, D i E, i odstupanja od te linearnosti u zonama A i C (ToV I); i

2. Obrnuto proporcionalna (inverzna) linearnost za zone A, C i E, i malo veće vrednosti  $a_0$ , t.j. odstupanje, pri konstantnom Raman pomeranju za zone B i D (ToV II).

Ovakvi tipovi zavisnosti su identični, ili vrlo slični, i za veliku većinu ostalih Raman traka (videti *Tabelu 11*), tako da ih ovom prilikom nećemo posebno navoditi.



*Slika 13. Zavisnost pomeranja Raman trake VII u odnosu na dimenziju jedinične ćelije  $a_0$ . Dva tipa zavisnosti (ToV I i II) su jasno vidljiva (Tančić i dr., 2012a).*

Slično kao i za IC rezultate, razmatrana je teoretska mogućnost određivanja sastava grandita na osnovu Raman rezultata (*Tabela 11* i *Slika 12*) pomoću jednačine linearne zavisnosti (Tančić, 2005).

Na primer, može se pretpostaviti da su Raman trake spektra grosulara i andradita (kao krajnjih članova izomorfne serije) linearno, ili skoro linearno, međusobno korelisane. Prema tome, neke od tih traka u okviru nižeg spektralnog opsega granatskih zona (t.j. N°: V, VII, X i XV), su iskorišćene za približnu odredbu grosularskih sadržaja (*Tabela 12*), a na osnovu odgovarajućih podataka (Kolesov i Geiger, 1998) za grosularske (Gr-98) i andraditske (An-98) uzorke.

*Tabela 12. Izračunati sadržaji grosulara u A-E zonama iz odgovarajućih položaja traka (u  $cm^{-1}$ ) iz grosularskog (Gr-98) i andraditskog (An-98) uzorka; za detalje videti Kolesov-a i Geiger-a (1998).*

Traka N°	Kolesov i Geiger (1998)		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
	Gr-98	An-98	Grs	Grs	Grs	Grs	Grs
V	630	539	56,5	53,9	46,1	53,9	46,9
VII	550	516	64,1	61,3	52,8	61,3	55,6
X	420	382	60,1	57,6	52,5	57,6	44,9
XV	247	236	71,8	63,1	54,4	63,1	63,1
Sr. vr. iz V, VII, X i XV (mol. %)			<b>63,1</b>	<b>59,0</b>	<b>51,4</b>	<b>59,0</b>	<b>52,6</b>
Sr. vred. iz VII, X i XV (mol. %)			<b>65,3</b>	<b>60,7</b>	<b>53,2</b>	<b>60,7</b>	<b>54,5</b>

Ovakvi preračuni su doveli do  $Grs_{51-63}Adr_{37-49}$  sastava (srednja vrednost iz 4 trake), odnosno do  $Grs_{53-65}Adr_{35-47}$  sastava (srednja vrednost iz 3 trake). Takvi rezultati nisu u potpunoj saglasnosti sa prethodnim. Naime, dobra saglasnost je u zonama A, B i D, dok je loša u zonama C i E. U zonama C i E su primetna odstupanja od linearnosti i niže vrednosti od očekivanih i dobijenih drugim metodama (Tančić, 2008; i *Tabela 5*). Iako su razlozi za ovakva odstupanja izvan sadašnjih proučavanja, u zoni E bi najverovatnije mogli da se objasne prisustvom skapolita, i preklapanjem pojedinih traka, slično kao i kod IC rezultata. Što se tiče zone C, ovo odstupanje bi možda moglo biti u vezi sa strukturnom (ne)uređenošću ili nekom vrstom desimetrizacije. Na tako nešto bi realno mogao da ukazuje i sam izgled svih Raman spektara, kao i određena odstupanja u odnosu na karakteristične granditske pikove kod svih proučavanih A-E zona (usmena komunikacija sa prof. Dr Reinhard-om Kaindl-om). Trebalo bi takođe imati u vidu da je Ramanska tehnika osetljivija od rendgenske difrakcije na prisustvo desimetrizacije.

Bez obzira na dobijene rezultate, ovakva mogućnost određivanja sastava grandita na osnovu Raman proučavanja ukazuje na mnogo veći potencijal, obzirom na dobru saglasnost u preostale tri zone, a što bi trebalo dodatno proveriti nekim budućim ispitivanjima.



## 6.4. ODREĐIVANJE STRUKTURE GRANDITA RIETVELD-OVOM METODOM

Obzirom da je prethodno utvrđena homogenost pet granditskih zona u smislu njihovih hemijskih sastava, kao i da su procenjeni svi relevantni uslovi postanka grandita, stekli su se preduslovi da se utvrdi egzaktna prostorna grupa kristalizacije ovog grandita, odnosno njegovih pet različitih makroskopski vidljivih zona. U tom smislu, utačnjavane su različite strukture Rietveld-ovom metodom.

Izvršena su proučavanja u: teseralnoj ( $Ia\bar{3}d$ ,  $I\bar{4}3d$ ,  $I4_132$ ,  $P4_132$ ,  $Ia\bar{3}$  i  $I2_13$  p.g.; kao i za mešavine dve faze u  $P4_132 + Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d + Ia\bar{3}d$  p.g.); romboedarskoj ( $R\bar{3}c$  i  $R\bar{3}$  p.g.); tetragonalnoj ( $I4_1/acd$  i  $I4_1/a$  p.g.); rombičnoj ( $Ibca$ ,  $Fddd$  i  $Pbca$  p.g.); monoklinočnoj ( $I2/a$ ,  $I2/b$ ,  $I2/c$  i  $C2/c$  p.g.); i trikličnoj ( $I\bar{1}$  p.g.) simetriji. Sva navedena proučavanja struktura (t.j. u 18 od 20 različitih struktura) vršena su u prvom delu bez geometrijskih ograničenja (engleski: constrains).

U drugom delu proučavanja su, shodno problematici i hemijskom sastavu, kod sledećih 6 p.g.:  $Ia\bar{3}d$ ,  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$ ; kao i kod mešavine u istim  $Ia\bar{3}d + Ia\bar{3}d$  p.g.; uvedena dodatna geometrijska ograničenja za Ca-Mn i Al-Fe parametre zauzeća (Tabela 5); kao i za Si-O, Y-O i X-O rastojanja adekvatno hemijskom sastavu između grosulara i andradita (Tabela 15; Tančić, 2008); a koja su prikazana u Tabeli 13. Svi uglovi su tretirani bez geometrijskih ograničenja.

Izvršena su i dodatna ispitivanja zona da bi se utvrdilo da li predstavljaju mešavine dve faze grandita koji kristališu u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$ , ili ne; a takođe je detaljnije proučavano pojavljivanje dubleta kao važnog faktora za dokazivanje eventualne desimetrizacije.

Tabela 13. Ograničenja za Ca i Al parametre zauzeća; i za Si-O, Y-O i X-O rastojanja.

	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Ca (at. %)	98	98	98	98	98
Al (at. %)	64	62	59	58	58
Si-O (Å)	1,644(5)	1,644(5)	1,644(5)	1,644(5)	1,644(5)
Y-O (Å)	1,960(5)	1,962(5)	1,965(5)	1,966(5)	1,966(5)
X(1)-O (Å)	2,336(5)	2,336(5)	2,337(5)	2,338(5)	2,338(5)
X(2)-O (Å)	2,494(5)	2,494(5)	2,494(5)	2,494(5)	2,494(5)

#### 6.4.1. Određivanje strukture bez geometrijskih ograničenja

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I\bar{4}3d$  (220) p.g. su prikazani u *Prilozima 1-5*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 6*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 7*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I4_132$  (214) p.g. su prikazani u *Prilozima 8-12*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 13*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 14*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $P4_132$  (213) p.g. su prikazani u *Prilozima 15-19*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 20*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 21*.

Finalni Rietveld-ovi difraktogrami praha ispitivanih zona u dvofaznim  $P4_132$  (213) i  $Ia\bar{3}d$  (230) p.g. su prikazani u *Prilozima 22-26*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 27*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilozima 28 i 29*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $Ia\bar{3}$  (206) p.g. su prikazani u *Prilozima 30-34*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 35*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 36*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I2_13$  (199) p.g. su prikazani u *Prilozima 37-41*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 42*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 43*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $R\bar{3}c$  (167) p.g. su prikazani u *Prilozima 44-48*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu*

49, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 50*. Odabrana međuatomska rastojanja su prikazana u *Prilogu 51*, a međuatomski uglovi u *Prilogu 52*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $R\bar{3}$  (148) p.g. su prikazani u *Prilozima 53-57*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 58*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 59*. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja su prikazana u *Prilogu 60*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I4_1/acd$  (142) p.g. su prikazani u *Prilozima 61-65*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 66*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 67*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I4_1/a$  (88) p.g. su prikazani u *Prilozima 68-72*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 73*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 74*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $Ibca$  (73) p.g. su prikazani u *Prilozima 75-79*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 80*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 81*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $Fddd$  (70) p.g. su prikazani u *Prilozima 82-86*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 87*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 88*. Odabrana međuatomska rastojanja su prikazana u *Prilogu 89*, a međuatomski uglovi u *Prilogu 90*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $Pbca$  (61) p.g. su prikazani u *Prilozima 91-95*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 96*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 97*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I2/a$  (15) p.g. su prikazani u *Prilozima 98-102*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 103*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 104*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I2/b$  (15) p.g. su prikazani u *Prilozima 105-109*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 110*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 111*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I2/c$  (15) p.g. su prikazani u *Prilozima 112-116*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 117*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 118*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $C2/c$  (15) p.g. su prikazani u *Prilozima 119-123*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 124*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 125*. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja su prikazana u *Prilogu 126*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $\bar{1}$  (2) p.g. su prikazani u *Prilozima 127-131*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 132*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 133*. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja su prikazana u *Prilogu 134*.

Rezultati koji su dobijeni proučavanjem svih 6 teseralnih p.g. i njihovih mešavina, odnosno finalni Rietveld-ovi plotovi, profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja (*Prilozi 1-6, 8-13, 15-20, 22-27, 30-35 i 37-42*) su vrlo slični onima koji su dobijeni za  $Ia\bar{3}d$  p.g. (*Tabela 12, Slike 17-21; Tančić, 2008*).

Sa početkom snižavanja simetrije, razlike u dimenzijama između  $a_0$  i  $c_0$  kristalografskih osa sa sličnim vrednostima postaju značajno vidljive već u tetragonalnoj sistemi (*Prilozi 66 i 73*), ukazujući na odstupanje od teseralne simetrije i vrlo moguću desimetrizaciju.

Sa daljim snižavanjem simetrije preko rombične (*Prilozi 80, 87 i 96*), monoklinične (*Prilozi 103, 110, 117 i 124*) i triklinične sisteme (*Prilog 132*), nastavlja se isti trend između  $a_0$ ,  $b_0$  i  $c_0$  kristalografskih osa, čime pretpostavljena desimetrizacija postaje sve očiglednija.

Ovde bi trebalo napomenuti da se kod romboedarske sisteme desimetrizacija ne može lako uočiti zbog promene orijentacije kristalografskog krsta (*Prilozi 49 i 58*). Međutim, Ishizawa i Inagaki (2008) su napravili matematičke proračune koji omogućavaju da se utvrde razlike između romboedarskih i pseudoteseralnih dimenzija jediničnih ćelija. Naime, ukoliko je četvorostruka vrednost odnosa  $c/a$  bliska  $\sqrt{6}$ , odnosno 2,44949, ta vrednost odgovara uglu  $\alpha=60^\circ$ , odnosno metrički pljosno centriranoj teseralnoj ćeliji (FCC, engleski: Face Centred Cell). Ovi parametri su dodatno preračunati i prikazani u *Prilozima 49 i 58*. Kao što se može videti, u svim zonama se zapažaju manja ili veća odstupanja ugla  $\alpha$  od  $60^\circ$ , što ukazuje da ispitivani grandit sigurno ne kristališe teseralno. Ova odstupanja su u opsegu od  $0,024^\circ$  do  $0,068^\circ$  u  $R\bar{3}c$  p.g., i u opsegu od  $0,026^\circ$  do  $0,054^\circ$  u  $R\bar{3}$  p.g. U obe ove p.g. najveća odstupanja se zapažaju u zonama B, C i E.

Takođe, izračunati sadržaji za Ca i Al Rietveld-ovom metodom kod svih teseralnih p.g. (*Prilozi 7, 14, 21, 28, 29, 36 i 43*), vrlo slično kao ni za  $Ia\bar{3}d$  p.g. (*Tabela 13, Slika 25; Tančić, 2008*), se ni dalje u zonama A i C ne poklapaju sa izračunatim rezultatima ostalih metoda (*Tabele 5, 10 i 12; kao i Tabele 8-10 i 14; Tančić, 2008*). Isti trend se ponovo uočava kod tetragonalnih  $I4_1/acd$  i  $I4_1/a$  p.g. (*Prilozi 67 i 74*), kao i kod triklinične  $I\bar{1}$  p.g. (*Prilog 133*).

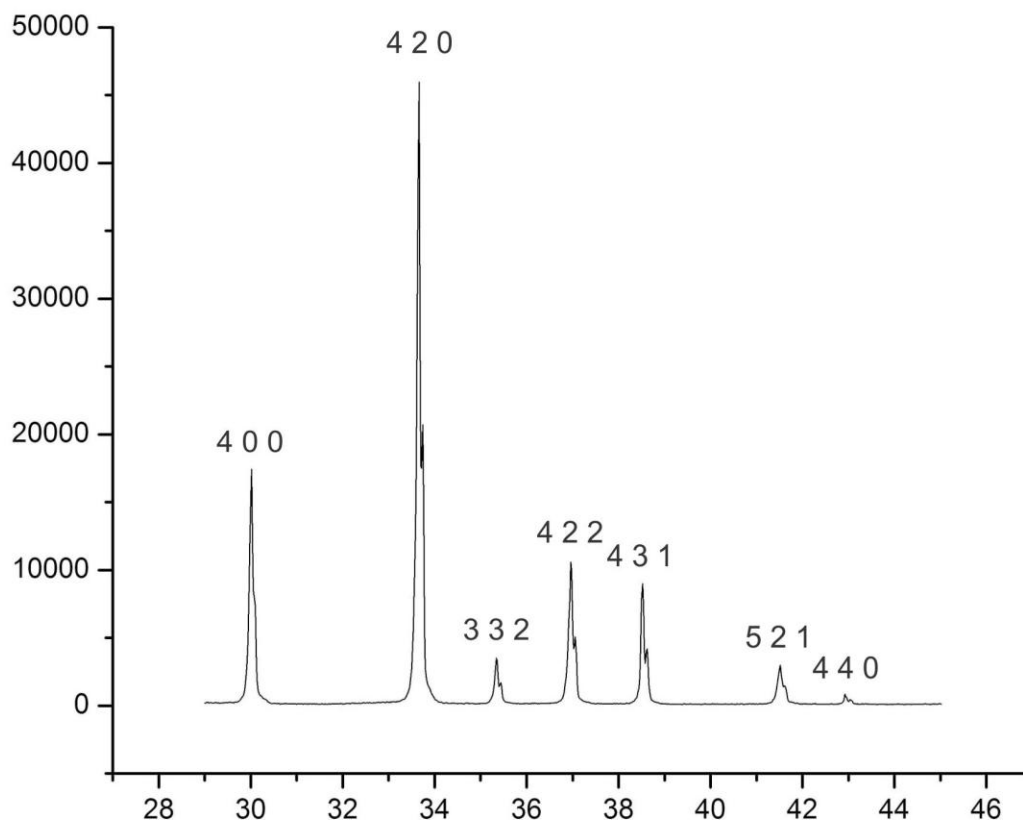
Sa druge strane, primetno bolja slaganja izračunatih sadržaja za Ca i Al Rietveld-ovom metodom u odnosu na izračunate rezultate dobijene ostalim metodama (*Tabele 5, 10 i 12; kao i Tabele 8-10 i 14; Tančić, 2008*), se zapažaju kod svih romboedarskih (*Prilozi 50 i 59*), rombičnih (*Prilozi 81, 88 i 97*) i monokliničnih p.g. (*Prilozi 104, 111, 118 i 125*). Samim tim, ovaj podatak preliminarno ukazuje da bi egzaktnu p.g. kristalizacije najverovatnije trebalo potražiti u okviru ove tri sisteme.

U svim ispitivanim sistemama i p.g. mogu se uočiti manje ili veće međusobne razlike između A-E zona, čime se potvrđuju rezultati svih prethodnih strukturno-hemijskih i Raman proučavanja, kako u ovom, tako i u prethodnim radovima (Tančić, 2008; Tančić i dr., 2012a).

### 6.4.2. Analiza dubleta pojedinih pikova

U ovom delu analizirani su dubleti kod pojedinih pikova. Za ova proučavanja odabrana je zona A, jer su tu prethodno uočeni dubleti najizraženiji (*Slike 13 i 23*; Tančić, 2008).

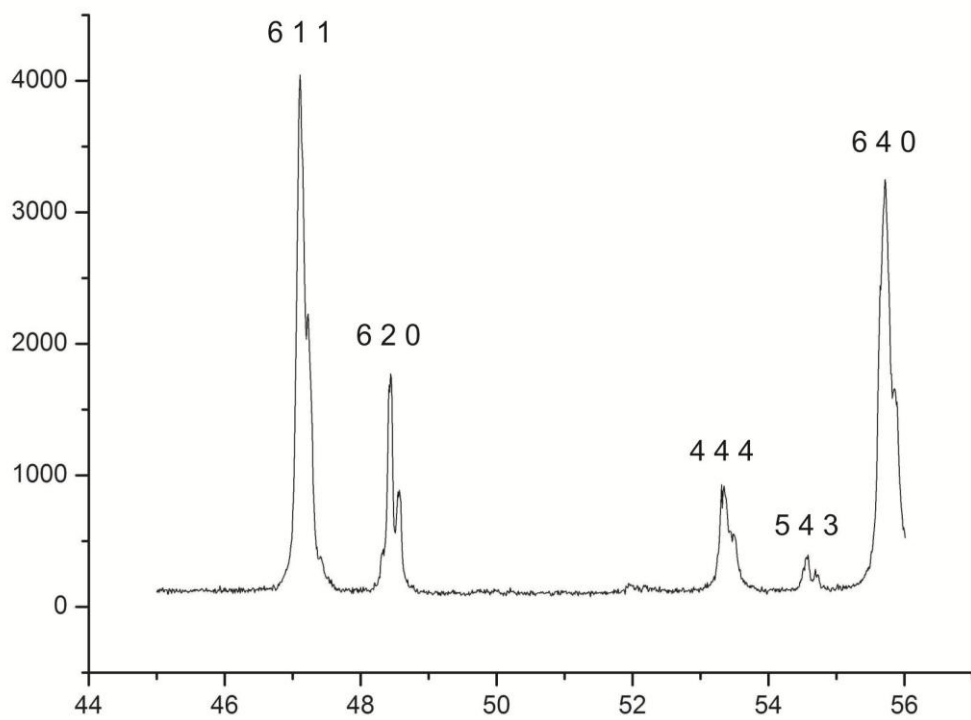
Snimljeni rendgenski difraktogrami praha pojedinih ugaonih oblasti zone A prikazani su na *Slikama 14-18*, a pikovi su označeni sa  $hkl$ -ovima koji pripadaju  $Ia\bar{3}d$  p.g.



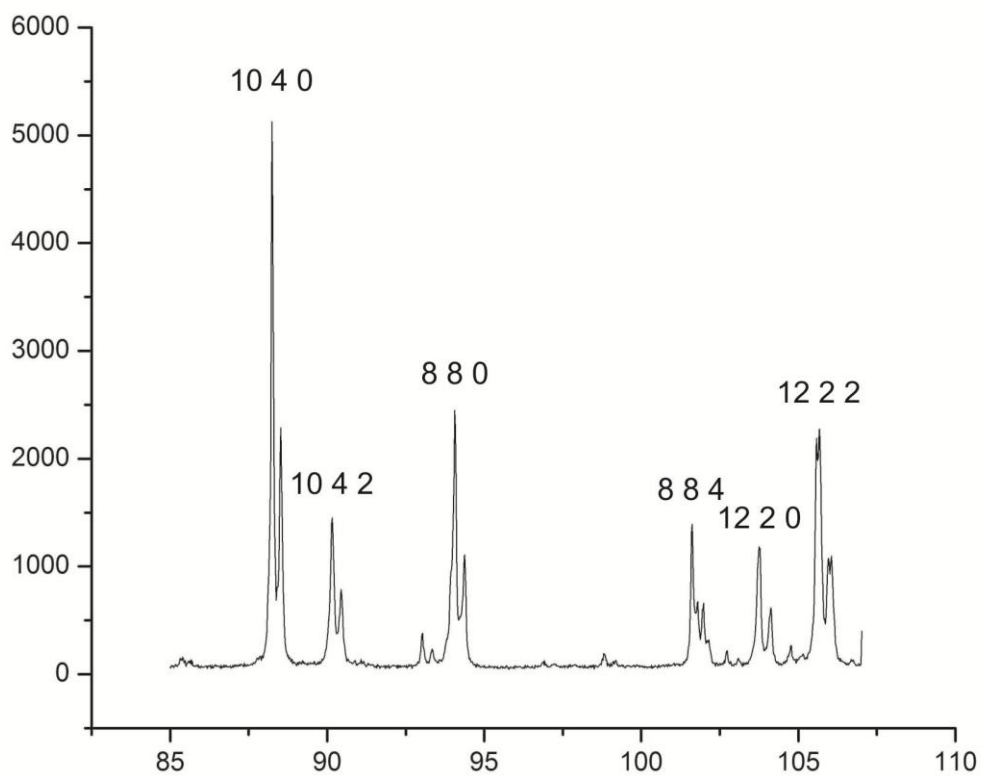
*Slika 14. Rendgenski difraktogram praha ispitivane zone A od 29° do 45°.*

Sa *Slike 14* može se videti da pikovi 4 0 0, 3 3 2, 4 2 2, 4 3 1 i 5 2 1 sigurno nisu dubleti (--); dok su pikovi 4 2 0 i 4 4 0 možda dubleti (-+).

Sa *Slike 15* može se videti da su pikovi 6 1 1, 5 4 3 i 6 4 0 sigurno dubleti (+); dok su pikovi 6 2 0 i 4 4 4 vrlo izraženi dubleti (++)

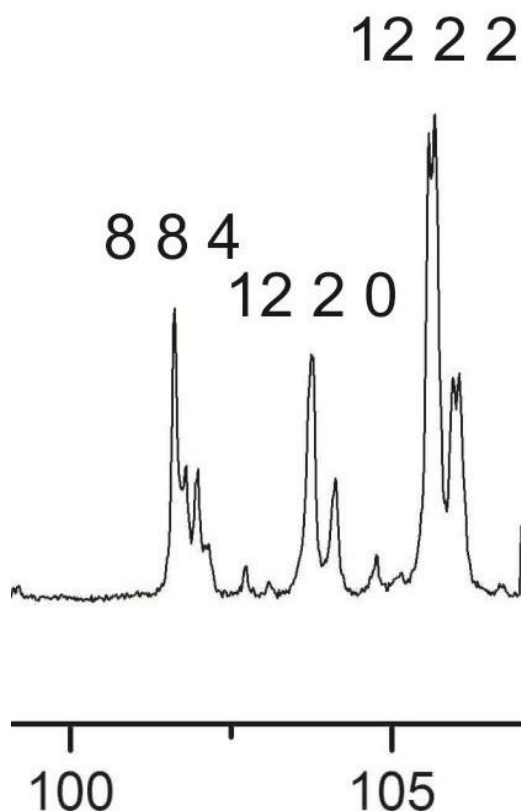


Slika 15. Rendgenski difraktogram praha ispitivane zone A od 45° do 56°.



Slika 16. Rendgenski difraktogram praha ispitivane zone A od 85° do 107°.

Sa Slika 16 i 17 (koja predstavlja uveličani desni deo Slike 16) može se videti da pikovi 10 4 0 i 10 4 2 sigurno nisu dubleti (--); da su pikovi 8 8 0 i 12 2 0 možda dubleti (-+); dok su pikovi 8 8 4 i 12 2 2 vrlo izraženi dubleti (++)



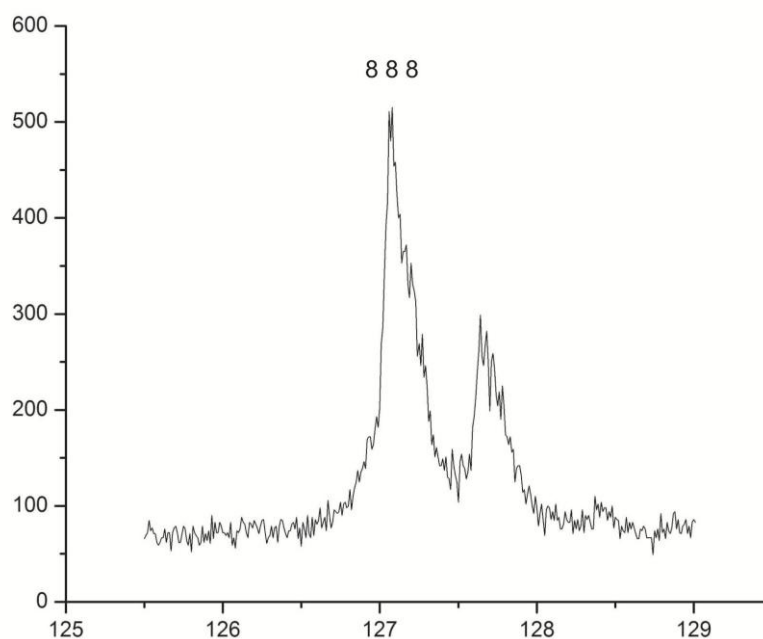
Slika 17. Rendgenski difraktogram praha ispitivane zone A od oko 99° do 107°.

Sa Slike 18 može se videti da je pik 8 8 8 vrlo izražen dublet (++)

- Gledano u celosti, sa Slike 14-18 može se videti da pikovi:
1. 4 0 0, 3 3 2, 4 2 2, 4 3 1, 5 2 1, 10 4 0 i 10 4 2 sigurno nisu dubleti (--);
  2. 4 2 0, 4 4 0, 8 8 0 i 12 2 0 su možda dubleti (-+);
  3. 6 1 1, 5 4 3 i 6 4 0 su sigurno dubleti (+); dok su
  4. 6 2 0, 4 4 4, 8 8 4, 12 2 2 i 8 8 8 vrlo izraženi dubleti (++)

Iz prethodnog se može jasno sagledati da jedan isti uzorak zone A pokazuje različite vrste pikova, odnosno da sa jedne strane postoje pikovi koje sigurno ili možda nisu dubleti, dok sa druge strane postoje pikovi koje su sigurno dubleti, od kojih su neki vrlo izraženi.





Slika 18. Rendgenski difraktogram praha ispitivane zone A od  $125,5^\circ$  do  $129^\circ$ .

Takav isti trend se uočava i kod pikova sa paralelnih ravni Milerovih indeksa, a primeri za to su sledeći: 5 2 1 i 10 4 2 (--), 4 4 0 i 8 8 0 (-+), 6 1 1 (+) i 12 2 2 (++), i 4 4 4 i 8 8 8 (++) dubleti. Kako su nama bile najinteresantniji pikovi u kojima se pojavljuju dubleti, ovde bi trebalo istaći da za 8 8 4 (t.j. 12 0 0) ne postoji adekvatan pik 4 4 2 (t.j. 6 0 0); dok za 6 2 0 postoji adekvatan pik 12 4 0 na oko  $109,5^\circ 2\theta$ , ali vrlo niskog intenziteta i samim tim je bilo nemoguće odrediti da li je dublet ili ne. Ovde bi trebalo napomenuti da ne postoje ni pikovi 6 1 0 i 5 2 0 (t.j. 4 3 2) za slično poređenje sa pikovima 12 2 0 i 10 4 0 (t.j. 8 6 4).

Ako postoji takva različitost između pikova u okviru istog uzorka, onda je to veoma važan podatak, jer to onda ukazuje da proučavani uzorak nikako ne može da kristališe ni u jednoj od teseralnih p.g., a ni da je u pitanju mešavina dve faze koje kristališu u teseralnim prostornim grupama, već da je gotovo sigurno došlo do nekog vida desimetrizacije.

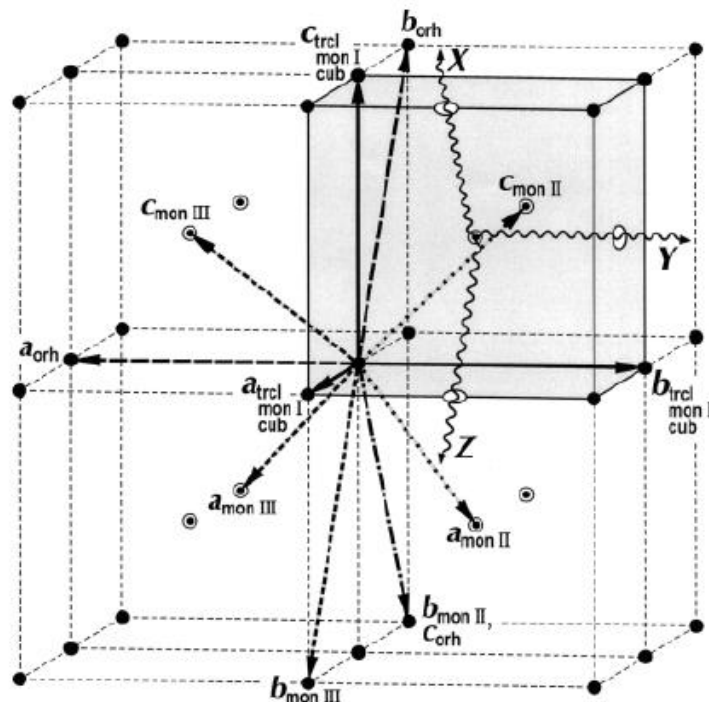
Da je takav preliminarni zaključak vrlo verovatan, jasno se može uočiti sa *Slike 17*, na kojoj se vrlo jasno može videti da se pik 12 2 0 koji najverovatnije nije dublet (-+) nalazi približno tačno između dva vrlo izražena dubleta pikova 8 8 4 i 12 2 2 (++) . Sa leve strane *Slike 16*, takođe se vrlo jasno uočavaju 3 pika koji nisu dubleti (t.j. 10 4 0, 10 4 2 i 8 8 0).

Iz prethodnog su se takođe mogli izvesti sledeći preliminarni zaključci:

1. najizraženiji dubleti su u pravcu  $hhh$  (4 4 4 i 8 8 8);
2. izraženi su i dubleti u pravcu  $hkk$  (6 1 1 i 12 2 2) i  $hhl$  (8 8 4); s tim što se to ne primećuje kod 4 2 2 i 3 3 2, ili usled toga što nisu dubleti, ili kao posledica njihovog pojavljivanja na malim uglovima (od oko  $35^\circ$  do  $37^\circ 20'$ );
3. kod refleksija tipa  $hh0$  se ne zapažaju dubleti (4 4 0 i 8 8 0);
4. kod refleksija tipa  $hk0$  situacija se veoma razlikuje: 10 4 0 (--); 4 2 0 i 12 2 0 (-+); 6 4 0 i 8 4 0 (na oko  $70^\circ 20'$ ) (+) i 6 2 0 (++) ; i
5. kod većine pikova tipa  $hkl$  uopšte se ne zapažaju dubleti (4 3 1, 5 2 1 i 10 4 2), osim kod pika 5 4 3, koji je inače niskog intenziteta (Slika 15).

Ukoliko su dubleti najizraženiji najviše u kristalografskom pravcu  $hhh$ , onda bi to moglo najvećim delom i da ukaže na narušavanje simetrije u pravcu oktaedra koji se nalazi u pravcu velike dijagonale cele kocke-t.j. heksaedra, odnosno u pravcu ose 3-eg stepena  $Ia\bar{3}d$  p.g.

Ukoliko su dubleti takođe izraženi i u kristalografskim pravcima  $hkk$  i  $hhl$ , onda bi to moglo i da ukaže na narušavanje simetrije u pravcu manje dijagonale pljosni heksaedra-t.j. kvadrata, odnosno u pravcu ose 2-og stepena  $Ia\bar{3}d$  p.g..



Slika 19. Promena simetrije i kristalografskih osa (Wildner i Andrut, 2001).

Na primer, Wildner i Andrut (2001) su promenu teseralne simetrije u rombičnu, tri monoklinične i trikliničnu, kao i promenu njihovih odgovarajućih kristalografskih osa, šematski predstavili na *Slici 19*.

Ukoliko se na opisani način transformišu ose simetrije, mišljenja smo da bi se one mogle preračunati po geometrijsko-matematičkom modelu na sledeći način:

$$1. a_0 \times \sqrt{3} = \sim 20,64\text{Å} / 2 = \sim 10,32\text{Å}; i$$

$$2. a_0 \times \sqrt{2} = \sim 16,86\text{Å}.$$

Ovakve nove dimenzije jedinične ćelije bi na primer preliminarno mogle da ukažu na  $R\bar{3}c$  i  $R\bar{3}$  p.g. kod kojih su:

$$a_{\text{rhombohedral}} = a_{\text{cubic}} \times \sqrt{2}; i c_{\text{rhombohedral}} = a_{\text{cubic}} \times \sqrt{3} / 2 \text{ (Prilozi 49 i 58);}$$

kao i na  $Fddd$  p.g. kod koje su:

$$a_{\text{rhombic}} = b_{\text{rhombic}} = a_{\text{cubic}} \times \sqrt{2}; i c_{\text{rhombic}} = a_{\text{cubic}} \text{ (Prilog 87).}$$

Dodatno, ukoliko se kod eventualnog narušavanja zakonitosti teseralne simetrije odvijala i promena nekog (ili nekih) od uglova između osa na taj način da postanu različiti od  $90^\circ$  (osim naravno za romboedarske  $R\bar{3}c$  i  $R\bar{3}$  p.g. kod kojih su uglovi  $\gamma = 120^\circ$ ), to bi dovelo do nastanka neke od monokliničnih prostornih grupa, ili čak i do triklinične simetrije.

Na primer, kod monokliničnih  $I2/a$  i  $I2/c$  p.g. su:

$a_{\text{monoclinic}} = c_{\text{monoclinic}} = a_{\text{cubic}} \times \sqrt{3} / 2; i b_{\text{monoclinic}} = a_{\text{cubic}} \times \sqrt{2};$  sa međusobno različitim vrednostima ugla  $\beta_0$  (Prilozi 103 i 117), dok je kod  $C2/c$  p.g.:

$$a_{\text{monoclinic}} = a_{\text{cubic}} \times \sqrt{2}; i b_{\text{monoclinic}} = c_{\text{monoclinic}} = a_{\text{cubic}} \text{ (Prilog 124).}$$

Kao što se može videti iz prikazanih rezultata u ovom Poglavlju, može se zaključiti da samo  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $I2/a$ ,  $I2/c$  i  $C2/c$  p.g. mogu ispuniti ovakve kriterijume.

Sa druge strane, nijedna proučavana teseralna, tetragonalna ni triklinična p.g., kao ni preostale dve rombične p.g. ( $Ibca$  i  $Pbca$ ), a takođe ni preostala jedna monoklinična p.g. ( $I2/b$ ), ne ispunjavaju ovakve kriterijume.

Dobijeni rezultati na ovakav način takođe potvrđuju prethodnu pretpostavku da bi egzaktnu p.g. kristalizacije najverovatnije trebalo potražiti u okviru romboedarske, rombične i monoklinične sisteme (Poglavlje 6.4.1.).

### 6.4.3. Kriterijumi za određivanje prostorne grupe kristalne strukture

Kao što je ranije utvrđeno, sve proučavane granditske zone pokazuju manje ili više izražene dublete refleksija (*Slike 13 i 23*; Tančić, 2008). Usled toga, dodatno je izvršeno detaljnije proučavanje dubleta u zoni A (jer su tu dubleti najizraženiji), a što je prikazano u prethodnom Poglavlju (*Slike 14-18*).

Obzirom da je tom prilikom konstatovano da jedan isti uzorak pokazuje različite vrste pikova, odnosno da sa jedne strane postoje pikovi koji sigurno nisu dubleti, dok sa druge strane postoje pikovi koje su sigurno dubleti (neki čak i vrlo izraženi), mišljenja smo da bi onda taj podatak trebalo uzeti kao ključni, t.j. osnovni kriterijum za određivanje egzaktne prostorne grupe kristalizacije.

Samim tim, kao najznačajnije refleksije odabrane su (za sada) one sa Milerovim indeksima  $hkl$  12 2 2 i 8 8 8. Na taj način, odabrana su prva 2 kriterijuma (i) koja, da bi se ispunila, moraju da zadovolje uslov da na tim Bragg-ovim položajima postoje najmanje 2 ili više refleksija. Buduća proučavanja će takođe obuhvatiti i ostale indikativne refleksije.

Sledeći veoma važni kriterijumi (ii-iv) su izračunata međuatomska rastojanja Si-O, Y-O i X-O (3 kriterijuma), kao i parametri zauzeća Al i Ca u oktaedarskim i dodekaedarskim položajima (2 kriterijuma). Parametar zauzeća Si u tetraedarskom položaju nije ovog puta uzet u obzir usled toga što on nije variran u ovim proučavanjima.

Kao poslednja 2 značajna kriterijuma (v) odabrani su  $R_B$  i  $R_F$  faktori slaganja, koji bi trebalo, pre svega, da budu niži nego oni izračunati za  $Ia\bar{3}d$  p.g. (*Tabela 12*; Tančić, 2008).

Na taj način, za određivanje egzaktne prostorne grupe kristalizacije proučavanog grandita preliminarno je odabrano ukupno 9 glavnih parametara, čije su karakteristike prikazane u *Tabeli 14*.

Ovde bi trebalo napomenuti da su kod zona A-C posebno uzeta u obzir i neka od njihovih najspecifičnijih odstupanja u odnosu na literaturne podatke za  $Ia\bar{3}d$  p.g., t.j. izračunata međuatomska rastojanja Si-O i Y-O, kao i parametri zauzeća Al i Ca u

oktaedarskim i dodekaedarskim položajima (Tabele 13 i 15, Slike 24 i 25; Tančić, 2008). Svi preostali parametri su odgovarajući hemijskom sastavu proučavanih granditskih zona (Tabela 5).

Tabela 14. Korišćeni kriterijumi za ocenu valjanosti: (i) broj izračunatih Bragg-ovih položaja ( $Y_{calc}$ ) za refleksije sa hkl 12 2 2 i 8 8 8; (ii) srednja Si-O rastojanja (u Å) u tetraedarskom položaju; (iii) srednja Y-O rastojanja (u Å) i Al sadržaji (u at. %) u oktaedarskom položaju (u %); (iv) srednja X-O rastojanja (u Å) i Ca sadržaji (u at. %) u dodekaedarskom položaju (u %); i (v)  $R_B$  i  $R_F$  faktori pouzdanosti (u %).

	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
i	$\geq 2/\geq 2$	$\geq 2/\geq 2$	$\geq 2/\geq 2$	$\geq 2/\geq 2$	$\geq 2/\geq 2$
ii	>1,57	<1,68	>1,55	~1,645	~1,645
iii	<2,05/<84	>1,94/~62	<2,08/<69	~1,96-1,97/~58	~1,96-1,97/~58
iv	~2,41-2,42/>80	~2,41-2,42/~98	~2,41-2,42/>79	~2,41-2,42/~98	~2,41-2,42/~98
v	<9,23/<7,69	<8,87/<7,20	<6,57/<6,51	<7,98/<6,89	<6,82/<5,83

Osim navedenih devet glavnih, za pomoćne kriterijume odabrane su vrednosti e.s.d.-a (engleski-estimated standard deviations; t.j. procenjene standardne devijacije) variranih Si-O, Y-O i X-O međuatomskih rastojanja, kao i parametara zauzeća Al i Ca.

Odabrani kriterijumi u teseralnim i tetragonalnim p.g. su prikazani u Tabeli 15, a u romboedarskim, rombičnim, monokliničnim i trikliničnim p.g. u Tabeli 16.

Iz predstavljenih rezultata može se videti da nijedna od proučavanih 9 teseralnih i tetragonalnih p.g. ne ispunjava kriterijume dubleta refleksija (Tabela 15, red i). To takođe važi i za 2 rombične p. g., t.j. za *Ibca* i *Pbca* (Tabela 16, red i).

Preostalih 8 p. g. pokazuju manje-više slična Si-O, Y-O i X-O međuatomska rastojanja, kao i vrednosti parametara zauzeća Al i Ca (Tabela 16, redovi ii-iv). U tom slučaju, kombinacija realnijih rastojanja i parametara zauzeća, sa nižim  $R_B$  i  $R_F$  faktorima (Tabela 16, red v) i sa manjim e.s.d. vrednostima (Tabela 16, redovi ii-iv), ukazuje da bi najverovatnije pravu p.g. kristalizacije ovog grandita trebalo tražiti između  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $I2/c$  ili  $C2/c$ , od kojih  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  p.g. najviše zadovoljavaju postavljene kriterijume.

Tabela 15. Odabrani kriterijumi u teseralnim i tetragonalnim prostornim grupama.

Prost. gr.		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>Ia<math>\bar{3}d</math></b> (230)	<b>i</b>	1/1	1/1	1/1	1/1	1/1
	<b>ii</b>	1,570(4)*	1,681(2)	1,546(3)	1,654(4)	1,646(4)
	<b>iii</b>	2,046(4)/84(1)	1,944(2)/65(1)	2,079(4)/69(1)	1,969(4)/59(1)	1,975(4)/58(1)
	<b>iv</b>	2,410(4)/80(4)	2,391(2)/96(1)	2,406(3)/79(3)	2,406(4)/96(4)	2,409(4)/96(4)
	<b>v</b>	9,23/7,69	8,87/7,20	6,57/6,51	7,98/6,89	6,82/5,83
<b>I<math>\bar{4}3d</math></b> (220)	<b>i</b>	1/1	1/1	1/1	1/1	1/1
	<b>ii</b>	1,58(1)	1,68(2)	1,55(1)	1,66(2)	1,64(2)
	<b>iii</b>	2,05(2)/85(2)	1,94(2)/64(2)	2,08(2)/85(2)	1,96(2)/59(1)	1,98(2)/58(2)
	<b>iv</b>	2,41(1)/82(6)	2,39(2)/97(1)	2,41(1)/82(4)	2,41(2)/98(4)	2,41(2)/98(4)
	<b>v</b>	8,91/7,48	8,83/7,28	6,52/6,80	8,02/6,96	6,81/5,94
<b>I4<math>\bar{1}32</math></b> (214)	<b>i</b>	1/1	1/1	1/1	1/1	1/1
	<b>ii</b>	1,57(2)	1,68(2)	1,54(1)	1,66(2)	1,65(2)
	<b>iii</b>	2,05(2)/84(2)	1,94(2)/64(2)	2,08(1)/70(1)	1,97(2)/58(2)	1,98(2)/58(2)
	<b>iv</b>	2,41(1)/80(16)	2,39(2)/98(4)	2,406(8)/82(8)	2,40(1)/98(14)	2,41(2)/98(16)
	<b>v</b>	8,98/7,79	8,78/7,41	6,66/7,45	7,91/7,11	6,83/6,14
<b>P4<math>\bar{1}32</math></b> (213)	<b>i</b>	1/1	1/1	1/1	1/1	1/1
	<b>ii</b>	1,57(3)	1,68(3)	1,55(2)	1,65(4)	1,65(4)
	<b>iii</b>	2,05(3)/84(6)	1,94(3)/64(9)	2,08(2)/70(6)	1,98(4)/58(4)	1,98(4)/60(6)
	<b>iv</b>	2,41(2)/81(17)	2,39(2)/96(4)	2,40(2)/83(8)	2,40(4)/98(14)	2,41(4)/99(14)
	<b>v</b>	9,13/8,76	8,93/8,33	6,66/8,41	8,02/7,97	6,91/6,81
<b>P4<math>\bar{1}32</math></b> (213) + <b>Ia<math>\bar{3}d</math></b> (230)	<b>i</b>	>1/>1	>1/>1	>1/>1	>1/>1	>1/>1
	<b>ii<sup>1</sup></b>	1,58(3)	1,671(5)	1,58(4)	1,663(5)	1,650(5)
	<b>iii<sup>1</sup></b>	2,04(3)/84(8)	1,952(5)/58(3)	2,08(3)/45(12)	1,962(5)/67(2)	1,964(5)/59(2)
	<b>iv<sup>1</sup></b>	2,41(2)/82(15)	2,392(5)/98(2)	2,39(4)/109(15)	2,399(5)/108(8)	2,410(5)/100(4)
	<b>v</b>	9,24/8,80	9,43/8,67	6,01/7,17	8,16/7,54	7,82/6,90
<b>Ia<math>\bar{3}</math></b> (206)	<b>i</b>	1/1	1/1	1/1	1/1	1/1
	<b>ii</b>	1,58(2)	1,68(2)	1,54(1)	1,64(3)	1,65(2)
	<b>iii</b>	2,04(1)/87(6)	1,94(1)/63(6)	2,084(8)/72(3)	1,98(2)/57(12)	1,97(1)/60(4)
	<b>iv</b>	2,41(1)/82(6)	2,39(2)/96(1)	2,40(1)/80(4)	2,41(2)/92(4)	2,41(2)/98(4)
	<b>v</b>	8,89/7,79	8,62/7,39	6,62/6,94	8,22/7,38	6,34/5,82
<b>I2<math>\bar{1}3</math></b> (199)	<b>i</b>	1/1	1/1	1/1	1/1	1/1
	<b>ii</b>	1,58(4)	1,68(6)	1,54(2)	1,66(4)	1,66(4)
	<b>iii</b>	2,05(4)/86(9)	1,94(6)/64(9)	2,08(2)/72(9)	1,96(4)/63(6)	1,97(4)/62(6)
	<b>iv</b>	2,41(4)/80(40)	2,40(4)/97(10)	2,41(3)/83(13)	2,42(4)/92(19)	2,41(4)/100(20)
	<b>v</b>	8,77/7,44	8,59/7,58	6,61/7,28	8,29/7,17	6,91/6,81
<b>I4<math>\bar{1}acd</math></b> (142)	<b>i</b>	>2/1	>2/1	>2/1	>2/1	>2/1
	<b>ii</b>	1,58(2)	1,66(2)	1,60(1)	1,64(2)	1,64(2)
	<b>iii</b>	2,03(2)/85(2)	1,95(2)/64(2)	2,04(1)/69(2)	1,97(2)/59(2)	1,98(2)/60(2)
	<b>iv</b>	2,42(2)/80(9)	2,39(2)/95(3)	2,42(1)/76(5)	2,42(2)/99(6)	2,40(2)/103(3)
	<b>v</b>	8,47/7,16	8,48/7,24	5,78/5,96	7,62/7,38	6,46/5,68
<b>I4<math>\bar{1}a</math></b> (88)	<b>i</b>	>2/1	>2/1	>2/1	>2/1	>2/1
	<b>ii</b>	1,65(4)	1,68(6)	1,66(4)	1,64(5)	1,66(5)
	<b>iii</b>	2,04(4)/87(11)	1,96(5)/64(15)	2,04(4)/65(10)	1,96(5)/59(9)	2,00(5)/59(10)
	<b>iv</b>	2,41(4)/102(4)	2,40(6)/97(5)	2,42(4)/100(3)	2,43(5)/102(4)	2,42(5)/98(4)
	<b>v</b>	7,82/6,52	8,75/7,49	5,72/6,19	7,54/7,52	6,25/5,75

\*Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti.

<sup>1</sup>-Podaci su iz faze sa većom zastupljenošću (zone A i C p.g. 213; i zone B, D i E p.g. 230; Prilog 27)

Tabela 16. Odabrani kriterijumi u romboedarskim, rombičnim, monokliničnim i trikliničnim prostornim grupama.

Prostorna g.	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
$R\bar{3}c$ (167)	i	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2
	ii	1,58(3)*	1,68(3)	1,55(2)	1,64(3)	1,65(4)
	iii	2,08(2)/81(8)	1,97(2)/61(12)	2,11(2)/62(8)	1,98(2)/63(4)	2,02(2)/52(8)
	iv	2,40(2)/90(12)	2,40(2)/95(5)	2,41(2)/89(8)	2,41(2)/99(2)	2,41(2)/97(9)
	v	8,17/6,80	8,64/7,42	6,07/6,31	6,78/6,94	6,02/6,24
$R\bar{3}$ (148)	i	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2
	ii	1,58(8)	1,70(8)	1,57(7)	1,6(1)	1,7(2)
	iii	2,08(7)/79(28)	1,97(6)/62(25)	2,10(6)/64(22)	1,95(9)/62(28)	1,99(9)/58(26)
	iv	2,40(8)/90(20)	2,40(8)/95(6)	2,42(6)/95(20)	2,4(1)/98(12)	2,4(1)/105(20)
	v	7,69/6,58	8,48/7,69	6,23/6,64	6,75/7,11	6,12/5,77
$Ibca$ (73)	i	>2/1	>2/1	>2/1	>2/1	>2/1
	ii	1,59(4)	1,70(3)	1,58(3)	1,66(4)	1,64(5)
	iii	2,02(4)/87(12)	1,93(2)/65(10)	2,03(2)/71(8)	1,96(4)/63(11)	1,99(4)/63(13)
	iv	2,44(4)/101(7)	2,40(3)/95(5)	2,43(3)/101(4)	2,42(4)/100(4)	2,41(5)/95(5)
	v	8,42/7,21	8,02/7,57	5,69/6,04	6,94/7,23	5,61/5,85
$Fddd$ (70)	i	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2
	ii	1,60(3)	1,66(4)	1,60(4)	1,65(4)	1,64(4)
	iii	2,03(3)/82(8)	1,95(3)/66(10)	2,04(3)/67(8)	1,97(3)/64(5)	1,98(4)/62(8)
	iv	2,42(3)/100(8)	2,38(3)/94(6)	2,41(3)/96(6)	2,41(3)/98(5)	2,41(4)/105(6)
	v	8,63/7,39	8,72/7,65	5,80/6,06	7,67/7,54	6,30/6,22
$Pbca$ (61)	i	>2/>1	>2/>1	>2/>1	>2/>1	>2/>1
	ii	1,58(9)	1,7(1)	1,6(1)	1,6(1)	1,6(1)
	iii	2,05(8)/80(20)	1,9(1)/60(37)	2,04(9)/63(23)	2,0(1)/60(17)	2,0(1)/60(20)
	iv	2,42(8)/103(9)	2,4(1)/93(13)	2,4(1)/103(6)	2,4(1)/101(7)	2,4(1)/99(8)
	v	9,93/7,61	8,77/7,55	6,20/7,10	7,30/7,67	6,51/6,19
$I2/a$ (15)	i	>2/>2	>2/>2	>2/>2	>2/>2	>2/>2
	ii	1,6(1)	1,70(9)	1,55(8)	1,6(1)	1,7(1)
	iii	2,04(8)/80(40)	1,96(8)/65(30)	2,08(6)/70(18)	2,0(1)/65(35)	2,0(1)/60(20)
	iv	2,40(9)/104(14)	2,40(8)/96(18)	2,42(6)/105(9)	2,4(1)/101(14)	2,4(1)/97(13)
	v	9,02/6,99	8,78/8,09	5,71/7,10	7,36/7,43	5,79/6,54
$I2/b$ (15)	i	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2
	ii	1,6(1)	1,68(8)	1,58(8)	1,6(1)	1,6(1)
	iii	2,0(1)/80(40)	1,95(7)/60(20)	2,04(6)/60(20)	1,97(9)/60(30)	1,98(9)/60(2)
	iv	2,4(1)/99(11)	2,39(8)/96(12)	2,41(7)/104(8)	2,4(1)/100(11)	2,4(1)/101(2)
	v	9,81/7,51	9,71/8,76	6,55/7,90	8,58/7,74	7,24/8,42
$I2/c$ (15)	i	>2/>2	>2/>2	>2/>2	>2/>2	>2/>2
	ii	1,62(7)	1,7(1)	1,56(7)	1,7(1)	1,7(1)
	iii	2,02(6)/98(14)	1,92(8)/65(20)	2,05(7)/76(16)	1,98(8)/64(14)	1,95(8)/64(24)
	iv	2,43(6)/94(7)	2,4(1)/91(12)	2,45(7)/98(7)	2,44(9)/96(8)	2,41(9)/97(10)
	v	6,78/6,65	7,90/7,75	5,17/5,62	4,76/5,46	5,67/6,41
$C2/c$ (15)	i	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2	>2/2
	ii	1,6(2)	1,72(8)	1,57(9)	1,7(1)	1,7(1)
	iii	2,0(1)/104(20)	1,94(6)/70(16)	2,04(8)/60(20)	1,98(8)/63(20)	2,0(1)/65(20)
	iv	2,4(2)/102(9)	2,42(8)/94(8)	2,42(8)/106(8)	2,41(8)/97(8)	2,4(1)/93(10)
	v	7,54/6,48	7,30/6,95	6,73/8,38	6,25/7,03	5,33/5,53
$I\bar{1}$ (2)	i	>2/>2	>2/>2	>2/>2	>2/>2	>2/>2
	ii	1,6(2)	1,7(2)	1,6(2)	1,6(2)	1,6(2)
	iii	2,0(2)/80(92)	2,0(2)/65(95)	2,0(2)/78(72)	2,0(2)/70(70)	2,0(2)/65(68)
	iv	2,4(2)/105(33)	2,4(2)/97(37)	2,4(2)/103(23)	2,4(2)/97(20)	2,4(2)/93(18)
	v	11,2/9,71	12,0/11,6	7,94/10,3	9,01/9,35	7,65/8,21

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

Ovako dobijeni rezultati su u odličnoj saglasnosti sa prethodnom pretpostavkom da bi egzaktnu p.g. kristalizacije najverovatnije trebalo potražiti u okviru romboedarske, rombične i monoklinične sisteme (Poglavlje 6.4.1.), a takođe i sa pretpostavkom proisteklom iz proučavanja dubleta (Poglavlje 6.4.2.), odnosno da bi najverovatniju p.g. kristalizacije trebalo tražiti među onima koje imaju dimenzije parametara ćelije oko 10,32Å i/ili 16,86Å, t.j. između  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $I2/a$ ,  $I2/c$  i  $C2/c$  p.g.

Dobijeni rezultati su takođe u vrlo dobroj saglasnosti i potvrđuju mogućnost  $T_{2g}$  prelaza, t.j. fazne transformacije koje vode od  $Ia\bar{3}d$  p.g. ka  $R\bar{3}c$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$  p.g. (Hatch i Griffen, 1989), adekvatno sastavu proučavanog grandita (Slika 11).

Znači, sinteza do sada prikazanih rezultata argumentovano ukazuje da bi najverovatnija egzaktna p.g. kristalizacije proučavanog grandita trebalo da bude ili  $R\bar{3}c$  ili  $Fddd$ , od kojih ova druga pokazuje nešto bolje rezultate.

Dodatne dileme bi još trebalo otkloniti uvođenjem međuatomskih ograničenja kod  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  p.g., što je i urađeno u sledećem Poglavlju. Radi poređenja, kao i dopunskih provera, dodate su i  $Ia\bar{3}d$  p.g.; mešavina dve faze koje kristališu u istim  $Ia\bar{3}d$  p.g.;  $R\bar{3}$  kao vrlo slična sa  $R\bar{3}c$  p.g.; i  $I\bar{1}$  p.g. kao još jedna mogućnost  $T_{2g}$  faznog prelaza.

Takođe, od dva kandidata monoklinične simetrije ( $I2/c$  i  $C2/c$ ), odabrana je  $C2/c$  p.g. u skladu sa  $T_{2g}$  faznim prelazom, a i usled činjenice da su te dve p.g. u osnovi iste, samo sa drugim izborom osa simetrije posle transformacije osa, kao što tvrde Hatch i Griffen (1989).



#### 6.4.4. Određivanje strukture sa geometrijskim ograničenjima

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona su u  $Ia\bar{3}d$  p.g. prikazani u *Prilozima 135-139*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 140*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 141*. Odabrana međuatomska rastojanja su prikazana u *Prilogu 142*, a međuatomski uglovi u *Prilogu 143*.

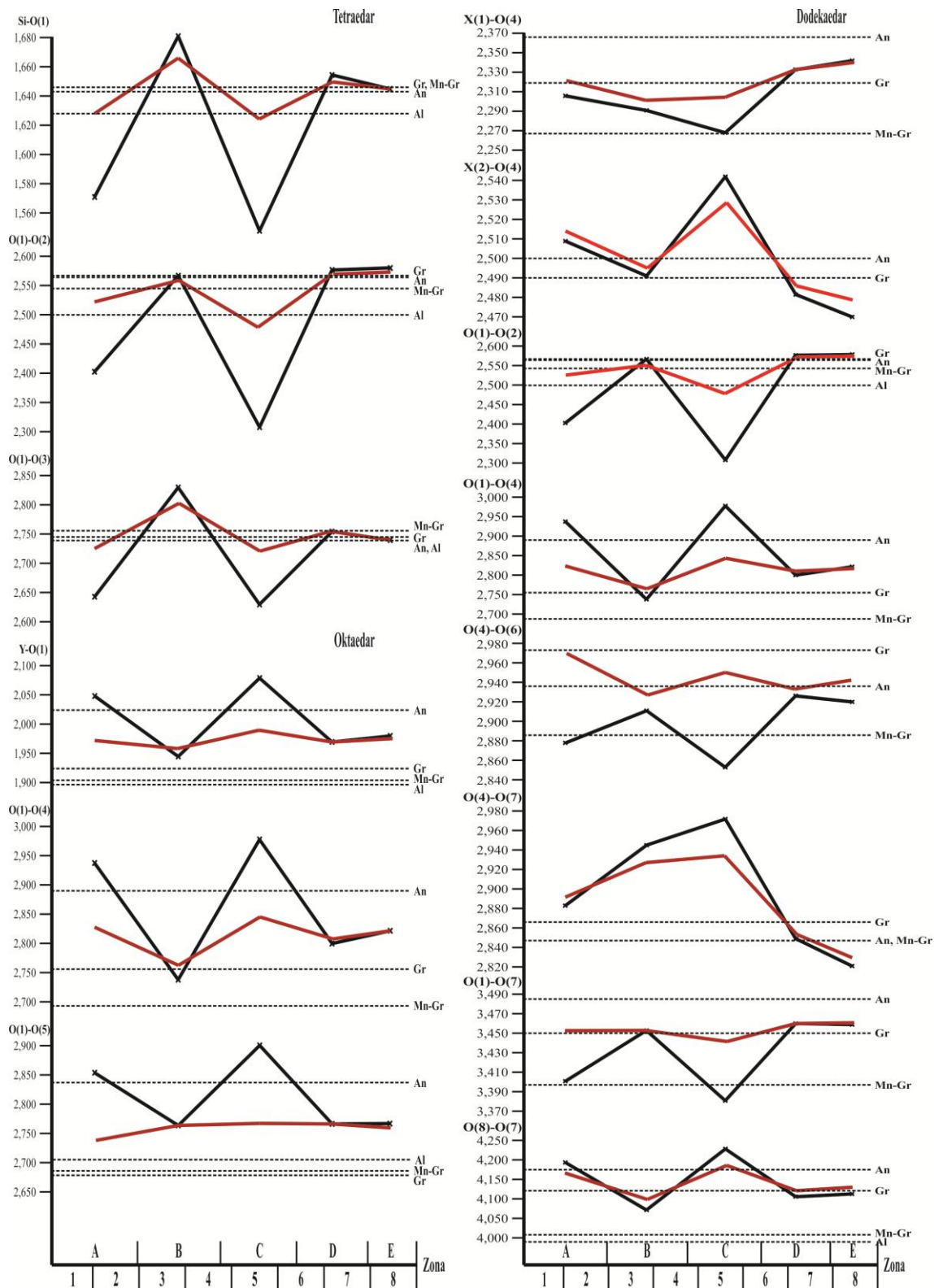
Ovim strukturnim proučavanjima utvrđeno je da je u zoni E sadržaj granata 94(3) % a skapolita 6,3(5) %. Skapolit ima dimenzije jedinične ćelije:  $a_0=12,131(2)\text{Å}$ ;  $c_0=7,568(1)\text{Å}$ ; i  $V_0=1113,7(3)\text{Å}^3$ ; sa odnosima Ca:Na=76(6):24(6) i Cl:C=94(2):6(2), što odgovara graničnoj oblasti sastava mizonit-mejonit, i vrlo slično prethodnim proučavanjima (Tančić, 2008).

Većina profilnih i strukturnih parametara, kao i izračunate dimenzije jediničnih ćelija (*Prilog 140*) su skoro identični kao i kod proučavanja bez geometrijskih ograničenja (*Tabela 12*; Tančić, 2008). Samim tim, i zavisnost Raman trake VII u odnosu na  $a_0$  je identična kao na *Slici 13*. Faktori slaganja,  $\text{scor}$  i  $\text{Chi}^2$  su uglavnom nešto malo veći.

Sa druge strane, vide se i određene promene, jer su atomske koordinate kiseonika dobijene na ovakav način (*Prilog 141*) približnije „idealnim” izračunatim vrednostima odgovarajućim za sastav granditskih zona (*Tabela 22*; Tančić, 2008).

Međuatomska rastojanja sa ograničenjima u okviru tetraedarskog, oktaedarskog i dodekaedarskog koordinacionog poliedra (*Prilog 142*) su prikazana na *Slici 20* zajedno sa odgovarajućim podacima bez ograničenja (*Tabela 15*, *Slika 24*; Tančić, 2008), kao i sa podacima za grosular (Gr) i andradit (An), a gde je bilo adekvatno i za Mn-grosular (Mn-Gr) i almandin (Al).

Ovako dobijeni rezultati nam pružaju mogućnost da ih uporedimo sa podacima bez geometrijskih ograničenja (*Tabela 15*; Tančić, 2008), i ukazuju da sada više ne postoje toliko značajno velike distorzije, t.j. deformisanosti poliedara, koje su pogotovo bile vidljive u zonama A-C.



Slika 20. Međuatomska rastojanja u tetraedarskom, oktaedarskom i dodekaedarskom poliedru (u Å). Oznake: crna linija-bez geometrijskih ograničenja (Tančić, 2008); crvena linija-sa geometrijskim ograničenjima.

Mnoga međuatomska rastojanja i uglovi se sada nalaze u očekivanom opsegu vrednosti između grosulara i andradita (*Tabela 15, Slika 24*; Tančić, 2008), iako postoje i određena odstupanja, ali koja su sada značajno manje izražena (*Prilozi 142 i 143*). Osim navedenog, u zonama B i C više ne postoji jedna neuobičajena karakteristika za granditsku grupu granata, t.j. da su rastojanja O(4)-O(7) duža nego O(4)-O(6). Bolje slaganje i korelacija su ponovo utvrđeni za zone D i E u odnosu na A-C.

Sva međuatomska rastojanja između Si, Y i X metala (*Tabela 17*) pokazuju vrlo male promene u odnosu na one bez geometrijskih ograničenja (*Tabela 18*; Tančić, 2008) i nalaze se u očekivanom opsegu između grosulara i andradita, usled činjenice da se svi ovi joni nalaze u specijalnim položajima u p.g. *Ia  $\bar{3}d$* .

*Tabela 17. Metal-metal međuatomska rastojanja (Å).*

Rastojanja	Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>X-Y</b>	3,311	3,370	3,331493(7)*	3,335090(9)	3,335696(7)	3,33570(1)	3,334184(9)
<b>X(2)-Si</b>	3,627	3,692	3,649467(6)	3,653408(9)	3,654072(6)	3,65408(1)	3,652416(9)
<b>X(1)-Si</b>	2,961	3,015	2,979778(8)	2,98300(1)	2,983537(7)	2,98354(1)	2,98218(1)
<b>Y-Si</b>	3,311	3,370	3,331493(7)	3,335090(9)	3,335696(7)	3,33570(1)	3,334184(9)
<b>X(1)-X(2)</b>	3,627	3,692	3,649467(6)	3,653408(9)	3,654072(6)	3,65408(1)	3,652416(9)
<b>Si-Si</b>	3,627	3,692	3,649467(6)	3,653408(9)	3,654072(6)	3,65408(1)	3,652416(9)
<b>Y-Y</b>	5,129	5,221	5,161009(7)	5,16670(1)	5,167638(8)	5,16764(1)	5,16530(1)

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju i odnose se na poslednji značajni broj

Izmereni uglovi oko kiseonika (*Tabela 18*), iako u boljoj saglasnosti sa literturnim podacima u odnosu na one vrednosti koje su dobijene bez geometrijskih ograničenja (*Tabela 19*; Tančić, 2008), pokazuju i dalje mnoga odstupanja. To je na primer slučaj sa uglovima Y-O-X(1) i X(1)-O-X(2) u zoni B, kao i sa uglovima Y-O-X(2) i X(1)-O-Si u zonama A-C. Jedino su uglovi Y-O-Si i X(2)-O-Si u okviru literturnih podataka u svim zonama.

*Tabela 18. Izmereni uglovi oko kiseonika (°).*

Uglovi	Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>Y-O-Si</b>	135,95(7)*	133,4(1)	135,6(1)	134,0(1)	135,4(1)	134,1(1)	134,2(1)
<b>Y-O-X(1)</b>	102,19(7)	100,03(8)	101,54(9)	102,90(9)	101,77(9)	101,28(9)	100,8(1)
<b>Y-O-X(2)</b>	96,33(9)	95,75(8)	95,29(9)	96,40(9)	94,54(9)	96,38(9)	96,35(9)
<b>X(1)-O-Si</b>	95,14(6)	95,9(1)	96,3(1)	96,1(1)	97,4(1)	95,4(1)	95,1(1)
<b>X(2)-O-Si</b>	121,20(6)	124,8(1)	122,2(1)	121,5(1)	122,1(1)	123,0(1)	123,4(1)
<b>X(1)-O-X(2)</b>	97,83(5)	98,68(6)	97,90(8)	99,15(8)	98,07(8)	98,62(8)	98,4(1)

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju i odnose se na poslednji značajni broj

Poliedarske distorzije (Tabela 19), iako takođe u boljoj saglasnosti sa literaturnim podacima u odnosu na one vrednosti koje su dobijene bez geometrijskih ograničenja (Tabela 20; Tančić, 2008), pokazuju i dalje mnoga odstupanja. To je na primer slučaj sa naprežanjem veza [O(1)-O(3)]-[O(1)-O(2)] i [O(1)-O(5)]-[O(1)-O(4)], i naprežanjem uglova [O(1)-Si-O(2)]-109,47°, [O(1)-Si-O(3)]-109,47° i [O(1)-Y-O(4)]-90,00° u svim zonama. Naprežanje uglova [O(1)-X(2)-O(2)]-69,45° i [O(4)-X(2)-O(7)]-71,70° odstupa u zonama B i C. Jedino su naprežanja uglova [O(1)-X(2)-O(4)]-69,45° i [O(4)-X(2)-O(6)]-71,70° u okviru literaturnih podataka u svim zonama.

Tabela 19. Poliedarske distorzije.

Naprežanje veza (Å)	Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
[O(1)-O(3)]-[O(1)-O(2)]	0,178	0,175	0,200	0,242	0,239	0,184	0,163
[O(1)-O(5)]-[O(1)-O(4)]	-0,070	-0,056	-0,081	-0,001	-0,077	-0,042	-0,058
Naprežanje uglova (°)	Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
[O(1)-Si-O(2)]-109,47°	-6,59	-6,83	-7,87	-9,27	-9,37	-7,17	-6,37
[O(1)-Si-O(3)]-109,47°	3,58	3,58	4,03	4,83	4,83	3,63	3,33
[O(1)-Y-O(4)]-90,00°	1,46	1,12	1,70	0,00	1,60	0,90	1,20
[O(1)-X(2)-O(2)]-69,45°	-2,25	-3,81	-3,65	-1,95	-4,45	-2,65	-2,85
[O(1)-X(2)-O(4)]-69,45°	0,39	3,37	1,85	0,75	2,45	1,75	1,95
[O(4)-X(2)-O(6)]-71,70°	4,58	2,47	3,90	3,30	3,40	3,30	3,40
[O(4)-X(2)-O(7)]-71,70°	-1,43	-2,27	-1,50	0,10	-0,80	-1,60	-2,10

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

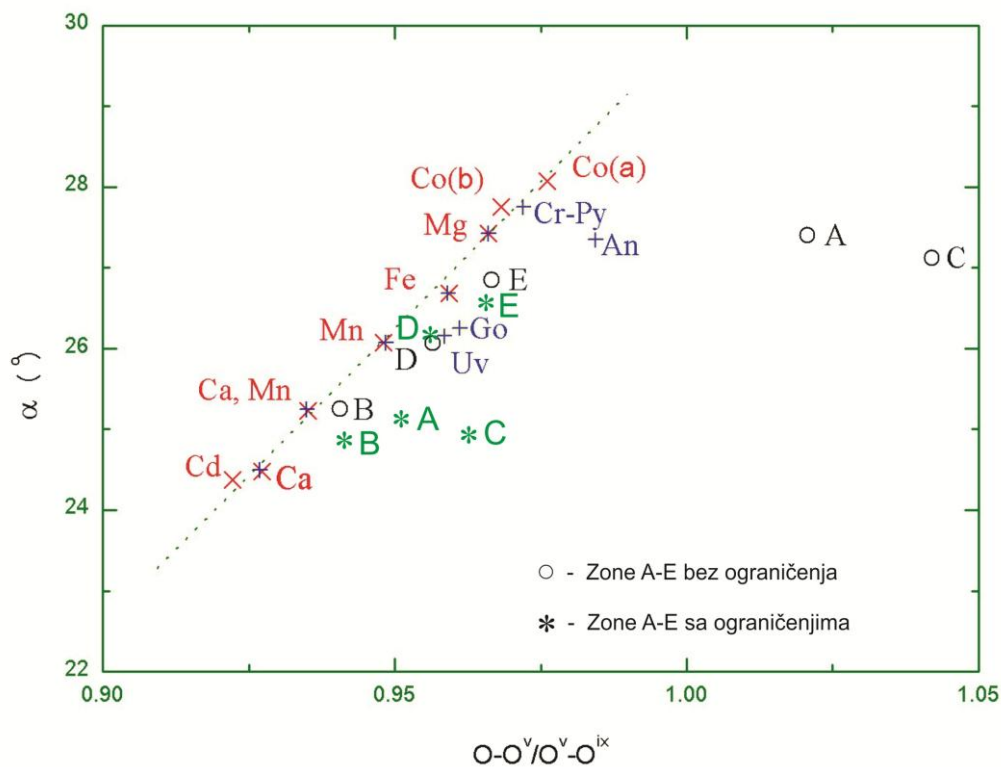
Rotacija tetraedra ( $\alpha_1$ ), veličina ( $p_1$ ), oblik ( $\sigma_1$ ), orijentacija ( $\varphi_1$ ), polarna koordinata ( $\Phi_{ox1}$ ) i odnos [O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)], kao i promene uglova  $\alpha$  sa (O<sup>⋯</sup>O<sup>v</sup>)/(O<sup>v</sup>⋯O<sup>ix</sup>) odnosima (Tabela 20, Slika 21) su isto u boljoj saglasnosti sa literaturnim podacima u odnosu na prethodne, t.j. u odnosu na one vrednosti koje su dobijene bez geometrijskih ograničenja (Tabela 21, Slika 32; Tančić, 2008).

Tabela 20. Rotacija tetraedra ( $\alpha_1$ , °), veličina ( $p_1$ ), oblik ( $\sigma_1$ , °), orijentacija ( $\varphi_1$ , °), polarna koordinata ( $\Phi_{ox1}$ , °), i odnos [O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)].

	Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A	B	C	D	E
Rotacija tetraedra ( $\alpha_1$ )*	24,50	27,35	25,04	24,86	24,94	26,16	26,40
Veličina ( $p_1$ )*	0,1624	0,1678	0,1650	0,1634	0,1662	0,1650	0,1654
Oblik ( $\sigma_1$ )*	55,76	55,52	55,91	54,93	55,85	55,37	55,56
$\sigma_0$ - $\sigma_1$ *	-1,01	-0,77	-1,18	0,20	-1,12	-0,64	-0,83
Orijentacija ( $\varphi_1$ )*	4,09	3,04	4,42	4,89	5,14	3,43	3,09
Polarna koordinata ( $\Phi_{ox1}$ )*	49,72	50,79	49,18	49,18	49,06	51,05	50,69
Odnos [O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)]*	0,927	0,984	0,951	0,945	0,963	0,956	0,958

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

\*-Ovaj rad



Slika 21. Promene uglova  $\alpha$  sa  $(O^v \cdots O^v)/(O^v \cdots O^{ix})$  odnosima rastojanja za različite vrste granata i za A-E zone. Oznake:  $\times$ -Ohashi i dr. (1995);  $+$ -Tančić (2008);  $^{\circ}$ -zone A-E bez ograničenja (Tančić, 2008);  $*$ -zone A-E sa ograničenjima.

Međutim, odstupanja su vidljiva za oblik ( $\sigma_1$ ), razliku  $\sigma_0 - \sigma_1$ , i polarnu koordinatu ( $\Phi_{ox1}$ ) kod A-D zona, kao i za orijentaciju ( $\varphi_1$ ) kod A-C zona. U okviru literaturnih podataka u svim zonama nalaze se vrednosti za rotaciju tetraedra ( $\alpha_1$ ), veličinu ( $p_1$ ) i odnos  $[O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)]$ .

Tabela 21. Izračunate razlike između atomskih koordinata kiseonika ( $x, y$  i  $z$ ; u Å), dimenzija jediničnih ćelija ( $a_0$ ; u Å), rotacije tetraedara ( $\alpha$ ; u  $^{\circ}$ ), veličine ( $p$ ), oblika ( $\sigma$ ; u  $^{\circ}$ ), orijentacije ( $\varphi$ ; u  $^{\circ}$ ) i polarnih koordinata ( $\Phi_{ox}$ ; u  $^{\circ}$ ).

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
$\Delta x$	0,0001	-0,0032	0,0007	-0,0003	0,0006
$\Delta y$	-0,0018	-0,0017	-0,0003	0,0007	0,0012
$\Delta z$	0,0016	0,0005	0,0031	0,0006	0,0006
$\Delta a_0$	-0,006	0,004	-0,002	-0,004	-0,009
$\Delta \alpha$	-0,51	-0,72	-0,73	0,46	0,70
$\Delta p$	0,0009	-0,0008	0,0018	0,0006	0,0010
$\Delta \sigma$	0,29	-0,69	0,24	-0,24	-0,05
$\Delta \varphi$	0,84	1,33	1,62	-0,08	-0,42
$\Delta \Phi_{ox}$	-1,17	-1,18	-1,34	0,64	0,28

Obzirom na prikazane rezultate, nove izračunate razlike određenih parametara (*Tabela 21*) su manje u odnosu na one bez geometrijskih ograničenja (*Tabela 23*; Tančić, 2008), odnosno bolje su i približnije hipotetički „idealnim”. Isti trend se zapaža i na *Slici 21*. Međutim, odstupanja su i dalje izražena kod  $\Delta\alpha$  u svim zonama,  $\Delta\varphi$  i  $\Delta\Phi_{ox}$  u zonama A-C, kao i  $\Delta\sigma$  u zoni B.

Takođe, i nove izračunate poliedarske zapremine, kvadratna izduženja i uglovna odstupanja za tetraedar i oktaedar (*Tabela 22*) pokazuju vrednosti koje su u boljoj saglasnosti sa literaturnim podacima u odnosu na prethodne, t.j. u odnosu na one koje su izračunate bez ograničenja (*Tabela 24*; Tančić, 2008).

Odstupanja su vidljiva kod svih proučavanih parametara za tetraedar u skoro svim zonama. Sa druge strane, za oktaedar je znatno bolja situacija, jer su uglovna odstupanja vidljiva u A-D zonama, dok kvadratna izduženja odstupaju samo u zoni B.

*Tabela 22. Poliedarske zapremine, kvadratna izduženja i uglovna odstupanja za tetraedar i oktaedar.*

<b>Tetraedar</b>	<b>Gr</b>	<b>An</b>	<b>A (jezgro)</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>	<b>E (obod)</b>
<b>Poliedarska zapr.</b>	2,26129	2,25035	2,18297	2,33331	2,12724	2,28029	2,25865
<b>Kvadratna izd.</b>	1,00728	1,00707	1,00932	1,01290	1,01327	1,00767	1,00615
<b>Uglovna odstup.</b>	29,82111	28,92861	38,19099	52,98229	54,50149	31,41953	25,18694
<b>Oktaedar</b>	<b>Gr</b>	<b>An</b>	<b>A (jezgro)</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>	<b>E (obod)</b>
<b>Poliedarska zapr.</b>	9,49050	11,04628	10,14359	9,93734	10,40964	10,17823	10,22421
<b>Kvadratna izd.</b>	1,00066	1,00038	1,00087	1,00008	1,00076	1,00023	1,00043
<b>Uglovna odstup.</b>	2,33292	1,35636	3,04133	0,00524	2,66788	0,80322	1,52526

Trebalo bi još napomenuti da je dodatno provereno i prisustvo hidro-grosularske komponente (*Tabela 23*) na isti način kako je to prethodno urađeno bez geometrijskih ograničenja (*Tabela 27*; Tančić, 2008), i ponovo dokazano da ne postoji hidro-grosularska komponenta u proučavanim zonama.

*Tabela 23. Izračunate i izmerene  $d_{420}$  vrednosti i njihove međusobne razlike (u Å).*

<b>Zona</b>	<b>A (jezgro)</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>	<b>E (obod)</b>
<b>Izračunate <math>d_{420}^1</math></b>	2,6676	2,6681	2,6698	2,6702	2,6702
<b>Izmerene <math>d_{420}^2</math></b>	2,6652	2,6681	2,6686	2,6686	2,6673
<b><math>\Delta(d_{420}^2-d_{420}^1)</math></b>	-0,0024	0,0000	-0,0012	-0,0016	-0,0029

Konačno, iako su sva prethodna proučavanja sa geometrijskim ograničenjima u *Ia  $\bar{3}d$*  p.g. nesumnjivo ukazala na određene prednosti njihove upotrebe, problem dubleta refleksija je i dalje ostao nerešen.

Slično kao i kod rendgenskih, strukturnih Rietveld, spektroskopskih IC i Raman proučavanja (*Tabele 10 i 12*; kao i *Tabele 8 i 14*; Tančić, 2008), dodatno je razmatrana i teoretska mogućnost određivanja sastava grandita na osnovu mnogih dobijenih podataka u ovom Poglavlju, a pomoću jednačine linearne zavisnosti (Tančić, 2005).

Na taj način, razmatrana je mogućnost određivanja sastava grandita na osnovu metal-metal među-atomskih rastojanja; izmerenih uglova oko kiseonika; poliedarskih distorzija; kao i rotacija tetraedara ( $\alpha$ ), veličina ( $p$ ), oblika ( $\sigma$ ), orijentacija ( $\varphi$ ), polarnih koordinata ( $\Phi_{ox}$ ), i odnosa  $[O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)]$ . Za ovakva određivanja korišćeni su prethodno navedeni podaci dobijeni proučavanjima bez geometrijskih ograničenja (*Tabele 18-21*; Tančić, 2008), kao i sa geometrijskim ograničenjima (*Tabele 17-20*). Dobijeni rezultati su prikazani skupno u *Tabelama 24-27* radi lakšeg upoređivanja.

*Tabela 24. Izračunati sadržaji grosularske komponente (u mol. %) iz metal-metal međuatomskih rastojanja (Å).*

Rastojanja	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
X-Y	65	65	59	59	58	58	58	58	61	61
X(2)-Si	66	65	59	59	58	58	58	58	61	61
X(1)-Si	65	65	59	59	58	58	58	58	61	61
Y-Si	65	65	59	59	58	58	58	58	61	61
X(1)-X(2)	66	65	59	59	58	58	58	58	61	61
Si-Si	66	65	59	59	58	58	58	58	61	61
Y-Y	65	65	59	59	58	58	58	58	60	60
<b>Sred. vr.</b>	<b>65</b>	<b>65</b>	<b>59</b>	<b>59</b>	<b>58</b>	<b>58</b>	<b>58</b>	<b>58</b>	<b>61</b>	<b>61</b>

a-Bez ograničenja;  
b-Sa ograničenjima

Iz *Tabele 24* se može zaključiti da su dobijeni skoro identični rezultati iz proučavanja kako sa ograničenjima (b), tako i bez njih (a). To se i moglo očekivati, obzirom na vrlo male razlike u rezultatima (*Tabela 17*; kao i *Tabela 18*; Tančić, 2008).

Ovakvi preračuni su doveli do Gr<sub>S58-65</sub>Adr<sub>35-42</sub> sastava, što je u vrlo dobroj saglasnosti sa EMPA (*Tabela 5*), IC (*Tabela 10*) i Raman (*Tabela 12*) proučavanjima izvršenim u ovom radu, kao i sa svim prethodnim hemijskim, SEM-EDS, rendgenskim (XRPD) i Rietveld rezultatima (*Tabele 8-10 i 14*; Tančić, 2008). Samo je u zonama B i E vrlo malo odstupanje od 2-3 mol. %.

Samim tim, ovakva mogućnost određivanja sastava grandita na osnovu rezultata metal-metal međuatomskih rastojanja je pokazala visok potencijal sličnih odredbi kako

ove, tako i mnogih drugih izomorfni serija ostalih mineralnih vrsta, a što bi trebalo ubuduće dodatno proučiti.

Sa druge strane, iako svi ostali rezultati dobijeni iz parametara prikazanih u Tabelama 25-27 pokazuju uglavnom bolje vrednosti sa ograničenjima (b) nego bez njih (a), u suštini ni sa jednim ni sa drugim se ne dobijaju u potpunosti zadovoljavajući rezultati. Jedino su nešto bolji rezultati dobijeni iz srednjih vrednosti<sup>2</sup> parametara koji su manje-više u okviru literaturnih podataka (Tabele 18-20). Usled toga, mišljenja smo da ne mogu biti od koristi u ove svrhe određivanja sastava grandita.

Tabela 25. Izračunati sadržaji grosularske komponente (u mol. %) iz izmerenih uglova oko kiseonika (°). Srednje vrednosti su iz: <sup>1</sup>-svih proračuna; i <sup>2</sup>-pojedinih proračuna.

Uglovi	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
Y-O-Si <sup>2</sup>	16	86	12	24	0	78	20	27	16	31
Y-O-X(1)	-38	70	168	133	3	81	59	58	26	36
Y-O-X(2)	-405	-79	159	112	-681	-209	146	109	146	103
X(1)-O-Si	-355	-53	-39	-26	-697	-197	79	66	118	105
X(2)-O-Si <sup>2</sup>	11	72	-15	92	16	75	-6	50	-3	39
X(1)-O-X(2)	45	92	-101	-55	9	72	-14	7	9	33
Sred. vr. <sup>1</sup>	<b>-121</b>	<b>31</b>	<b>31</b>	<b>47</b>	<b>-225</b>	<b>-17</b>	<b>47</b>	<b>53</b>	<b>52</b>	<b>58</b>
Sred. vr. <sup>2</sup>	<b>14</b>	<b>79</b>	<b>-2</b>	<b>58</b>	<b>8</b>	<b>76</b>	<b>7</b>	<b>38</b>	<b>6</b>	<b>35</b>

a-Bez ograničenja;

b-Sa ograničenjima

Tabela 26. Izračunati sadržaji grosularske komponente (u mol. %) iz poliedarskih distorzija. Srednje vrednosti su iz: <sup>1</sup>-svih proračuna; i <sup>2</sup>-pojedinih proračuna.

Naprezanje veza (Å)	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
[O(1)-O(3)]-[O(1)-O(2)]	1833	733	2933	2133	4667	2033	167	200	-600	-400
[O(1)-O(5)]-[O(1)-O(4)]	250	179	-586	-393	171	150	-164	-100	-36	14
Naprezanje uglova (°)	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
[O(1)-Si-O(2)]-109,47°	-1058	-433	-1350	-1017	-6040	-1058	-100	-1417	275	192
[O(1)-Si-O(3)]-109,47°	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.
[O(1)-Y-O(4)]-90,00°	200	171	-491	-329	141	141	-124	-65	-35	24
[O(1)-X(2)-O(2)]-69,45°	-183	10	162	119	-290	-41	88	74	70	62
[O(1)-X(2)-O(4)]-69,45° <sup>02</sup>	-73	51	106	88	-117	31	57	54	42	48
[O(4)-X(2)-O(6)]-71,70° <sup>02</sup>	-36	68	35	39	-77	44	34	39	33	44
[O(4)-X(2)-O(7)]-71,70°	62	92	373	282	238	175	90	80	0	20
Srednja vrednost <sup>1</sup>	<b>124</b>	<b>109</b>	<b>148</b>	<b>115</b>	<b>-163</b>	<b>184</b>	<b>6</b>	<b>-142</b>	<b>-31</b>	<b>0</b>
Srednja vrednost <sup>2</sup>	<b>-38</b>	<b>60</b>	<b>70</b>	<b>64</b>	<b>-97</b>	<b>38</b>	<b>46</b>	<b>46</b>	<b>38</b>	<b>46</b>

a-Bez ograničenja;

b-Sa ograničenjima;

n.c.-Nije izračunavano



Tabela 27. Izračunati sadržaji grosularske komponente (u mol. %) iz rotacija tetraedara ( $\alpha_1$ , °), veličina ( $p_1$ ), oblika ( $\sigma_1$ , °), orijentacija ( $\varphi_1$ , °), polarnih koordinata ( $\Phi_{ox1}$ , °), i odnosa  $[O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)]$ . Srednje vrednosti su iz: <sup>1</sup>-svih proračuna; i <sup>2</sup>-pojedinih proračuna.

	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
<b>Rotacija tetraedra (<math>\alpha_1</math>)<sup>2</sup></b>	1	81	77	87	5	85	36	42	22	33
<b>Velichina (<math>p_1</math>)<sup>2</sup></b>	-72	52	91	81	-118	30	52	52	41	44
<b>Oblik (<math>\sigma_1</math>)</b>	204	162	-492	-245	133	138	-121	-62	-21	17
<b><math>\sigma_0-\sigma_1</math></b>	204	171	-492	-404	133	146	-121	-54	-21	25
<b>Orijentacija (<math>\varphi_1</math>)</b>	138	131	171	176	281	200	28	37	-19	5
<b><math>\Phi_{ox1}</math></b>	177	150	-248	150	192	162	-64	-24	-21	9
<b>Odnos <math>[O(1)-O(4)]/[O(4)-O(6)]</math><sup>2</sup></b>	-60	58	77	68	-104	37	47	49	39	46
<b>Srednja vrednost<sup>1</sup></b>	<b>85</b>	<b>115</b>	<b>-117</b>	<b>-12</b>	<b>75</b>	<b>114</b>	<b>-20</b>	<b>6</b>	<b>3</b>	<b>26</b>
<b>Srednja vrednost<sup>2</sup></b>	<b>-44</b>	<b>64</b>	<b>82</b>	<b>79</b>	<b>-72</b>	<b>51</b>	<b>45</b>	<b>48</b>	<b>34</b>	<b>41</b>

a-Bez ograničenja;  
b-Sa ograničenjima

Najverovatniji uzrok takvoj pojavi je utvrđena desimetrizacija proučavanog grandita, rotacija tetraedra, poliedarske distorzije, kao i sva ostala prethodno dokazana odstupanja koja proističu iz neteseralne simetrije, odnosno nepripadanja  $Ia\bar{3}d$  p.g. Samim tim, bilo je i više nego očekivano da se ovim putem uglavnom neće dobiti zadovoljavajući rezultati. Međutim, ovakvi proračuni bi mogli imati i svoje prednosti, jer ukoliko se javljaju slična odstupanja sa ovakvim (Tabele 25-27), ona se mogu posmatrati i kao vrlo korisni preliminarni pokazatelji da  $Ia\bar{3}d$  nije egzaktna p.g. kristalizacije, odnosno da je ili došlo do neke vrste desimetrizacije, ili se radi o mešavini više faza koje kristališu u  $Ia\bar{3}d$  p.g.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u istim teseralnim  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g. prikazani su u Prilozima 144-148, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u Prilogu 149, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u Prilozima 150 i 153. Odabrana međuatomska rastojanja i uglovi su prikazani u Prilozima 151, 152, 154 i 155.

Iz prikazanih rezultata (Prilog 149) može se videti da je većina strukturnih parametara, kao što su npr. faktori slaganja,  $\text{scor}$  i  $\text{Chi}^2$ , uglavnom nešto malo veći nego kod proučavanja bez geometrijskih ograničenja (Tabela 16; Tančić, 2008).

Sa druge strane, vide se i određene pozitivne promene, jer su atomske koordinate kiseonika (Prilozi 150 i 153) nešto malo približnije „idealnim” izračunatim vrednostima

odgovarajućim za sastav granditskih zona (*Tabela 22*; Tančić, 2008), nego što je to bio slučaj bez geometrijskih ograničenja (Tančić, 2008).

Međuatomska rastojanja i uglovi sa geometrijskim ograničenjima u okviru tetraedarskog, oktaedarskog i dodekaedarskog koordinacionog poliedra (*Prilozi 151, 152, 154 i 155*), su takođe značajno približniji „idealnim” izračunatim vrednostima u odnosu na odgovarajuće podatke bez ograničenja (*Tabela 17*; Tančić, 2008).

Međutim, iako su na ovakav način dobijene bolje vrednosti međuatomskih rastojanja i uglova u odnosu na odgovarajuće podatke bez ograničenja, one se još uvek veoma značajno razlikuju u odnosu na literaturne podatke. To se posebno odnosi na zone A i C, kao i delimično B, u svim koordinacionim poliedrima, i to nešto više u tetraedru i oktaedru u odnosu na dodekaedar.

Shodno tome, mišljenja smo da se proučavane granditske zone nikako ne mogu objasniti ni kao mešavine dve faze koje kristališu u istim  $Ia\bar{3}d$  prostornim grupama, a u skladu sa prethodnim rezultatima.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $R\bar{3}c$  p.g. su prikazani u *Prilozima 156-160*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 161*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 162*. Odabrana međuatomska rastojanja su prikazana u *Prilogu 163*, a međuatomski uglovi u *Prilogu 164*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $R\bar{3}$  p.g. su prikazani u *Prilozima 165-169*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 170*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 171*. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja su prikazana u *Prilogu 172*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $Fddd$  p.g. su prikazani u *Prilozima 173-177*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 178*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 179*. Odabrana međuatomska rastojanja su prikazana u *Prilogu 180*, a međuatomski uglovi u *Prilogu 181*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $C2/c$  p.g. su prikazani u *Prilozima 182-186*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 187*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 188*. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja su prikazana u *Prilogu 189*.

Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivanih zona u  $I\bar{1}$  p.g. su prikazani u *Prilozima 190-194*, zajedno sa  $Y_{izm}$ ,  $Y_{izr}$ ,  $Y_{izm}-Y_{izr}$  i Bragg-ovim položajima. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja su prikazani u *Prilogu 195*, a atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (u at. %) u *Prilogu 196*. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja su prikazana u *Prilogu 197*.

Kao što se može videti kod svih ovih proučavanih neteseralnih p.g. ( $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$ ), svi podaci dobijeni uvođenjem geometrijskih ograničenja su za profilne i strukturne parametre, kao i za dimenzije jediničnih ćelija, skoro podjednaki ili vrlo slični u odnosu na one koji su dobijeni bez geometrijskih ograničenja. Takođe, faktor scor, kao i svi faktori slaganja su uvek veći, ali su zato procenjene standardne devijacije (e.s.d.) niže čak i po 5-6 puta (*Prilozi 49, 58, 87, 124, 132, 161, 170, 178, 187 i 195*).

Sa druge strane, kod svih tih proučavanih neteseralnih p.g. ( $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$ ), svi podaci dobijeni uvođenjem geometrijskih ograničenja su za atomske koordinate, međuatomska rastojanja i međuatomske uglove, značajno bolji, odnosno mnogo približniji literaturnim podacima u odnosu na one koji su dobijeni bez geometrijskih ograničenja (*Prilozi 50, 51, 52, 59, 60, 88, 89, 90, 125, 126, 133, 134, 162, 163, 164, 171, 172, 179, 180, 181, 188, 189, 196 i 197*).

Vrlo je indikativno i da se kod ovih neteseralnih p.g. za one jone koji se nalaze u specijalnim položajima u  $Ia\bar{3}d$  p.g., t.j. za Si, Al-Fe i Ca, mogu vrlo jasno uočiti odstupanja atomskih koordinata od onih „idealnih”, odnosno od takvih koje bi se dobile transformacijom atomskih koordinata iz  $Ia\bar{3}d$  u  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  ili  $I\bar{1}$  p.g. To su koordinate tipa: 0,000; 0,125; 0,250; 0,375; 0,500; 0,625; 0,750; i 0,875. Takva odstupanja su manje-više primetna, kako bez, tako i sa geometrijskim ograničenjima u navedenim p.g. (*Prilozi 50, 59, 88, 125, 133, 162, 171, 179, 188 i 196*), kao i kod svih ostalih proučavanih p.g. (*Prilozi 7, 14, 21, 29, 36, 43, 67, 74, 81, 97, 104, 111 i 118*).

Kod romboedarske sisteme (t.j. za  $R\bar{3}c$  i  $R\bar{3}$  p.g.) i ovom prilikom su matematičkim putem utvrđene razlike između romboedarskih i pseudoteseralnih dimenzija jediničnih ćelija (*Prilozi 161 i 170*), pomoću jednačine koju su dali Ishizawa i Inagaki (2008). Kao što se može videti iz prikazanih rezultata, u svim zonama se ponovo zapažaju manja ili veća odstupanja ugla  $\alpha$  od  $60^\circ$ , što ukazuje da ispitivani grandit ne kristališe teseralno. Ova odstupanja su u opsegu od  $0,024^\circ$  do  $0,064^\circ$  u  $R\bar{3}c$  p.g., a najveća odstupanja se zapažaju u zonama B, C i E. U  $R\bar{3}$  p.g. ova odstupanja su u opsegu od  $0,026^\circ$  do  $0,050^\circ$ , a najveća odstupanja se zapažaju u zonama A, B i C.

Nadalje, vrlo je indikativno i da je različita raspodela  $Al^{3+}$  i  $Fe^{3+}$  manje ili više uočljiva u svim proučavanim simetrijama, pa čak i u teseralnim p.g. kod kojih postoji barem 2 različita oktaedarska položaja (*Prilozi 21, 29, 36, 43, 50, 59, 67, 74, 81, 88, 97, 104, 111, 118, 125, 133, 162, 171, 179, 188 i 196*).

Ovakve različite raspodele  $Al^{3+}$  i  $Fe^{3+}$  u oktaedarskim položajima, zajedno sa odstupanjima atomskih koordinata u odnosu na one „idealne”, odnosno proizvedene iz  $Ia\bar{3}d$  p.g., predstavljaju još jedan nesumnjivi dokaz da je do desimetrizacije grandita zaista došlo.

U vezi sa prethodnim konstatacijama, trebalo bi razmotriti i pojedina značajnija odstupanja u okviru međuatomskih rastojanja. Naime, prethodno su nesumnjivo dokazane rotacije tetraedara kao i poliedarske distorzije u  $Ia\bar{3}d$  p.g., kako sa, tako i bez geometrijskih ograničenja. Ove dve pojave su za posledicu imale odstupanja izračunatih rastojanja i uglova u tetraedarskom, oktaedarskom i dodekaedarskom poliedru, a naročito u A-C zonama. Najkarakterističnije takve pojave su da su rastojanja Si-O(1) kraća u zonama A i C, a duža u zoni B; Y-O rastojanja u zonama A i C su veća; rastojanje X(1)-O(4) i razlika  $\Delta(X-O)$  su očekivani samo za zone D i E; dok je X(2)-O(4) rastojanje u dobroj saglasnosti samo za zonu B (*Prilog 142; Tabela 15, Slika 24; Tančić, 2008*).

Osnovni razlozi za ovakva odstupanja su desimetrizacija grandita u  $Fddd$  ili  $R\bar{3}c$  p.g. Međutim, i izračunata rastojanja kako u ovim, tako i u ostalim relevantnim p.g., kao što su  $R\bar{3}$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$ , takođe odstupaju manje ili više od idealnih vrednosti, pa čak i sa geometrijskim ograničenjima (*Prilozi 51, 60, 89, 126, 134, 163, 172, 180, 189 i 197*).

Ovakvi podaci preliminarno ukazuju i da bi uzrok takvoj pojavi mogle biti različite valence poliedara između zona, kao što je dokazano kod nekih drugih prirodnih

(Tančić i dr., 2012b) i veštačkih (Kremenović i dr., 2000) mineralnih vrsta. Brown (1992) je utvrdio da je kod grosulara Ca katjon „strongly overbonded” sa valencom od 2,51; dok je Al „clearly underbonded” sa valencom od 2,62. Tako bi, na primer, tamo gde je rastojanje kraće od idealne vrednosti, valenca katjona trebala da bude veća, dok bi u slučajevima gde je rastojanje duže od idealne vrednosti, valenca katjona trebalo da bude manja (*Prilog 142; Tabela 15*). Nadalje, moglo bi da se postavi i pitanje u vezi nesparenih elektrona, kao i stepena popunjenosti elektronskih orbitala; međutim, to prevazilazi okvire sadašnjih proučavanja, i biće razmatrano u nekom budućem radu.

U svakom slučaju, moglo bi da se preliminarno pretpostavi npr. da u A i C zonama Si ima valencu najverovatnije iznad 4+, i to samo u slučaju ukoliko se ne radi o postojanju vakancija u tetraedru, kao još jedne vrlo realne mogućnosti, dok je valentnost Al najverovatnije ispod 3+. U B zoni Si ima valencu najverovatnije ispod 4+, a Ca najverovatnije iznad 2+. I u zonama D i E se vide određena slična odstupanja, samo u znatno manjoj meri. Na ovakav način se takođe može ustanoviti i da se valence poliedara razlikuju između svih proučavanih zona.

#### 6.4.5. Dodatni kriterijumi za određivanje prostorne grupe kristalne strukture

U prethodnom delu proučavanja (Poglavlje 6.4.4.) su, kod za nas najinteresantnijih p.g., uvedena ograničenja za Ca-Mn i Al-Fe parametre zauzeća; kao i za Si-O, Y-O i X-O međuatomska rastojanja, adekvatno hemijskim sastavima ispitivanih granditskih zona (*Tabela 5*).

Kao početni osnov za određivanje prostorne grupe kristalizacije, izračunata su i ostala „idealna“ rastojanja i uglovi shodno hemijskim sastavima (*Tabela 5*; i *Tabela 15*; Tančić, 2008) i prikazana u *Tabeli 28*.

*Tabela 28. „Idealna“ međuatomska rastojanja (u Å) i uglovi (u °) adekvatno hemijskim sastavima proučavanih granditskih zona.*

		<b>A (jezgro)</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>	<b>E (obod)</b>
<b>1</b>	<b>Ca</b>	98	98	98	98	98
<b>2</b>	<b>Al</b>	64	62	59	58	58
<b>3</b>	<b>Si-O</b>	1,644(2)	1,644(2)	1,644(2)	1,644(2)	1,644(2)
<b>4</b>	<b>Y-O</b>	1,960(2)	1,962(2)	1,965(2)	1,966(2)	1,966(2)
<b>5</b>	<b>X-O</b>	2,415(2)	2,416(2)	2,416(2)	2,417(2)	2,417(2)
<b>6</b>	<b>O-O (Tet)</b>	2,684(2)	2,684(2)	2,684(2)	2,684(2)	2,684(2)
<b>7</b>	<b>O-O (Oct)</b>	2,772(3)	2,775(3)	2,779(3)	2,780(3)	2,780(3)
<b>8</b>	<b>O-O (Dod)</b>	3,113(2)	3,114(2)	3,114(2)	3,115(2)	3,115(2)
<b>9</b>	<b>O-Si-O</b>	109,54(6)	109,54(6)	109,54(6)	109,54(6)	109,54(6)
<b>10</b>	<b>O-Y-O</b>	90,00(6)	90,00(6)	90,00(6)	90,00(6)	90,00(6)
<b>11</b>	<b>O-X-O</b>	80,54(6)	80,54(6)	80,54(6)	80,54(6)	80,54(6)

Da bi se odredila egzaktna prostorna grupa kristalizacije, u ovom delu proučavanja odabrane su još 4 grupe kriterijuma za konačnu ocenu valjanosti. Ovde bi trebalo napomenuti da su kod zona A-C takođe posebno uzeta u obzir i neka od njihovih najspecifičnijih odstupanja u odnosu na literaturne podatke za  $Ia\bar{3}d$  p.g. (*Prilozi 141-143*; *Tabela 15*; Tančić, 2008), kao i kod prethodno korišćenih kriterijuma bez ograničenja (*Tabela 14*). Osim glavnih, za pomoćne kriterijume odabrane su takođe i vrednosti e.s.d.-a.

Kao prva grupa (I), odabrano je prvih pet parametara-vrednosti iz *Tabele 28*, koje su prikazane u *Tabeli 29*. Njima su pridodati  $R_B$  i  $R_F$  faktori slaganja, koji bi trebalo, pre svega, da budu niži nego oni izračunati za  $Ia\bar{3}d$  p.g. (*Prilog 140*).

Tabela 29. Korišćeni kriterijumi (I) za ocenu valjanosti: (i) srednja Si-O rastojanja (u Å) u tetraedarskom položaju; (ii) srednja Y-O rastojanja (u Å) i Al sadržaji (u at. %) u oktaedarskom položaju; (iii) srednja X-O rastojanja (u Å) i Ca sadržaji (u at. %) u dodekaedarskom položaju; i (iv)  $R_B$  i  $R_F$  faktori pouzdanosti (u %).

	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
i	>1,628	<1,667	>1,617	1,644	1,644
ii	<1,968/64	>1,953/62	<1,985/59	1,966/58	1,966/58
iii	2,415/98	>2,398/98	2,416/98	2,417/98	2,417/98
iv	<10,8/<8,09	<9,50/<7,39	<6,96/<6,34	<8,04/<6,91	<6,84/<5,81

Odabrani kriterijumi (I) u svim proučavanim prostornim grupama i dvofaznim sistemima (Prilozi 149, 150, 151, 153, 154, 161, 162, 163, 170, 171, 172, 178, 179, 180, 187, 188, 189, 195, 196 i 197) prikazani su skupno u Tabeli 30.

Tabela 30. Odabrani kriterijumi (I) u svim proučavanim prostornim grupama sa geometrijskim ograničenjima.

Prost. gr.	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
$Ia\bar{3}d$ (faza 1)	i	1,613(3)*	1,665(2)	1,616(2)	1,647(4)	1,643(4)
	ii	1,992(2)/83(1)	1,954(2)/58(1)	1,986(2)/58(1)	1,971(4)/70(1)	1,972(2)/58(1)
	iii	2,414(2)/98	2,398(2)/98	2,417(2)/98	2,406(4)/98	2,412(2)/98
	iv	10,5/8,59	10,4/8,52	7,28/6,54	8,07/6,71	7,35/6,15
$Ia\bar{3}d$ (faza 2)	i	1,648(4)	1,658(4)	1,651(4)	1,648(4)	1,648(4)
	ii	1,956(4)/45(1)	1,963(4)/66(1)	1,970(4)/60(1)	1,970(4)/46(2)	1,973(4)/58(1)
	iii	2,421(5)/98	2,412(5)/98	2,422(5)/98	2,414(4)/98	2,418(5)/98
	iv	8,12/7,38	8,93/7,80	7,01/6,82	8,26/7,16	7,12/6,76
$R\bar{3}c$ (167)	i	1,637(6)	1,658(6)	1,631(6)	1,644(6)	1,643(6)
	ii	1,964(4)/64(2)	1,960(4)/61(6)	1,975(4)/60(3)	1,973(4)/58(2)	1,971(4)/58(6)
	iii	2,416(5)/98	2,405(5)/98	2,417(5)/98	2,414(5)/98	2,412(5)/98
	iv	10,1/8,17	9,84/8,15	7,46/6,38	8,07/7,41	6,92/6,94
$R\bar{3}$ (148)	i	1,642(6)	1,656(6)	1,641(6)	1,648(6)	1,646(6)
	ii	1,964(4)/64(2)	1,964(4)/61(17)	1,974(4)/60(5)	1,973(4)/58(20)	1,972(4)/58(12)
	iii	2,417(6)/98	2,410(6)/98	2,416(6)/98	2,416(6)/98	2,416(6)/98
	iv	11,1/8,50	10,3/8,29	8,87/8,32	8,55/7,72	7,00/6,59
$Fddd$ (70)	i	1,638(6)	1,656(6)	1,637(6)	1,644(6)	1,642(6)
	ii	1,963(4)/64(10)	1,960(4)/62(12)	1,969(4)/59(8)	1,968(4)/58(4)	1,970(4)/58(1)
	iii	2,417(5)/98	2,410(5)/98	2,416(5)/98	2,414(5)/98	2,414(5)/98
	iv	11,5/9,01	9,75/8,20	8,72/6,94	9,28/8,02	7,47/6,95
$C2/c$ (15)	i	1,642(7)	1,652(7)	1,640(7)	1,646(7)	1,644(7)
	ii	1,961(5)/64(16)	1,964(5)/62(10)	1,970(5)/60(20)	1,968(5)/60(20)	1,968(5)/58(10)
	iii	2,414(6)/98	2,413(6)/98	2,414(6)/98	2,416(6)/98	2,415(6)/98
	iv	12,6/9,89	10,6/8,35	8,89/8,67	8,49/7,76	6,96/6,60
$I\bar{1}$ (2)	i	1,642(6)	1,649(6)	1,643(6)	1,645(6)	1,644(6)
	ii	1,960(4)/65(55)	1,963(4)/60(70)	1,967(4)/58(70)	1,967(4)/58(50)	1,968(4)/58(35)
	iii	2,415(6)/98	2,414(6)/98	2,416(6)/98	2,415(6)/98	2,414(6)/98
	iv	16,9/14,3	15,8/12,5	12,7/13,0	12,1/10,7	11,8/11,0

\*Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti.

Kao što se može videti iz dobijenih rezultata, uvođenjem geometrijskih ograničenja značajno su porasli R faktori kod svih proučavanih p.g., tako da taj kriterijum (iv) nije skoro nigde mogao biti zadovoljen. Sa druge strane, očigledno je da su kod svih p.g. dobijena mnogo realnija međuatomska rastojanja (i-iii), u odnosu na prvobitno korišćene kriterijume prikazane u *Tabeli 14* i rezultate prikazane u *Tabeli 16*. Uzimajući u obzir sve kriterijume, najlošiju korelaciju pokazuju mešavine dve teseralne faze (u  $Ia\bar{3}d$  p.g.), a zatim i parametri u  $I\bar{1}$ ,  $C2/c$  i  $R\bar{3}$  p.g. Prema tome, najbolja korelacija se ponovo dobija za p.g.  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$ .

U Poglavlju 6.4.2., kada je razmatrano postojanje dubleta kod pojedinih pikova u zoni A, uočeno je da je posebno interesantna oblast od oko  $102^\circ$  do  $106^\circ 2\theta$  (*Slika 17*). Tu se moglo videti da se refleksija  $12\ 2\ 0$  koja najverovatnije nije dublet (-+) nalazi približno tačno između dva vrlo izražena dubleta refleksija  $8\ 8\ 4$  i  $12\ 2\ 2$  (++) . Zato je ova oblast odabrana kao druga grupa kriterijuma (II) da bi se i vizuelno videli i međusobno uporedili difraktogrami za p.g. koje su ovde proučavane, t.j. za mešavinu dve faze u  $Ia\bar{3}d$ ,  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$  p.g., a koji su prikazani u *Prilozima 198 i 199*. Dodata je takođe i  $Ia\bar{3}d$  p.g. sa pripadajućim *hkl*-ovima.

Jasno se može videti kakav je odnos između izmerenih ( $Y_{izm}$ ) i izračunatih ( $Y_{izr}$ ) Bragg-ovih položaja u različitim p.g. Ponovo je očigledno da ovaj uzorak nikako ne može da kristališe niti u  $Ia\bar{3}d$  p.g., niti može da bude mešavina dve faze koje kristališu u  $Ia\bar{3}d$  p.g. Takođe se potvrđuje i desimetrizacija, iako se ne može sa velikom preciznošću samo iz *Priloga 198 i 199* dovoljno argumentovano utvrditi koja bi to od prikazanih p.g. mogla biti. U te svrhe, mnogo su pouzdaniji podaci koji su prikazani u *Tabeli 31*.

*Tabela 31. Broj pikova (i) i ugaona razlika između izračunatih Bragg-ovih položaja (ii,  $\Delta 2\theta$ , u  $^\circ$ ) za  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$  p.g. Prvi red: približne vrednosti širine pikova (u  $^\circ$ ) koji su označeni sa *hkl*-ovima koji pripadaju  $Ia\bar{3}d$  p.g.*

	<b>8 8 4 (++) ; 0,21</b>		<b>12 2 0 (-+) ; 0,14</b>		<b>12 2 0 (-+) ; 0,19</b>	
<b>Prost. g.</b>	<b>i</b>	<b>ii</b>	<b>i</b>	<b>ii</b>	<b>i</b>	<b>ii</b>
<b><math>R\bar{3}c</math> (167)</b>	4	0,171	2	0,018	7	0,048
<b><math>R\bar{3}</math> (148)</b>	5	0,114	4	0,028	12	0,120
<b><math>Fddd</math> (70)</b>	6	0,194	4	0,151	10	0,197
<b><math>C2/c</math> (15)</b>	9	0,218	8	0,256	18	0,258
<b><math>I\bar{1}</math> (2)</b>	15	0,246	12	0,235	36	0,273



Tu je prikazan broj pikova (i), kao i ugaona razlika između početnih i krajnjih izračunatih ( $Y_{izr}$ ) Bragg-ovih položaja određene oblasti (ii,  $\Delta 2\theta$ ) za  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $C2/c$  i  $I\bar{1}$  p.g. Tako dobijeni podaci su upoređivani sa približnim vrednostima širine pikova koji su označeni sa  $hkl$ -ovima koji pripadaju  $Ia\bar{3}d$  p.g. Najbolje slaganje se dobija za  $Fddd$  p.g.

Da bi se utvrdilo kakve su razlike između  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  p.g., uvedeno je dodatnih šest kriterijuma (III) iz *Tabele 28*. To su srednje O-O vrednosti u tetraedru, oktaedru i dodekaedru (v-vii), korigovane u zonama A-C za najspecifičnija odstupanja u odnosu na literaturne podatke za  $Ia\bar{3}d$  p.g. (*Prilog 142*), kao i srednje vrednosti O-Si-O, O-Y-O i O-X-O uglova (viii-x), prikazani u *Tabeli 32*. Odabrani kriterijumi (III) u  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  p.g. (*Prilozi 171, 172, 180 i 181*) prikazani su skupno u *Tabeli 33*.

*Tabela 32. Korišćeni kriterijumi (III) za ocenu valjanosti u proučavanim  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  prostornim grupama sa geometrijskim ograničenjima: srednja O-O rastojanja (u Å) u tetraedarskom (v), oktaedarskom (vi) i dodekaedarskom (vii) položaju; i srednji O-Si-O (viii), O-Y-O (ix) i O-X-O (x) uglovi (u °).*

	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
v	>2,656	<2,720	>2,638	2,684	2,684
vi	<2,782	>2,762	<2,806	2,780	2,780
vii	<3,119	>3,096	<3,120	3,115	3,115
viii	109,5	109,5	109,5	109,5	109,5
ix	90,0	90,0	90,0	90,0	90,0
x	80,5	80,5	80,5	80,5	80,5

*Tabela 33. Odabrani kriterijumi (III) u proučavanim  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  prostornim grupama sa geometrijskim ograničenjima.*

Prost. gr.	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
<b><math>R\bar{3}c</math></b> <b>(167)</b>	v	2,670(6)	2,705(6)	2,661(6)	2,681(6)	2,681(6)
	vi	2,777(6)	2,772(6)	2,792(6)	2,790(6)	2,788(6)
	vii	3,114(6)	3,096(6)	3,110(6)	3,104(6)	3,104(6)
	viii	109,5(4)	109,6(5)	109,6(4)	109,5(4)	109,6(4)
	ix	90,0(3)	90,0(4)	90,0(3)	90,0(2)	90,0(4)
	x	80,8(2)	80,6(3)	80,5(2)	80,5(2)	80,6(3)
<b><math>Fddd</math></b> <b>(70)</b>	v	2,674(6)	2,704(6)	2,670(6)	2,682(6)	2,680(6)
	vi	2,776(6)	2,770(6)	2,784(6)	2,782(6)	2,785(6)
	vii	3,096(6)	3,104(6)	3,111(6)	3,109(6)	3,109(6)
	viii	109,6(5)	109,6(4)	109,6(5)	109,6(4)	109,5(4)
	ix	90,0(3)	90,0(3)	90,0(3)	90,0(3)	90,0(3)
	x	80,9(3)	80,9(3)	80,9(3)	81,0(3)	81,0(3)

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti.

Kao što se može videti iz prikazanih rezultata, za obe proučavane prostorne grupe dobijene su prilično slične vrednosti odabranih kriterijuma (III). To se posebno uočava kod srednjih vrednosti za O-Si-O i O-Y-O uglove (viii i ix). Sa druge strane, nešto bolji rezultati za srednja međuatomska O-O rastojanja u tetraedru, oktaedru i dodekaedru (v-vii) dobijeni su kod  $Fddd$  p.g., dok bolje srednje vrednosti za O-X-O uglove (x) ima  $R\bar{3}c$  p.g.

Kao četvrta i konačna grupa kriterijuma (IV) za ocenu valjanosti za određivanje egzaktne p.g. kristalizacije između  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$ , u ovom delu proučavanja odabrano je još ukupno 18 korelacija između izmerenih i izračunatih Bragg-ovih položaja u svim A-E zonama.

Kako bi se to utvrdilo, najprimereniji način je bio da se te korelacije predstave kako vizuelno, tako i matematički. U tom smislu, korišćene su pojedine ugaone oblasti koje su prethodno prikazane na *Slikama 14, 15, 16 i 18* za zonu A, i prikazane u *Prilozima 200-234*. Radi bolje preglednosti i upoređenja, ugaoni opseg od  $85^\circ$  do  $107^\circ$  ugla  $2\theta$  je razdvojen na dve oblasti sa približno  $87,5^\circ$ - $94,5^\circ$  i  $101^\circ$ - $106^\circ$ , a dodata je i  $Ia\bar{3}d$  p.g. sa pripadajućim  $hkl$ -ovima koji su označeni u zoni A. Svi adekvatni  $hkl$ -ovi Bragg-ovih položaja shodno proučavanjem  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  p.g., kao i izračunate razlike između krajnjih takvih položaja su takođe prikazane u ovim *Prilozima*.

Kao što se može videti iz prikazanih rezultata, u svim A-E zonama  $Fddd$  p.g. generalno sadrži više izračunatih Bragg-ovih položaja u odnosu na  $R\bar{3}c$  p.g. Samim tim, takvi izračunati položaji u  $Fddd$  p.g. obuhvataju i veći uglovni raspon u odnosu na  $R\bar{3}c$  p.g., čime se dobija znatno bolje poklapanje sa izmerenim Bragg-ovim položajima.

Iz ovako dobijenih podataka, može se razmotriti i prethodno konstatovana problematika dubleta. Naime, sa snižavanjem simetrije od teseralne  $Ia\bar{3}d$  p.g. ka romboedarskoj  $R\bar{3}c$  p.g. i rombičnoj  $Fddd$  p.g., logično dolazi i do povećanja broja izračunatih Bragg-ovih refleksija. Samim tim, veći broj pikova će biti konstituisan umesto jedne refleksije, tako da se više ne može govoriti o dubletima u klasičnom smislu te reči. U skladu sa tim, samo ako su pikovi jasno vidljivi i razdvojeni, i ako obuhvataju širi ugaoni interval, mogu se i dalje nazivati dubletima.

Na primer, refleksije sa  $hkl$ :

1. 4 0 0, 4 2 0, 3 3 2, 4 2 2, 4 3 1 i 5 2 1 nisu vidljivi dubleti (*Prilozi 200-204*);

2. 6 1 1, 6 2 0, 4 4 4, 5 4 3, 6 4 0, 8 8 4, 12 2 2 i 8 8 8 jesu jasno vidljivi dubleti (*Prilozi 207-211, 221-225 i 228-232*); dok

3. 10 4 0, 10 4 2 i 8 8 0 pokazuju vrlo blago razdvajanje pikova, i to samo u pojedinim zonama (*Prilozi 214-218*). To isto važi i za refleksiju 12 2 0, ali je ona i dalje u mnogo užem ugaonom intervalu u odnosu na susedne 8 8 4 i 12 2 2 refleksije (*Prilozi 221-227*).

Obzirom da se ove refleksije (10 4 0, 10 4 2, 8 8 0 i 12 2 0) pojavljuju na uglovima  $2\theta > 87^\circ$ , mišljenja smo da je ovakvo blago razdvajanje pikova, koje je vidljivo samo u pojedinim zonama (B i D), pre svega najviše prouzrokovano međusobnim razlikama u dimenzijama kristalografskih  $a_0$ ,  $b_0$  i  $c_0$  osa u  $Fddd$  p.g., a koje su u ovim zonama najizraženije (*Prilog 178*). Neznatne hemijske varijacije, odnosno nehomogenosti u sastavu tih zona, mogu prouzrokovati ovu pojavu samo delimično, dok su neki drugi strukturni faktori, u smislu odstupanja od  $Fddd$  ili  $R\bar{3}c$  p.g., vrlo malo verovatni.

U zoni B se takođe može uočiti i prisustvo neidentifikovane faze (*Prilog 222*), koja bi mogla pripadati nekom od prethodno identifikovanih akcesornih minerala (Fe-hidroksidi, skapoliti, plagioklasi ili pirokseni). Na žalost, ta faza nije mogla biti identifikovana, obzirom da je njeno prisustvo utvrđeno pomoću refleksije koja se nalazi na oko  $103-104^\circ$  ugla  $2\theta$ , a da literaturni podaci za identifikaciju na tim uglovima ne postoje, jer se uglavnom završavaju u oblastima do  $90^\circ$  ugla  $2\theta$ .

Ponovo je potvrđeno da se isti trend uočava kod refleksija sa paralelnih ravnih Milerovih indeksa, a najočigledniji primeri za to su dubleti sa  $hkl$ -ovima: 6 1 1 i 12 2 2, kao i 4 4 4 i 8 8 8.

I ovom prilikom je konstatovano da svih pet zona jednog istog uzorka pokazuje različite vrste refleksija, odnosno da sa jedne strane postoje refleksije koje sigurno ili najverovatnije nisu dubleti, dok sa druge strane postoje refleksije koje su sigurno dubleti (neki čak i vrlo izraženi). Mišljenja smo da bi taj podatak trebalo uzeti kao ključni, iako postoje blage varijacije između zona, kao i nekoliko primera neznatnog odstupanja koji su ovde navedeni.

Dodatno je izvršeno i poređenje sa preračunatom strukturom, odnosno izračunatim  $hkl$ -ovima intermedijarnog grandita  $Grs_{67}Adr_{33}$  u  $Fddd$  p.g. (ICDD-PDF 85-1369, Munam, Severna Koreja, Takéuchi i dr., 1982; *Prilog 235*) u uglovnom intervalu

koji su ovi autori prikazali, t.j. samo do  $90^\circ 2\theta$ . Trebalo bi napomenuti i da su Takéuchi i dr. (1982) dobili samo po 2 izračunate Bragg-ove refleksije po piku, isto kao i za preračunatu strukturu u  $I\bar{1}$  p.g. (ICDD-PDF 85-0500).

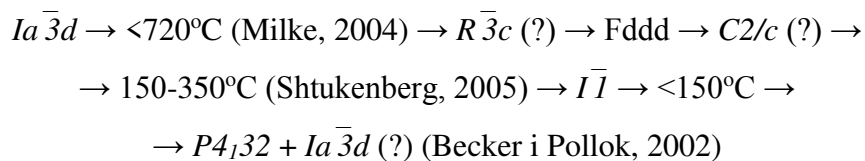
Iz ovakvih rezultata (*Prilozi 206, 213 i 220*) može se uočiti da tako izračunati položaji obuhvataju manji uglovni raspon u odnosu na izračunate *hkl*-ove u ovom radu, što je i logično, obzirom na manji broj refleksija.

Sintezom svih prikazanih rezultata, može se pouzdano ustanoviti da je dokazana desimetrizacija u *Fddd* ili  $R\bar{3}c$  p.g., pri čemu je prva p.g. znatno verovatnija. Samim tim, to je glavni uzrok svih uočenih odstupanja, neuređenosti i distorzija koje su se pojavile u  $Ia\bar{3}d$  p.g. (Tančić, 2008).

U postojećim literaturnim podacima poznati su primeri dva, po hemijskom sastavu, vrlo slična grandita (*Prilozi 236 i 237*) sa ovim koji je ovde proučavan. To su  $\text{Grs}_{60}\text{Adr}_{38}\text{-Grs}_{67}\text{Adr}_{33}$  (Diamantina, Minas Gerais, Brazil; Resende i Fernandes, 2005) koji kristališe u  $Ia\bar{3}d$  p.g.; i  $\text{Grs}_{67}\text{Adr}_{33}$  (Munam, Severna Koreja; Takéuchi i dr., 1982) koji kristališe u  $I\bar{1}$  p.g. Iako veoma sličnog hemijskog sastava, očigledno je da su ova dva grandita strukturno veoma različita od grandita sa Meke Presedle.

Sa druge strane, u postojećim literaturnim podacima poznati su i primeri grandita različitog hemijskog sastava, ali koji kristališu u istoj *Fddd* p.g., kao što su npr.:  $\text{Adr}_{58}\text{Grs}_{42}$  (Kamaishi, Japan) i  $\text{Grs}_{80}\text{Adr}_{20}$  (Moravia, Čehoslovačka) koje su proučavali Takéuchi i dr. (1982);  $\text{Adr}_{50}\text{Grs}_{45}\text{Sps}_5$  (Mul-Kum, Južna Koreja; Hirai i Nakazawa, 1986); kao i  $\text{Adr}_{58}\text{Grs}_{42}$  (Bazhenovskoe, Rusija; Shtukenberg i dr. 2002, 2005 i 2006, i Frank-Kamenetskaya i dr., 2007).

U skladu sa tim, mišljenja smo da je temperatura, a ne hemijski sastav, glavni činilac od koga zavisi u kojoj p.g. će intermedijarni grandit da kristališe, a u saglasnosti sa  $T_{2g}$  vrstom faznog prelaza. Opšte je poznato pravilo da simetrija raste sa porastom temperature. U tom smislu, ovom prilikom predlažemo sledeću zavisnost sniženja simetrije, odnosno p.g. kristalizacije, od snižavanja temperature postanka:



Prikazane temperaturne vrednosti su preuzete iz citiranih radova, dok kristalizacije grandita u  $P4_132 + Ia\bar{3}d$ ,  $C2/c$  i  $R\bar{3}c$  p.g. još uvek nisu u potpunosti potvrđene, pa su samim tim i označene sa (?).

To je takođe u saglasnosti sa sledećim:

-Gali (1983) i Akizuki (1984) su obrazlagali da se tokom rasta kristala odvija različita raspodela  $Fe^{3+}$  i  $Al^{3+}$  u oktaedarskim položajima;

-Sa porastom temperature, snižava se uređenost strukture i optička birefrakcija. Posle žarenja na temperaturama do 870 °C grandit postaje skoro potpuno izotropan i bez hidroksilne komponente (Allen i Busseck, 1988);

-Hammonds i dr. (1998) su objasnili da je za nastanak čvrstog rastvora grandita neophodna distorzija oktaedra i tetraedra.

-Hatch i Griffen (1989) su sugerisali da se uređenost može javiti kao temperaturom izazvana fazna transformacija od neuređene  $Ia\bar{3}d$  strukture u uređenu, ili delimično uređenu strukturu niže simetrije  $Fddd$  ili  $I\bar{1}$ ; i

-Milke (2004) smatra da je proces uređenosti koji dovodi do birefrakcije kod intermedijarnih i Grs-bogatih grandita u najvećoj meri zavistan od temperature rasta, a da su hemijski sastav, okolna sredina i pritisak samo sporedni faktori.

## 7. ZAKLJUČAK

U ovoj Doktorskoj disertaciji proučavano je pet različitih zona u okviru jednog makroskopski zonarnog grandita sa lokaliteta Meka Presedla (Kopaonik, Srbija).

Pomoću hemijske i EMPA analize preračunati su relativno visoko homogeni sastavi zona:  $\text{Grs}_{64\pm 1}\text{Adr}_{36\pm 1}\text{Sps}_2$  (A);  $\text{Grs}_{62\pm 1}\text{Adr}_{38\pm 1}\text{Sps}_2$  (B);  $\text{Grs}_{59\pm 2}\text{Adr}_{40\pm 2}\text{Sps}_2$  (C);  $\text{Grs}_{58\pm 2}\text{Adr}_{41\pm 2}\text{Sps}_2$  (D); i  $\text{Grs}_{58\pm 1}\text{Adr}_{41\pm 1}\text{Sps}_2$  (E). Glavne promene u sastavima ukazuju da je jedina značajnija varijacija ustanovljena samo kod Al-Fe<sup>3+</sup> izmena u oktaedarskom položaju:  $\text{Ca}_{2,93-2,97}\text{Mn}_{0,05-0,06}\text{Mg}_{0,00-0,01}\text{Al}_{1,14-1,26}\text{Fe}^{3+}_{0,72-0,83}\text{Ti}_{0,00-0,02}\text{Si}_{2,97-3,02}\text{O}_{12}$ . Ovakav hemijski sastav je potvrđen i sa matematičkim proračunima iz IC i Raman spektroskopskih analiza, kao i iz metal-metal međuatomskih rastojanja. Dokazano je i da ove zone predstavljaju pre čvrste rastvore nego mešavine.

Urađena je takođe i karakterizacija zona Raman spektroskopskom metodom, ukazujući na dva tipa promena: 1. Proporcionalna linearnost za zone B, D i E, i odstupanja od te linearnosti u zonama A i C (ToV I); i 2. Obrnuto proporcionalna (inverzna) linearnost za zone A, C i E, i malo veće vrednosti  $a_0$ , t.j. odstupanje, pri konstantnom Raman pomeranju za zone B i D (ToV II). Izgled svih Raman spektara, odnosno određena odstupanja u odnosu na karakteristične granditske pikove kod svih proučavanih A-E zona, preliminarno ukazuje na prisustvo desimetrizacije obzirom da je Ramanska tehnika u tom smislu znatno osetljivija od rendgenske difrakcije.

Brojne strukture minerala su određivane Rietveld-ovom metodom, kako sa, tako i bez geometrijskih ograničenja. Na takav način, ukupno je razmatrano 54 različitih prostornih grupa i mešavina faza sa ciljem određivanja egzaktne prostorne grupe kristalizacije proučavanog grandita.

Mnogobrojni parametri za ocenu valjanosti su zatim uvedeni i korišćeni kako bi se utvrdila egzaktna prostorna grupa kristalizacije, kao i da bi se dokazala eventualna desimetrizacija za koju su prethodno postojale vrlo realne pretpostavke. Tako na primer, različita raspodela Al<sup>3+</sup> i Fe<sup>3+</sup> je manje ili više uočljiva u svim simetrijama, pa čak i u teseralnim prostornim grupama kod kojih postoji barem 2 različita oktaedarska položaja, a koji predstavlja peti mogući uzrok optičke anizotropije.

Nadalje, i razlike u dimenzijama između kristalografskih osa postaju značajno vidljive već u tetragonalnoj sustemi, ukazujući na vrlo moguću desimetrizaciju. Sa daljim snižavanjem simetrije, takav trend je sve izraženiji i očigledniji.

Takođe, primetno bolji izračunati sadržaji za Ca i Al Rietveld-ovom metodom se zapažaju kod svih romboedarskih, rombičnih i monokličnih prostornih grupa. To ukazuje da bi egzaktnu prostornu grupu kristalizacije najverovatnije trebalo potražiti u okviru ove tri sisteme, jer sve ostale proučavane teseralne, tetragonalne i triklične prostorne grupe pokazuju znatna odstupanja ovih sadržaja od očekivanih i realnih.

Matematičkim putem su zatim utvrđene i razlike između romboedarskih (t.j.  $R\bar{3}c$  i  $R\bar{3}$ ) u odnosu na pseudoteseralne dimenzije jediničnih ćelija. Obzirom da se u svim zonama zapažaju manja ili veća odstupanja ugla  $\alpha$  od  $60^\circ$ , to takođe ukazuje da ispitivani grandit najverovatnije ne kristališe teseralno.

Analizom različitih vrsta pikova u istom uzorku, utvrđeno je da istovremeno postoje pikovi koje sigurno ili možda nisu dubleti, dok postoje i pikovi koje su sigurno dubleti, od kojih su neki vrlo izraženi. Takav podatak je od ključnog značaja, jer argumentovano ukazuje da takav uzorak nikako ne može da kristališe ni u jednoj od teseralnih, pa tako ni u  $Ia\bar{3}d$  prostornoj grupi, a čak ni da je u pitanju mešavina dve faze koje kristališu u bilo kojoj od teseralnih prostornih grupa. To takođe potvrđuje da je sigurno došlo do nekog vida desimetrizacije. Obzirom da su dubleti najizraženiji najviše u kristalografskim pravcima  $hhh$ ,  $hkk$  i  $hhl$ , takvi podaci su potom ukazali isključivo na prostorne grupe koje imaju dimenzije jediničnih ćelija od približno  $10,32\text{\AA}$  i/ili  $16,86\text{\AA}$ , odnosno samo na  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $I2/a$ ,  $I2/c$  i  $C2/c$ . Sve ostale proučavane prostorne grupe ne ispunjavaju ovakve kriterijume.

Daljim proširivanjem broja kriterijuma za još dodatnih 9 parametara, kao i sistemom eliminacije svih onih prostornih grupa koje ne zadovoljavaju tako postavljene uslove, došlo se do zaključka da bi najverovatnije egzaktnu prostornu grupu kristalizacije ovog grandita trebalo tražiti samo između  $R\bar{3}c$ ,  $R\bar{3}$ ,  $Fddd$ ,  $I2/c$  ili  $C2/c$ . Došlo se do zaključka da prostorne grupe  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  najviše ispunjavaju postavljene kriterijume. Ovakvi rezultati su takođe u vrlo dobroj saglasnosti i potvrđuju mogućnost  $T_{2g}$  prelaza, adekvatno sastavu proučavanog grandita.

Uvođenjem geometrijskih ograničenja, kao i opsežnim proučavanjima mnogih relevantnih parametara u okviru njih, ponovo je potvrđeno da prostorne grupe  $R\bar{3}c$  i  $Fddd$  najviše ispunjavaju i te kriterijume.

Uvođenjem još dodatnih 37 parametara podeljenih u 4 grupe kriterijuma, konačno je utvrđeno da je znatno verovatnija prostorna grupa kristalizacije grandita  $Fddd$  u odnosu na  $R\bar{3}c$ . Kristalizacija grandita u  $Fddd$  ili  $R\bar{3}c$  prostornim grupama predstavlja i uređeniju strukturu u odnosu na  $Ia\bar{3}d$  prostornu grupu.

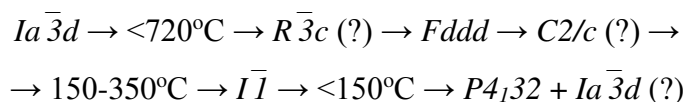
Na takav način, ovi rezultati se mogu svrstati u samo nekoliko publikovanih radova u svetu u kojima je desimetrizacija grandita nesumnjivo dokazana, a prvi i jedini rad takve vrste sa podacima koji su dobijeni rendgenskom difrakcionom analizom praha (XRPD).

Pojedina značajna odstupanja u okviru međuatomskih rastojanja dokazuju različite rotacije tetraedara i poliedarske distorzije između zona, a preliminarno ukazuju da se i valence poliedara takođe razlikuju između zona.

Desimetrizacija proučavanog grandita predstavlja i najlogičniji uzrok utvrđenoj anizotropiji, rotaciji tetraedara, poliedarskim distorzijama, kao i svim ostalim mnogobrojnim odstupanjima dobijenih rezultata (kako bez, tako i sa geometrijskim ograničenjima) u odnosu na literaturne podatke vezane za kristalizaciju granata u prostornoj grupi  $Ia\bar{3}d$ .

Iz rezultata hemijskog sastava, procenjeni su sledeći uslovi postanka:  $t \sim 650-690$  (715) °C u zavisnosti od proučavane zone grandita, najverovatnije konstantan  $p = 2-3$  kbara, kao i  $X_{CO_2} \geq 0,6$ . Rast kristala je bio kontinuiran, i bez prekida u kristalizaciji.

Obzirom da granditi vrlo sličnog hemijskog sastava kristališu u različitim prostornim grupama, a različitog hemijskog sastava u istim prostornim grupama, predložena je i sledeća zavisnost sniženja simetrije intermedijarnih grandita u zavisnosti od snižavanja temperature postanka:



Do sada su kristalizacije grandita potvrđene u  $Ia\bar{3}d$ ,  $Fddd$  i  $I\bar{1}$  prostornim grupama, dok za mešavinu dve faze  $P4_132 + Ia\bar{3}d$ , kao ni za prostorne grupe  $C2/c$  i  $R\bar{3}c$  još uvek nema relevantnih strukturnih podataka, već samo određenih naznaka ili pretpostavki.



## 8. LITERATURA

- Aines, R. D. & Rossman, G. R. (1984): The hydrous component in garnets: Pyrospites. *Am. Mineral.* **69**, 1116-1126.
- Akizuki, M. (1984): Origin of optical variations in grossular-andradite garnet. *Am. Mineral.* **69**, 328-338.
- Akizuki, M. (1989): Growth structure and crystal symmetry of grossular garnets from the Jeffrey Mine Asbestos, Quebec, Canada. *Am. Mineral.* **74**, 859-864.
- Akizuki, M., Takéuchi, Y., Terada, T. & Kudoh, Y. (1998): Sectoral texture of cubo-dodecahedral garnet in grandite. *Neues Jahrb. Miner. Mh.* **1998**, 565-576.
- Aleksić, V., Kalenić, M. i Kemenci, R., (1987): *Geologija Srbije-Metamorfizam III-2, 187-199*. Zavod za regionalnu geologiju i paleontologiju Rudarsko-geološkog fakulteta, Beograd.
- Allen, F. M. & Buseck, P. R. (1988): XRD, FT-IR and TEM studies of optically anisotropic grossular garnets. *Am. Mineral.* **73**, 568-584.
- Amthauer, G. & Rossman, G. R. (1998): The hydrous component in andradite garnet. *Am. Mineral.* **83**, 835-840.
- Andrut, M. & Wildner, M. (2001): The crystal chemistry of birefringent natural uvarovites: Part I. Optical investigations and UV-VIS-IR absorption spectroscopy. *Am. Mineral.* **86**, 1219-1230.
- Andrut, M. & Wildner, M. (2002): The crystal chemistry of birefringent natural uvarovites. Part III. Application of the superposition model of crystal fields with a characterization of synthetic cubic uvarovite. *Phys. Chem. Mineral.* **29**, 595-608.
- Andrut, M., Wildner, M. & Beran, A. (2002): The crystal chemistry of birefringent natural uvarovites. Part IV. OH defect incorporation mechanisms in non-cubic garnets derived from polarized IR spectroscopy. *Eur. J. Mineral.* **14**, 1019-1026.
- Angel, R. J., Finger, L. W., Hazen, R. M., Kanzaki, M., Weidner, D. J., Lieberman, R. C. & Veblen, D. R. (1989): Structure and twinning of single-crystal MgSiO<sub>3</sub> garnet synthesized at 17GPa and 1800 °C. *Am. Mineral.* **74**, 509-512.

- Antao, S. M. (2013): Three cubic phases intergrown in a birefringent andradite-grossular garnet and their implications. *Phys. Chem. Mineral.* **40**, 705-716.
- Antao, S. M. & Klincker, A. M. (2013): Origin of birefringence in andradite from Arizona, Madagascar and Iran. *Phys. Chem. Mineral.* **40**, 575-586.
- Appleman, D. E. & Evans, H. T. (1973): Job 9214: Indexing and least-square refinement of powder diffraction data. *Natl. Techn. Inf. Serv. U. S. Dep. Comm., Doc. PB-216188*, Springfield, Virginia.
- Armbruster, T. & Geiger, C. A. (1993): Andradite crystal chemistry, dynamic X-site disorder and structural strain in silicate garnets. *Eur. J. Mineral.* **5**, 59-71.
- Armbruster, T., Kohler, T., Libowitzky, E., Friedrich, A., Miletich, R., Kunz, M., Medenbach, O. & Gutzmer, J. (2001): Structure, compressibility, hydrogen bonding, and dehydration of the tetragonal Mn<sup>3+</sup> hydrogarnet, henritermierite. *Am. Mineral.* **86**, 147-158.
- Aubry, A., Dusausoy, Y., Laffaille, A. & Protas, J. (1969): Determination et étude de la structure cristalline de l'henritermierite, hydrogrenat de symétrie quadratique. *Bull. Soc. fr. Minéral. Cristallogr.* **92**, 126-133.
- Basso, R., Della Guista, A. & Zefiro, L. (1983): Crystal structure refinement of plazolite, a highly hydrated natural hydrogrossular. *Neues Jahrb. Miner. Mh.* **1983**, 251-258.
- Basso, R., Cimmino, F. & Messiga, B. (1984): Crystal chemistry of hydrogarnets from three different microstructural sites of a basaltic metarodingite from the Voltri Massif (Western Liguria, Italy). *Neues Jahrb. Miner. Abh.* **148(3)**, 246-258.
- Becker, U. & Pollok, K. (2002): Molecular simulations of interfacial and thermodynamic mixing properties of grossular-andradite garnets. *Phys. Chem. Mineral.* **29**, 52-64.
- Berar, J. F. & Lelann, P. (1991): E.S.D.'s and estimated probable error obtained in Rietveld refinements with local correlations. *J. Appl. Cryst.* **24**, 1-5.
- Blanc, Y. & Maisonneuve, J. (1973): Sur la biréfringence des grenats calciques. *Bull. Soc. fr. Minéral. Cristallogr.* **96**, 320-321.
- Boffa Ballaran, T. & Woodland, A. B. (2006): Local structure of ferric iron-bearing garnets deduced by IR-spectroscopy. *Chem. Geol.* **225**, 360-372.

- Boiocchi, M., Bellatreccia, F., Della Ventura, G. & Oberti, R. (2012): On the symmetry and atomic ordering in (OH,F)-rich spessartine: towards a new hydrogarnet end-member. *Z. Kristallogr.* **227**, 385-395.
- Born, L. & Zemann, J. (1964): Abstandsberechnungen und gitterenergetische Berechnungen an Granaten. *Contrib. Mineral. Petrol.* **10**, 2-23.
- Brauns, R. (1891): *Die optischen Anomalien der Kristalle*. Preisschr. Jablonowski Ges., Leipzig, Germany.
- Brown, I.D. (1992) Chemical and steric constraints in inorganic solids. *Acta Crystallogr.* **B48**, 553-572
- Brown, D. & Mason, R. A. (1994): An occurrence of sectored birefringence in almandine from the Gangon terrane, Labrador. *Can. Mineral.* **32**, 105-110.
- Brunet, F., Bonneau, V. & Irifune, T. (2006): Complete solid-solution between  $\text{Na}_3\text{Al}_2(\text{PO}_4)_3$  and  $\text{Mg}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_4)_3$  garnets at high pressure. *Am. Mineral.* **91**, 211-215.
- Chase, A. B. & Lefever, R. A. (1960): Birefringence of synthetic garnets. *Am. Mineral.* **45**, 1126-1129.
- Cheng, W., Greenwood, H., Hu, H. & Frost, D. (1990): XRD and XPS analysis of the Grossular-Hydrogrossular series. *Can. Min.* **28**, 87-91.
- Ćirić, B. i Karamata, S. (1962): Vodič za ekskurziju-Magmatske stene, geološka građa i rudna ležišta. *V Savetovanje geologa FNRJ*.
- Dapiaggi, M., Geiger, C. A. & Artioli, G. (2005): Microscopic strain in synthetic pyrope-grossular solid solutions determined by synchrotron X-ray powder diffraction at 5 K: The relationship to enthalpy of mixing behavior. *Am. Mineral.* **90**, 506-509.
- Dasgupta, S. & Pal, S. (2005): Origin of grandite garnet in calc-silicate granulites: mineral-fluid equilibria and petrogenetic grids. *J. Petrol.* **46:5**, 1045-1076.
- Deer, W. A., Howie, R. A. & Zussman, J. (1982): *Rock forming minerals, vol. 1A, Orthosilicates*, 467-698. Longmans, London.
- Dempsey, M. J. (1980): Evidence for structural changes in garnet caused by calcium substitution. *Contrib. Mineral. Petrol.* **71**, 281-282.
- Dimitrijević, M. i Dragić, D. (1957): O sklopu granodioritskog masiva Kopaonika. *Vesnik Geol. zavoda* **19**, 299-313.

- Dimitrijević, R. i Tančić, P. (1998): Mineraloške i kristalografske karakteristike silikata iz skarnova lokalnosti Meka Presedla-Mrkonje na Kopaoniku. *Glasnik Prir. Muzeja* **A 47-50**, 143-160.
- Dong, J. & Lu, K. (1991): Noncubic symmetry in garnet structures studied using extended X-ray-absorption fine-spectra. *Physics* **B 43**, 8808-8821.
- Engi, M. & Wersin, P. (1987): Derivation and application of a solution model for calcic garnet. *Schweiz. Mineral. Petrog. Mitt.* **67**, 53-73.
- Euler, F. & Bruce, J. A. (1965): Oxygen coordinates of compounds with garnet structure. *Acta Crystallogr.* **19**, 971-978.
- Foord, E. E. & Mills, B. A. (1978): Biaxiality in 'isometric' and 'dimetric' crystals. *Am. Mineral.* **63**, 316-325.
- Frank-Kamenetskaya, O. V., Rozhdestvenskaya, I. V., Shtukenberg, A. G., Bannova, I. I. & Skalkina, Yu. A. (2007): Dissymmetrization of crystal structures of grossular-andradite garnets  $\text{Ca}_3(\text{Al, Fe})_2(\text{SiO}_4)_3$ . *Struct. Chem.* **18**, 493-500.
- Fujino, K., Momoi, H., Sawamoto, H. & Kumazawa, M. (1986): Crystal structure and chemistry of  $\text{MnSiO}_3$  tetragonal garnet. *Am. Mineral.* **71**, 781-785.
- Gadsden, J. A. (1975): *Infrared spectra of minerals and related inorganic compounds*. Longmans, London.
- Gali, S. (1983): Grandite garnet structures in connection with the growth mechanism. *Z. Kristallogr.* **163**, 43-52.
- Garvey R. (1987): Least-square unit cell refinement, Version 86,2, Dept. of Chemistry, North Dakota State University.
- Geiger, C. A. & Armbruster, T. (1997):  $\text{Mn}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$  spessartine and  $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$  grossular garnet: structural dynamic and thermodynamic properties. *Am. Mineral.* **82**, 740-747.
- Geller, S. (1960): Magnetic interactions and distributions of ions in the garnets. *J. Appl. Cryst.* **24**, 1-5.
- Geller, S. (1967): Crystal chemistry of the garnets. *Z. Kristallogr.* **125**, 1-47.
- Grew, E. S., Locock, A. J., Mills, S. J., Galuskina, I. O., Galuskin, E. V. & Halenius, U. (2013): IMA Report, Nomenclature of the garnet supergroup. *Am. Mineral.* **98**, 785-811.

- Griffen, D. T., Hatch, D. M., Phillips, W. R. & Kulaksiz, S. (1992): Crystal chemistry and symmetry of a birefringent tetragonal pyralspite<sub>75</sub>-grandite<sub>25</sub> garnet. *Am. Mineral.* **74**, 399-406.
- Hahn, T., ed. (1983): *International tables for X-ray crystallography*, vol. A. Reidel, Boston.
- Hålenius, U., Häusserman, U. & Harryson, H. (2005): Holtstamite, Ca<sub>3</sub>(Al,Mn<sup>3+</sup>)<sub>2</sub>(SiO<sub>4</sub>)<sub>3-x</sub>(H<sub>4</sub>O<sub>4</sub>)<sub>x</sub>, a new tetragonal hydrogarnet from Wessels Mine, South Africa. *Eur. J. Mineral.* **17**, 375-382.
- Hamilton, W. C. (1965): Significance tests on the crystallographic R factor. *Acta Crystallogr.* **18**, 502-510.
- Hammonds, K. D., Bosenick, A., Dove, M. T. & Heine, V. (1998): Rigid unit modes in crystal structures with octahedrally coordinated atoms. *Am. Mineral.* **74**, 352-359.
- Hatch, D. M. & Griffen, D. T. (1989): Phase transitions in the grandite garnets. *Am. Mineral.* **74**, 151-159.
- Hazen, R. M., Downs, R. T., Finger, L. W., Conrad, P. G. & Gasparik, T. (1994): Crystal chemistry of Ca-bearing majorite. *Am. Mineral.* **79**, 581-584.
- Heinemann, S., Sharp, T. G., Seifert, F. & Rubie, D. C. (1997): The cubic-tetragonal phase transition in the system majorite (Mg<sub>4</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>12</sub>)-pyrope (Mg<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>O<sub>12</sub>). *Phys. Chem. Mineral.* **24**, 206-221.
- Heinemann, S. & Miletich, R. (2000): Structure and twinning of tetragonal Ca<sub>3</sub>Mn<sub>2</sub>Ge<sub>3</sub>O<sub>12</sub> garnet. *Am. Mineral.* **85**, 993-1000.
- Hermann, J. (2002): Experimental constraints on phase relations in subducted continental crust. *Contrib. Mineral. Petrol.* **143**, 219-235.
- Hermann, J. & Green, D. H. (2001): Experimental constraints on high pressure melting in subducted crust. *Earth and Planetary Sci. Lett.* **188**, 149-168.
- Hirai, H. & Nakazawa, H. (1986): Visualising low symmetry of a grandite garnet on precession photographs. *Am. Mineral.* **71**, 1210-1213.
- Hofmeister, A. M., Schaal, R. B., Campbell, K. R., Berry, S. L. & Fagan, T. J. (1998): Prevalence and origin of birefringence in 48 garnets from the pyrope-almadine-grossularite-spessartine quaternary. *Am. Mineral.* **83**, 1293-1301.
- Hsu, L. C. (1980): Hydration and phase relations of grossular-spessartine garnets at P<sub>H<sub>2</sub>O</sub>=2Kb. *Contrib. Mineral. Petrol.* **71**, 407-415.

- Huckenholz, H. G. & Fehr, K. T. (1982): Stability relationships of grossular + quartz + wollastonite + anorthite, II. The effect of grandite-hydrograndite solid solution. *Neues Jahrb. Miner. Abh.* **145(1)**, 1-33.
- Huggins, F. E., Virgo, D. & Huckenholz, H. G. (1977a): Titanium-containing silicate garnets I. The distribution of Al, Fe<sup>3+</sup> and Ti<sup>4+</sup> between octahedral and tetrahedral sites. *Am. Mineral.* **62**, 475-490.
- Huggins, F. E., Virgo, D. & Huckenholz, H. G. (1977b): Titanium-containing silicate garnets II. The crystal chemistry of melanites and schorlornites. *Am. Mineral.* **62**, 646-665.
- ICDD-PDF 10-0288 (1960): Andradite, syn. *Natl. Bur. Stand. (U.S.)* **539(9)**, 22.
- Ingerson, E. & Barksdale, J. D. (1943): Iridescent garnet from the Adelaide Mining District, Nevada. *Am. Mineral.* **28**, 303-312.
- Ishizawa, N. and Inagaki, Y. (2008): A Guide to Discriminating the Rhombohedral Cell from the Face-Centred Pseudo Cubic Cell, *Ceramics Research Center, Annual Report*, **8**, 35-49.
- Ivanova, T. I., Shtukenberg, A. G., Punin, Yu. O., Frank-Kamenetskaya, O. V. & Sokolov, P. B. (1998): On the complex zonality in grandite garnets and implications. *Min. Mag.* **62**, 857-868.
- Jamtveit, B. (1991): Oscillatory zonation patterns in hydrothermal grossular-andradite garnet: Nonlinear dynamics in regions of immiscibility. *Am. Mineral.* **76**, 1319-1327.
- Jamtveit, B., Wogelius, R. & Fraser, D. (1993): Zonation patterns of skarn garnets: Records of hydrothermal system evolution. *Geology* **21**, 113-116.
- Jamtveit, B., Ragnarsdottir, K. & Wood, B. (1995): On the origin of zoned grossular-andradite garnets in hydrothermal systems. *Eur. J. Mineral.* **7**, 1399-1410.
- Keller, L., Rask, J. & Buseck, P. (1987): *ICDD-PDF 39-0368, Grossular*. Arizona State University, Tempe, Arizona, USA, ICDD Grant-in-Aid.
- Kingma, K. J. & Downs, J. W. (1989): Crystal-structure analysis of a birefringent andradite. *Am. Mineral.* **74**, 1307-1316.
- Kitamura, K. & Komatsu, H. (1978): Optical anisotropy associated with growth striation of yttrium garnet, Y<sub>3</sub>(Al,Fe)<sub>5</sub>O<sub>12</sub>. *Kristall. und Technik* **13**, 811-816.

- Knežević-Đorđević, V. i Đorđević, P. (1973): Istočni kontaktni pojas Kopaonika, Petrohemijska studija kontaktno metamorfnih stena između Duboke i Vučaka, **I**, Beograd. (neobjavljeno)
- Kobayashi, S. & Shoji, T. (1987): Infrared spectra and cell dimensions of hydrothermally synthesized grandite-hydrograndite series. *Min. J.* **13:8**, 490-499.
- Kohn, M. J. (2003): *Geochemical zoning in metamorphic minerals*. In Treatise on Geochemistry, vol. 3: The Crust (ed. R. Rudnick), Elsevier, pp. 229-261.
- Kolesov, B. A. & Geiger, C. A. (1998): Raman spectra of silicate garnets. *Phys. Chem. Mineral.* **25**, 142-151.
- Kremenović, A., Spasojević-de Biré, A., Dimitrijević, R., Sciau, P., Mioč, U. B. & Colomban, Ph. (2000): Keggin's ion structural modification and expansion of dodecatungstophosphoric acid hexahydrate induced by temperature treatment: In situ X-ray powder diffraction and raman investigations. *Solid State Ionics*, **132**, 39–53
- Lager, G. A., Armbruster, T. & Faber, J. (1987): Neutron and X-ray diffraction study of hydrogarnet  $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{O}_4\text{H}_4)_3$ . *Am. Mineral.* **72**, 756-765.
- Lager, G. A., Armbruster, T., Rotella, F. J. & Rossman, G. R. (1989): OH substitution in garnets: X-ray and neutron diffraction, infrared, and geometric-modeling studies. *Am. Mineral.* **74**, 840-851.
- Lessing, P. & Standish, R. P. (1973): Zoned garnet from Crested Butte, Colorado. *Am. Mineral.* **58**, 840-842.
- Locock, A., Luth, R. W., Cavell, R. G., Smith, D. G. W. & Duke, M. J. M. (1995): Spectroscopy of the cation distribution in the schorlomite species of garnet. *Am. Mineral.* **80**, 27-38.
- Manning, C. E. & Bird, D. K. (1990): Fluorian garnets from the host rocks of the Skaergaard intrusion: Implications for metamorphic fluid compositions. *Am. Mineral.* **75**, 859-873.
- Marezio, M., Chenavas, J. & Joubert, J. C. (1978): On the symmetry of the garnet structure. *Am. Crystallogr. Assoc. Norman, Okla.* **6**, 23.
- McAloon, B. P. & Hofmeister, A. M. (1993): Single-crystal absorption and reflection infrared spectroscopy of birefringent grossular-andradite garnets. *Am. Mineral.* **78**, 957-967.

- McAloon, B. P. & Hofmeister, A. M. (1995): Single-crystal IR spectroscopy of grossular-andradite garnets. *Am. Mineral.* **80**, 1145-1156.
- Meagher, E. P. (1975): The crystal structures of pyrope and grossularite at elevated temperatures. *Am. Mineral.* **60**, 218-228.
- Meagher, E. P. (1980): *Silicate garnets*. Mineralogical Society of America, Reviews in Mineralogy **5**, 218-228.
- Menzer, G. (1926): Die Kristallstrukture von Granat. *Z. Kristallogr.* **63**, 157-158.
- Menzer, G. (1928): Die Kristallstrukture der Granate. *Z. Kristallogr.* **69**, 300-396.
- Milke, R. (2004): Spiral growth of grossular under hydrothermal conditions. *Am. Mineral.* **89**, 211-218.
- Milovanović, B. i Ćirić, B. (1960-1963): *Geološka karta SR Srbije 1:200.000, List Pljevlja-Novi Pazar*. Zavod za geološka i geofizička istraživanja, Beograd.
- Milovanović, B. i Ćirić, B. (1965-1966): *Geološka karta SR Srbije 1:200.000, List Priština-Niš*. Zavod za geološka i geofizička istraživanja, Beograd.
- Mičić, I. (1974): *Kontaktne, pneumatolitske i hidrotermalne promene u vulkanskim stenama Kopaoničke oblasti, Doktorska disertacija*. Rudarsko-geološki fakultet, Beograd.
- Mičić, I., Urošević, D., Kandić, M., Klisić, M. i Simić, D. (1972): Nalazak trijaske konodontne faune u metamorfnom kompleksu Kopaonika. *Zapisi SGD za 1968. god.*
- Moenke, H. (1962): *Mineralspektren*. Akademie Verlag, Berlin, Germany.
- Moore, R. K., White, W. B. & Long, T. V. (1971): Vibrational spectra of the common silicates: I. The garnets. *Am. Mineral.* **56**, 54-71.
- Murad, E. (1976): Zoned birefringent garnets from Thera Island, Santorini Group (Aegean Sea). *Mineral. Mag.* **40**, 715-719.
- Nakatsuka, A., Chaya, H. & Yoshiasa, A. (2005): Crystal structure of single-crystal CaGeO<sub>3</sub> tetragonal garnet synthesized at 3 Gpa and 1000 °C. *Am. Mineral.* **90**, 755-757.
- Novak, G. A. & Gibbs, G. V. (1971): The crystal chemistry of the silicate garnets. *Am. Mineral.* **56**, 791-825.
- Ohashi H., Osawa, T. & Sato, A. (1995): Low-pressure polymorph of Co<sub>3</sub>Al<sub>2</sub>Si<sub>3</sub>O<sub>12</sub>. *Acta Crystallogr.* **C51**, 2213-2215.



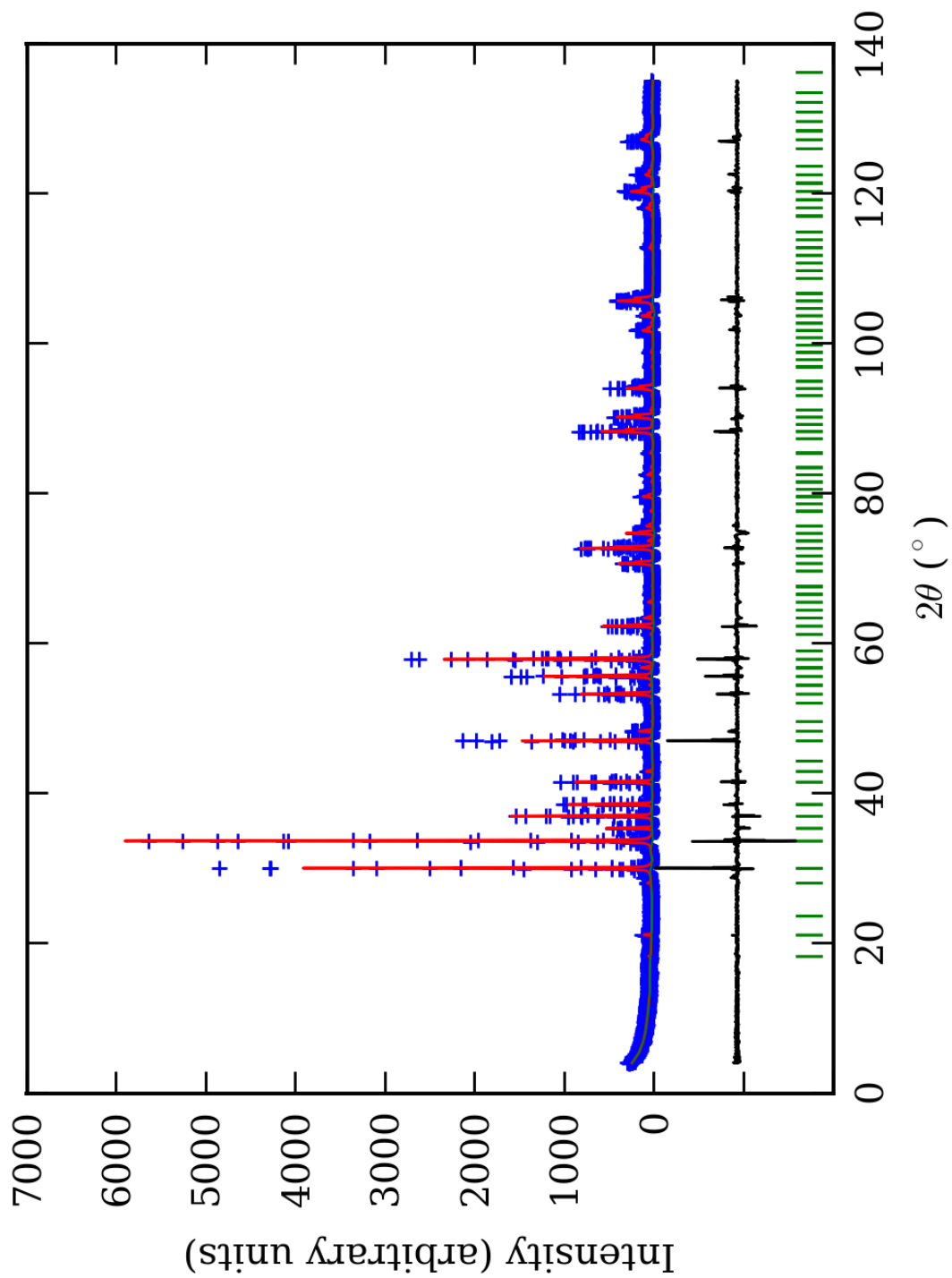
- Palache, C., Berman, H. & Frondel, C. (1951): *Dana's system of mineralogy*, 7<sup>th</sup> edition, II, John Wiley & Sons, New York.
- Pinet, M. & Smith, D. C. (1993): La microspectrométrie Raman des grenats  $X_3Y_2Z_3O_{12}$ : I: La série calcique naturelle ouvarovite-grossulaire-andradite. *Schweiz. Mineral. Petrog. Mitt.* **73**, 21-40.
- Plyusnina, I. I. (1967): *Infrakrasnie spektrov minerala*. Moskva.
- Poharc, V. (1972): *Proučavanje granata iz kontaktno metamorfnih i regionalno metamorfnih stena*, Diplomski rad. Rudarsko-geološki fakultet, Beograd.
- Poharc, V., Logar, M. i Nikolić, D. (1977): Optički refleksioni spektri i određivanje boje kod granata Kokre, Peštana i Kopaonika. *Zapisi SGD za 1975 i 1976. god.*, 23-29.
- Prewitt C. T. & Sleight, A. W. (1969): Garnet-like structures of high pressure cadmium germanate and calcium germanate. *Science* **163**, 386-387.
- Radukić, M. (1965): *Metalični minerali i rude kontaktno-metamorfne oreole Kopaoničkog granitoida*, Doktorska disertacija. Rudarsko-geološki fakultet, Beograd.
- Reeder, R. & Grams, J. (1987): Sector zoning in calcite cement crystals: Implications for trace element distributions in carbonates. *Geochim. Cosmochim. Acta* **51**, 187-194.
- Reeder, R. & Prosky, J. (1986): Compositional sector zoning in dolomite. *J. Sedim. Petr.* **56**, 137-247.
- Resende, J. A. L. C. & Fernandes, N. G. (2005): X-ray powder refinement of a natural garnet from Diamantina, Minas Gerais, Brazil. *Acta Crystallogr.* **E61**, 265-267.
- Rinaldi, R. & Passaglia, E. (1989): Hibschite toptype: crystal chemical characterization. *Eur. J. Mineral.* **1**, 639-644.
- Robinson, K., Gibbs, G. V. & Ribbe, P. H. (1971): Quadratic elongation: A quantitative measure of distortion in coordination polyhedra. *Science* **172**, 567-570.
- Rodehorst, U., Geiger, C. A. & Armbruster, T. (2002): The crystal structures of grossular and spessartine between 100 and 600 K and the crystal chemistry of grossular-spessartine solid solutions. *Am. Mineral.* **87**, 542-549.

- Rodić, D., Mitrić, M., Tellgren, R., Rundlof, H. & Kremenović, A. (1999): True magnetic structure of the ferromagnetic garnet  $Y_3Fe_5O_{12}$  and magnetic moments of iron ions. *J. Magn. Magn. Mater.* **191**, 137-145.
- Rodriguez-Carvajal, J. (1990): Program Fullprof, *Coll. Abs. of Powd. Diffraction Meeting*, 127, Toulouse.
- Rossmann, G. R. & Aines, R. D. (1986): Spectroscopy of a birefringent grossular from Asbestos, Quebec, Canada. *Am. Mineral.* **71**, 779-780.
- Rossmann, G. R. & Aines, R. D. (1991): The hydrous components in garnets: Grossular-hydrogrossular. *Am. Mineral.* **76**, 1153-1164.
- Rossmann, E. & Armbruster, T. (1995): The intensity of forbidden reflections of pyrope: Umweganregung or symmetry reduction?. *Z. Kristallogr.* **210**, 645-649.
- Shannon, R. D. & Prewitt, C. T. (1969): Effective ionic radii in oxides and fluorides. *Acta Crystallogr.* **B25**, 925-946.
- Shore, M. & Fowler, A. (1996): Oscillatory zoning in minerals: A common phenomenon. *Can. Mineral.* **34**, 1111-1126.
- Shtukenberg, A. G., Punin, Yu. O., Frank-Kamenetskaya, O. V., Kovalev, O. G. & Sokolov, P. B. (2001): On the origin of anomalous birefringence in grandite garnets. *Min. Mag.* **65**, 445-459.
- Shtukenberg, A. G., Popov, D. Yu. & Punin, Yu. O. (2002): An application of the point-dipole model to the problem of optical anomalies in grandite garnets. *Min. Mag.* **66**, 275-286.
- Shtukenberg, A. G., Popov, D. Yu. & Punin, Yu. O. (2005): Growth ordering and anomalous birefringence in ugrandite garnets. *Min. Mag.* **69**, 537-550.
- Shtukenberg, A. G., Punin, Yu. O. & Frank-Kamenetskaya, O. V. (2006): The kinetic ordering and growth dissymmetrisation in crystalline solid solutions. *Russ. Chem. Rev.* **75**, 1083-1106.
- Sibley, D., Vogel, T., Walther, B. & Byerly, G. (1976): The origin of oscillatory zoning in plagioclase: A diffusion and growth controlled model. *Am. J. Sci.* **276**, 275-281.
- Skinner, B. J. (1956): Physical properties of end-members of the garnet group. *Am. Mineral.* **41**, 428-436.
- Smith, J. V. & Mason, B. (1970): Pyroxene-garnet transformation in Coorara meteorite. *Science* **168**, 832-833.

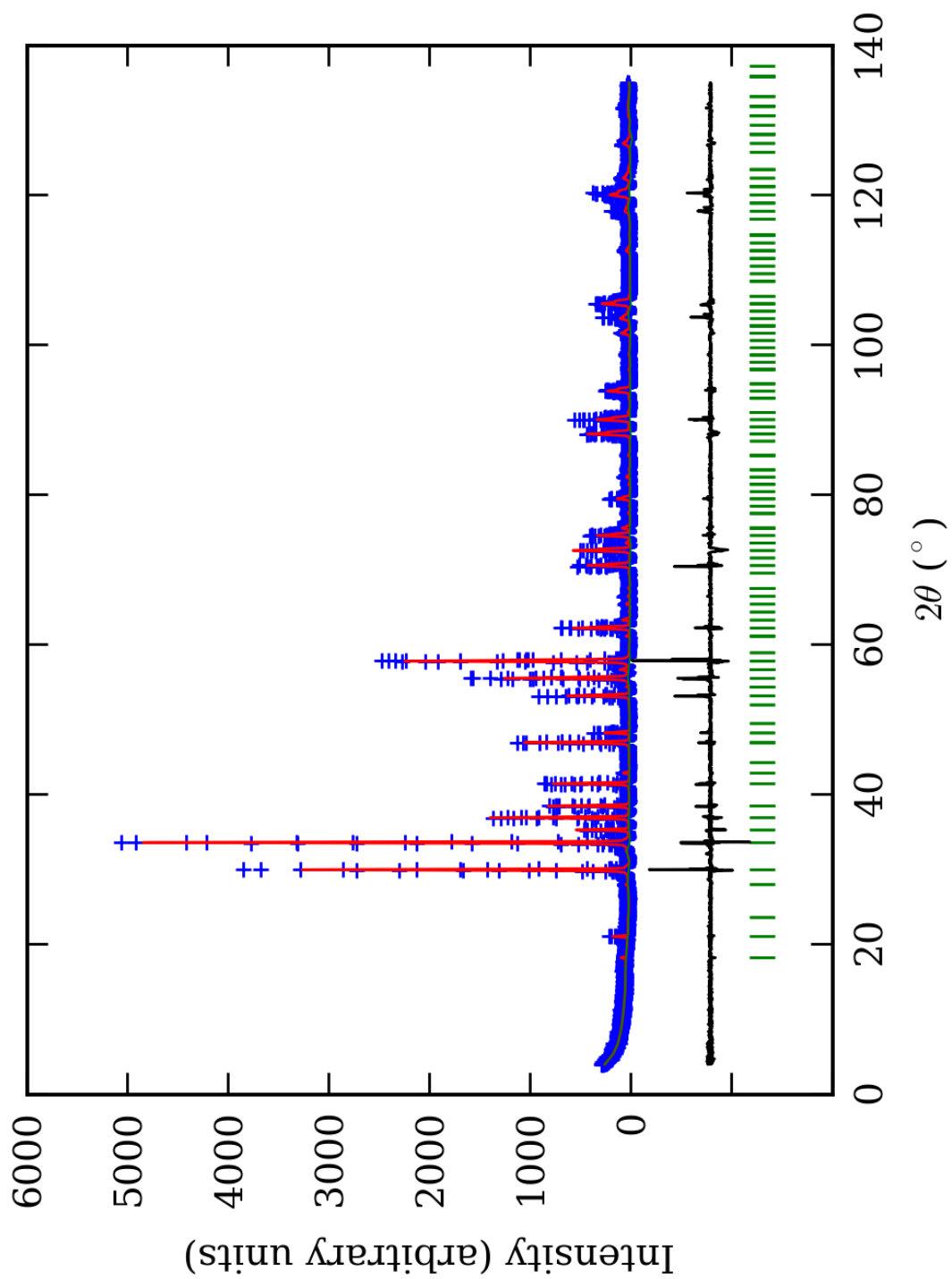
- Stefanović, M. i Pavlović, Z. (1960): Prilog poznavanju petroloških karakteristika Kopaoničkog granitoidnog masiva. *Vesnik zavoda za geol. i geof. istraž.* **XVIII**.
- Takéuchi, Y. & Haga, N. (1976): Optical anomaly and structure of silicate garnets. *Proc. Jap. Acad.* **52**, 228-231.
- Takéuchi, Y., Haga, N., Umizu, S. & Sato, G. (1982): The derivative structure of silicate garnets in grandite. *Z. Kristallogr.* **158**, 53-99.
- Tančić, P. I. (1990): *Kristallografsko-mineraloške karakteristike kontaktno-metamorfnih silikata iz skarnova Meke Presedle na planini Kopaonik, Diplomski rad.* Rudarsko-geološki fakultet, Beograd.
- Tančić, P. (2005): Some possibilities of the approximative determination of the composition of the orthorhombic carbonate solid solutions with crystallographic parameters. *Inter. Conf. on Approx. Meth. and num. Modeling in Env. and Nat. Res. (MAMERN 2005)* **III**, 51-52, Oujda, Morocco.
- Tančić, P. I. (2008): *Kristallografska i mineraloška karakterizacija makroskopski zonarnog granata iz lokalnosti Meka Presedla na Kopaoniku, Magistarski rad.* Rudarsko-geološki fakultet, Beograd.
- Tančić, P. i Dimitrijević, R. (1992): Mineraloške i kristallografske karakteristike epidota i skapolita iz lokalnosti Meka Presedla na Kopaoniku. *I Konf. Srpskog kristal. društva* **S16**, 38, Beograd.
- Tančić, P., Vulić, P., Kaindl, R., Sartory, B. & Dimitrijević, R. (2012a): Macroscopically-zoned grandite from the garnetite skarn of Meka Presedla (Kopaonik Mountain, Serbia). *Acta Geol. Sinica* **86**, 393-406.
- Tančić, P., Dimitrijević, R., Poznanović, M., Pačevski, A. and Sudar, S. (2012b): Crystal structure and chemical composition of ludwigite from Vranovac ore deposit (Boranja Mountain, Serbia), *Acta Geol. Sinica* **86**, 1524-1538.
- Taylor, B. E. & Liou, J. G. (1978): The low-temperature stability of andradite in C-O-H fluids. *Am. Mineral.* **63**, 378-393.
- Urošević, S. (1908): Centralni Kopaonik-studija kontaktno metamorfni pojava granita. *Glas Srpske Kralj. Akad.* **75**, 101-171.
- Vulić, P. J. (1999): *Kristalna struktura almandina iz lokaliteta Brčeli i Brijegi (Crna Gora), Diplomski rad.* Rudarsko-geološki fakultet, Beograd.

- Whitney, D. L. & Evans, B. W. (2010): Abbreviations for names of rock-forming minerals. *Am. Mineral.* **95**, 185-187.
- Wildner, M. & Andrut, M. (2001): The crystal chemistry of birefringent natural uvarovites: Part II. Single-crystal X-ray structures. *Am. Mineral.* **86**, 1231-1251.
- Zemann, J. (1962): Zur Kristallchemie der Granate. *Beitr. Mineral. Petrol.* **8**, 180-188.

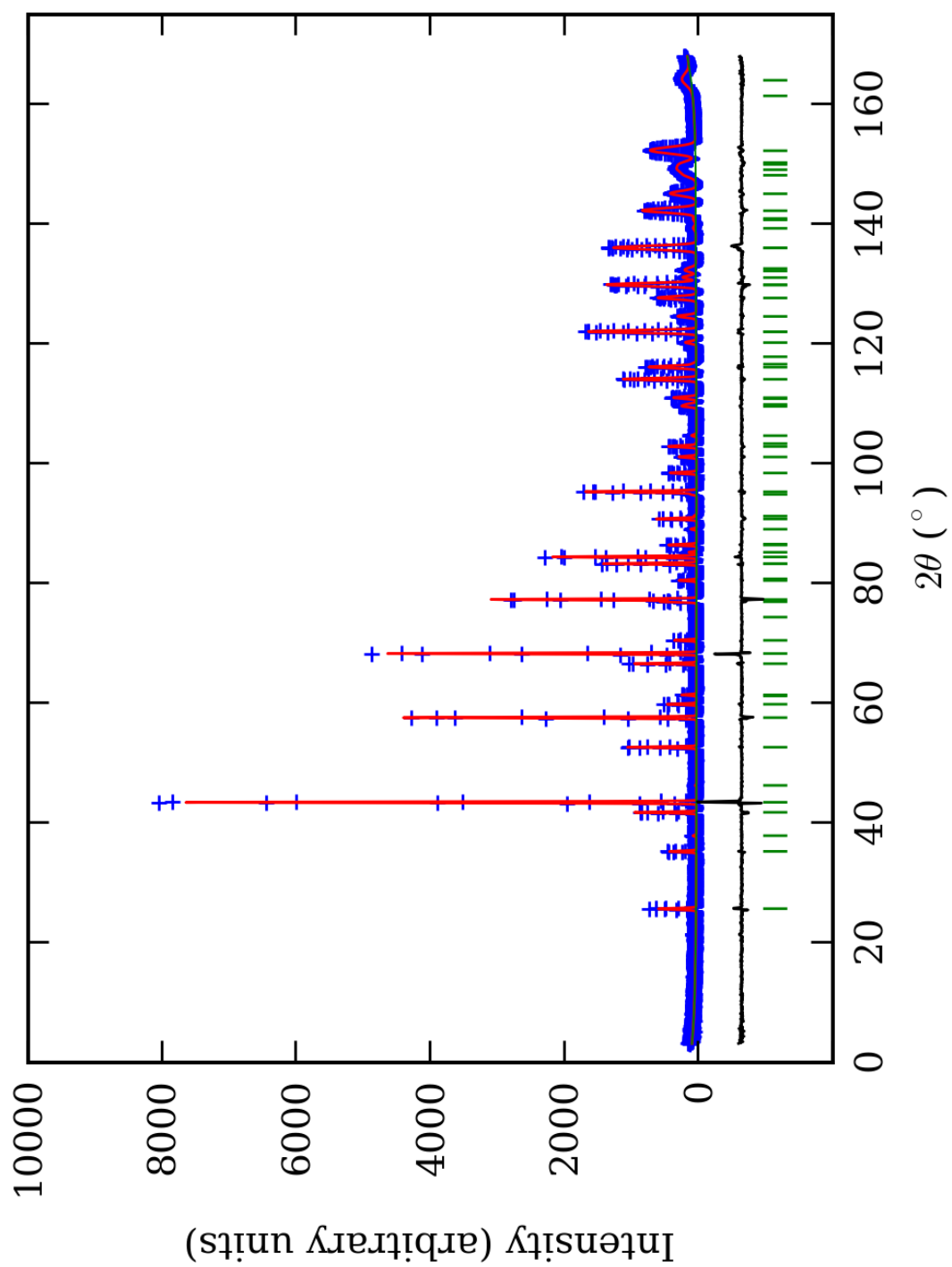
## 9. PRILOZI



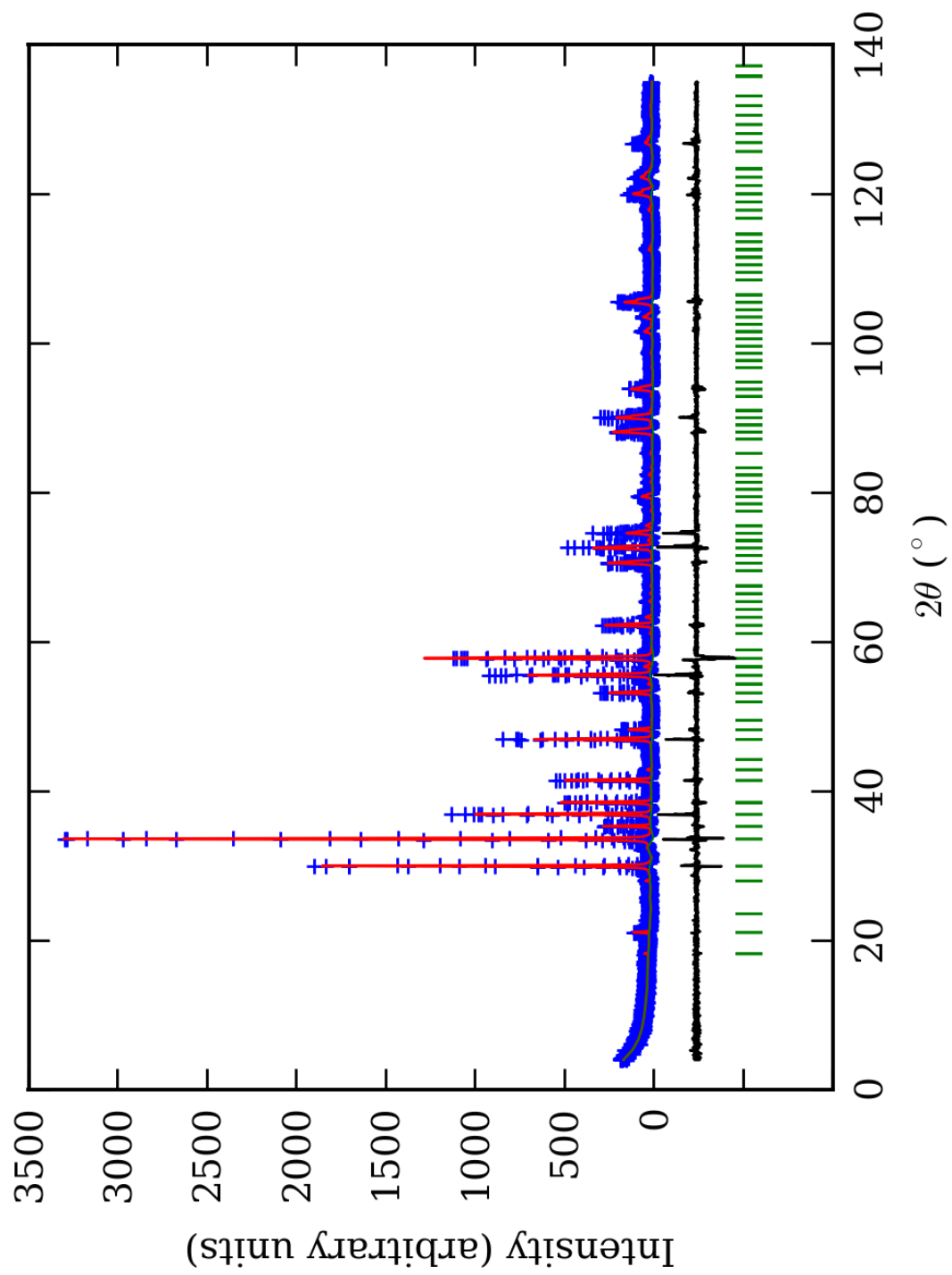
PRILOG 1. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $\bar{I}43d$  p.g.



PRILOG 2. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $\bar{1}43d$  p.g.

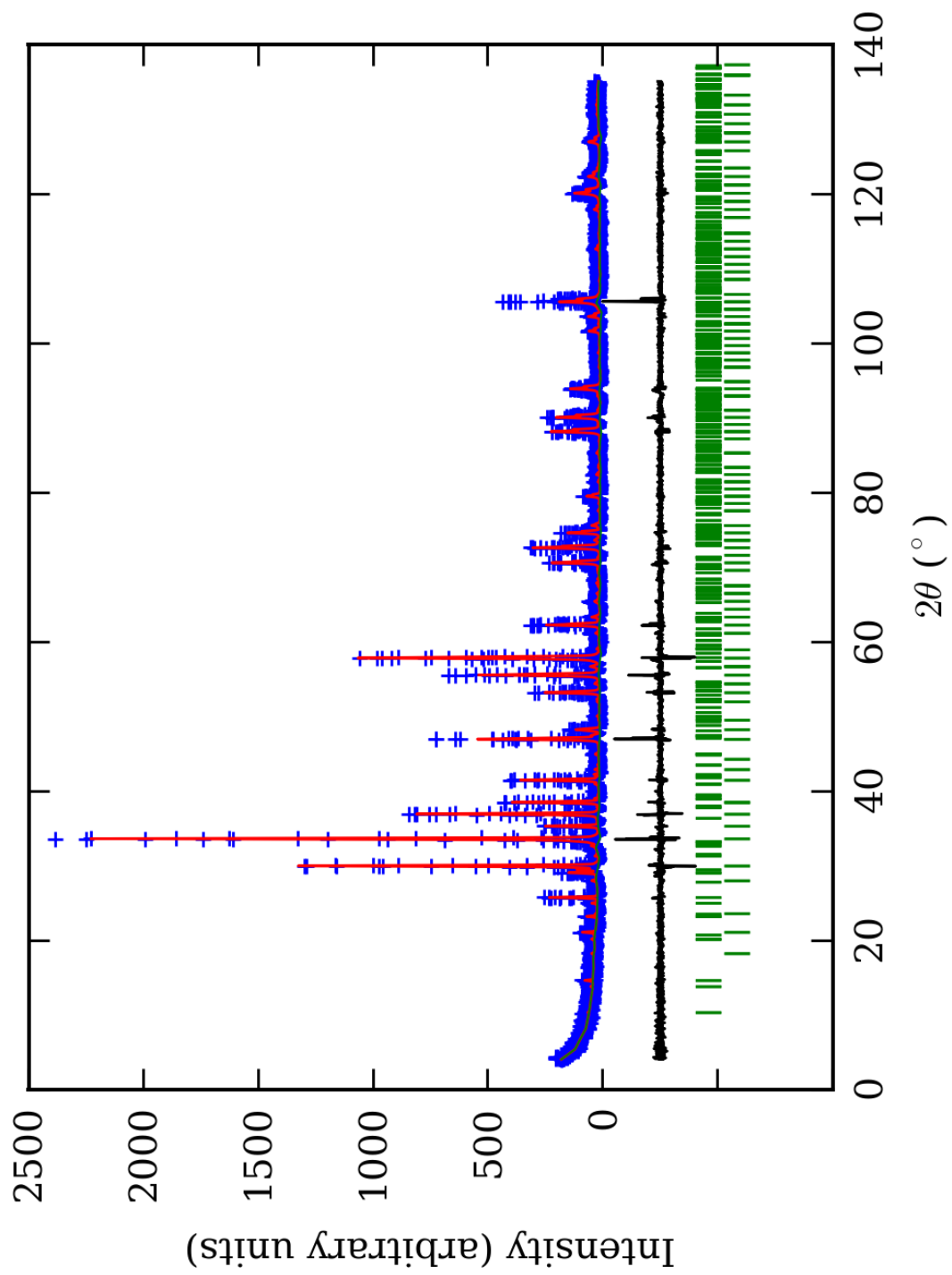


PRILOG 3. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $I\bar{4}3d$  p.g.



PRILOG 4. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I43d p.g.





PRILOG 5. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $I\bar{4}3d$  p.g.

Prilog 6. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I43d p.g.

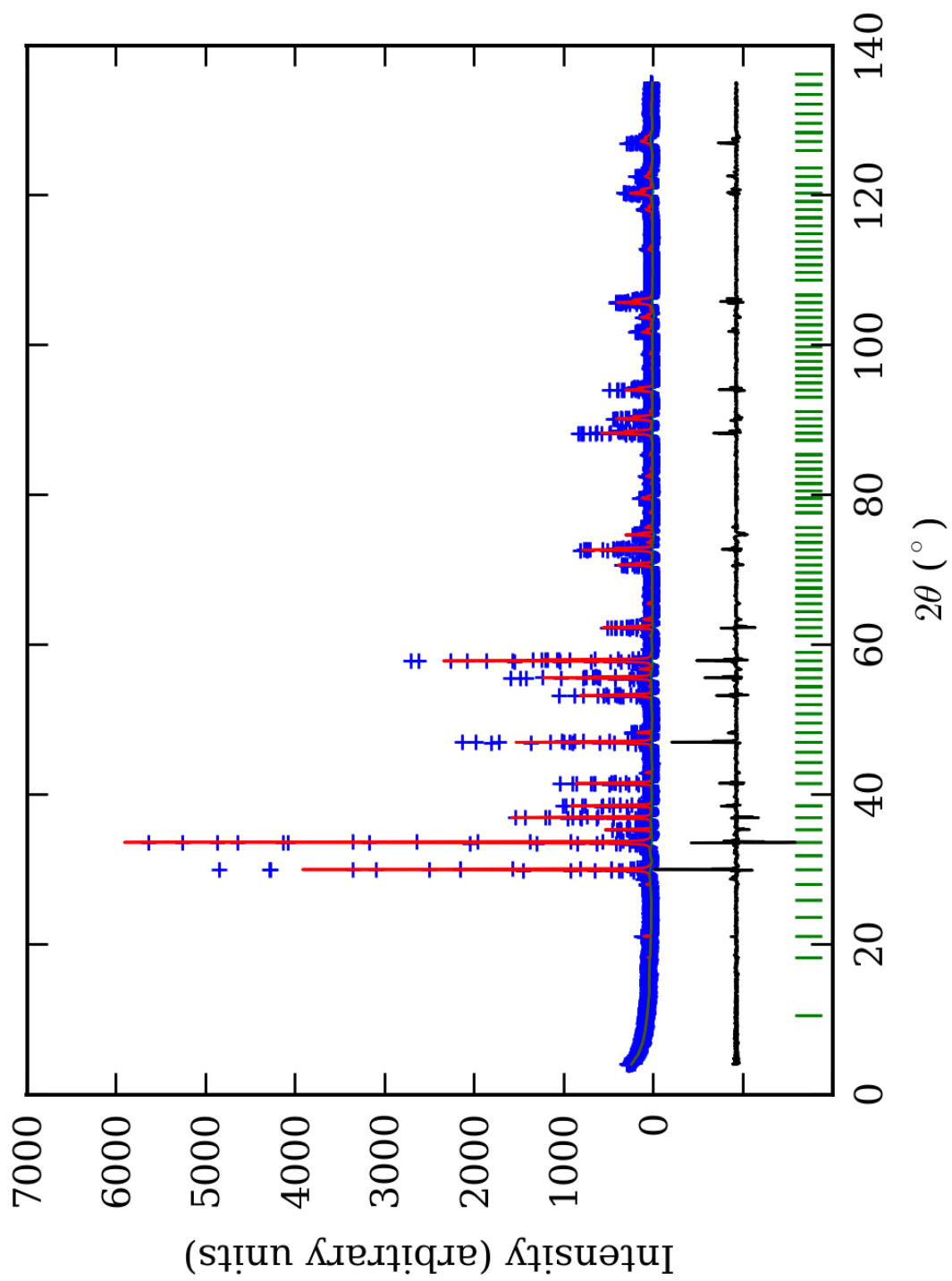
Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,3282	2,4456	2,0551	2,0519	1,7159	
Faktor skale	0,0000186(6)*	0,0000218(7)	0,0000196(5)	0,0000168(5)	0,0000101(3)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(8)	0,34(9)	0,17(6)	0,31(9)	0,12(8)	
Ukupni temp. faktor	0,2(1)	0,4(1)	0,44(8)	0,8(1)	0,4(1)	
Parametri polu-širine	U	0,034(7)	0,08(1)	0,008(6)	0,03(1)	0,024(7)
	V	-0,010(9)	-0,04(1)	0,025(8)	0,03(2)	0,00(1)
	W	0,014(2)	0,026(4)	0,014(2)	0,012(4)	0,027(3)
Preferentna orijent.	0,78(7)	0,34(6)	0,46(5)	-0,33(5)	0,38(5)	
Parametri asimetrije	As 1	0,01(5)	0,16(4)	0,05(5)	0,05(6)	0,06(4)
	As 2	0,046(8)	0,065(7)	0,048(6)	0,041(8)	0,045(6)
X parametar	0,003(2)	0,001(2)	0,005(1)	0,002(2)	0,008(1)	
Nulta tačka	0,009(6)	0,030(8)	-0,003(7)	0,02(1)	-0,042(7)	
a <sub>0</sub>	11,9189(5)	11,9320(8)	11,9342(5)	11,9342(8)	11,9287(6)	
V <sub>0</sub>	1693,2(1)	1698,8(2)	1699,7(1)	1699,7(2)	1697,4(1)	
N-P+C	6429	6429	6429	6429	6406	
R <sub>p</sub>	14,7	14,2	12,5	13,8	13,1	
R <sub>wp</sub>	19,8	19,4	16,9	19,1	17,8	
R <sub>exp</sub>	11,49	11,42	11,64	14,10	14,05	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,9	22,4	19,7	22,9	24,8	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	26,1	25,6	22,4	26,0	26,9	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,09	15,11	15,37	19,22	21,22	
Chi2	2,98	2,87	2,12	1,83	1,60	
Chi2 (Bragg contr.)	3,55	3,32	2,45	2,12	1,69	
DW-stat.	0,8640	0,8744	1,1548	1,2762	1,3884	
DW-exp.	1,9613	1,9613	1,9613	1,9613	1,9686	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,3	
R <sub>B</sub>	<b>8,91</b>	<b>8,83</b>	<b>6,52</b>	<b>8,02</b>	<b>6,81</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,48</b>	<b>7,28</b>	<b>6,80</b>	<b>6,96</b>	<b>5,94</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti.

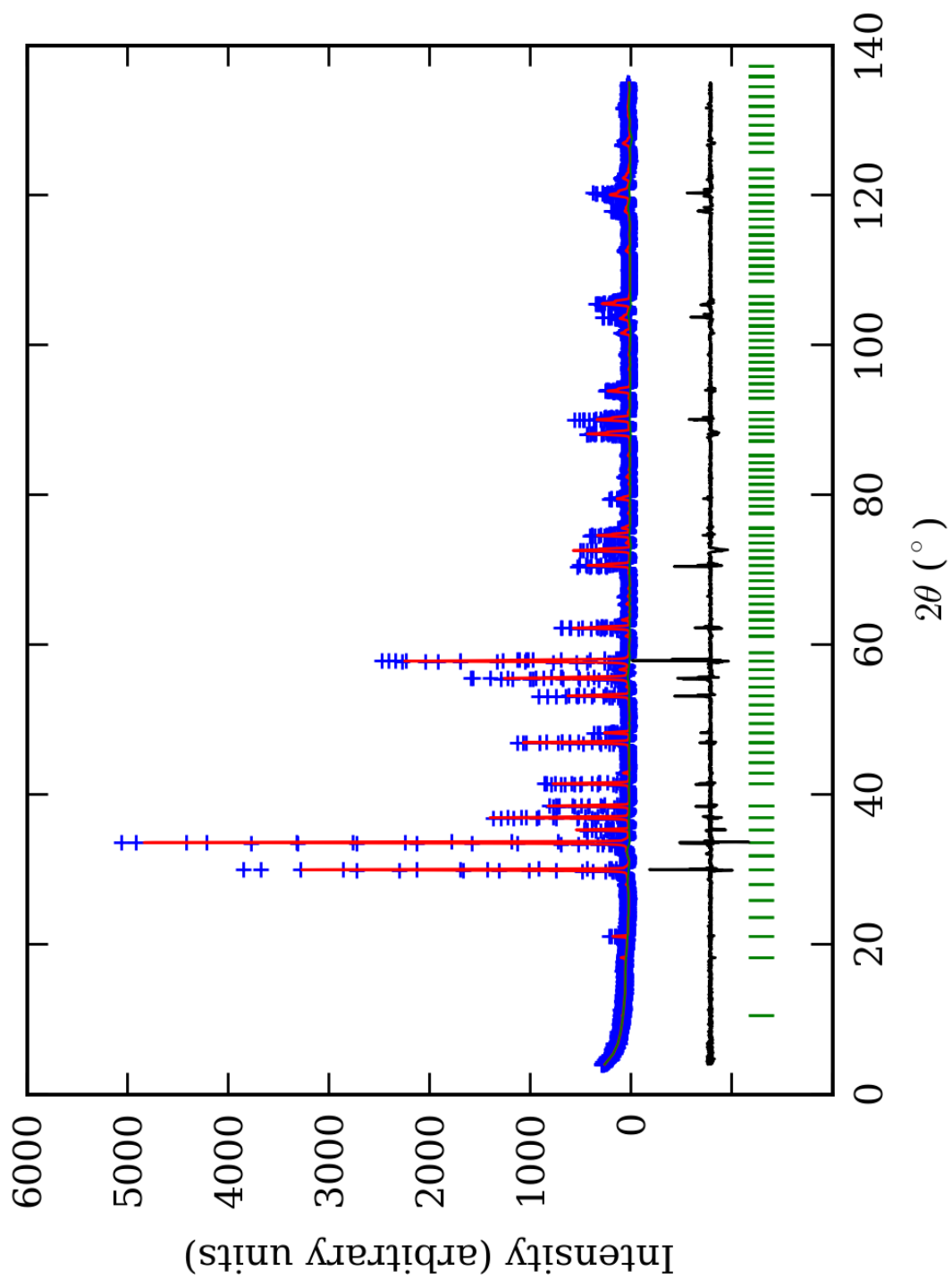
Prilog 7. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u  $I\bar{4}3d$  p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,3282		2,4456		2,0551		2,0519		1,7159		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca	x	0,122(1)*	0,41 (3)	0,122(1)	0,483 (5)	0,123(1)	0,41 (2)	0,123(2)	0,49 (2)	0,124(2)	0,49 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Mn	x	0,122(1)	0,09 (3)	/	/	0,123(1)	0,09 (2)	0,123(2)	0,01 (2)	0,124(2)	0,01 (2)
	y	0,000		/		0,000		0,000			
	z	0,250		/		0,250		0,250			
Al	x	-0,000(2)	0,283 (5)	-0,000(2)	0,215 (5)	-0,000(2)	0,283 (5)	-0,001(2)	0,196 (4)	-0,000(2)	0,195 (5)
	y	-0,000(2)		-0,000(2)		-0,000(2)		-0,001(2)			
	z	-0,000(2)		-0,000(2)		-0,000(2)		-0,001(2)			
Fe	x	-0,000(2)	0,050 (5)	-0,000(2)	0,118 (5)	-0,000(2)	0,050 (5)	-0,001(2)	0,137 (4)	-0,000(2)	0,139 (5)
	y	-0,000(2)		-0,000(2)		-0,000(2)		-0,001(2)			
	z	-0,000(2)		-0,000(2)		-0,000(2)		-0,001(2)			
Si1	x	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Si2	x	0,875	0,250 (0)	0,875	0,250 (0)	0,875	0,250 (0)	0,875	0,250 (0)	0,875	0,250 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
O1	x	0,035(2)	1,000 (0)	0,034(3)	1,000 (0)	0,034(2)	1,000 (0)	0,036(3)	1,000 (0)	0,038(3)	1,000 (0)
	y	0,048(2)		0,045(4)		0,046(2)		0,049(4)		0,053(3)	
	z	0,665(2)		0,654(3)		0,668(2)		0,657(3)		0,657(3)	
O2	x	0,794(3)	1,000 (0)	0,796(4)	1,000 (0)	0,792(2)	1,000 (0)	0,797(4)	1,000 (0)	0,794(3)	1,000 (0)
	y	0,296(2)		0,284(2)		0,294(2)		0,290(2)		0,290(3)	
	z	0,594(2)		0,599(3)		0,590(2)		0,601(3)		0,600(3)	
Ca (%)	82(6)		97(1)		82(4)		98(4)		98(4)		
Al (%)	85(2)		64(2)		85(2)		59(1)		58(2)		

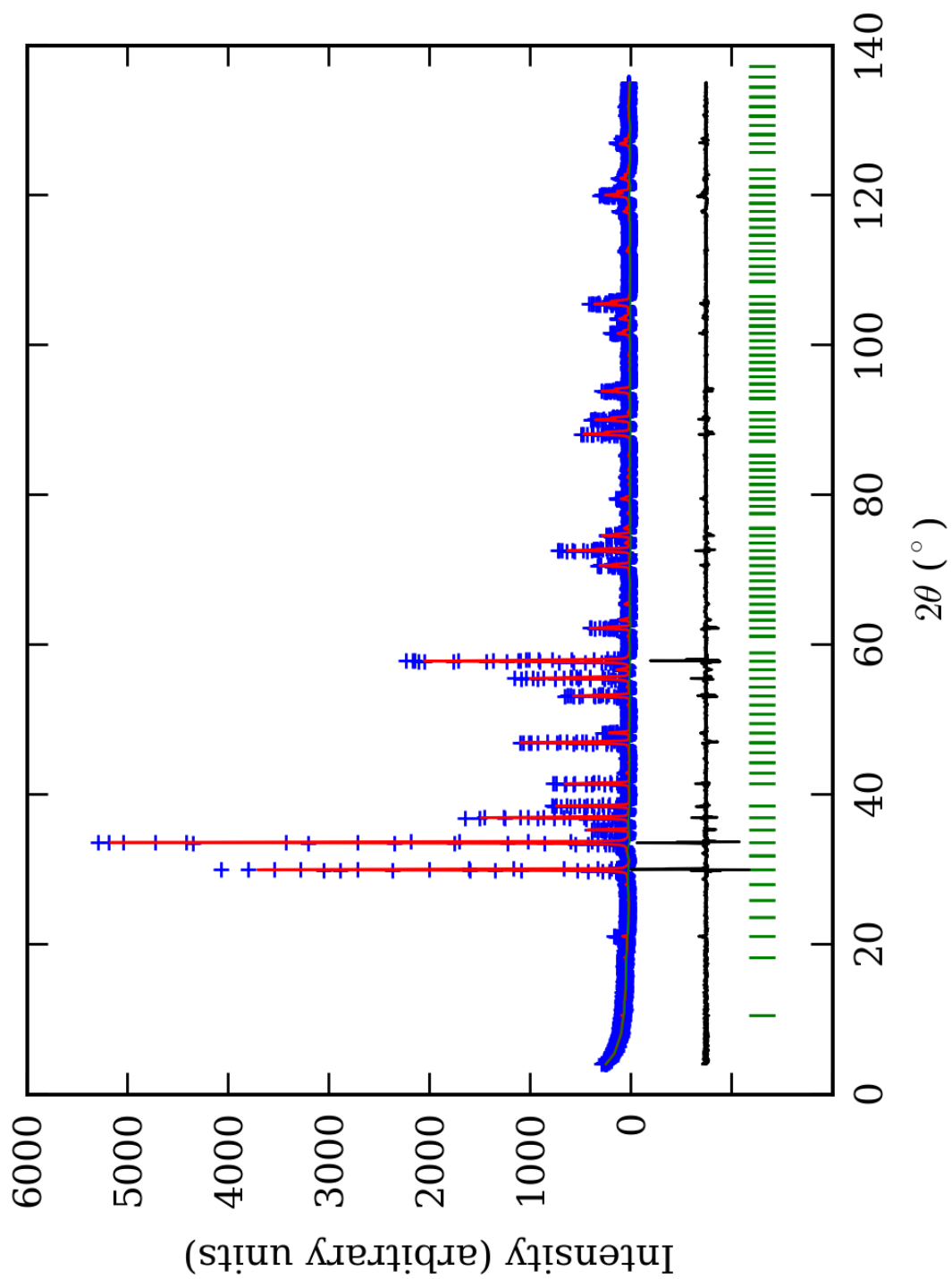
\*Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



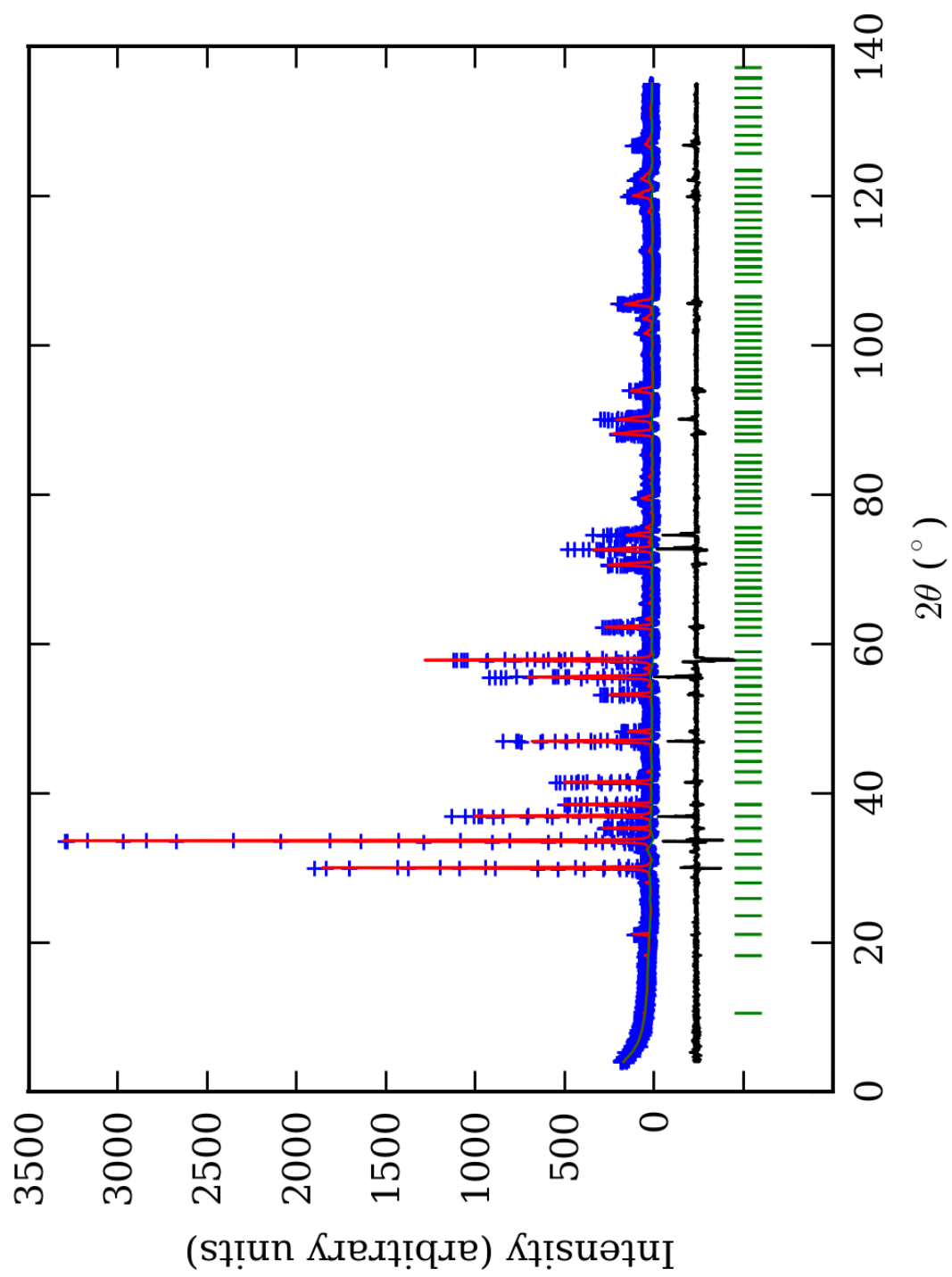
PRILOG 8. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $I_{4132}$  p.g.



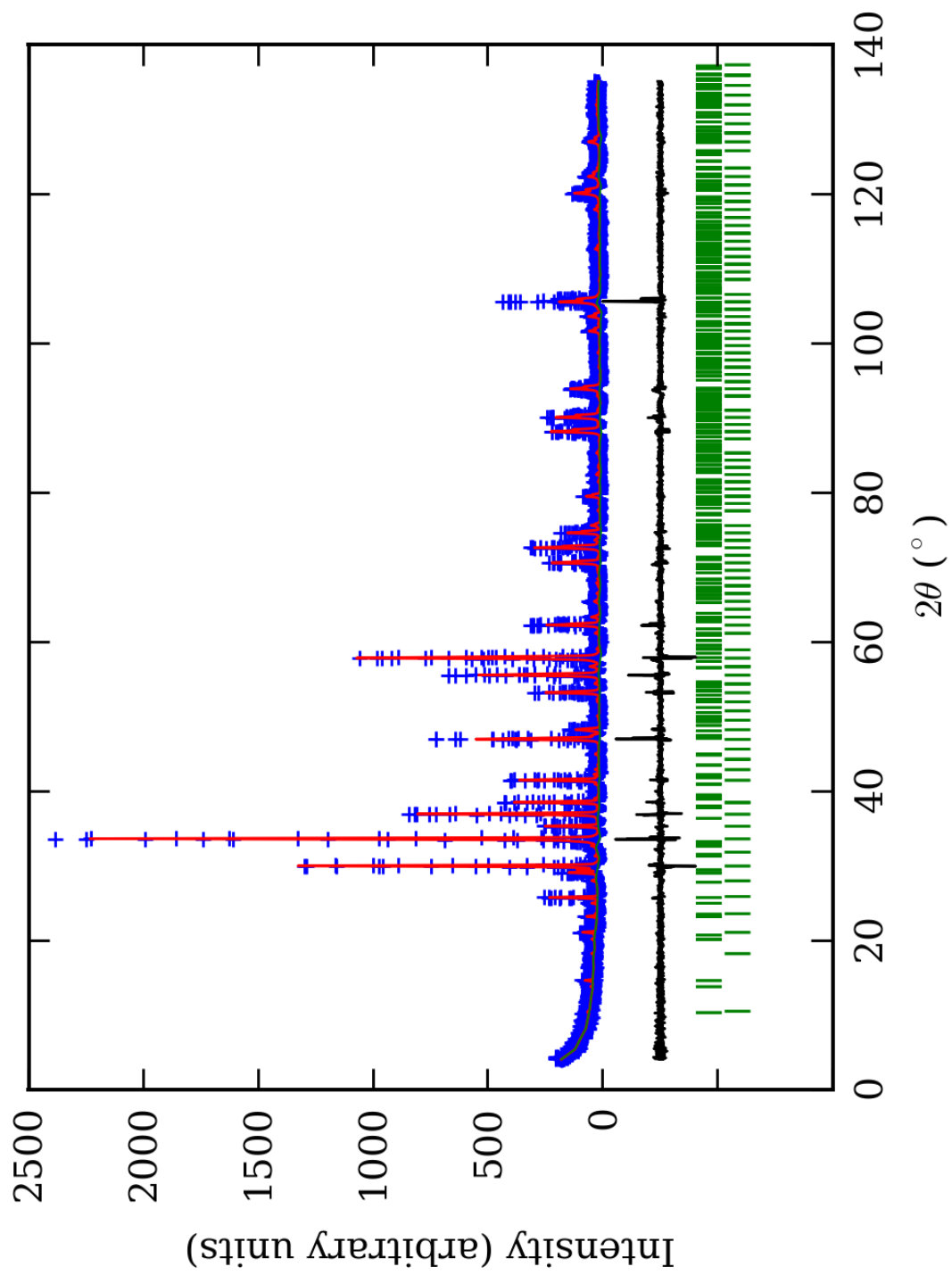
PRILOG 9. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u I4<sub>1</sub>32 p.g.



PRILOG 10. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $I4_132$  p.g.



PRILOG 11. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I4<sub>1</sub>32 p.g.



PRILOG 12. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u I4<sub>1</sub>32 p.g.



PRILOG 13. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I4<sub>1</sub>32 p.g.

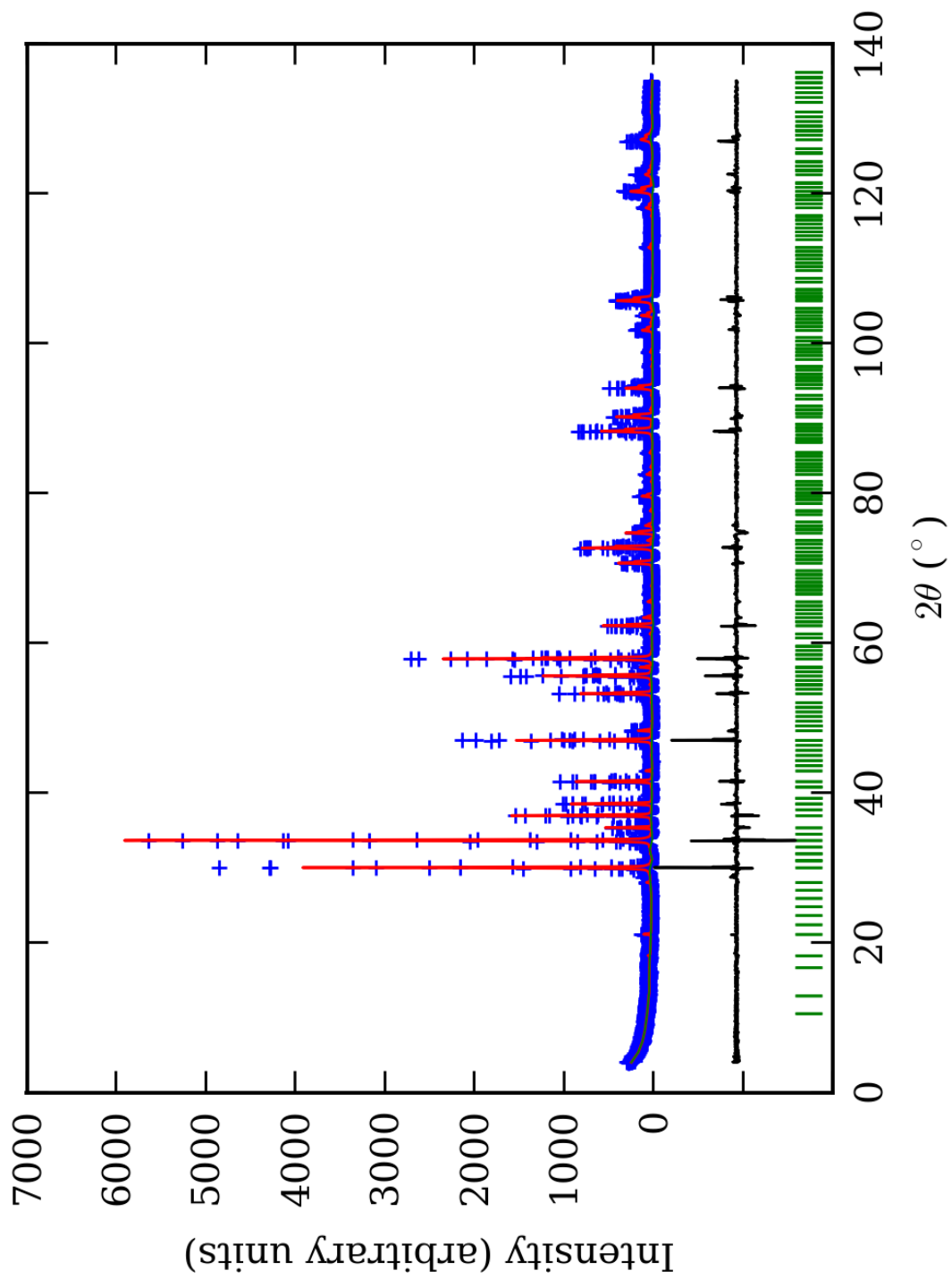
Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,3030	2,4282	2,0207	2,0387	1,7202	
Faktor skale	0,0000183(5)*	0,0000218(7)	0,0000194(4)	0,0000167(5)	0,0000101(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(8)	0,34(9)	0,16(6)	0,30(8)	0,11(8)	
Ukupni temp. faktor	0,1(1)	0,4(1)	0,41(8)	0,8(1)	0,3(1)	
Parametri polu-širine	U	0,034(7)	0,08(1)	0,009(6)	0,03(1)	0,023(7)
	V	-0,010(8)	-0,04(1)	0,024(8)	0,03(2)	-0,00(1)
	W	0,014(2)	0,026(4)	0,014(2)	0,012(4)	0,026(3)
Preferentna orijent.	0,80(7)	0,34(6)	0,46(5)	-0,33(5)	0,39(5)	
Parametri asimetrije	As 1	0,01(5)	0,16(4)	0,05(4)	0,05(6)	0,07(4)
	As 2	0,047(7)	0,065(7)	0,048(6)	0,041(8)	0,046(6)
X parametar	0,004(2)	0,001(2)	0,005(1)	0,002(2)	0,008(1)	
Nulta tačka	0,009(6)	0,029(8)	-0,003(7)	0,02(1)	-0,041(7)	
a <sub>0</sub>	11,9189(5)	11,9320(7)	11,9343(5)	11,9341(8)	11,9288(6)	
V <sub>0</sub>	1693,2(1)	1698,8(2)	1699,8(1)	1699,7(2)	1697,4(1)	
N-P+C	6428	6428	6428	6428	6405	
R <sub>p</sub>	14,8	14,2	12,4	13,8	13,2	
R <sub>wp</sub>	19,9	19,3	16,9	19,1	17,8	
R <sub>exp</sub>	11,49	11,42	11,64	14,10	14,05	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,9	22,3	19,5	22,7	24,8	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	26,1	25,6	22,2	26,0	26,8	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,07	15,09	15,34	19,19	21,18	
Chi2	2,99	2,87	2,10	1,83	1,60	
Chi2 (Bragg contr.)	3,37	3,15	2,32	2,02	1,69	
DW-stat.	0,8604	0,8750	1,1603	1,2774	1,3890	
DW-exp.	1,9616	1,9616	1,9616	1,9616	1,9689	
GoF	1,7	1,7	1,5	1,4	1,3	
R <sub>B</sub>	<b>8,98</b>	<b>8,78</b>	<b>6,66</b>	<b>7,91</b>	<b>6,83</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,79</b>	<b>7,41</b>	<b>7,45</b>	<b>7,11</b>	<b>6,14</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

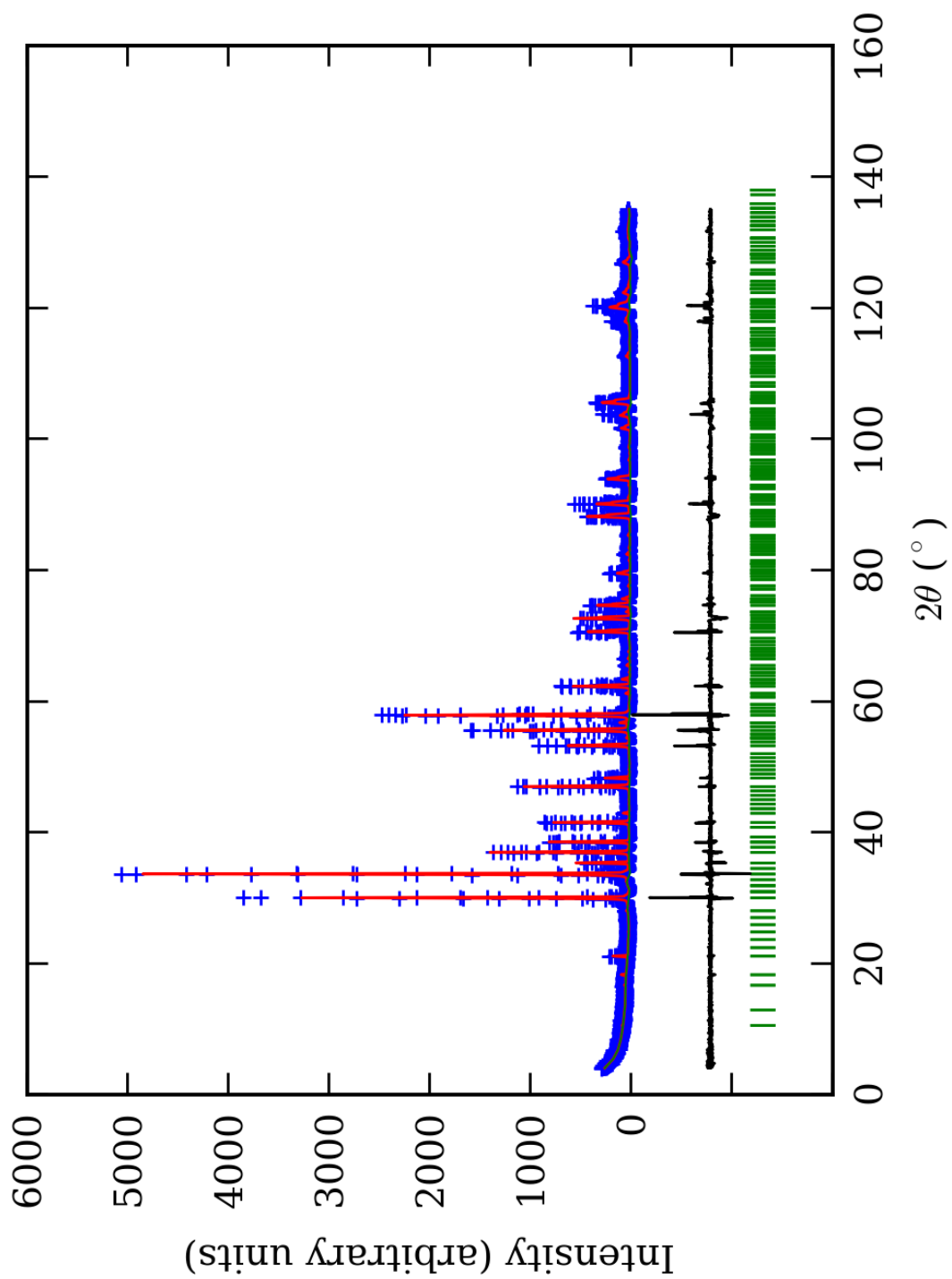
PRILOG 14. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I4<sub>132</sub> p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,3030		2,4282		2,0207		2,0387		1,7202		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
<b>Ca1</b>	x	0,125	0,20 (4)*	0,24 (1)	0,125	0,23 (2)	0,125	0,26 (3)	0,125	0,25 (4)	
	y	0,000			0,000		0,000		0,000		
	z	0,250			0,250		0,250		0,250		
<b>Mn1</b>	x	0,125	0,05 (4)	/	0,125	0,02 (2)	0,125	-0,01 (3)	0,125	0,00 (4)	
	y	0,000			/		0,000		0,000		
	z	0,250			/		0,250		0,250		
<b>Ca2</b>	x	0,625	0,20 (4)	0,25 (1)	0,625	0,18 (2)	0,625	0,23 (4)	0,625	0,24 (4)	
	y	0,000			0,000		0,000		0,000		
	z	0,250			0,250		0,250		0,250		
<b>Mn2</b>	x	0,625	0,05 (4)	/	0,625	0,07 (2)	0,625	0,02 (4)	0,625	0,01 (4)	
	y	0,000			/		0,000		0,000		
	z	0,250			/		0,250		0,250		
<b>Al</b>	x	-0,001(2)	0,281 (5)	0,215 (5)	-0,001(1)	0,235 (4)	-0,002(1)	0,193 (6)	-0,000(2)	0,194 (5)	
	y	-0,001(2)			0,001(2)		-0,001(1)		-0,002(1)		-0,000(2)
	z	-0,001(2)			0,001(2)		-0,001(1)		-0,002(1)		-0,000(2)
<b>Fe</b>	x	-0,001(2)	0,053 (5)	0,118 (5)	-0,001(1)	0,099 (4)	-0,002(1)	0,140 (6)	-0,000(2)	0,139 (5)	
	y	-0,001(2)			0,001(2)		-0,001(1)		-0,002(1)		-0,000(2)
	z	-0,001(2)			0,001(2)		-0,001(1)		-0,002(1)		-0,000(2)
<b>Si</b>	x	0,380(2)	0,500 (0)	0,500 (0)	0,374(2)	0,500 (0)	0,378(2)	0,500 (0)	0,380(2)	0,500 (0)	
	y	0,000			0,000		0,000		0,000		
	z	0,250			0,250		0,250		0,250		
<b>O1</b>	x	0,043(3)	1,000 (0)	1,000 (0)	0,045(1)	1,000 (0)	0,041(2)	1,000 (0)	0,039(3)	1,000 (0)	
	y	0,045(2)			0,046(3)		0,043(1)		0,049(3)		0,051(3)
	z	0,660(3)			0,652(3)		0,667(1)		0,656(2)		0,651(3)
<b>O2</b>	x	0,962(3)	1,000 (0)	1,000 (0)	0,968(1)	1,000 (0)	0,964(2)	1,000 (0)	0,961(3)	1,000 (0)	
	y	0,952(2)			0,954(3)		0,955(1)		0,954(3)		0,954(3)
	z	0,339(2)			0,346(3)		0,339(1)		0,349(2)		0,345(3)
<b>Ca1 (%)</b>	80(16)	80	96(4)	98	92(8)	82	104(12)	98	100(16)	98	
<b>Ca2 (%)</b>	80(16)	(16)	100(4)	(4)	72(8)	(8)	92(16)	(14)	96(16)	(16)	
<b>Al (%)</b>	84(2)		64(2)		70(1)		58(2)		58(2)		

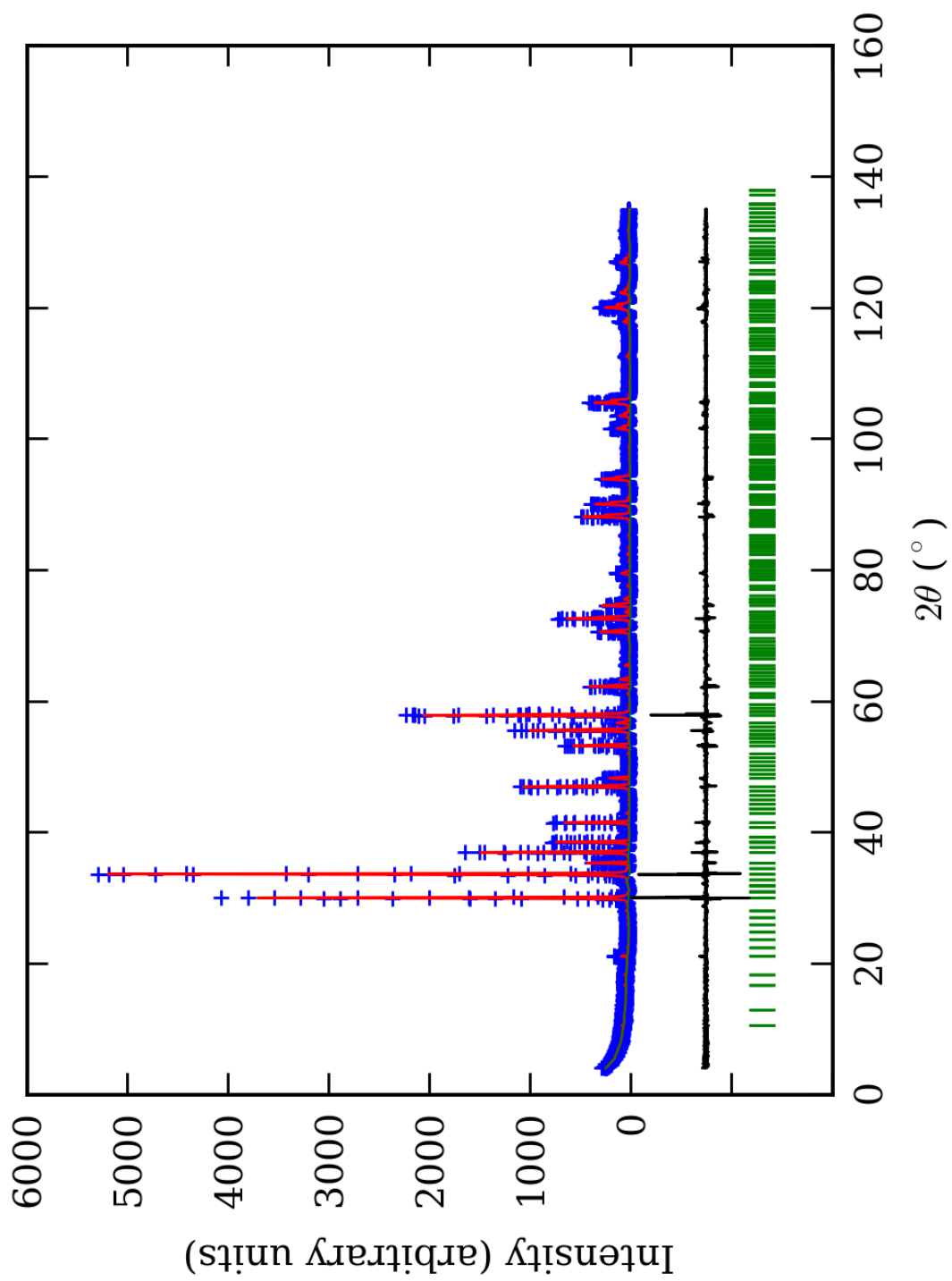
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



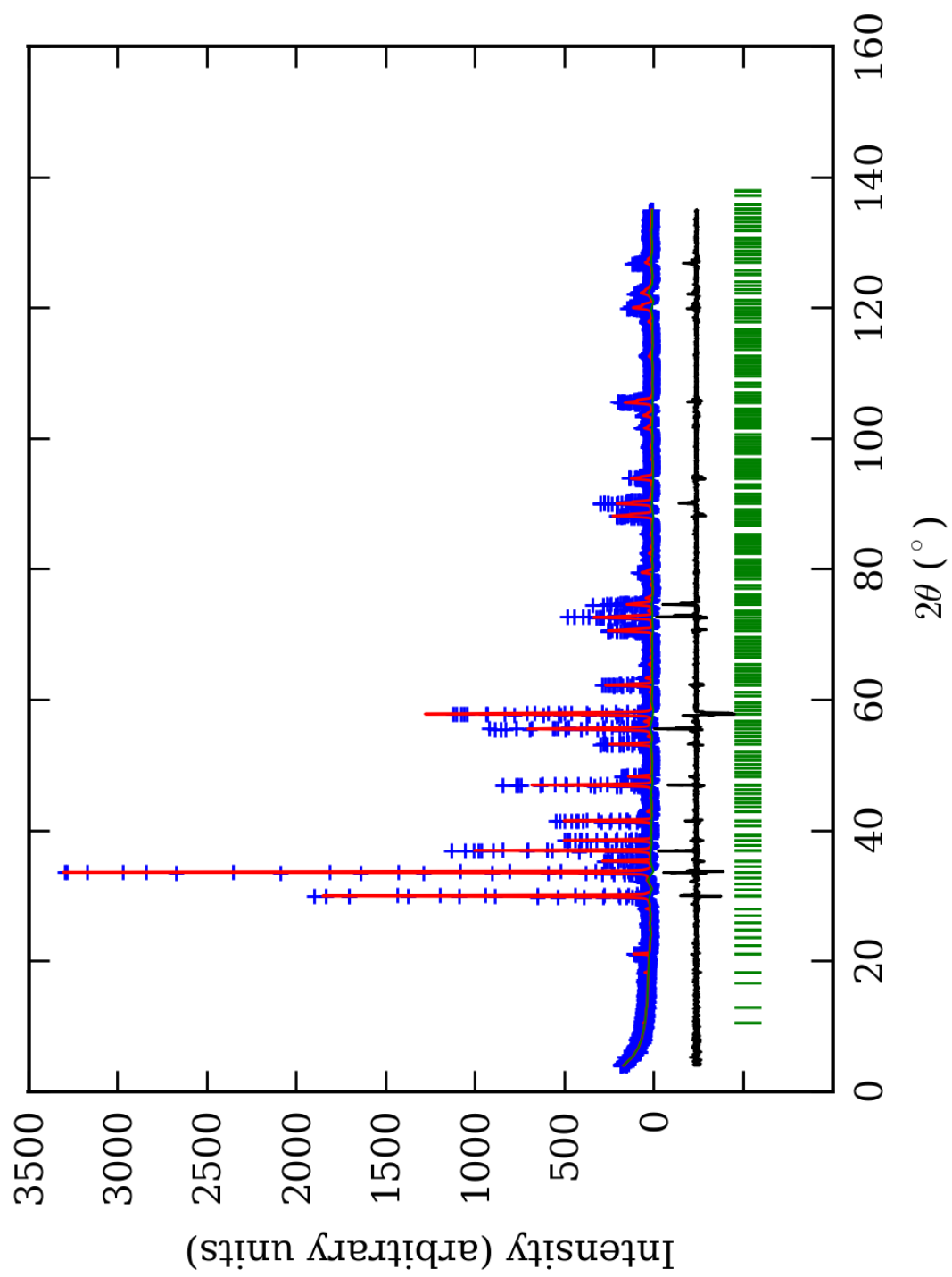
PRILOG 15. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u P4<sub>1</sub>32 p.g.



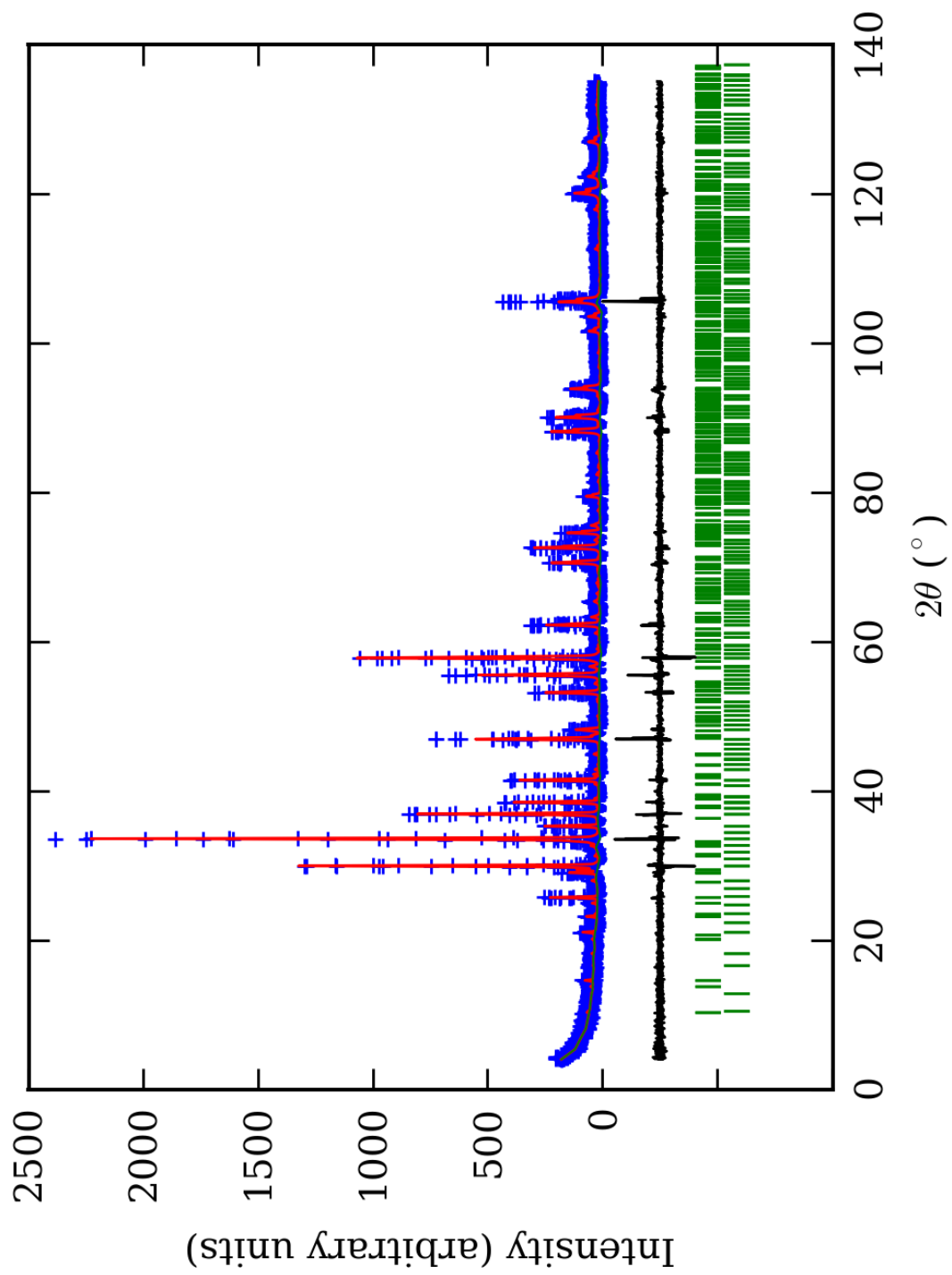
PRILOG 16. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u P4<sub>i</sub>32 p.g.



PRILOG 17. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u P4<sub>1</sub>32 p.g.



PRILOG 18. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u P4<sub>132</sub> p.g.



PRILOG 19. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u P4<sub>132</sub> p.g.

PRILOG 20. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u P4<sub>132</sub> p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,2841	2,3597	1,9642	2,0255	1,7013	
Faktor skale	0,0000184(5)*	0,0000219(7)	0,0000197(4)	0,0000167(5)	0,0000101(3)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(8)	0,35(8)	0,19(6)	0,31(8)	0,11(8)	
Ukupni temp. faktor	0,1(1)	0,4(1)	0,42(8)	0,8(1)	0,3(1)	
Parametri polu-širine	U	0,034(7)	0,08(1)	0,010(5)	0,04(1)	0,023(7)
	V	-0,011(8)	-0,04(1)	0,023(8)	0,03(2)	-0,00(1)
	W	0,014(2)	0,026(4)	0,015(2)	0,013(4)	0,026(3)
Preferentna orijent.	0,79(7)	0,33(6)	0,47(5)	-0,34(5)	0,40(5)	
Parametri asimetrije	As 1	0,01(5)	0,16(4)	0,05(4)	0,05(6)	0,07(4)
	As 2	0,046(7)	0,065(6)	0,047(6)	0,041(7)	0,046(6)
X parametar	0,004(2)	0,001(2)	0,005(1)	0,002(2)	0,008(1)	
Nulta tačka	0,009(6)	0,030(7)	-0,003(6)	0,02(1)	-0,041(7)	
a <sub>0</sub>	11,9189(5)	11,9320(7)	11,9343(5)	11,9342(8)	11,9287(6)	
V <sub>0</sub>	1693,2(1)	1698,8(2)	1699,8(1)	1699,7(2)	1697,4(1)	
N-P+C	6416	6416	6416	6416	6393	
R <sub>p</sub>	14,8	14,2	12,3	13,8	13,1	
R <sub>wp</sub>	19,8	19,3	16,8	19,1	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,48	11,41	11,62	14,08	14,03	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,8	22,2	19,3	22,5	24,4	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	26,0	25,5	22,1	25,9	26,6	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,03	15,04	15,29	19,14	21,06	
Chi2	2,99	2,86	2,08	1,83	1,60	
Chi2 (Bragg contr.)	3,21	3,03	2,22	1,95	1,66	
DW-stat.	0,8624	0,8779	1,1752	1,2794	1,3951	
DW-exp.	1,9654	1,9654	1,9654	1,9654	1,9728	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>9,13</b>	<b>8,93</b>	<b>6,66</b>	<b>8,02</b>	<b>6,91</b>	
R <sub>F</sub>	<b>8,76</b>	<b>8,33</b>	<b>8,41</b>	<b>7,97</b>	<b>6,81</b>	

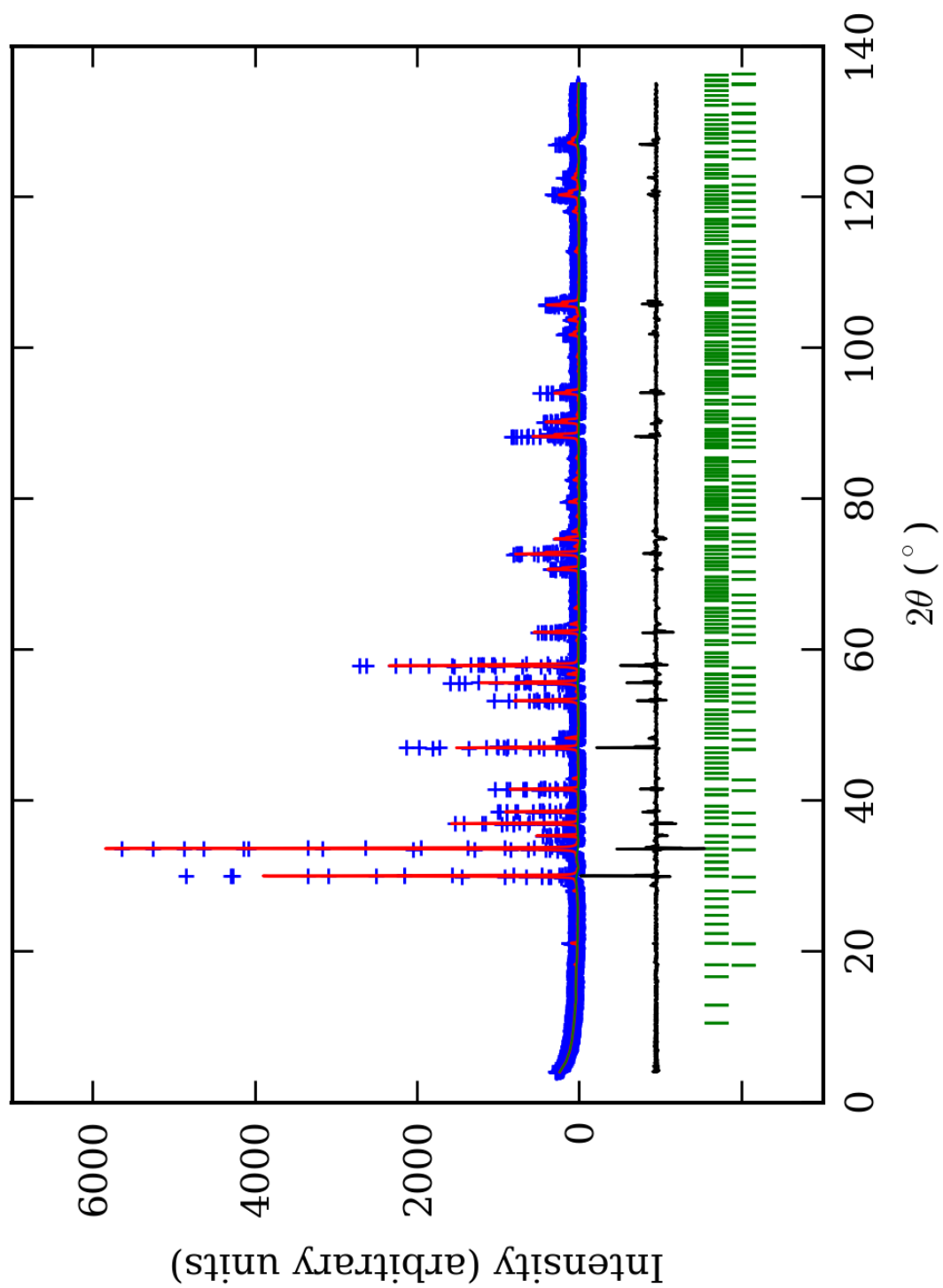
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti



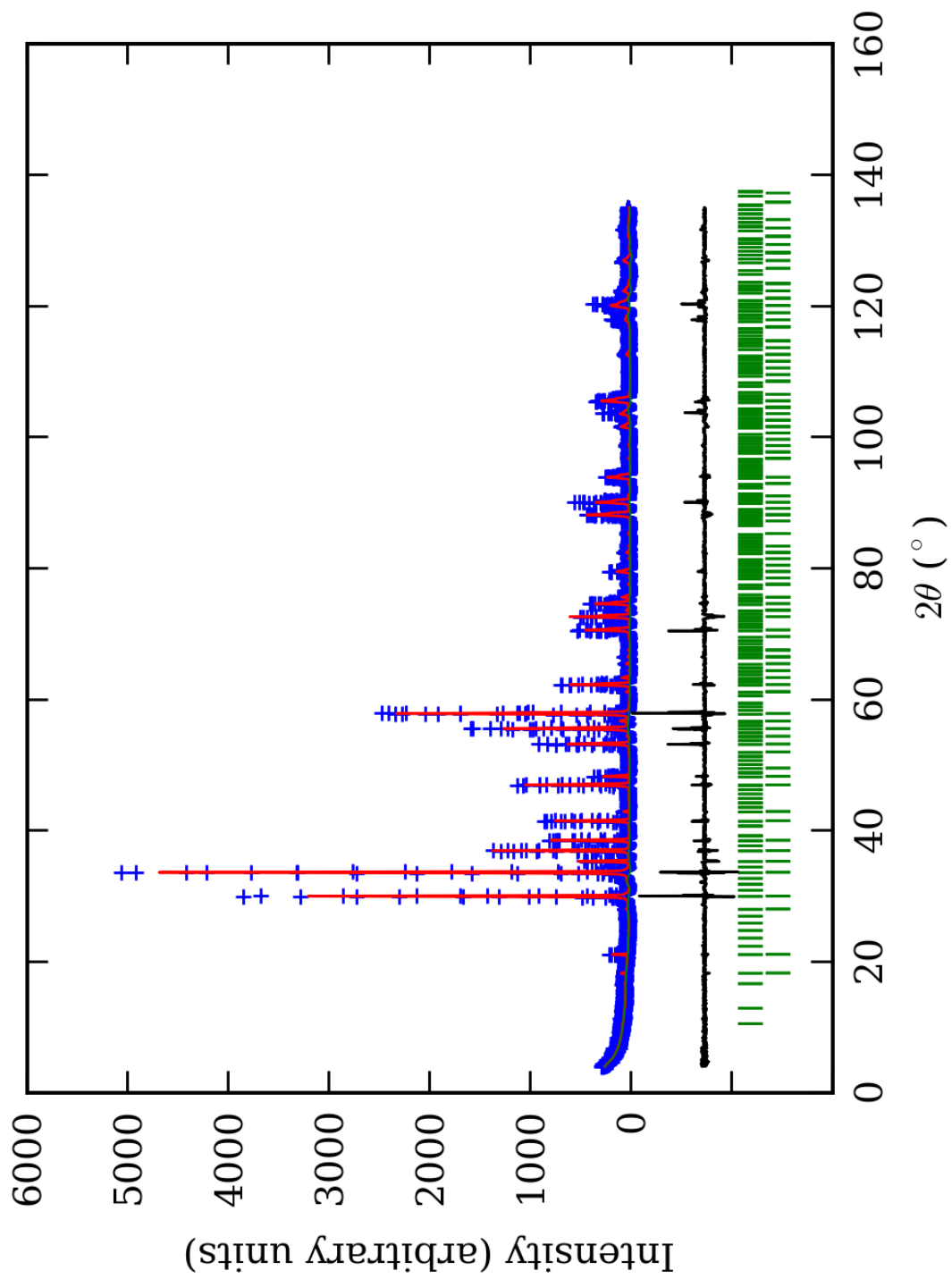
PRILOG 21. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u P4<sub>132</sub> p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,2841		2,3597		1,9642		2,0255		1,7013	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	-0,001(2)*	0,40 (9)	-0,000(3)	0,49 (2)	-0,001(1)	0,37 (4)	-0,001(3)	0,46 (7)	-0,001(3)	0,49 (7)
	y	0,249(2)		0,250(3)		0,249(1)		0,249(3)			
	z	0,125		0,125		0,125		0,125			
Mn1	x	-0,001(2)	0,10 (9)	/	/	-0,001(1)	0,13 (4)	-0,001(3)	0,04 (7)	-0,001(3)	0,01 (7)
	y	0,249(2)		/		0,249(1)		0,249(3)			
	z	0,125		/		0,125		0,125			
Ca2	x	0,500(2)	0,41 (8)	0,500(3)	0,47 (2)	0,500(2)	0,46 (4)	0,499(4)	0,52 (7)	0,498(2)	0,50 (7)
	y	0,750(2)		0,750(3)		0,750(2)		0,749(4)		0,748(2)	
	z	0,125		0,125		0,125		0,125		0,125	
Mn2	x	0,500(2)	0,09 (8)	/	/	0,500(2)	0,04 (4)	0,499(4)	-0,02 (7)	0,498(2)	0,00 (7)
	y	0,750(2)		/		0,750(2)		0,749(4)		0,748(2)	
	z	0,125		/		0,125		0,125		0,125	
Al1	x	0,001(3)	0,29 (2)	-0,001(3)	0,23 (3)	0,001(2)	0,24 (3)	0,003(3)	0,22 (2)	0,003(3)	0,22 (2)
	y	0,001(3)		-0,001(3)		0,001(2)		0,003(3)		0,000(3)	
	z	0,001(3)		-0,001(3)		0,001(2)		0,003(3)		0,000(3)	
Fe1	x	0,001(3)	0,04 (2)	-0,001(3)	0,10 (3)	0,001(2)	0,09 (3)	0,003(3)	0,11 (2)	0,000(3)	0,11 (2)
	y	0,001(3)		-0,001(3)		0,001(2)		0,003(3)		0,000(3)	
	z	0,001(3)		-0,001(3)		0,001(2)		0,003(3)		0,000(3)	
Al2	x	0,501(3)	0,27 (2)	0,499(3)	0,20 (3)	0,502(1)	0,23 (3)	0,502(3)	0,17 (2)	0,500(3)	0,18 (2)
	y	0,501(3)		0,499(3)		0,502(1)		0,502(3)		0,500(3)	
	z	0,501(3)		0,499(3)		0,502(1)		0,502(3)		0,500(3)	
Fe2	x	0,501(3)	0,06 (2)	0,499(3)	0,13 (3)	0,502(1)	0,10 (3)	0,502(3)	0,16 (2)	0,500(3)	0,15 (2)
	y	0,501(3)		0,499(3)		0,502(1)		0,502(3)		0,500(3)	
	z	0,501(3)		0,499(3)		0,502(1)		0,502(3)		0,500(3)	
Si	x	-0,000(3)	1,000 (0)	0,000(4)	1,000 (0)	-0,001(2)	1,000 (0)	-0,002(5)	1,000 (0)	-0,003(3)	1,000 (0)
	y	0,249(4)		0,252(4)		0,250(2)		0,250(4)		0,254(3)	
	z	0,369(2)		0,370(2)		0,376(2)		0,372(3)		0,370(2)	
O1	x	0,042(6)	1,000 (0)	0,039(5)	1,000 (0)	0,039(2)	1,000 (0)	0,038(7)	1,000 (0)	0,040(6)	1,000 (0)
	y	0,047(5)		0,043(5)		0,043(2)		0,046(6)		0,043(4)	
	z	0,661(5)		0,658(4)		0,659(3)		0,654(6)		0,656(5)	
O2	x	0,954(5)	1,000 (0)	0,968(6)	1,000 (0)	0,950(3)	1,000 (0)	0,959(6)	1,000 (0)	0,960(4)	1,000 (0)
	y	0,958(5)		0,954(6)		0,959(3)		0,950(7)		0,943(4)	
	z	0,342(5)		0,350(6)		0,331(3)		0,343(6)		0,346(5)	
O3	x	0,537(6)	1,000 (0)	0,531(5)	1,000 (0)	0,525(2)	1,000 (0)	0,533(6)	1,000 (0)	0,538(5)	1,000 (0)
	y	0,548(5)		0,548(5)		0,546(3)		0,547(6)		0,548(4)	
	z	0,160(5)		0,150(4)		0,164(3)		0,148(5)		0,155(6)	
O4	x	0,464(5)	1,000 (0)	0,466(5)	1,000 (0)	0,460(3)	1,000 (0)	0,459(6)	1,000 (0)	0,461(4)	1,000 (0)
	y	0,452(5)		0,455(7)		0,453(4)		0,451(6)		0,452(4)	
	z	0,837(5)		0,847(6)		0,834(3)		0,845(6)		0,852(5)	
Ca1 (%)		80(18)	81	98(4)	96	74(8)	83	92(14)	98	98(14)	99
Ca2 (%)		82(16)	(17)	94(4)	(4)	92(8)	(8)	104(14)	(14)	100(14)	(14)
Al1 (%)		87(6)	84	69(9)	64	72(6)	70	66(4)	58	66(6)	60
Al2 (%)		81(6)	(6)	60(9)	(9)	69(6)	(6)	51(4)	(4)	54(6)	(6)

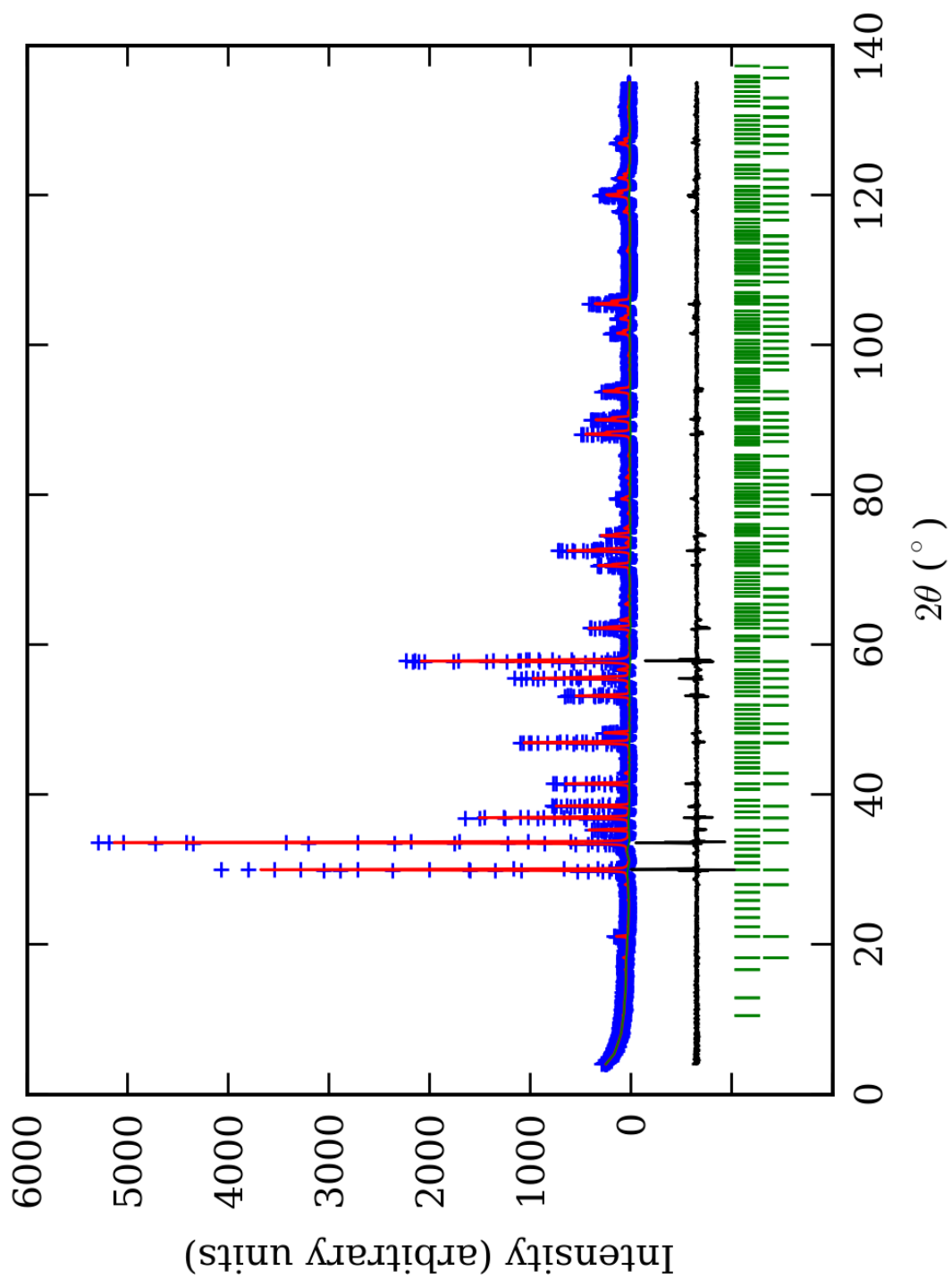
\*Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



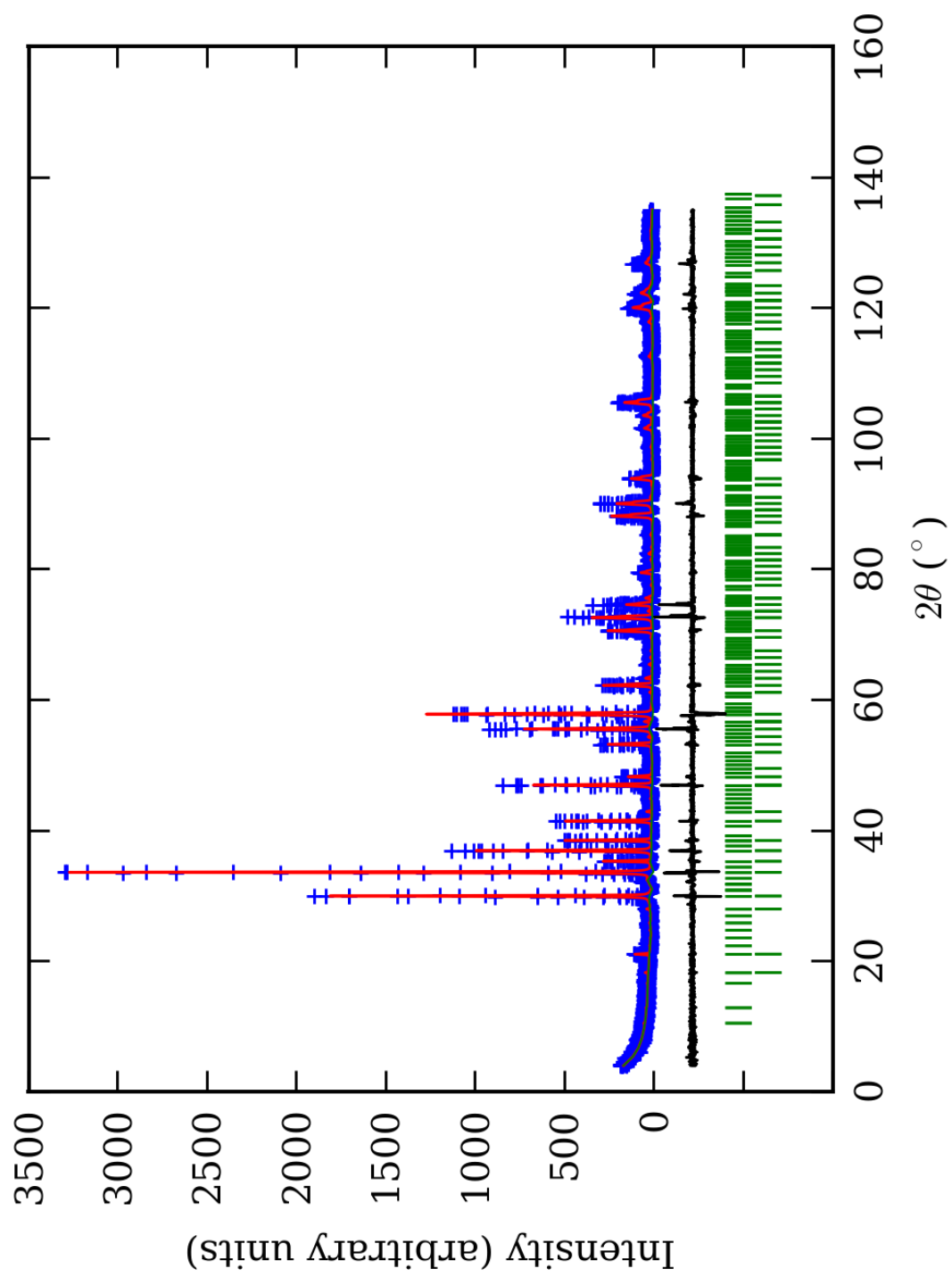
PRILOG 22. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $P4_132$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.



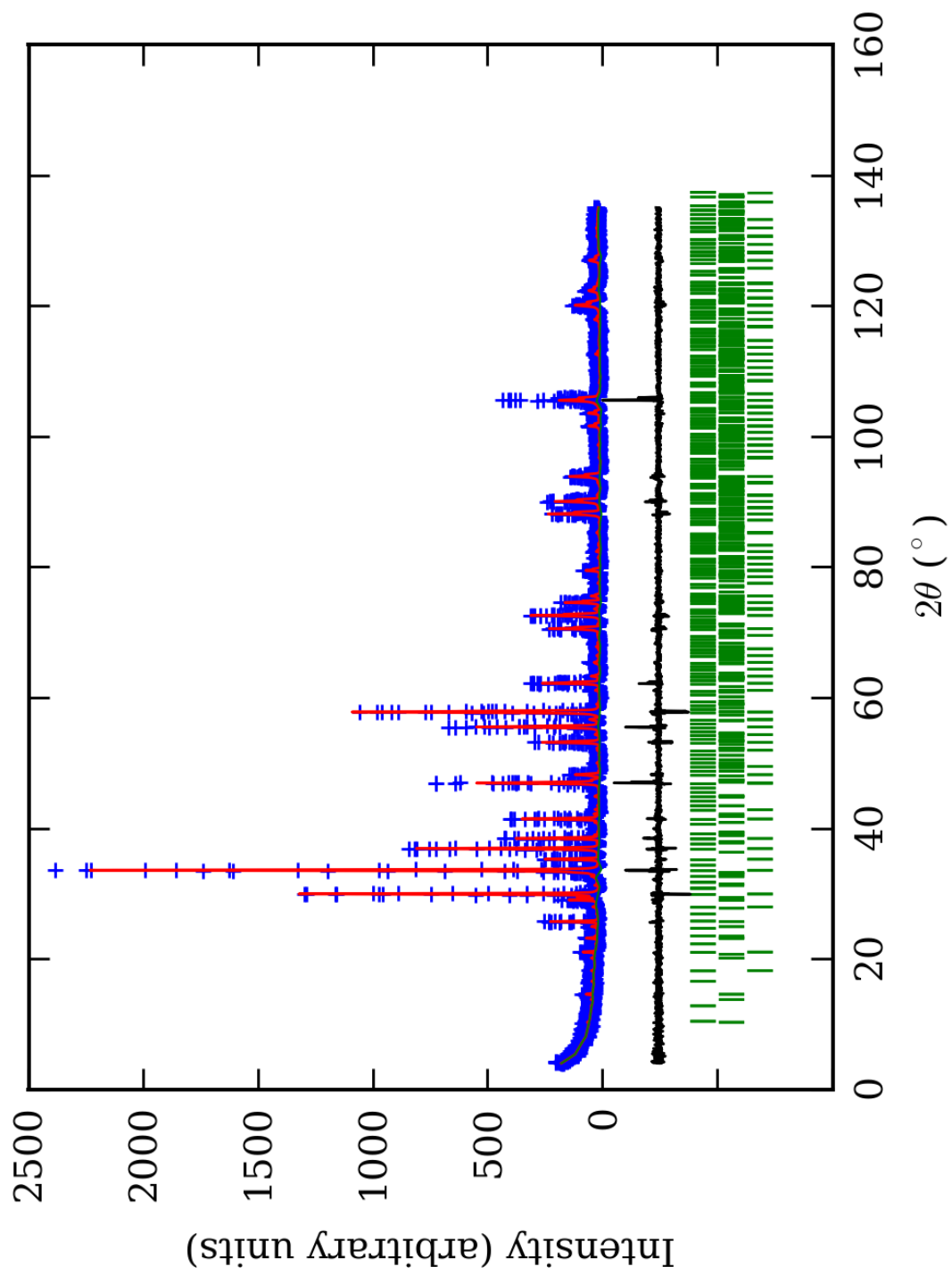
PRILOG 23. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $P4_132$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.



PRILOG 24. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $P4_132$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.



PRILOG 25. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u P4<sub>1</sub>32 i Ia  $\bar{3}d$  p.g.



PRILOG 26. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u P4<sub>1</sub>32 i Ia  $\bar{3}d$  p.g.

PRILOG 27. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u P4<sub>132</sub> i Ia 3d p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Scor		2,2865	2,3930	1,8690	2,0103	1,6057
Izr. sadržaj faza (%)	Ia 3d	3(1)*	72(7)	48(6)	79(7)	75(4)
	P4 <sub>132</sub>	97(5)	28(6)	52(5)	21(4)	18(2)
Faktor skale	Ia 3d	0,0000006(2)	0,000016(1)	0,0000093(7)	0,0000129(7)	0,0000082(3)
	P4 <sub>132</sub>	0,0000177(6)	0,000006(1)	0,0000105(9)	0,0000036(7)	0,0000021(3)
Eta (p-v) ili m(p-vii)		0,25(9)	0,5(1)	0,03(5)	0,3(1)	0,31(9)
Ukupni temp. faktor		0,1(1)	0,5(2)	0,40(6)	0,7(1)	0,4(1)
Parametri polu-širine	U	0,037(6)	0,10(1)	-0,003(3)	0,06(1)	0,046(6)
	V	-0,013(8)	-0,08(1)	0,014(6)	-0,01(1)	-0,035(9)
	W	0,014(2)	0,038(4)	0,018(2)	0,021(4)	0,029(3)
Preferentna orijent.		0,79(7)	0,35(6)	0,43(5)	-0,36(5)	0,42(5)
Parametri asimetrije	As 1	-0,02(6)	0,25(2)	0,08(4)	0,11(5)	0,07(4)
	As 2	0,034(9)	0,041(8)	0,053(5)	0,029(8)	0,026(6)
X parametar	Ia 3d	0,017(7)	-0,006(3)	0,010(1)	-0,002(2)	0,001(2)
	P4 <sub>132</sub>	0,003(2)	0,008(3)	0,008(1)	0,015(3)	0,013(2)
Nulta tačka		0,009(6)	0,059(6)	0,002(6)	0,015(3)	-0,023(6)
a <sub>0</sub>	Ia 3d	11,970(4)	11,9326(7)	11,9396(6)	11,9343(8)	11,9294(5)
	P4 <sub>132</sub>	11,9189(5)	11,952(2)	11,9307(5)	11,954(2)	11,954(1)
V <sub>0</sub>	Ia 3d	1714(1)	1699,0(2)	1702,0(1)	1699,8(2)	1697,7(1)
	P4 <sub>132</sub>	1693,2(1)	1707,5(2)	1698,2(1)	1708,4(5)	1708,2(3)
N-P+C		6408	6408	6408	6408	6385
R <sub>p</sub>		14,7	13,9	11,8	13,4	12,7
R <sub>wp</sub>		19,7	19,1	16,1	18,7	17,3
R <sub>exp</sub>		11,47	11,41	11,62	14,07	14,03
Konvencionalni R <sub>p</sub>		22,6	22,0	18,5	21,8	24,0
Konvencionalni R <sub>wp</sub>		25,8	25,3	21,3	25,4	26,3
Konvencionalni R <sub>exp</sub>		15,01	15,16	15,30	19,11	21,24
Chi <sup>2</sup>		2,95	2,79	1,93	1,76	1,53
Chi <sup>2</sup> (Bragg contr.)		3,16	2,94	2,05	1,87	1,59
DW-stat.		0,8745	0,9021	1,2596	1,3276	1,4522
DW-exp.		1,9680	1,9680	1,9680	1,9680	1,9753
GoF		1,7	1,7	1,4	1,3	1,2
R <sub>B</sub>	Ia 3d	<b>10,8</b>	<b>9,42</b>	<b>5,22</b>	<b>8,34</b>	<b>6,92</b>
	P4 <sub>132</sub>	<b>9,38</b>	<b>8,12</b>	<b>5,07</b>	<b>6,89</b>	<b>5,77</b>
R <sub>F</sub>	Ia 3d	<b>9,20</b>	<b>9,45</b>	<b>6,67</b>	<b>7,66</b>	<b>7,28</b>
	P4 <sub>132</sub>	<b>8,78</b>	<b>10,3</b>	<b>8,90</b>	<b>9,37</b>	<b>8,48</b>
Srednja vrednost R <sub>B</sub>		<b>9,24</b>	<b>9,43</b>	<b>6,01</b>	<b>8,16</b>	<b>7,82<sup>1</sup></b>
Srednja vrednost R <sub>F</sub>		<b>8,80</b>	<b>8,67</b>	<b>7,17</b>	<b>7,54</b>	<b>6,90<sup>1</sup></b>

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

<sup>1</sup>-Sa skapolitom

PRILOG 28. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,2865		2,3930		1,8690		2,0103		1,6057		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca	x	0,125	0,2 (3)*	0,125	0,244 (5)	0,125	0,17 (2)	0,125	0,27 (2)	0,125	0,25 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Mn	x	0,125	0,0 (3)	0,125	/	0,125	0,08 (2)	0,125	-0,02 (2)	0,125	-0,00 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Al	x	0,000	0,24 (5)	0,000	0,097 (5)	0,000	0,156 (6)	0,000	0,111 (4)	0,000	0,098 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Fe	x	0,000	-0,07 (5)	0,000	0,070 (5)	0,000	0,010 (6)	0,000	0,056 (4)	0,000	0,069 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Si	x	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
O	x	0,029(9)	1,000 (0)	0,0337(8)	1,000 (0)	0,046(1)	1,000 (0)	0,0364(7)	1,000 (0)	0,0382(6)	1,000 (0)
	y	0,04(1)		0,0448(8)		0,046(2)		0,0470(8)		0,0469(6)	
	z	0,662(8)		0,6537(8)		0,660(1)		0,6533(9)		0,6531(6)	
Ca (%)	80(120)		98(2)		68(8)		108(8)		100(4)		
Al (%)	144(30)		58(3)		94(4)		67(2)		59(2)		

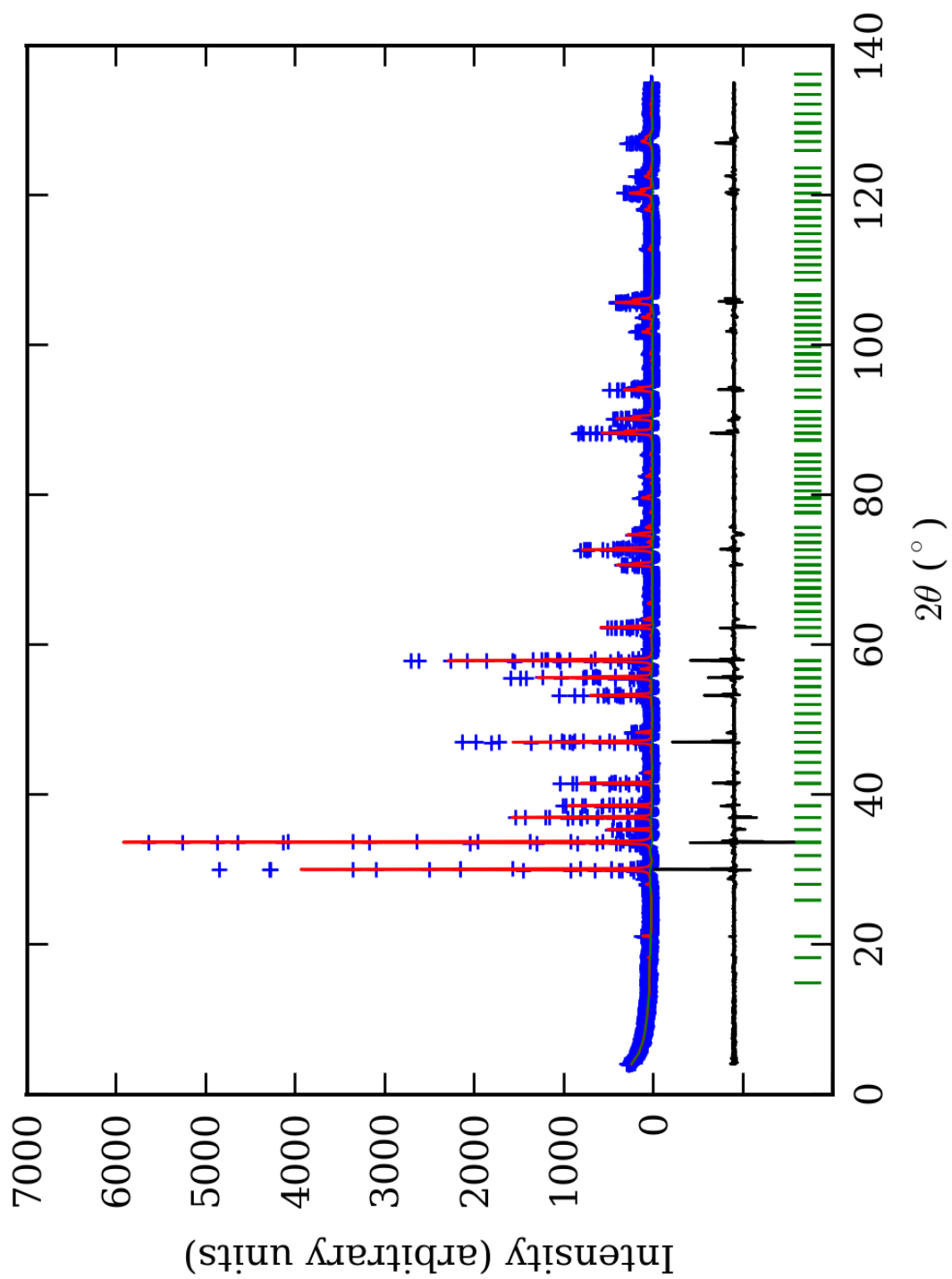
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



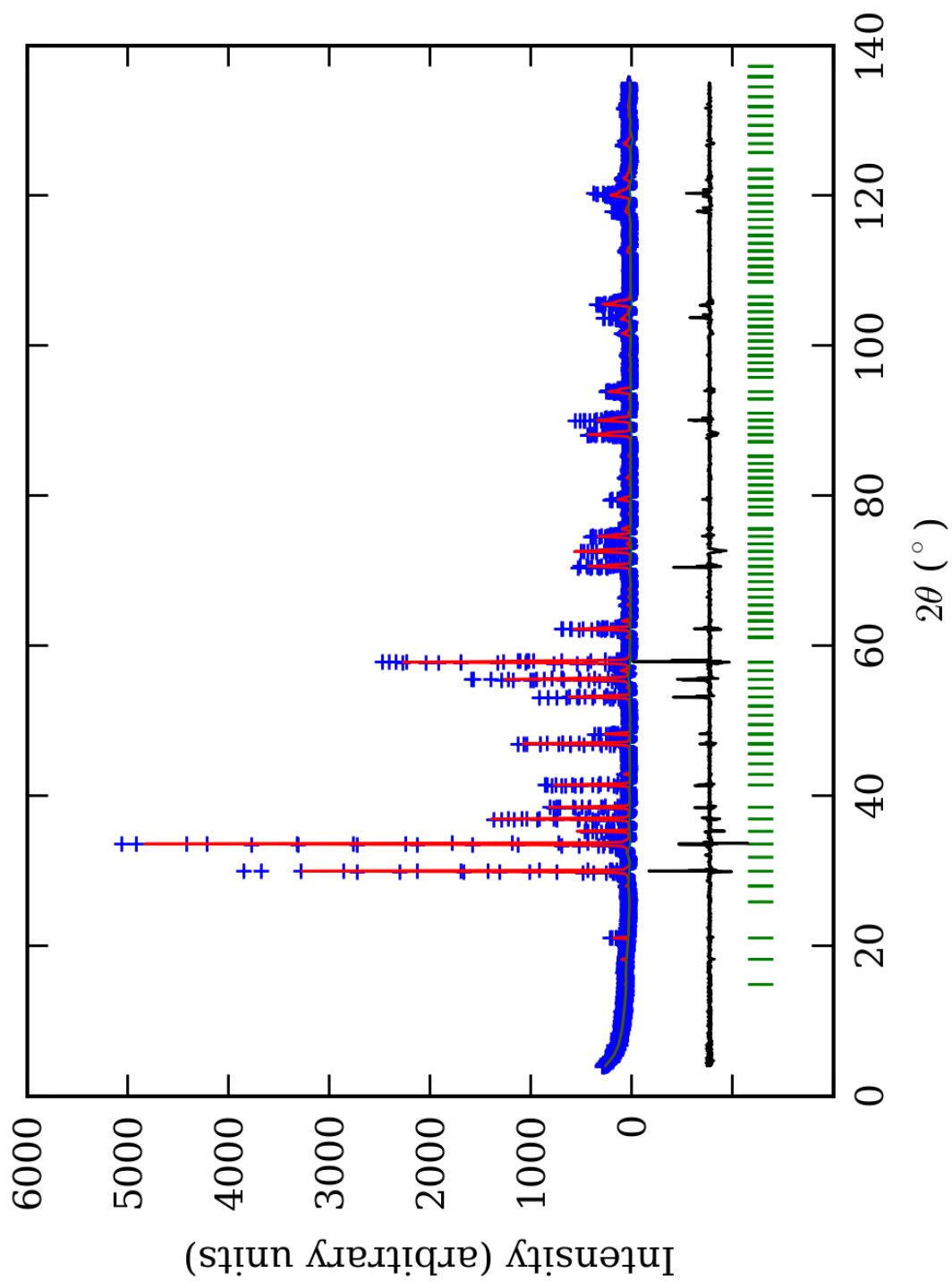
PRILOG 29. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u P4<sub>132</sub> p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,2865		2,3930		1,8690		2,0103		1,6057	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	-0,001(2)*	0,40 (8)	0,001(5)	0,48 (5)	0,000(3)	0,60 (8)	-0,002(7)	0,5 (2)	-0,003(7)	0,5 (2)
	y	0,249(2)		0,251(5)		0,250(3)		0,252(7)		0,247(7)	
	z	0,125		0,125		0,125		0,125		0,125	
Mn1	x	-0,001(2)	0,10 (8)	/	/	0,000(3)	-0,10 (8)	-0,001(3)	0,0 (2)	-0,003(7)	0,0 (2)
	y	0,249(2)		/		0,250(3)		0,249(3)		0,247(7)	
	z	0,125		/		0,125		0,125		0,125	
Ca2	x	0,500(2)	0,42 (7)	0,510(4)	0,44 (5)	0,500(2)	0,49 (7)	0,504(5)	0,2 (2)	0,497(6)	0,5 (2)
	y	0,750(2)		0,760(4)		0,750(2)		0,754(5)		0,747(6)	
	z	0,125		0,125		0,125		0,125		0,125	
Mn2	x	0,500(2)	0,08 (7)	/	/	0,500(2)	0,01 (7)	0,504(5)	0,3 (2)	0,497(6)	0,0 (2)
	y	0,750(2)		/		0,750(2)		0,754(5)		0,747(6)	
	z	0,125		/		0,125		0,125		0,125	
Al1	x	0,000(3)	0,29 (2)	-0,002(6)	0,29 (6)	-0,002(2)	0,14 (4)	-0,006(4)	0,02 (6)	0,002(9)	0,28 (5)
	y	0,000(3)		-0,002(6)		-0,002(2)		-0,006(4)		0,002(9)	
	z	0,000(3)		-0,002(6)		-0,002(2)		-0,006(4)		0,002(9)	
Fe1	x	0,000(3)	0,04 (2)	-0,002(6)	0,04 (6)	-0,002(2)	0,19 (4)	-0,006(4)	0,31 (6)	0,002(9)	0,05 (5)
	y	0,000(3)		-0,002(6)		-0,002(2)		-0,006(4)		0,002(9)	
	z	0,000(3)		-0,002(6)		-0,002(2)		-0,006(4)		0,002(9)	
Al2	x	0,501(3)	0,27 (3)	0,500(7)	0,30 (6)	0,498(2)	0,16 (5)	0,495(6)	0,14 (6)	0,501(6)	0,16 (5)
	y	0,501(3)		0,500(7)		0,498(2)		0,495(6)		0,501(6)	
	z	0,501(3)		0,500(7)		0,498(2)		0,495(6)		0,501(6)	
Fe2	x	0,501(3)	0,06 (3)	0,500(7)	0,03 (6)	0,498(2)	0,18 (5)	0,495(6)	0,19 (6)	0,501(6)	0,16 (5)
	y	0,501(3)		0,500(7)		0,498(2)		0,495(6)		0,501(6)	
	z	0,501(3)		0,500(7)		0,498(2)		0,495(6)		0,501(6)	
Si	x	-0,001(3)	1,000 (0)	0,004(6)	1,000 (0)	-0,001(3)	1,000 (0)	0,004(7)	1,000 (0)	-0,001(7)	1,000 (0)
	y	0,248(3)		0,252(6)		0,250(4)		0,25(1)		0,252(8)	
	z	0,369(1)		0,365(4)		0,374(3)		0,382(6)		0,365(5)	
O1	x	0,042(6)	1,000 (0)	0,03(1)	1,000 (0)	0,042(4)	1,000 (0)	0,05(1)	1,000 (0)	0,06(1)	1,000 (0)
	y	0,047(5)		0,05(1)		0,036(4)		0,06(1)		0,05(1)	
	z	0,661(5)		0,655(9)		0,673(5)		0,66(1)		0,67(1)	
O2	x	0,954(5)	1,000 (0)	0,96(1)	1,000 (0)	0,968(4)	1,000 (0)	0,961(8)	1,000 (0)	0,95(1)	1,000 (0)
	y	0,957(5)		0,95(1)		0,962(5)		0,958(8)		0,93(1)	
	z	0,343(5)		0,354(9)		0,342(6)		0,36(1)		0,34(1)	
O3	x	0,537(6)	1,000 (0)	0,533(9)	1,000 (0)	0,538(4)	1,000 (0)	0,57(1)	1,000 (0)	0,53(1)	1,000 (0)
	y	0,548(5)		0,55(1)		0,547(4)		0,56(1)		0,55(1)	
	z	0,160(5)		0,142(9)		0,165(5)		0,17(1)		0,15(1)	
O4	x	0,464(5)	1,000 (0)	0,46(1)	1,000 (0)	0,482(4)	1,000 (0)	0,466(8)	1,000 (0)	0,44(1)	1,000 (0)
	y	0,452(5)		0,45(1)		0,453(5)		0,447(9)		0,440(9)	
	z	0,838(5)		0,849(9)		0,833(5)		0,85(1)		0,84(2)	
Ca1 (%)		80(16)	82	96(10)	92	120(16)	109	100(40)	70	100(40)	100
Ca2 (%)		84(14)	(15)	88(10)	(10)	98(14)	(15)	40(40)	(40)	100(40)	(40)
Al1 (%)		87(6)	84	87(18)	88	42(12)	45	6(18)	25	84(15)	66
Al2 (%)		81(9)	(8)	90(18)	(18)	48(12)	(12)	42(18)	(18)	48(15)	(15)

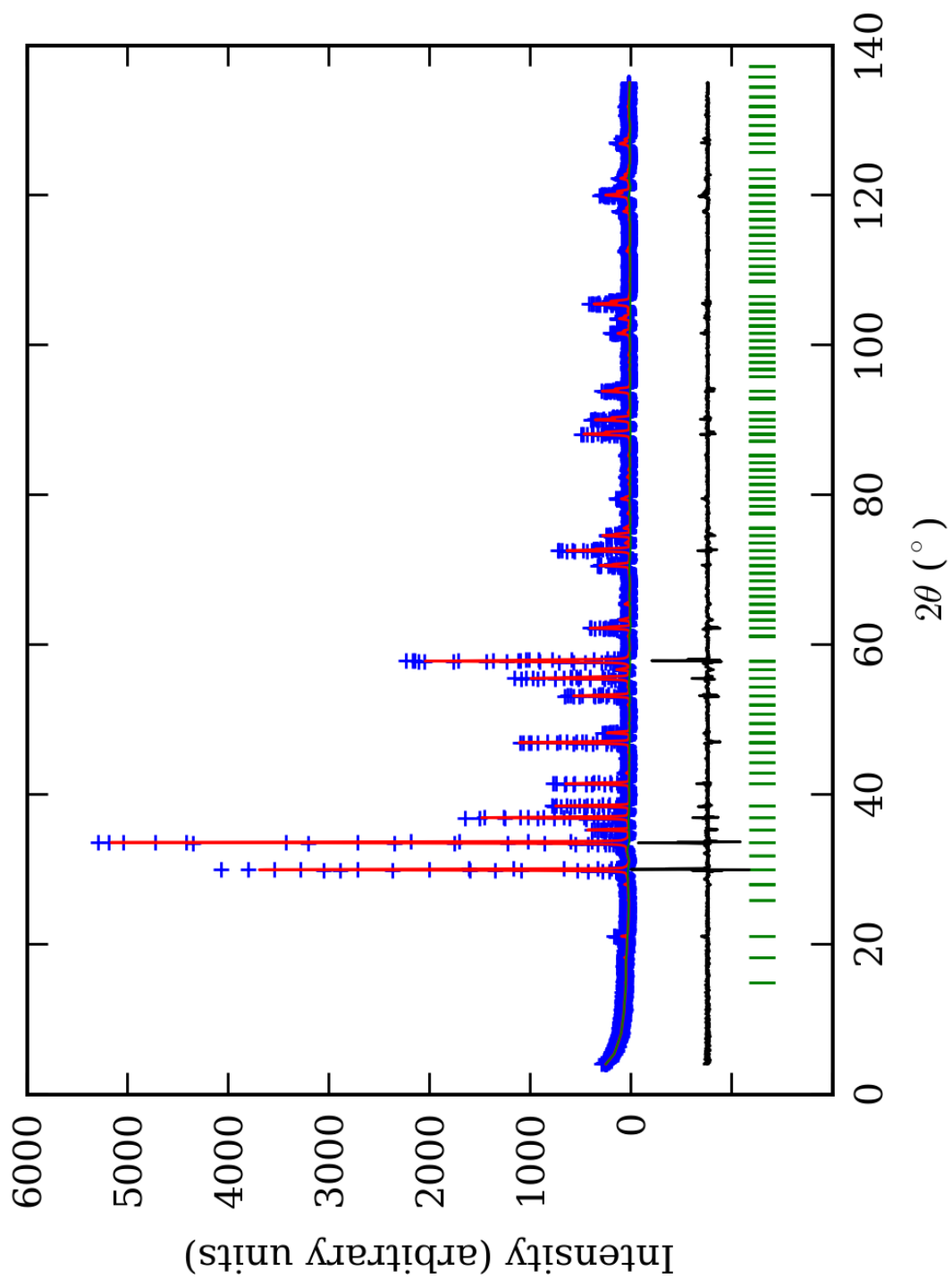
\* Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



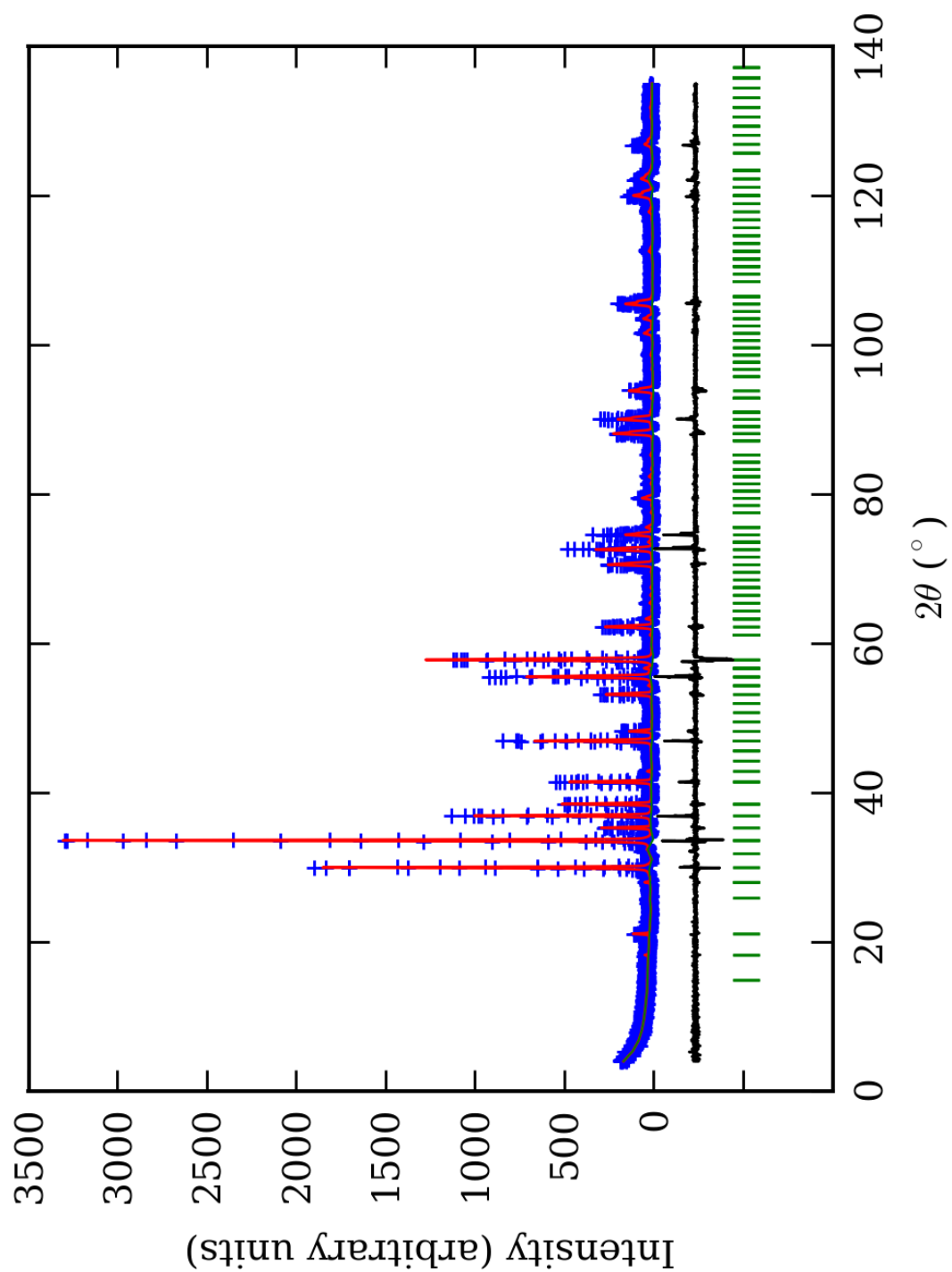
PRILOG 30. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u Ia  $\bar{3}$  p.g.



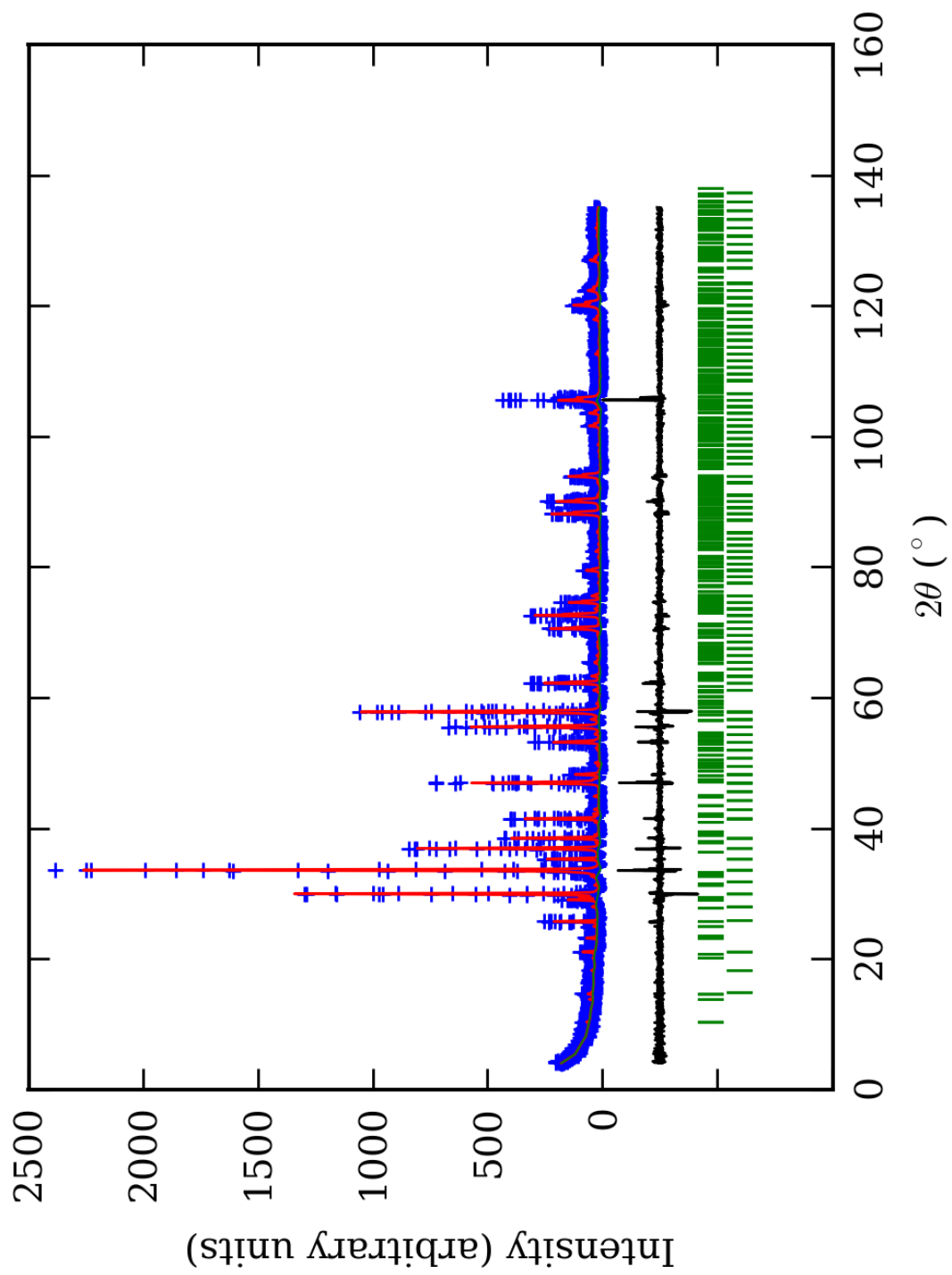
PRILOG 31. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $Ia\bar{3}$  p.g.



PRILOG 32. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $Ia\bar{3}$  p.g.



PRILOG 33. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u Ia  $\bar{3}$  p.g.



PRILOG 34. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $Ia\bar{3}$  p.g.

PRILOG 35. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u Ia  $\bar{3}$  p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,2482	2,4232	2,0483	2,0556	1,6588	
Faktor skale	0,0000166(6)*	0,0000217(7)	0,0000193(4)	0,0000136(4)	0,0000057(5)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(8)	0,33(9)	0,16(6)	0,30(8)	0,13(8)	
Ukupni temp. faktor	0,2(1)	0,3(1)	0,43(8)	0,8(1)	0,29(9)	
Parametri polu-širine	U	0,033(6)	0,08(1)	0,008(6)	0,04(1)	0,025(7)
	V	-0,010(8)	-0,04(1)	0,025(8)	0,03(2)	-0,006(9)
	W	0,014(2)	0,026(4)	0,014(2)	0,013(4)	0,027(3)
Preferentna orijent.	0,26(2)	0,34(6)	0,50(5)	0,23(4)	-0,35(4)	
Parametri asimetrije	As 1	0,00(5)	0,16(4)	0,05(4)	0,05(6)	0,05(4)
	As 2	0,045(7)	0,065(7)	0,048(6)	0,042(7)	0,045(6)
X parametar	0,003(2)	0,002(2)	0,005(1)	0,002(2)	0,009(4)	
Nulta tačka	0,007(6)	0,029(8)	-0,003(7)	0,02(1)	-0,043(6)	
a <sub>0</sub>	11,9187(5)	11,9319(7)	11,9342(5)	11,9342(8)	11,9288(5)	
V <sub>0</sub>	1693,1(1)	1698,8(2)	1699,7(1)	1699,7(2)	1697,4(1)	
N-P+C	6428	6428	6428	6428	6405	
R <sub>p</sub>	14,7	14,1	12,4	13,9	13,0	
R <sub>wp</sub>	19,7	19,3	16,9	19,2	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,49	11,42	11,64	14,10	14,05	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,9	22,2	19,6	23,0	24,3	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	26,0	25,4	22,3	26,2	26,6	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,13	15,06	15,36	19,22	21,16	
Chi <sup>2</sup>	2,94	2,85	2,11	1,86	1,58	
Chi <sup>2</sup> (Bragg contr.)	3,40	3,21	2,38	2,09	1,67	
DW-stat.	0,8760	0,8799	1,1564	1,2609	1,4076	
DW-exp.	1,9616	1,9616	1,9616	1,9616	1,9689	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,4	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>8,89</b>	<b>8,62</b>	<b>6,62</b>	<b>8,22</b>	<b>6,34</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,79</b>	<b>7,39</b>	<b>6,94</b>	<b>7,38</b>	<b>5,82</b>	

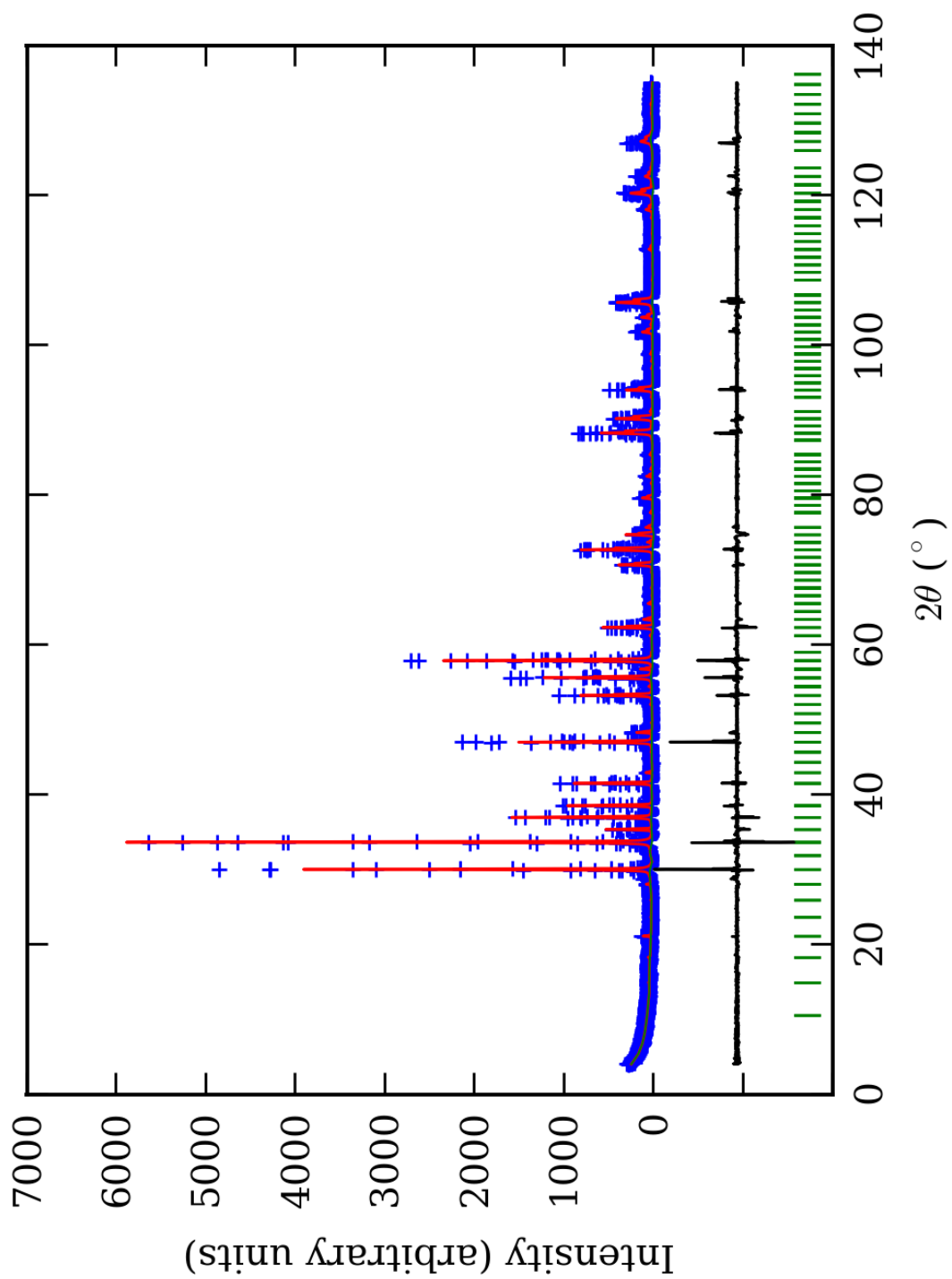
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 36. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u Ia  $\bar{3}$  p.g.

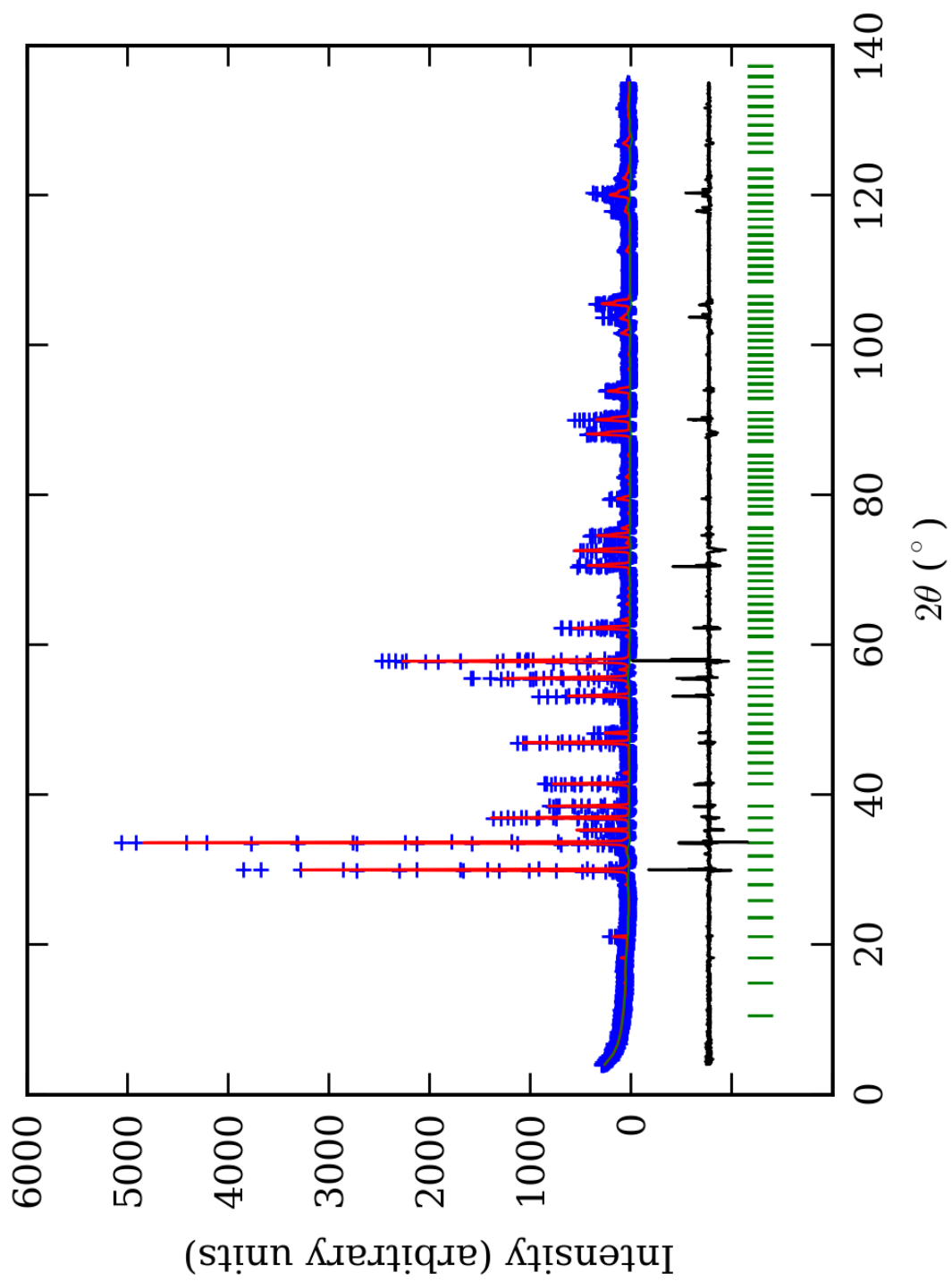
Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,2482		2,4232		2,0483		2,0556		1,6588		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
<b>Ca</b>	x	0,127(2)*	0,41 (3)	0,125(1)	0,481 (5)	0,127(1)	0,40 (2)	0,125(2)	0,46 (2)	0,128(2)	0,49 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
<b>Mn</b>	x	0,127(2)	0,09 (3)	/	/	0,127(1)	0,10 (2)	0,125(2)	0,04 (2)	0,128(2)	0,01 (2)
	y	0,000		/		0,000		0,000			
	z	0,250		/		0,250		0,250			
<b>Al1</b>	x	0,000	0,13 (1)	0,000	0,10 (1)	0,000	0,117 (8)	0,000	0,09 (2)	0,000	0,109 (7)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
<b>Fe1</b>	x	0,000	0,03 (1)	0,000	0,06 (1)	0,000	0,050 (8)	0,000	0,08 (2)	0,000	0,057 (7)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
<b>Al2</b>	x	0,250	0,16 (1)	0,250	0,11 (1)	0,250	0,12 (1)	0,250	0,10 (2)	0,250	0,094 (8)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
<b>Fe2</b>	x	0,250	0,01 (1)	0,250	0,05 (1)	0,250	0,04 (1)	0,250	0,07 (2)	0,250	0,072 (8)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
<b>Si</b>	x	0,872(3)	0,500 (0)	0,868(1)	0,500 (0)	0,874(2)	0,500 (0)	0,871(3)	0,500 (0)	0,872(3)	0,500 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
<b>O1</b>	x	0,038(2)	1,000 (0)	0,037(3)	1,000 (0)	0,033(1)	1,000 (0)	0,039(5)	1,000 (0)	0,038(2)	1,000 (0)
	y	0,047(2)		0,044(2)		0,046(1)		0,049(5)			
	z	0,662(2)		0,655(2)		0,664(2)		0,655(4)			
<b>O2</b>	x	0,796(2)	1,000 (0)	0,797(2)	1,000 (0)	0,792(1)	1,000 (0)	0,797(5)	1,000 (0)	0,798(2)	1,000 (0)
	y	0,294(2)		0,281(3)		0,295(1)		0,289(5)			
	z	0,593(2)		0,600(2)		0,585(2)		0,598(4)			
<b>Ca (%)</b>	82(6)		96(1)		80(4)		92(4)		98(4)		
<b>Al1 (%)</b>	78(6)	87	60(6)	63	71(5)	72	54(12)	57	65(4)	60	
<b>Al2 (%)</b>	96(6)	(6)	66(6)	(6)	72(6)	(3)	60(12)	(12)	56(4)	(4)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

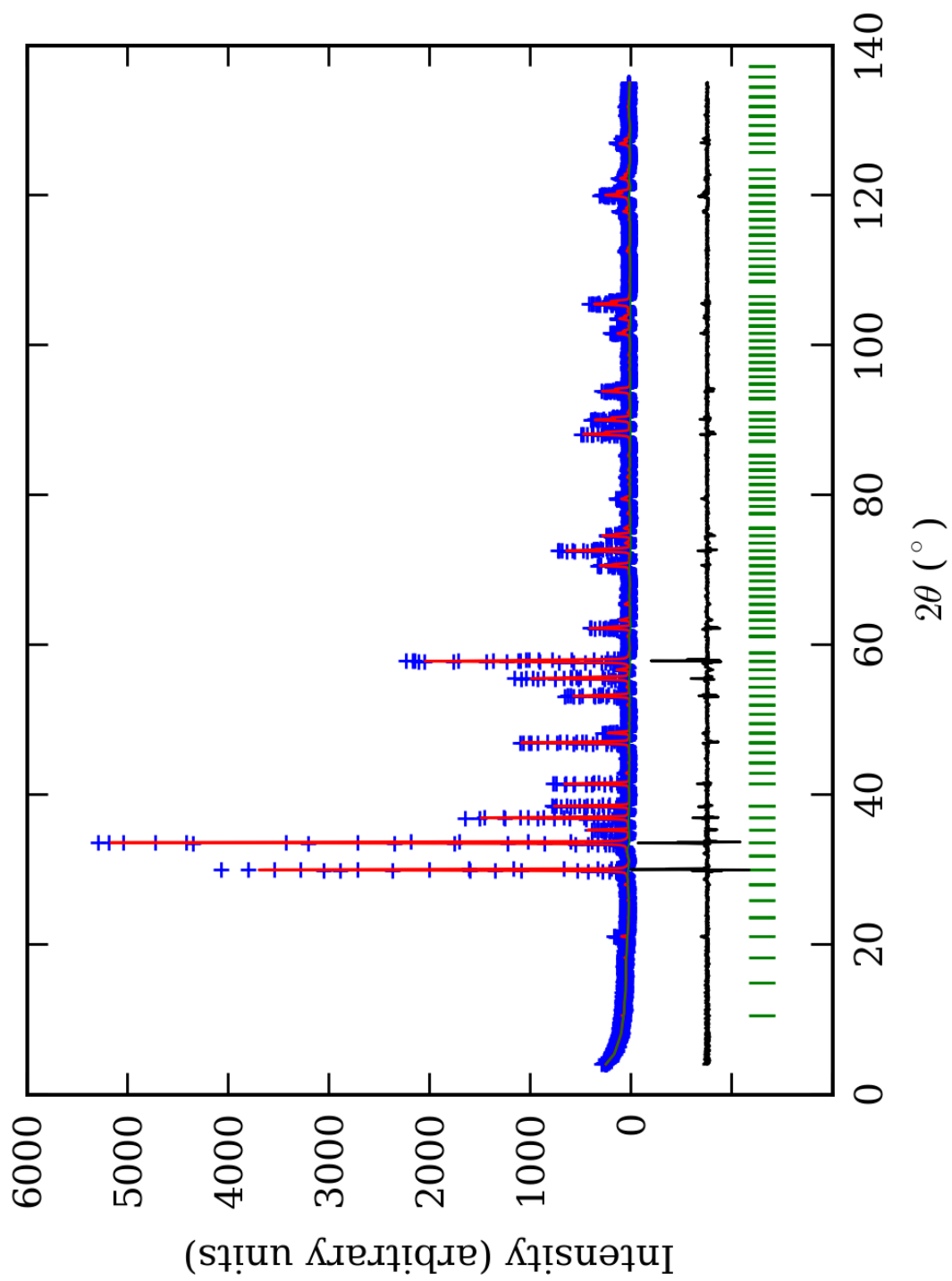




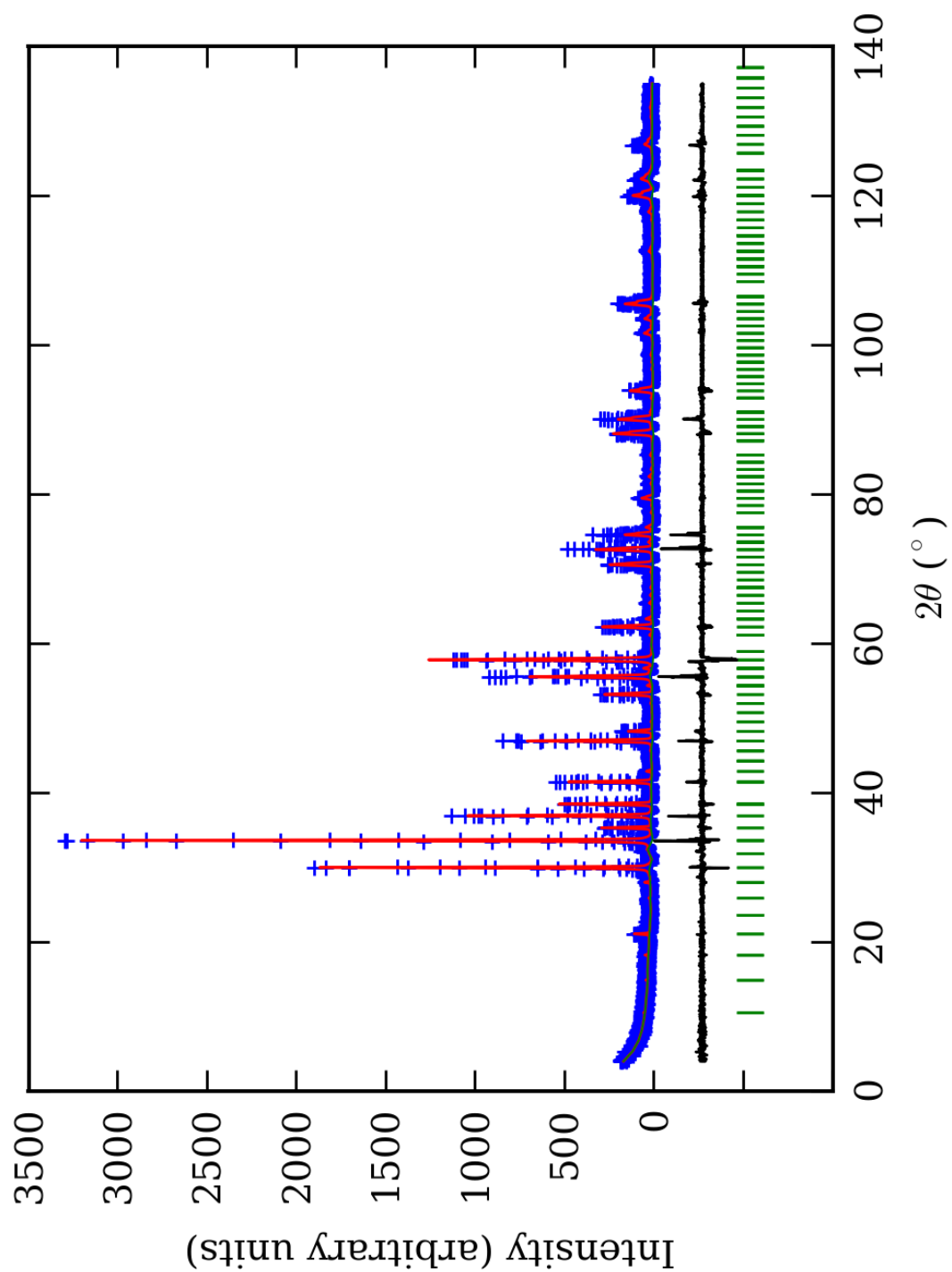
PRILOG 37. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u I213 p.g.



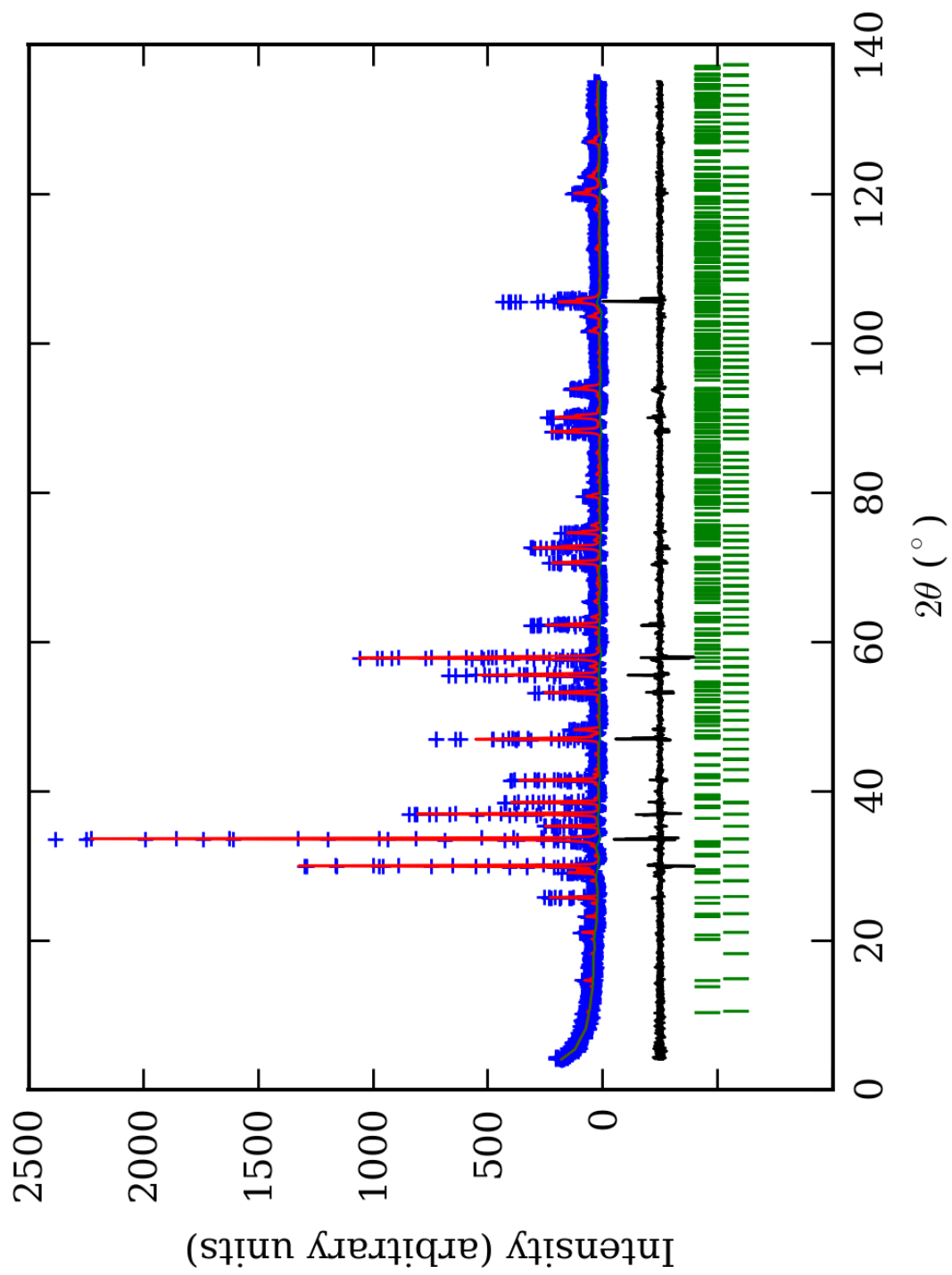
PRILOG 38. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u I213 p.g.



PRILOG 39. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u I213 p.g.



PRILOG 40. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I213 p.g.



PRILOG 41. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u I213 p.g.

PRILOG 42. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I213 p.g.

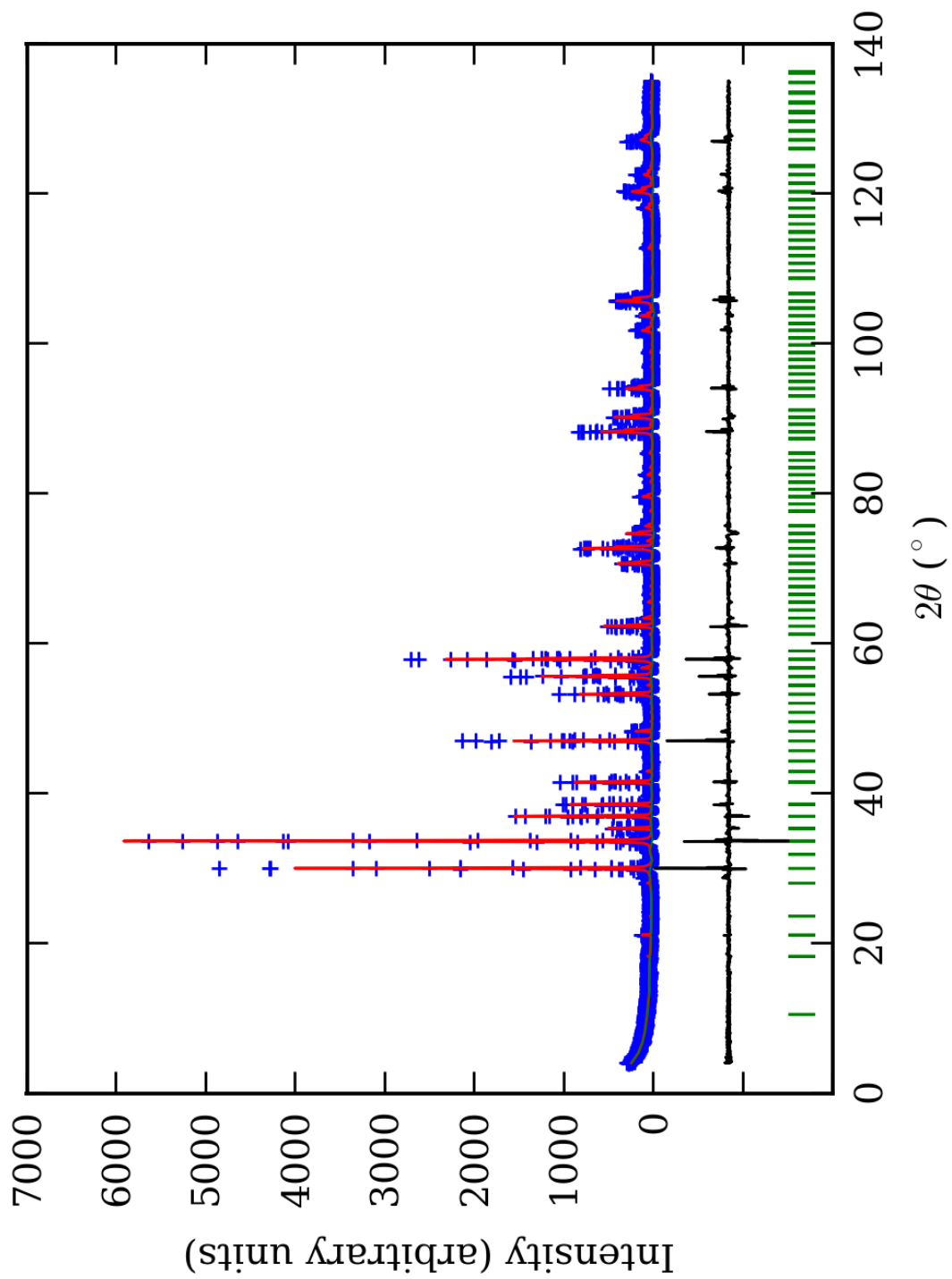
Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,2703	2,4103	2,0012	2,0055	1,7121	
Faktor skale	0,0000185(5)*	0,0000217(7)	0,0000195(5)	0,0000177(7)	0,0000101(3)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(8)	0,33(9)	0,16(6)	0,28(8)	0,11(8)	
Ukupni temp. faktor	0,1(1)	0,3(1)	0,40(8)	0,6(1)	0,2(1)	
Parametri polu-širine	U	0,034(7)	0,08(1)	0,009(6)	0,04(1)	0,023(7)
	V	-0,011(8)	-0,04(1)	0,024(8)	0,02(2)	-0,00(1)
	W	0,014(2)	0,026(4)	0,014(2)	0,014(4)	0,026(3)
Preferentna orijent.	0,81(7)	0,34(6)	0,49(6)	-0,29(5)	0,40(5)	
Parametri asimetrije	As 1	0,01(5)	0,16(4)	0,05(4)	0,06(6)	0,07(4)
	As 2	0,046(7)	0,065(7)	0,048(6)	0,043(7)	0,046(6)
X parametar	0,004(2)	0,002(2)	0,005(1)	0,003(2)	0,008(1)	
Nulta tačka	0,009(6)	0,030(8)	-0,003(6)	0,02(1)	-0,041(7)	
a <sub>0</sub>	11,9189(5)	11,9319(7)	11,9342(5)	11,9343(8)	11,9287(6)	
V <sub>0</sub>	1693,2(1)	1698,8(2)	1699,7(1)	1699,8(2)	1697,4(1)	
N-P+C	6417	6417	6417	6417	6393	
R <sub>p</sub>	14,7	14,1	12,4	14,0	13,1	
R <sub>wp</sub>	19,8	19,3	16,8	19,2	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,48	11,41	11,63	14,08	14,03	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,6	22,1	19,4	22,6	24,4	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	25,9	25,4	22,2	25,9	26,6	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,03	15,03	15,31	19,05	21,06	
Chi2	2,96	2,85	2,10	1,85	1,60	
Chi2 (Bragg contr.)	3,29	3,07	2,27	2,00	1,66	
DW-stat.	0,8707	0,8802	1,1654	1,2679	1,3951	
DW-exp.	1,9651	1,9651	1,9651	1,9651	1,9728	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>8,77</b>	<b>8,59</b>	<b>6,61</b>	<b>8,29</b>	<b>6,91</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,44</b>	<b>7,58</b>	<b>7,28</b>	<b>7,17</b>	<b>6,81</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 43. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I2,3 p.g.

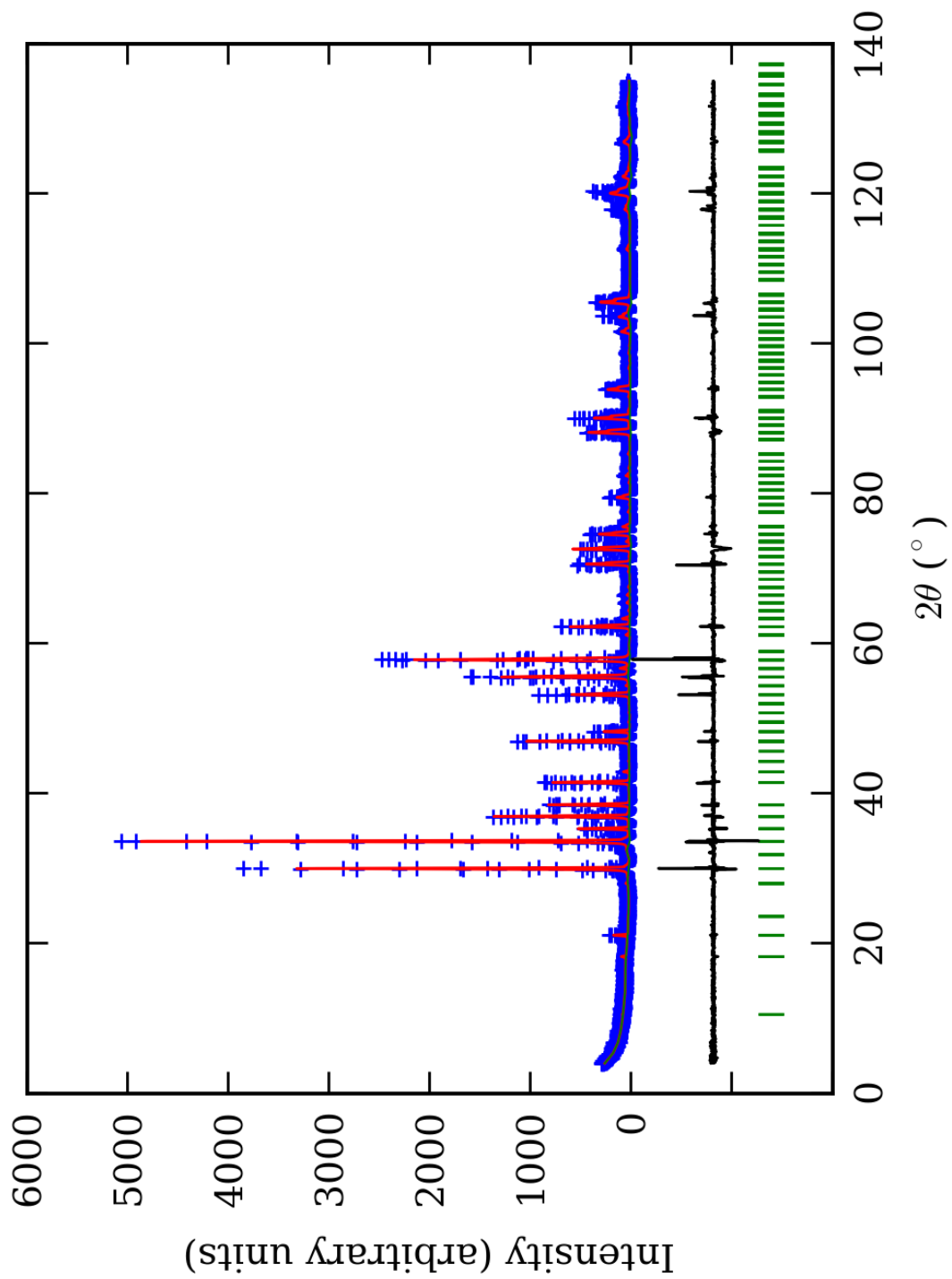
Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor		2,2703		2,4103		2,0012		2,0055		1,7121		
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca1	x	0,125(3)*	0,4 (2)	0,124(4)	0,49 (5)	0,126(2)	0,39 (6)	0,125(3)	0,4 (1)	0,126(4)	0,5 (1)	
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000		
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250		
Mn1	x	0,125(3)	0,1 (2)	/	/	0,126(2)	0,11 (6)	0,125(3)	0,1 (1)	0,126(4)	0,0 (1)	
	y	0,000		/		0,000		0,000				
	z	0,250		/		0,250		0,250				
Ca2	x	0,630(3)	0,4 (2)	0,628(5)	0,48 (5)	0,628(2)	0,44 (7)	0,631(3)	0,52 (9)	0,629(3)	0,5 (1)	
	y	0,000		0,000		0,000		0,000				
	z	0,250		0,250		0,250		0,250				
Mn2	x	0,630(3)	0,1 (2)	/	/	0,628(2)	0,06 (7)	0,631(3)	-0,02 (9)	0,629(3)	0,0 (1)	
	y	0,000		/		0,000		0,000				
	z	0,250		/		0,250		0,250				
Al1	x	0,000(4)	0,28 (3)	-0,001(7)	0,21 (3)	0,001(3)	0,25 (3)	0,000(4)	0,22 (2)	0,000(3)	0,22 (2)	
	y	0,000(4)		-0,001(7)		0,001(3)		0,000(4)				
	z	0,000(4)		-0,001(7)		0,001(3)		0,000(4)				
Fe1	x	0,000(4)	0,05 (3)	-0,001(7)	0,12 (3)	0,001(3)	0,08 (3)	0,000(4)	0,11 (2)	0,000(3)	0,11 (2)	
	y	0,000(4)		-0,001(7)		0,001(3)		0,000(4)				
	z	0,000(4)		-0,001(7)		0,001(3)		0,000(4)				
Al2	x	0,249(4)	0,29 (3)	0,250(6)	0,22 (3)	0,249(3)	0,23 (3)	0,247(2)	0,20 (2)	0,249(3)	0,17 (2)	
	y	0,249(4)		0,250(6)		0,249(3)		0,247(2)				
	z	0,249(4)		0,250(6)		0,249(3)		0,247(2)				
Fe2	x	0,249(4)	0,04 (3)	0,250(6)	0,11 (3)	0,249(3)	0,10 (3)	0,247(2)	0,13 (2)	0,249(3)	0,16 (2)	
	y	0,249(4)		0,250(6)		0,249(3)		0,247(2)				
	z	0,249(4)		0,250(6)		0,249(3)		0,247(2)				
Si1	x	0,367(3)	0,500 (0)	0,366(5)	0,500 (0)	0,375(4)	0,500 (0)	0,367(4)	0,500 (0)	0,366(3)	0,500 (0)	
	y	0,000		0,000		0,000		0,000				
	z	0,250		0,250		0,250		0,250				
Si2	x	0,873(7)	0,500 (0)	0,871(7)	0,500 (0)	0,873(5)	0,500 (0)	0,875(6)	0,500 (0)	0,876(7)	0,500 (0)	
	y	0,000		0,000		0,000		0,000				
	z	0,250		0,250		0,250		0,250				
O1	x	0,032(8)	1,000 (0)	0,038(8)	1,000 (0)	0,025 (3)	1,000 (0)	0,031(4)	1,000 (0)	0,036(5)	1,000 (0)	
	y	0,050(6)		0,043(9)		0,048(4)		0,048(6)				
	z	0,666(5)		0,657(8)		0,665(3)		0,656(6)				
O2	x	0,956(8)	1,000 (0)	0,964(9)	1,000 (0)	0,956(4)	1,000 (0)	0,958(4)	1,000 (0)	0,961(4)	1,000 (0)	
	y	0,955(7)		0,96(1)		0,956 (4)		0,949(5)				
	z	0,343(7)		0,35(1)		0,336(6)		0,352(6)				
O3	x	0,794(7)	1,000 (0)	0,798(9)	1,000 (0)	0,791(4)	1,000 (0)	0,796(5)	1,000 (0)	0,790(5)	1,000 (0)	
	y	0,297(9)		0,281(9)		0,292(5)		0,294(5)				
	z	0,595(8)		0,60(1)		0,592(5)		0,601(8)				
O4	x	0,203(6)	1,000 (0)	0,202(9)	1,000 (0)	0,206(4)	1,000 (0)	0,204(5)	1,000 (0)	0,196(7)	1,000 (0)	
	y	0,711(9)		0,72(1)		0,705(5)		0,709(6)				
	z	0,412(8)		0,40(1)		0,420(6)		0,406(8)				
Ca1 (%)	80(40)		80	97		78(12)	83	92		100(20)	100	
Ca2 (%)	80(40)		(40)	96(10)		(10)	88(14)	(13)	104(18)		(19)	100(20)
Al1 (%)	84(9)		86	63(9)		64	75(9)	72	66(6)		63	66(6)
Al2 (%)	87(9)		(9)	66(9)		(9)	69(9)	(9)	60(6)		(6)	57(6)

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

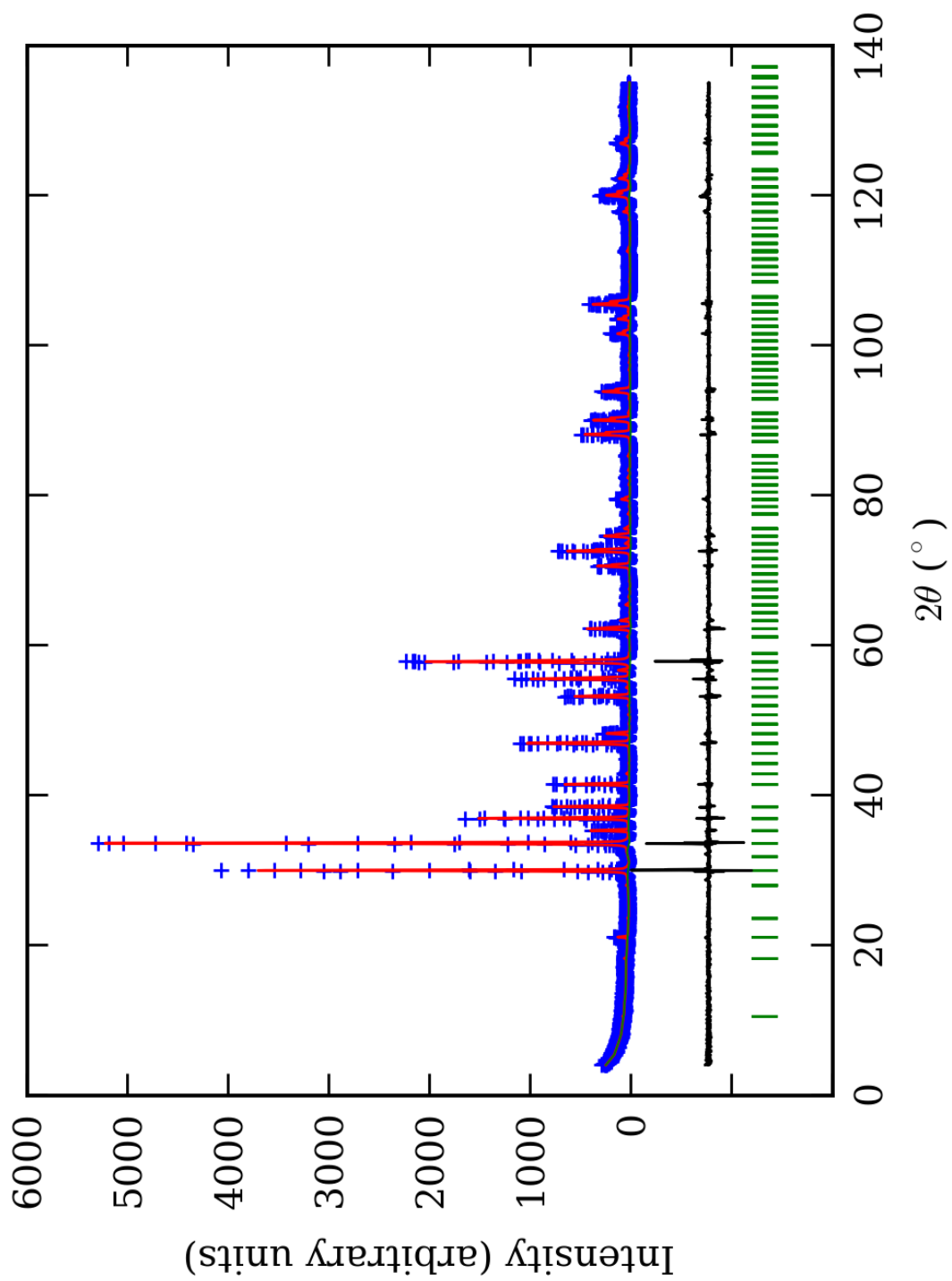


PRILOG 44. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $R\bar{3}c$  p.g.

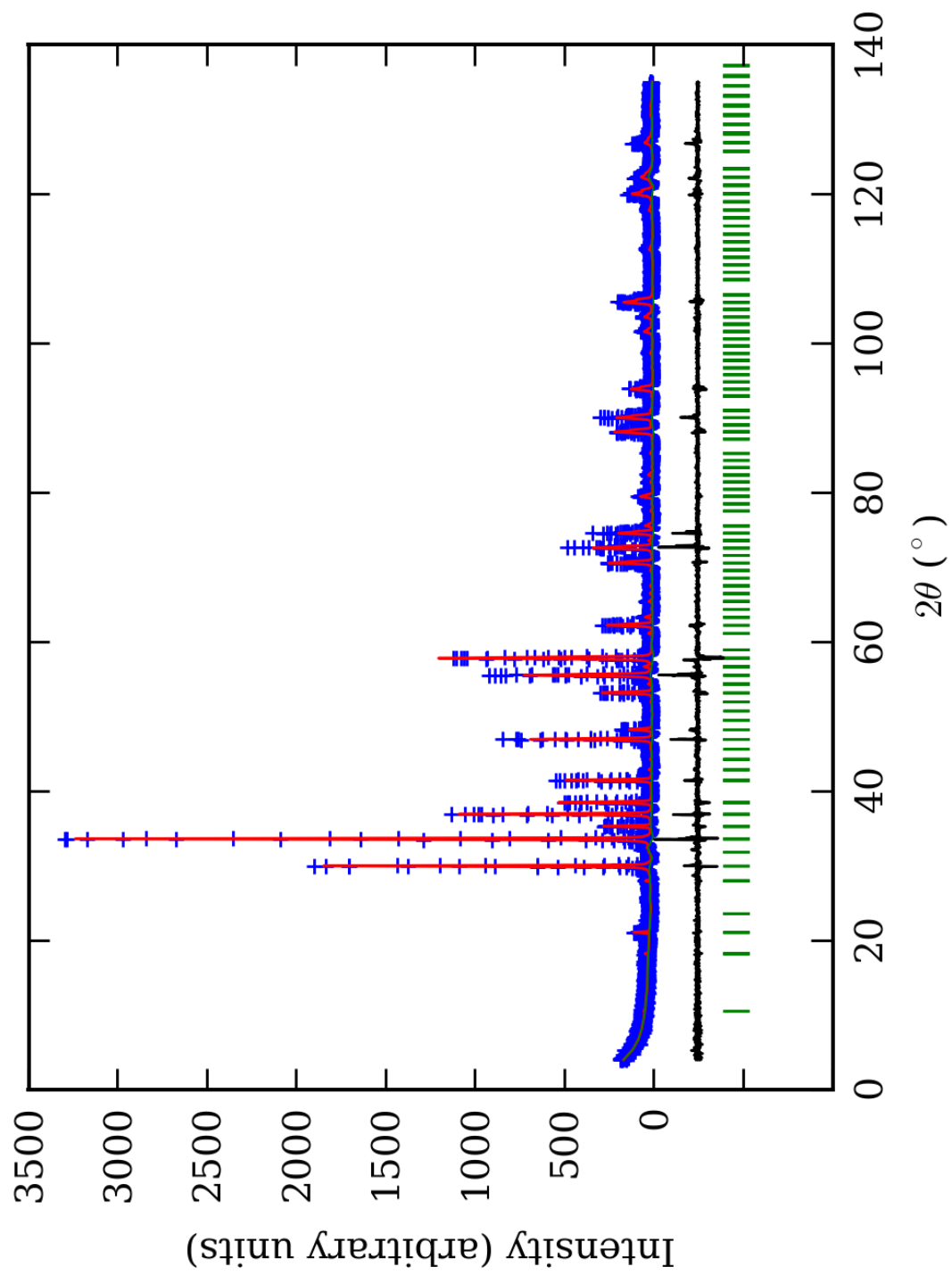




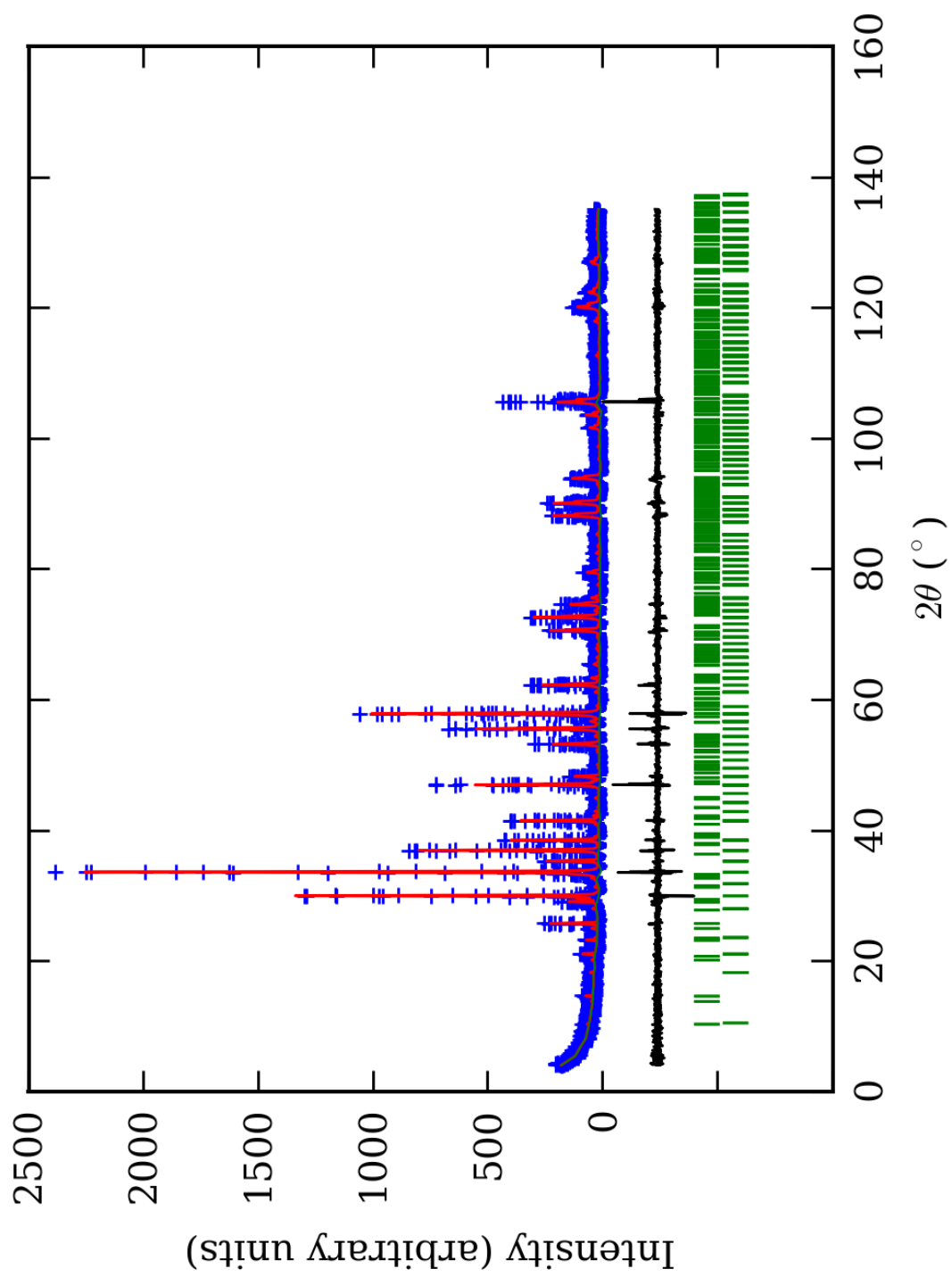
PRILOG 45. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $R\bar{3}c$  p.g.



PRILOG 46. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $R\bar{3}c$  p.g.



PRILOG 47. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u  $R\bar{3}c$  p.g.



PRILOG 48. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $R\bar{3}c$  p.g.

PRILOG 49. Profilni i strukturalni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u  $R\bar{3}c$  p.g. Izračunata je i četverostruka vrednost odnosa  $c/a$ , kao i ugao  $\alpha$  ( $^\circ$ ).

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,1962	2,3374	1,8919	1,8017	1,6553	
Faktor skale	0,0000052(3)*	0,0000080(4)	0,0000066(3)	0,000017(2)	0,0000029(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(7)	0,29(9)	0,09(6)	0,27(7)	0,12(8)	
Ukupni temp. faktor	0,1(1)	0,3(1)	0,34(8)	0,7(1)	0,40(9)	
Parametri polu-širine	U	0,029(6)	0,06(1)	0,000(5)	-0,04(1)	0,013(5)
	V	-0,007(8)	-0,04(1)	0,024(7)	0,02(1)	-0,015(8)
	W	0,012(2)	0,026(4)	0,015(2)	0,014(4)	0,030(3)
Preferentna orijent.	0,72(5)	0,31(6)	0,43(4)	-1,0(1)	0,35(4)	
Parametri asimetrije	As 1	0,05(5)	0,18(4)	0,05(4)	0,08(5)	0,05(4)
	As 2	0,051(7)	0,067(7)	0,049(6)	0,044(6)	0,039(5)
X parametar	0,004(1)	0,003(2)	0,007(1)	0,003(1)	0,007(4)	
Nulta tačka	0,013(6)	0,032(7)	-0,003(6)	0,018(9)	-0,042(6)	
$a_0$	16,852(1)	16,861(1)	16,8824(9)	16,873(2)	16,8615(9)	
$c_0$	10,3252(9)	10,341(1)	10,3308(8)	10,338(1)	10,3386(7)	
$V_0$	2539,4(3)	2547,8(5)	2549,9(3)	2548,7(5)	2545,6(2)	
N-P+C	6417	6417	6417	6417	6394	
$R_p$	14,4	14,1	12,0	13,3	12,8	
$R_{wp}$	19,3	19,2	16,3	18,5	17,5	
$R_{exp}$	11,48	11,41	11,63	14,08	14,04	
Konvencionalni $R_p$	22,0	21,9	18,8	21,5	24,2	
Konvencionalni $R_{wp}$	25,1	25,2	21,4	25,0	26,5	
Konvencionalni $R_{exp}$	14,95	14,98	15,28	19,00	21,20	
Chi2	2,83	2,83	1,97	1,73	1,56	
Chi2 (Bragg contr.)	3,25	3,16	2,21	1,94	1,64	
DW-stat.	0,9079	0,8863	1,2388	1,3483	1,4249	
DW-exp.	1,9651	1,9651	1,9651	1,9651	1,9724	
GoF	1,6	1,7	1,4	1,3	1,2	
$R_B$	<b>8,17</b>	<b>8,64</b>	<b>6,07</b>	<b>6,78</b>	<b>6,02</b>	
$R_F$	<b>6,80</b>	<b>7,42</b>	<b>6,31</b>	<b>6,94</b>	<b>6,24</b>	
$4 \times c_0/a_0$	2,45080	2,45324	2,44771	2,45078	2,45259	
$\alpha$	59,976	59,932	60,032	59,976	59,944	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 50. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u  $R\bar{3}c$  p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,1962		2,3374		1,8919		1,8017		1,6553		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca1	x	0,625(1)*	0,50 (2)	0,625(2)	0,47 (3)	0,628(1)	0,50 (2)	0,623(1)	0,51 (1)	0,620(1)	0,49 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca2	x	0,129(1)	0,4 (1)	0,122(2)	0,48 (2)	0,127(1)	0,39 (6)	0,124(2)	0,48 (1)	0,127(2)	0,48 (7)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Mn2	x	0,129(1)	0,1 (1)	/	/	0,127(1)	0,11 (6)	/	/	0,127(2)	0,02 (7)
	y	0,000		/		0,000		/		0,000	
	z	0,250		/		0,250		/		0,250	
Al1	x	0,000	0,13 (2)	0,000	0,09 (3)	0,000	0,09 (2)	0,000	0,11 (1)	0,000	0,07 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Fe1	x	0,000	0,04 (2)	0,000	0,08 (3)	0,000	0,07 (2)	0,000	0,06 (1)	0,000	0,09 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Al2	x	0,500	0,42 (2)	0,500	0,34 (3)	0,500	0,35 (2)	0,500	0,30 (1)	0,500	0,31 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Fe2	x	0,500	0,08 (2)	0,500	0,16 (3)	0,500	0,15 (2)	0,500	0,20 (1)	0,500	0,19 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Si	x	0,839(1)	1,000 (0)	0,837(2)	1,000 (0)	0,834(2)	1,000 (0)	0,829(2)	1,000 (0)	0,833(2)	1,000 (0)
	y	0,041(2)		0,046(2)		0,041(1)		0,045(2)		0,043(2)	
	z	0,417(2)		0,416(3)		0,418(2)		0,417(2)		0,416(2)	
O1	x	0,204(3)	1,000 (0)	0,210(5)	1,000 (0)	0,205(2)	1,000 (0)	0,215(3)	1,000 (0)	0,211(4)	1,000 (0)
	y	0,412(3)		0,405(5)		0,414(2)		0,417(3)		0,410(4)	
	z	0,495(3)		0,484(5)		0,491(3)		0,490(2)		0,495(3)	
O2	x	0,721(3)	1,000 (0)	0,729(4)	1,000 (0)	0,724(3)	1,000 (0)	0,721(3)	1,000 (0)	0,719(3)	1,000 (0)
	y	0,967(3)		0,965(4)		0,965(2)		0,960(3)		0,958(3)	
	z	0,382(3)		0,391(4)		0,386(3)		0,370(2)		0,372(4)	
O3	x	0,818(4)	1,000 (0)	0,821(5)	1,000 (0)	0,818(3)	1,000 (0)	0,826(4)	1,000 (0)	0,825(5)	1,000 (0)
	y	0,052(3)		0,061(5)		0,049(2)		0,067(4)		0,065(4)	
	z	0,561(3)		0,580(5)		0,570(4)		0,565(2)		0,566(4)	
O4	x	0,896(3)	1,000 (0)	0,905(4)	1,000 (0)	0,894(2)	1,000 (0)	0,907(3)	1,000 (0)	0,899(3)	1,000 (0)
	y	0,893(4)		0,898(5)		0,882(2)		0,895(3)		0,895(3)	
	z	0,892(3)		0,891(5)		0,895(3)		0,894(2)		0,890(4)	
Ca1 (%)	100(4)	90	94(6)	95	100(4)	89	102(2)	99	98(4)	97	
Ca2 (%)	80(20)	(12)	96(4)	(5)	78(12)	(8)	96(2)	(2)	96(14)	(9)	
Al1 (%)	78(12)	81	54(18)	61	54(12)	62	66(6)	63	42(12)	52	
Al2 (%)	84(4)	(8)	68(6)	(12)	70(4)	(8)	60(2)	(4)	62(4)	(8)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 51. Odabrana međuatomska rastojanja (u Å) u  $R\bar{3}c$  p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si-O(1)	1*	1,55(3) <sup>1</sup>	1,69(3)	1,56(2)	1,59(2)	1,62(3)
Si-O(2)	1	1,77(2)	1,67(2)	1,69(2)	1,74(3)	1,79(3)
Si-O(3)	1	1,56(2)	1,76(3)	1,61(2)	1,57(2)	1,62(3)
Si-O(4)	1	1,43(4)	1,60(4)	1,35(3)	1,68(4)	1,57(5)
sr. vr. Si-O		<b>1,58(3)</b>	<b>1,68(3)</b>	<b>1,55(2)</b>	<b>1,64(3)</b>	<b>1,65(4)</b>
O(1)-O(2)	1	2,67(3)	2,84(3)	2,67(2)	2,85(3)	2,87(3)
O(1)-O(3)	1	2,65(2)	2,96(3)	2,78(2)	2,70(2)	2,67(3)
O(1)-O(4)	1	2,39(5)	2,61(5)	2,24(3)	2,37(5)	2,48(5)
O(2)-O(3)	1	2,41(3)	2,52(3)	2,43(2)	2,69(3)	2,69(4)
O(2)-O(4)	1	2,70(4)	2,69(4)	2,58(3)	2,82(4)	2,74(5)
O(3)-O(4)	1	2,56(4)	2,82(5)	2,48(3)	2,67(4)	2,69(6)
sr. vr. O-O		<b>2,56(4)</b>	<b>2,74(4)</b>	<b>2,53(2)</b>	<b>2,68(4)</b>	<b>2,69(4)</b>
Y(1)-O(4)	6	<b>2,10(2)</b>	<b>2,01(2)</b>	<b>2,18(1)</b>	<b>2,01(2)</b>	<b>2,08(2)</b>
O(4)-O(4)	6	3,08(3)	2,88(3)	3,27(2)	2,91(3)	3,01(4)
O(4)-O(4)	6	2,85(3)	2,80(4)	2,88(3)	2,76(3)	2,86(4)
sr. vr. O-O		<b>2,96(3)</b>	<b>2,84(4)</b>	<b>3,08(2)</b>	<b>2,84(3)</b>	<b>2,94(4)</b>
Y(2)-O(1)	2	2,02(2)	1,88(2)	2,01(2)	2,04(2)	2,02(2)
Y(2)-O(2)	2	2,02(3)	2,01(3)	2,01(3)	1,89(4)	1,88(4)
Y(2)-O(3)	2	2,11(2)	1,91(2)	2,11(2)	1,94(2)	1,95(3)
sr. vr. Y(2)-O		<b>2,05(2)</b>	<b>1,93(2)</b>	<b>2,04(2)</b>	<b>1,96(3)</b>	<b>1,95(3)</b>
sr. vr. Y-O		<b>2,08(2)</b>	<b>1,97(2)</b>	<b>2,11(2)</b>	<b>1,98(2)</b>	<b>2,02(2)</b>
O(1)-O(2)	2	2,90(4)	2,68(5)	2,90(4)	2,84(5)	2,76(5)
O(1)-O(2)	2	2,82(3)	2,82(4)	2,78(3)	2,72(3)	2,75(4)
O(1)-O(3)	2	2,86(3)	2,74(3)	2,95(2)	2,83(3)	2,76(4)
O(1)-O(3)	2	2,99(3)	2,62(3)	2,89(3)	2,79(2)	2,85(3)
O(2)-O(3)	2	3,01(4)	2,74(5)	2,97(4)	2,72(5)	2,74(6)
O(2)-O(3)	2	2,84(3)	2,80(4)	2,86(3)	2,69(4)	2,67(6)
sr. vr. O-O		<b>2,90(3)</b>	<b>2,73(4)</b>	<b>2,89(3)</b>	<b>2,76(4)</b>	<b>2,76(5)</b>
sr. vr. O-O		<b>2,93(3)</b>	<b>2,78(4)</b>	<b>2,98(2)</b>	<b>2,80(4)</b>	<b>2,85(4)</b>
X(1)-O(1)	2	2,59(2)	2,46(3)	2,67(2)	2,51(3)	2,41(3)
X(1)-O(2)	2	2,40(3)	2,56(3)	2,43(3)	2,41(3)	2,45(3)
X(1)-O(2)	2	2,25(2)	2,23(2)	2,24(2)	2,37(1)	2,34(3)
X(1)-O(3)	2	2,24(2)	2,30(3)	2,23(2)	2,39(3)	2,38(4)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,37(2)</b>	<b>2,39(3)</b>	<b>2,39(2)</b>	<b>2,42(2)</b>	<b>2,40(3)</b>
O(1)-O(1)	1	2,94(3)	2,93(4)	3,04(3)	3,12(3)	2,89(4)
O(1)-O(2)	2	4,12(4)	4,08(5)	4,19(4)	4,01(5)	3,99(5)
O(1)-O(2)	2	2,90(3)	2,68(3)	2,90(2)	2,84(3)	2,76(3)
O(1)-O(2)	2	3,52(3)	3,40(3)	3,50(3)	3,56(2)	3,49(4)
O(1)-O(3)	2	2,90(5)	2,90(6)	2,84(4)	2,96(5)	2,95(7)
O(2)-O(2)	1	2,99(2)	3,09(3)	3,00(2)	2,76(2)	2,80(4)
O(2)-O(2)	2	2,67(5)	2,89(5)	2,77(4)	2,92(5)	2,89(5)
O(2)-O(3)	2	3,33(4)	3,51(5)	3,45(4)	3,43(5)	3,44(6)
O(2)-O(3)	2	2,84(3)	2,80(3)	2,86(3)	2,69(3)	2,67(4)
O(2)-O(3)	2	2,41(3)	2,52(3)	2,43(2)	2,69(3)	2,69(4)
sr. vr. O-O		<b>3,07(4)</b>	<b>3,09(4)</b>	<b>3,11(3)</b>	<b>3,12(4)</b>	<b>3,08(5)</b>
X(2)-O(1)	2	2,29(2)	2,34(3)	2,27(2)	2,19(2)	2,28(3)
X(2)-O(3)	2	2,48(2)	2,46(3)	2,40(2)	2,57(2)	2,52(3)
X(2)-O(4)	2	2,45(2)	2,31(2)	2,40(2)	2,30(2)	2,40(2)
X(2)-O(4)	2	2,53(2)	2,47(2)	2,65(2)	2,54(2)	2,49(2)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,44(2)</b>	<b>2,40(2)</b>	<b>2,43(2)</b>	<b>2,40(2)</b>	<b>2,42(2)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,40(2)</b>	<b>2,40(2)</b>	<b>2,41(2)</b>	<b>2,41(2)</b>	<b>2,41(2)</b>
O(1)-O(1)	1	4,09(3)	3,86(4)	4,06(3)	3,77(3)	3,92(4)
O(1)-O(3)	2	2,93(3)	2,62(3)	2,89(3)	2,79(2)	2,85(3)
O(1)-O(3)	2	2,90(3)	2,90(4)	2,84(3)	2,96(4)	2,95(5)
O(1)-O(4)	2	2,39(4)	2,61(5)	2,24(3)	2,37(4)	2,48(5)

<b>O(1)-O(4)</b>	<b>2</b>	3,29(3)	3,42(4)	3,29(3)	3,38(4)	3,36(4)
<b>O(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	4,18(2)	3,94(3)	3,99(3)	4,30(3)	4,25(4)
<b>O(3)-O(4)</b>	<b>2</b>	2,83(5)	2,88(5)	2,90(4)	2,90(5)	2,78(7)
<b>O(3)-O(4)</b>	<b>2</b>	3,47(3)	3,47(3)	3,32(3)	3,47(3)	3,57(5)
<b>O(4)-O(4)</b>	<b>2</b>	3,08(3)	2,88(4)	3,27(2)	2,91(4)	3,01(4)
<b>O(4)-O(4)</b>	<b>2</b>	2,94(2)	2,92(3)	3,01(2)	2,99(2)	2,90(3)
<b>sr. vr. O-O</b>		<b>3,11(3)</b>	<b>3,07(4)</b>	<b>3,09(3)</b>	<b>3,09(3)</b>	<b>3,11(4)</b>
<b>sr. vr. O-O</b>		<b>3,09(4)</b>	<b>3,08(4)</b>	<b>3,10(3)</b>	<b>3,10(4)</b>	<b>3,10(4)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

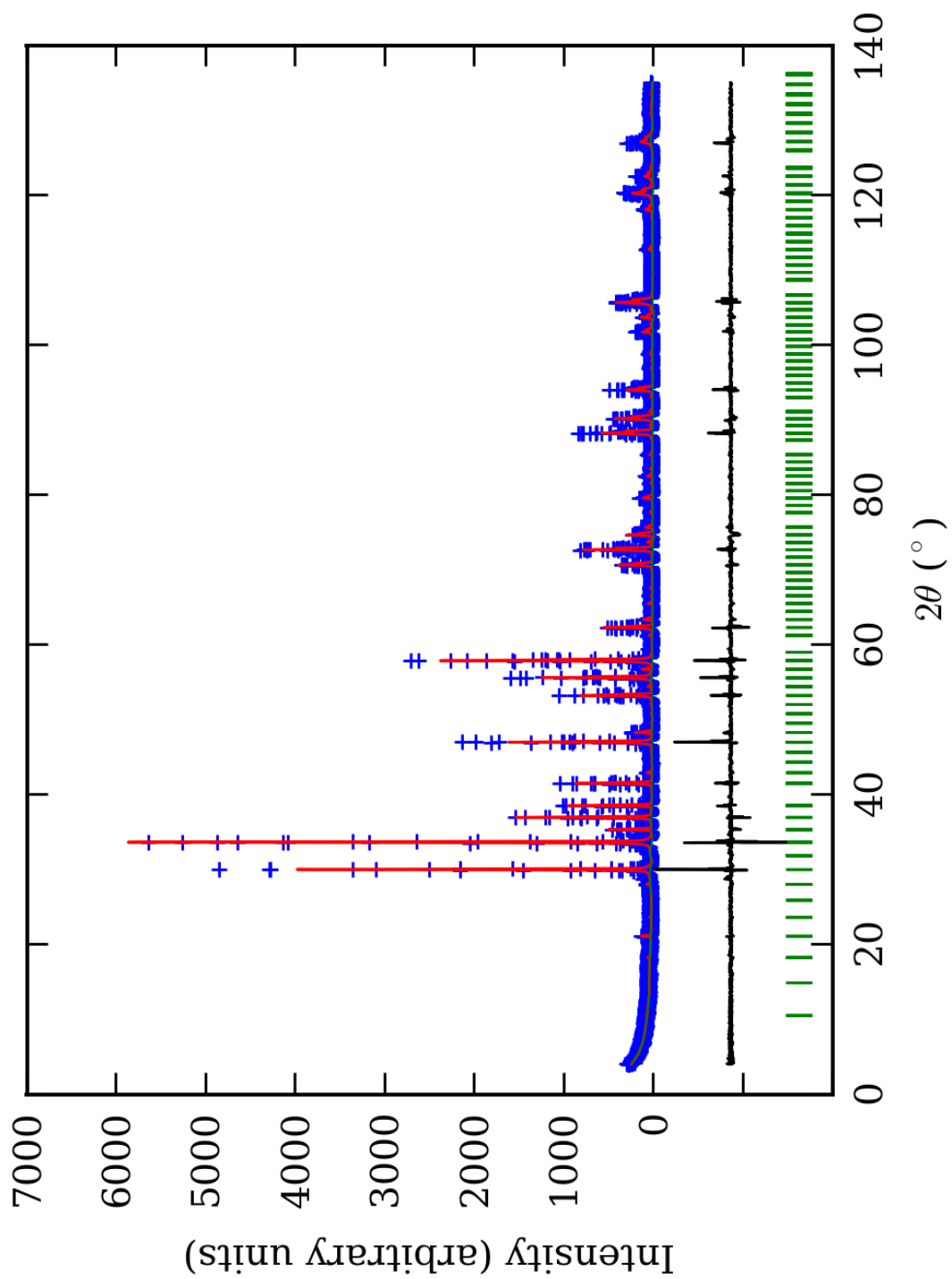
*PRILOG 52. Odabrani međuatomski uglovi ( $u^\circ$ ) u  $R\bar{3}c$  p.g.*

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>O(1)-Si-O(2)</b>	<b>1*</b>	107(2) <sup>1</sup>	115(2)	111(2)	117(2)	115(2)
<b>O(1)-Si-O(3)</b>	<b>1</b>	117(2)	118(2)	122(2)	117(2)	112(2)
<b>O(1)-Si-O(4)</b>	<b>1</b>	107(3)	104(3)	100(2)	93(3)	102(4)
<b>O(2)-Si-O(3)</b>	<b>1</b>	92(2)	95(2)	95(2)	108(2)	104(3)
<b>O(2)-Si-O(4)</b>	<b>1</b>	114(3)	111(3)	116(3)	111(3)	109(3)
<b>O(3)-Si-O(4)</b>	<b>1</b>	118(3)	114(3)	114(3)	110(3)	115(4)
<b>sr. vr. O-Si-O</b>		<b>109(2)</b>	<b>110(2)</b>	<b>110(2)</b>	<b>109(2)</b>	<b>110(3)</b>
<b>O(4)-Y(1)-O(4)</b>	<b>6</b>	94(2)	92(2)	97(1)	93(2)	93(2)
<b>O(4)-Y(1)-O(4)</b>	<b>6</b>	86(2)	88(2)	83(1)	87(2)	87(2)
<b>sr. vr. O-Y(1)-O</b>		<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(1)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>
<b>O(1)-Y(2)-O(2)</b>	<b>2</b>	92(2)	87(2)	92(2)	92(2)	90(3)
<b>O(1)-Y(2)-O(2)</b>	<b>2</b>	88(2)	93(2)	88(2)	88(2)	90(2)
<b>O(1)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	88(1)	92(2)	91(1)	91(2)	88(2)
<b>O(1)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	92(1)	88(2)	89(1)	89(1)	92(2)
<b>O(2)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	93(2)	89(2)	92(2)	91(2)	91(3)
<b>O(2)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	87(2)	91(2)	88(2)	89(2)	89(3)
<b>sr. vr. O-Y(2)-O</b>		<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>
<b>sr. vr. O-Y-O</b>		<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>
<b>O(1)-X(1)-O(1)</b>	<b>1</b>	69(1)	73(2)	69(1)	77(1)	74(2)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	111(2)	109(2)	110(2)	109(2)	110(2)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	73(1)	70(1)	71,7(9)	71(1)	71(1)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	93(1)	93(2)	90(1)	93(1)	94(2)
<b>O(1)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	73(1)	75(2)	70(1)	74(2)	76(2)
<b>O(2)-X(1)-O(2)</b>	<b>1</b>	74(1)	74(1)	76(1)	70(1)	70(2)
<b>O(2)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	70(2)	74(2)	72(2)	75(2)	74(2)
<b>O(2)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	92(2)	92(2)	96(2)	91(2)	91(3)
<b>O(2)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	75(1)	70(1)	76(1)	68(1)	67(2)
<b>O(2)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	65(1)	68(1)	65,8(9)	69(1)	69(2)
<b>sr. vr. O-X(1)-O</b>		<b>80(1)</b>	<b>80(2)</b>	<b>81(1)</b>	<b>80(1)</b>	<b>80(2)</b>
<b>O(1)-X(2)-O(1)</b>	<b>1</b>	127(2)	112(2)	126(1)	119(2)	119(2)
<b>O(1)-X(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	78(1)	66(1)	76(1)	71(1)	73(1)
<b>O(1)-X(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	75(1)	74(2)	75(1)	76(2)	76(2)
<b>O(1)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	61(1)	68(2)	57(1)	64(2)	64(2)
<b>O(1)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	86(1)	91(2)	84(1)	90(2)	90(2)
<b>O(3)-X(2)-O(3)</b>	<b>1</b>	113(1)	107(2)	112(1)	114(1)	115(2)
<b>O(3)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	69(2)	71(2)	70(1)	69(2)	67(2)
<b>O(3)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	90(1)	94(2)	88(1)	90(1)	93(2)
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	76(1)	74(2)	80,7(9)	73(1)	76(2)
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	72(1)	75(1)	73,1(9)	76(1)	73(1)
<b>sr. vr. O-X(2)-O</b>		<b>81(1)</b>	<b>80(2)</b>	<b>80(1)</b>	<b>81(2)</b>	<b>81(2)</b>
<b>sr. vr. O-X-O</b>		<b>80(1)</b>	<b>80(2)</b>	<b>80(1)</b>	<b>80(2)</b>	<b>80(2)</b>

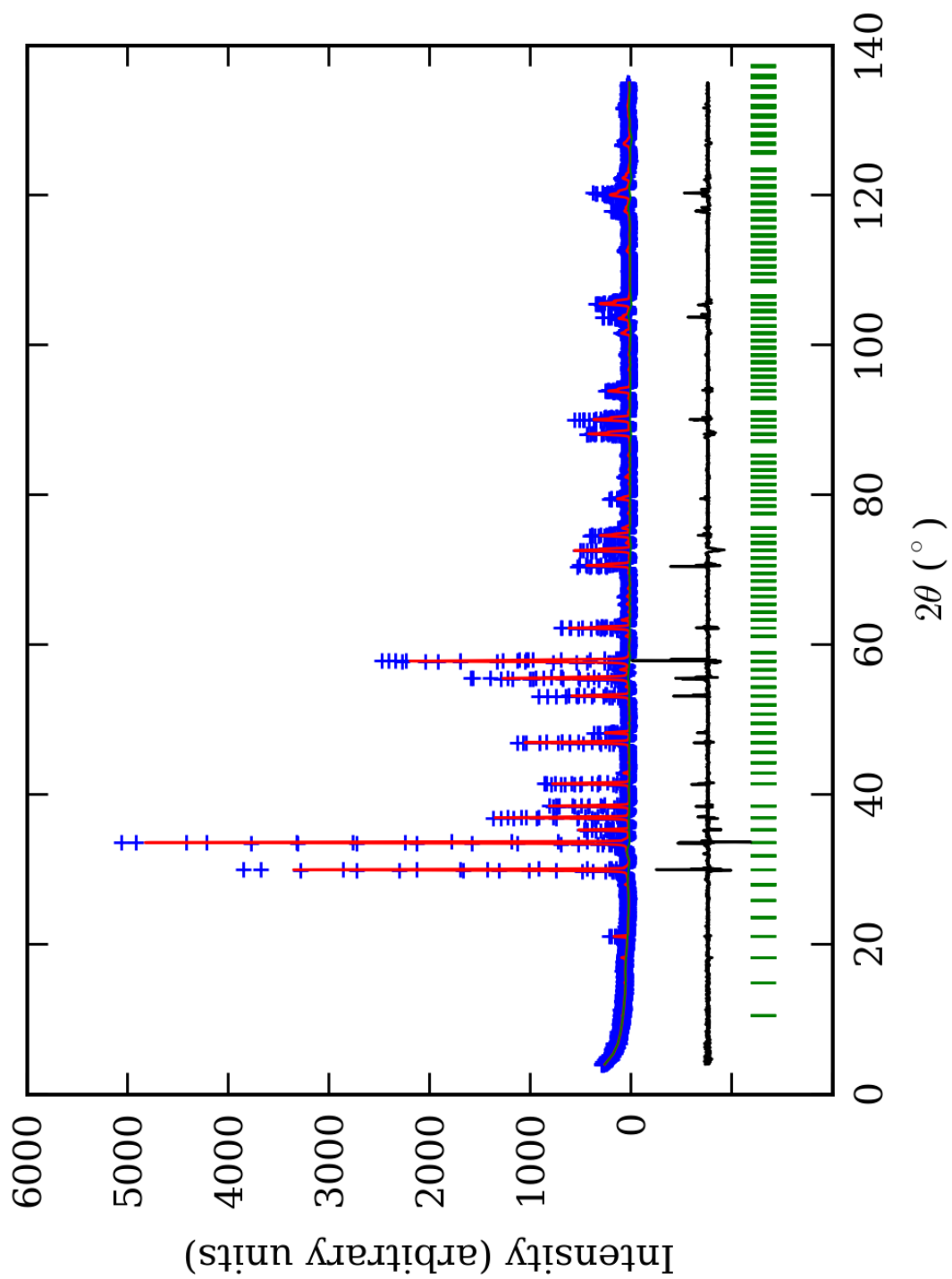
\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

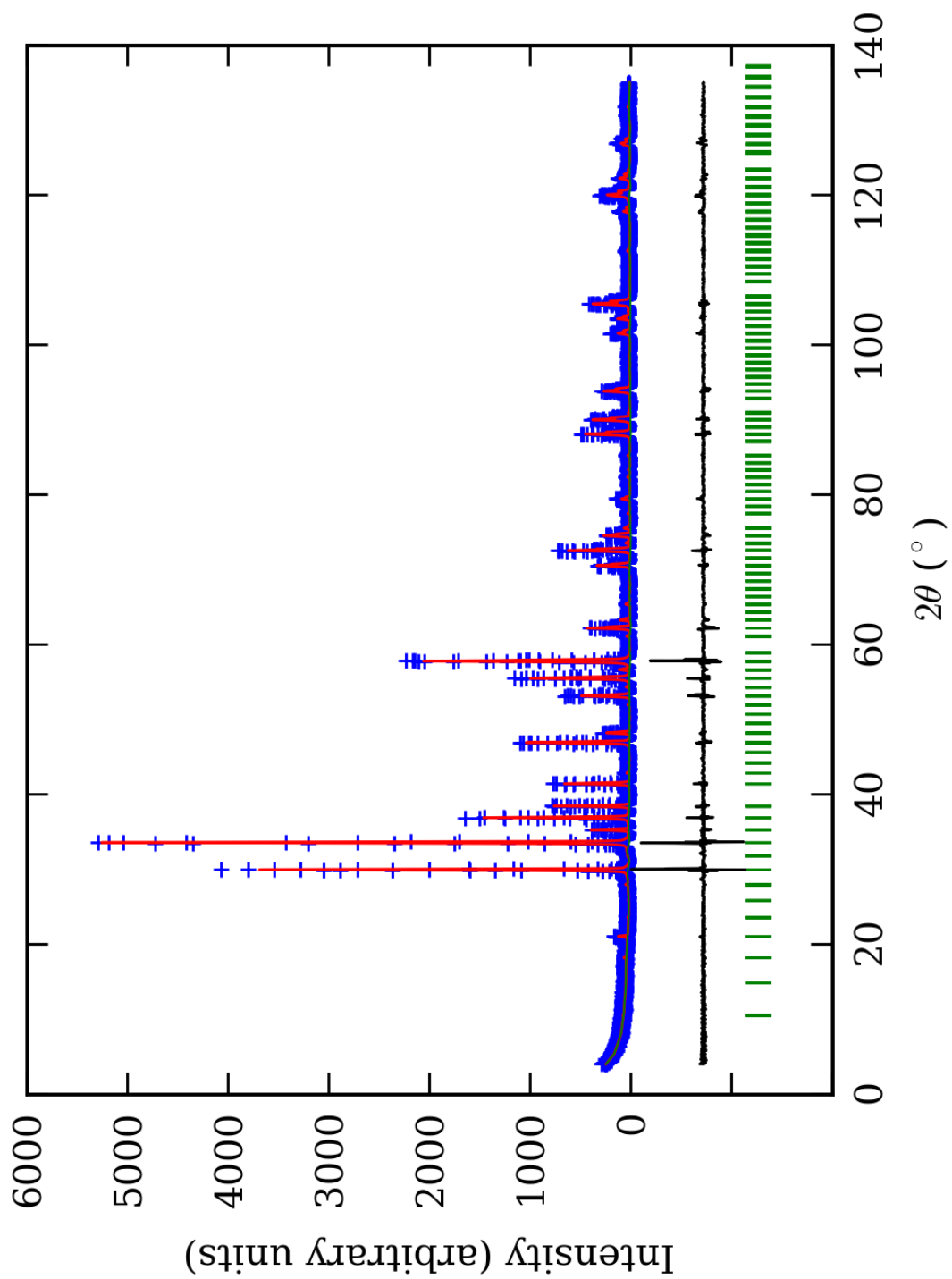




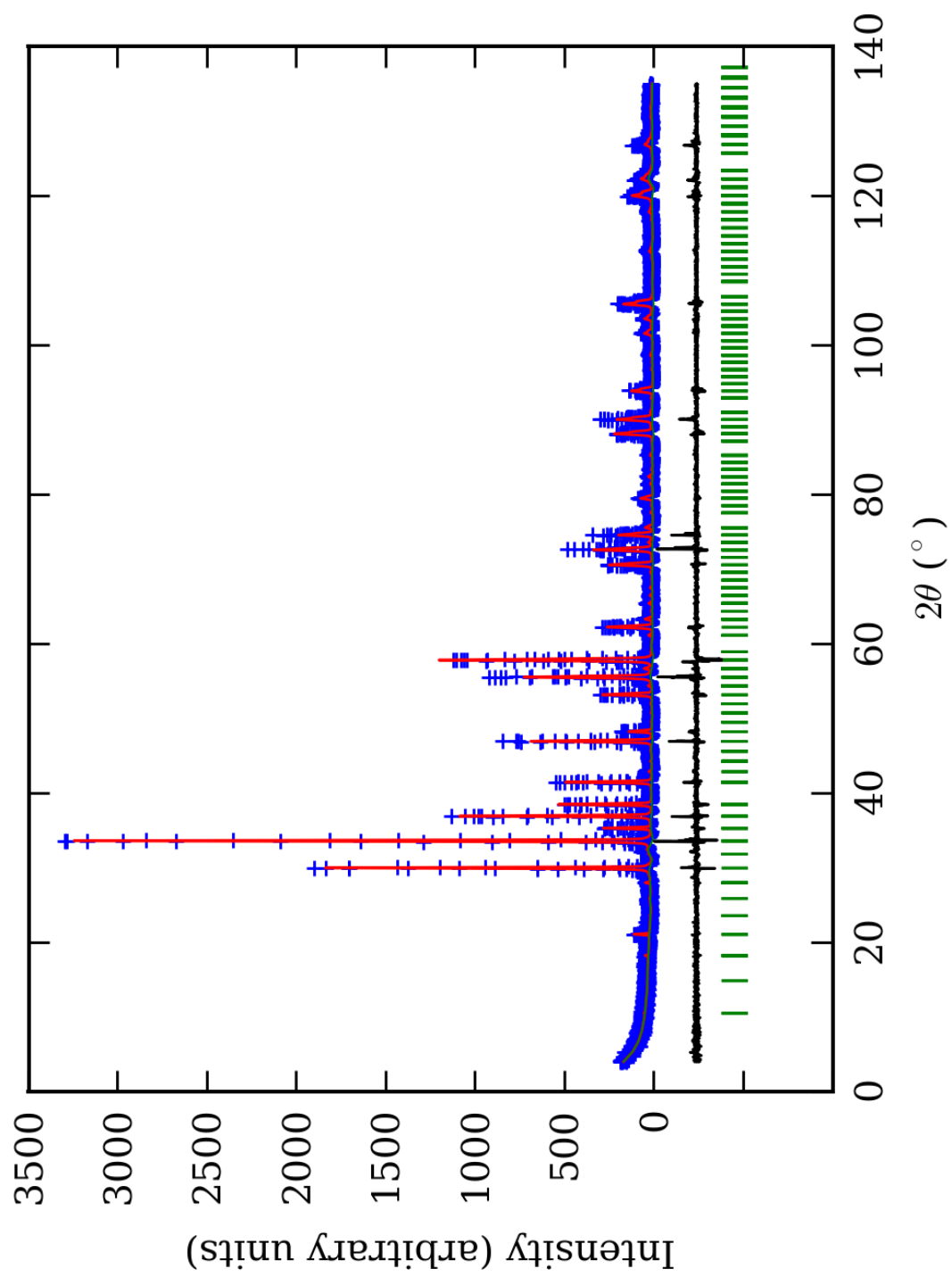
PRILOG 53. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $R\bar{3}$  p.g.



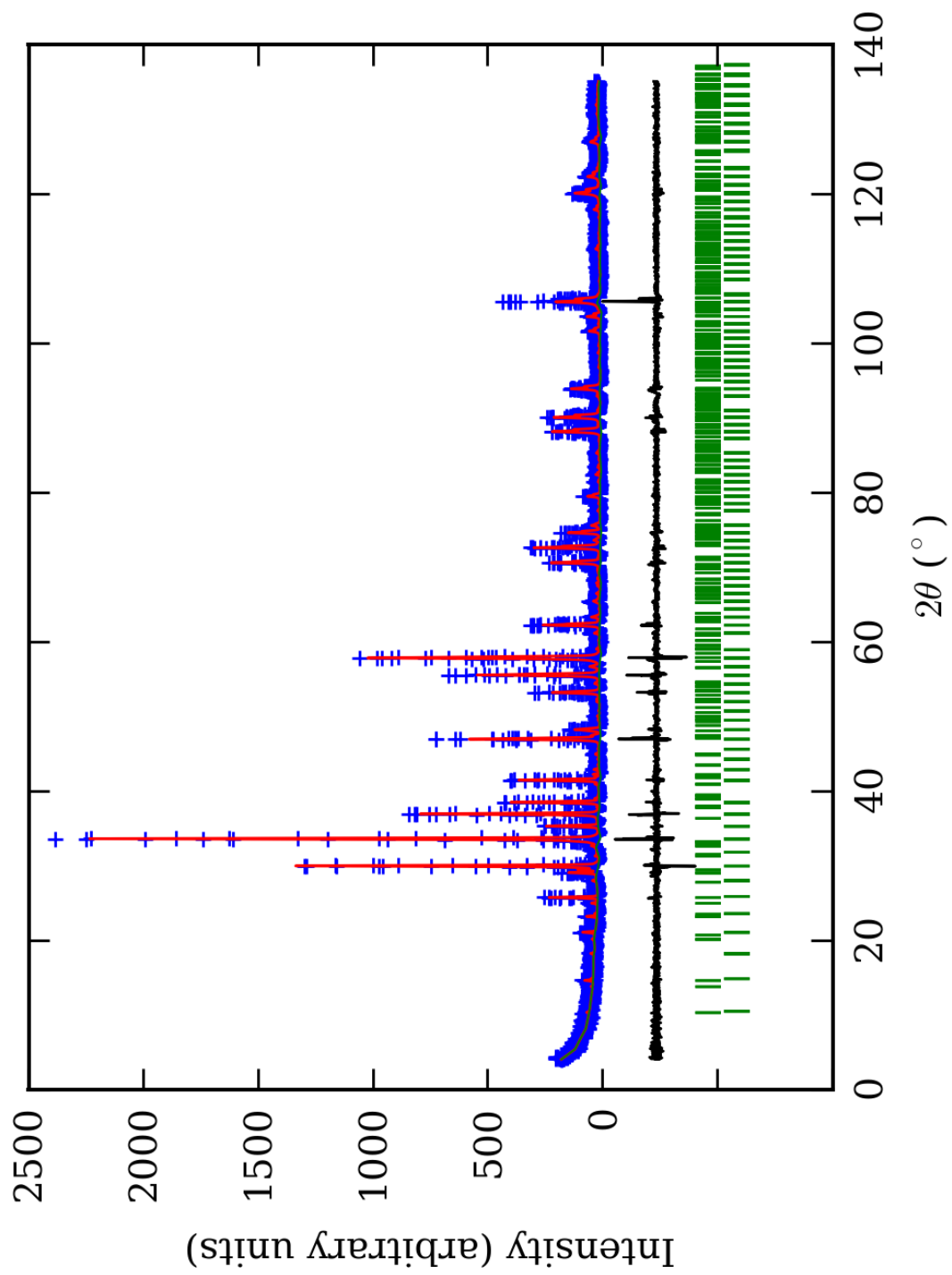
PRILOG 54. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $R\bar{3}$  p.g.



PRILOG 55. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $R\bar{3}$  p.g.



PRILOG 56. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u  $R\bar{3}p$ .



PRILOG 57. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $R\bar{3}$  p.g.

PRILOG 58. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u  $R\bar{3}$  p.g. Izračunata je i četverostruka vrednost odnosa  $c/a$ , kao i ugao  $\alpha$  (°).

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,1321	2,2775	1,8849	1,7886	1,6468	
Faktor skale	0,0000051(3)*	0,0000075(5)	0,0000074(3)	0,000018(2)	0,0000028(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(7)	0,27(8)	0,04(6)	0,26(7)	0,10(8)	
Ukupni temp. faktor	0,1(1)	0,2(1)	0,37(8)	0,7(1)	0,2(1)	
Parametri polu-širine	U	0,029(6)	0,05(1)	-0,003(4)	0,04(1)	0,014(7)
	V	-0,007(7)	-0,03(1)	0,020(7)	0,02(1)	-0,002(9)
	W	0,012(2)	0,026(4)	0,016(2)	0,015(4)	0,026(3)
Preferentna orijent.	0,74(6)	0,37(6)	0,33(5)	-1,0(2)	0,42(5)	
Parametri asimetrije	As 1	0,05(5)	0,18(4)	0,08(4)	0,08(5)	0,05(4)
	As 2	0,052(6)	0,068(6)	0,052(5)	0,044(6)	0,043(5)
X parametar	0,004(1)	0,004(2)	0,008(1)	0,004(1)	0,007(4)	
Nulta tačka	0,013(6)	0,032(7)	-0,000(6)	0,018(9)	-0,042(6)	
a <sub>0</sub>	16,852(1)	16,867(1)	16,8713(8)	16,872(2)	16,874(1)	
c <sub>0</sub>	10,3255(8)	10,341(1)	10,3416(7)	10,338(1)	10,326(1)	
V <sub>0</sub>	2539,4(3)	2547,7(4)	2549,2(2)	2548,7(5)	2546,4(2)	
N-P+C	6396	6396	6396	6396	6373	
R <sub>p</sub>	14,1	14,0	12,1	13,3	12,9	
R <sub>wp</sub>	19,1	19,0	16,5	18,5	17,5	
R <sub>exp</sub>	11,46	11,40	11,61	14,06	14,01	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	21,6	21,7	18,9	21,4	23,8	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	24,9	25,0	21,6	25,0	26,1	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	14,93	14,94	15,27	18,93	20,93	
Chi2	2,77	2,79	2,01	1,74	1,56	
Chi2 (Bragg contr.)	3,09	3,01	2,17	1,88	1,64	
DW-stat.	0,9281	0,8987	1,2164	1,3487	1,4364	
DW-exp.	1,9732	1,9708	1,9718	1,9718	1,9792	
GoF	1,6	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>7,69</b>	<b>8,48</b>	<b>6,23</b>	<b>6,75</b>	<b>6,12</b>	
R <sub>F</sub>	<b>6,58</b>	<b>7,69</b>	<b>6,64</b>	<b>7,11</b>	<b>5,77</b>	
4 × c <sub>0</sub> /a <sub>0</sub>	2,45087	2,45236	2,45188	2,45092	2,44779	
α	59,974	59,946	59,956	59,974	60,030	

\*Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 59. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u  $R\bar{3}$  p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,1321		2,2775		1,8849		1,7886		1,6468		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca1	x	0,625(4)*	1,1 (2)	0,625(1)	0,94 (7)	0,625(2)	1,1 (2)	0,623(4)	1,0 (2)	0,621(5)	1,1 (2)
	y	0,001(4)		0,000(2)		-0,002(3)		-0,001(6)		0,001(7)	
	z	0,249(6)		0,251(4)		0,252(5)		0,250(7)		0,253(7)	
Mn1	x	0,625(4)	-0,1 (2)	/	/	0,625(2)	-0,1 (2)	0,623(4)	-0,1 (2)	0,621(5)	-0,1 (2)
	y	0,001(4)		/		-0,002(3)		-0,001(6)		0,001(7)	
	z	0,249(6)		/		0,252(5)		0,250(7)		0,253(7)	
Ca2	x	0,127(3)	0,7 (2)	0,122(1)	0,96 (5)	0,127(2)	0,8 (2)	0,125(6)	0,96 (3)	0,126(6)	1,0 (2)
	y	-0,004(4)		-0,001(2)		-0,001(3)		0,002(8)		-0,000(8)	
	z	0,249(6)		0,249(4)		0,250(5)		0,252(6)		0,252(6)	

<b>Mn2</b>	x	0,127(3)	0,3 (2)	/	/	0,127(2)	0,2 (2)	/	/	0,126(6)	0,0 (2)
	y	-0,004(4)		/		-0,001(3)		/		-0,000(8)	
	z	0,249(6)		/		0,250(5)		/		0,252(6)	
<b>Al1</b>	x	0,000	0,13 (6)	0,000	0,10 (6)	0,000	0,09 (4)	0,000	0,10 (7)	0,000	0,07 (6)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
<b>Fe1</b>	x	0,000	0,04 (6)	0,000	0,06 (6)	0,000	0,08 (4)	0,000	0,06 (7)	0,000	0,10 (6)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
<b>Al2</b>	x	0,000	0,13 (6)	0,000	0,08 (6)	0,000	0,11 (6)	0,000	0,11 (6)	0,000	0,10 (6)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,500		0,500		0,500		0,500			
<b>Fe2</b>	x	0,000	0,04 (6)	0,000	0,09 (6)	0,000	0,05 (6)	0,000	0,06 (6)	0,000	0,06 (6)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,500		0,500		0,500		0,500			
<b>Al3</b>	x	0,500	0,4 (1)	0,500	0,35 (7)	0,500	0,33 (8)	0,500	0,29 (9)	0,500	0,29 (9)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,500		0,500		0,500		0,500			
<b>Fe3</b>	x	0,500	0,1 (1)	0,500	0,15 (7)	0,500	0,17 (8)	0,500	0,21 (9)	0,500	0,21 (9)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,500		0,500		0,500		0,500			
<b>Al4</b>	x	0,500	0,4 (1)	0,500	0,35 (7)	0,500	0,36 (7)	0,500	0,33 (9)	0,500	0,36 (8)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
<b>Fe4</b>	x	0,500	0,1 (1)	0,500	0,15 (7)	0,500	0,14 (7)	0,500	0,17 (9)	0,500	0,14 (8)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
<b>Si1</b>	x	0,835(6)	1,000 (0)	0,832(4)	1,000 (0)	0,833(3)	1,000 (0)	0,83(1)	1,000 (0)	0,834(6)	1,000 (0)
	y	0,039(4)		0,043(6)		0,041(3)		0,048(7)		0,045(9)	
	z	0,419(5)		0,420(6)		0,418(5)		0,418(6)		0,408(6)	
<b>Si2</b>	x	0,043(5)	1,000 (0)	0,048(5)	1,000 (0)	0,042(4)	1,000 (0)	0,043(6)	1,000 (0)	0,044(6)	1,000 (0)
	y	0,840(5)		0,840(3)		0,835(4)		0,828(7)		0,833(7)	
	z	0,082(5)		0,087(6)		0,082(6)		0,082(6)		0,083(6)	
<b>O1</b>	x	0,198(7)	1,000 (0)	0,21(1)	1,000 (0)	0,216(7)	1,000 (0)	0,22(2)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)
	y	0,408(8)		0,41(2)		0,414(6)		0,42(8)		0,41(2)	
	z	0,50(1)		0,48(1)		0,489(8)		0,49(1)		0,50(1)	
<b>O2</b>	x	0,416(9)	1,000 (0)	0,40(1)	1,000 (0)	0,426(6)	1,000 (0)	0,42(2)	1,000 (0)	0,41(2)	1,000 (0)
	y	0,22(1)		0,21(1)		0,202(6)		0,21(2)		0,21(2)	
	z	0,01(1)		0,02(1)		0,010(9)		0,01(1)		0,01(1)	
<b>O3</b>	x	0,73(1)	1,000 (0)	0,72(1)	1,000 (0)	0,726(8)	1,000 (0)	0,72(2)	1,000 (0)	0,72(1)	1,000 (0)
	y	0,97(1)		0,96(1)		0,957(7)		0,96(1)		0,95(1)	
	z	0,38(1)		0,39(1)		0,377(8)		0,37(1)		0,37(1)	
<b>O4</b>	x	0,962(9)	1,000 (0)	0,97(1)	1,000 (0)	0,965(9)	1,000 (0)	0,96(1)	1,000 (0)	0,96(1)	1,000 (0)
	y	0,720(9)		0,736(9)		0,722(9)		0,72(2)		0,71(1)	
	z	0,12(1)		0,11(1)		0,117(9)		0,13(1)		0,13(1)	
<b>O5</b>	x	0,81(1)	1,000 (0)	0,82(1)	1,000 (0)	0,815(8)	1,000 (0)	0,83(1)	1,000 (0)	0,82(2)	1,000 (0)
	y	0,052(8)		0,06(1)		0,047(7)		0,07(1)		0,06(2)	
	z	0,56(1)		0,58(1)		0,56(1)		0,571(9)		0,56(1)	
<b>O6</b>	x	0,05(1)	1,000 (0)	0,06(1)	1,000 (0)	0,051(8)	1,000 (0)	0,06(1)	1,000 (0)	0,06(1)	1,000 (0)
	y	0,82(1)		0,822(9)		0,815(6)		0,82(1)		0,83(1)	
	z	0,94(1)		0,92(1)		0,94(1)		0,943(9)		0,94(1)	
<b>O7</b>	x	0,90(1)	1,000 (0)	0,91(1)	1,000 (0)	0,894(6)	1,000 (0)	0,91(1)	1,000 (0)	0,897(9)	1,000 (0)
	y	0,89(1)		0,90(1)		0,884(8)		0,90(1)		0,90(1)	
	z	0,89(2)		0,89(1)		0,89(1)		0,89(1)		0,88(1)	
<b>O8</b>	x	0,89(1)	1,000 (0)	0,89(1)	1,000 (0)	0,890(8)	1,000 (0)	0,89(1)	1,000 (0)	0,90(1)	1,000 (0)
	y	0,90(1)		0,90(1)		0,899(8)		0,91(1)		0,91(1)	
	z	0,61(2)		0,61(1)		0,61(1)		0,60(1)		0,60(1)	
<b>Ca1 (%)</b>		110(20)	90	94(7)	95	110(20)	95	100(20)	98	110(20)	105
<b>Ca2 (%)</b>		70(20)	(20)	96(5)	(6)	80(20)	(20)	96(3)	(12)	100(20)	(20)
<b>Al1 (%)</b>		78(36)		60(36)		54(24)		60(42)		42(36)	
<b>Al2 (%)</b>		78(36)	79	48(36)	62	66(36)	64	66(36)	62	60(36)	58
<b>Al3 (%)</b>		80(20)	(28)	70(14)	(25)	66(16)	(22)	58(18)	(28)	58(18)	(26)
<b>Al4 (%)</b>		80(20)		70(14)		72(14)		66(18)		72(16)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

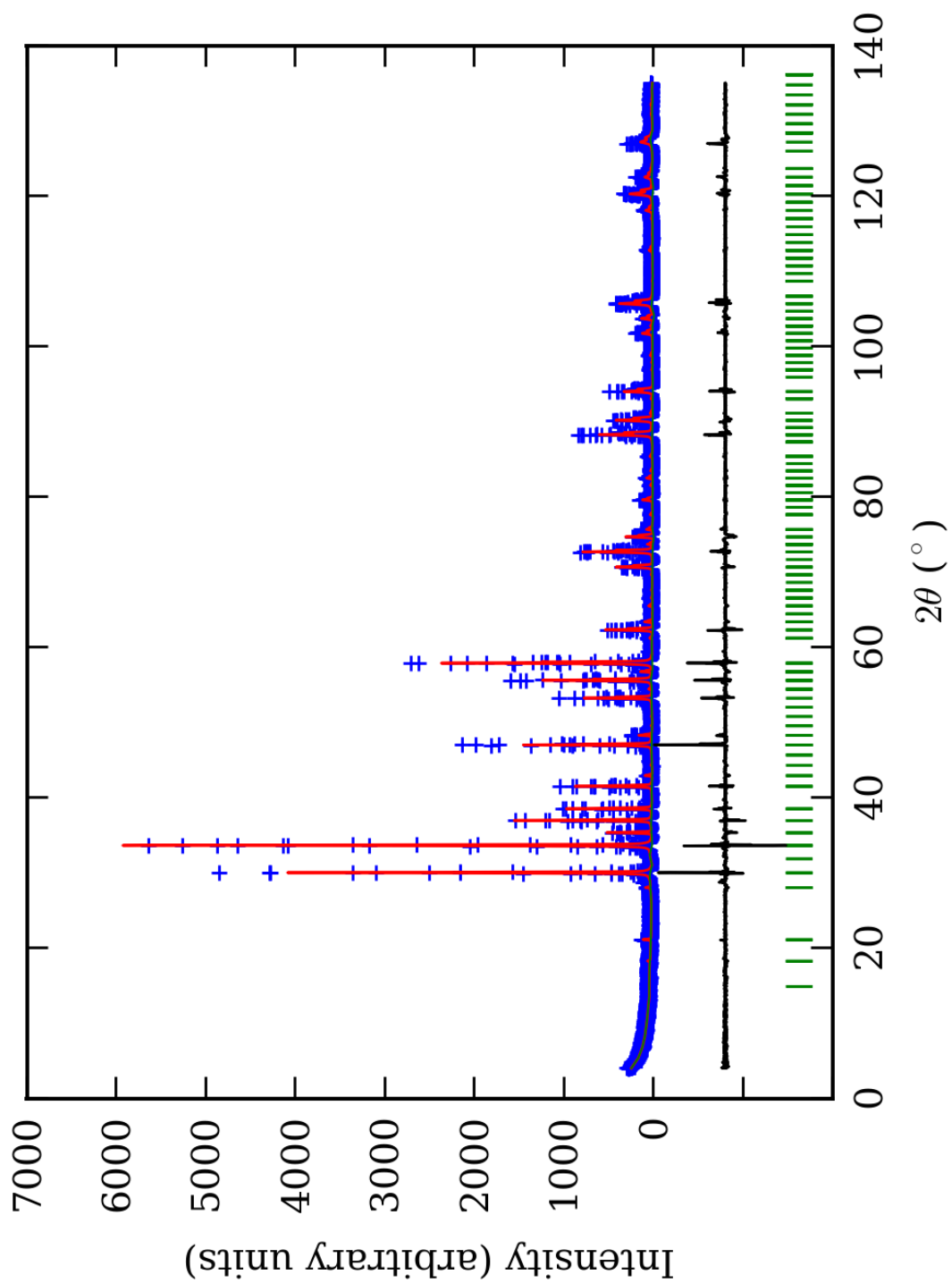
PRILOG 60. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja (u Å) u  $R\bar{3}$  p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si(1)-O(2)	1*	1,68(7) <sup>1</sup>	1,75(9)	1,41(6)	1,5(1)	1,6(2)
Si(1)-O(3)	1	1,67(8)	1,76(6)	1,79(5)	1,8(1)	1,8(1)
Si(1)-O(5)	1	1,60(7)	1,68(7)	1,56(7)	1,64(7)	1,6(1)
Si(1)-O(8)	1	1,4(1)	1,6(1)	1,48(9)	1,6(2)	1,7(2)
sr. vr. Si(1)-O		<b>1,59(8)</b>	<b>1,70(8)</b>	<b>1,56(7)</b>	<b>1,6(1)</b>	<b>1,7(2)</b>
Si(2)-O(1)	1	1,50(6)	1,64(8)	1,68(6)	1,7(1)	1,7(1)
Si(2)-O(4)	1	1,82(6)	1,60(5)	1,73(6)	1,7(1)	1,8(1)
Si(2)-O(6)	1	1,51(6)	1,81(6)	1,52(7)	1,48(7)	1,47(9)
Si(2)-O(7)	1	1,4(1)	1,7(1)	1,38(8)	1,7(2)	1,7(2)
sr. vr. Si(2)-O		<b>1,56(7)</b>	<b>1,69(7)</b>	<b>1,58(7)</b>	<b>1,6(1)</b>	<b>1,7(1)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,58(8)</b>	<b>1,70(8)</b>	<b>1,57(7)</b>	<b>1,6(1)</b>	<b>1,7(2)</b>
Y(1)-O(7)	6	<b>2,11(8)</b>	<b>1,93(5)</b>	<b>2,20(5)</b>	<b>2,02(8)</b>	<b>2,12(7)</b>
Y(2)-O(8)	6	<b>2,11(7)</b>	<b>2,08(5)</b>	<b>2,10(5)</b>	<b>1,99(8)</b>	<b>1,93(8)</b>
Y(3)-O(2)	2	2,05(6)	1,89(7)	2,11(5)	2,0(1)	2,0(1)
Y(3)-O(4)	2	1,96(6)	2,07(6)	2,00(8)	1,8(1)	1,9(1)
Y(3)-O(6)	2	2,15(9)	1,87(7)	2,13(6)	2,0(1)	2,1(1)
sr. vr. Y(3)-O		<b>2,05(7)</b>	<b>1,94(7)</b>	<b>2,08(6)</b>	<b>1,9(1)</b>	<b>2,0(1)</b>
Y(4)-O(1)	2	2,01(5)	1,90(7)	2,00(4)	2,03(9)	2,0(1)
Y(4)-O(3)	2	2,1(1)	1,92(9)	1,86(8)	1,9(2)	1,8(1)
Y(4)-O(5)	2	2,06(6)	1,93(7)	2,16(5)	1,85(6)	2,0(1)
sr. vr. Y(4)-O		<b>2,06(7)</b>	<b>1,92(8)</b>	<b>2,01(6)</b>	<b>1,9(1)</b>	<b>1,9(1)</b>
sr. vr. Y-O		<b>2,08(7)</b>	<b>1,97(6)</b>	<b>2,10(6)</b>	<b>1,95(9)</b>	<b>1,99(9)</b>
X(1)-O(1)	1	2,60(8)	2,5(1)	2,53(8)	2,5(2)	2,4(2)
X(1)-O(2)	1	2,50(6)	2,46(9)	2,82(5)	2,6(1)	2,4(1)
X(1)-O(3)	1	2,39(9)	2,45(8)	2,49(8)	2,4(2)	2,5(2)
X(1)-O(3)	1	2,32(6)	2,22(6)	2,38(5)	2,36(9)	2,39(9)
X(1)-O(4)	1	2,42(7)	2,63(7)	2,42(8)	2,4(1)	2,4(1)
X(1)-O(4)	1	2,24(6)	2,26(6)	2,25(6)	2,4(1)	2,27(9)
X(1)-O(5)	1	2,19(7)	2,3(1)	2,16(7)	2,4(1)	2,4(2)
X(1)-O(5)	1	2,25(7)	2,31(5)	2,23(5)	2,4(1)	2,4(1)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,36(7)</b>	<b>2,39(8)</b>	<b>2,41(6)</b>	<b>2,4(1)</b>	<b>2,4(1)</b>
X(2)-O(1)	1	2,33(8)	2,3(1)	2,17(7)	2,2(2)	2,3(2)
X(2)-O(2)	1	2,22(6)	2,34(7)	2,23(4)	2,2(1)	2,3(1)
X(2)-O(5)	1	2,50(8)	2,5(1)	2,45(8)	2,6(1)	2,5(2)
X(2)-O(6)	1	2,50(7)	2,46(6)	2,54(7)	2,61(8)	2,6(1)
X(2)-O(7)	1	2,5(1)	2,42(9)	2,61(8)	2,5(1)	2,4(1)
X(2)-O(7)	1	2,42(9)	2,34(6)	2,37(5)	2,3(1)	2,41(9)
X(2)-O(8)	1	2,5(1)	2,32(8)	2,39(8)	2,3(1)	2,4(1)
X(2)-O(8)	1	2,54(8)	2,52(5)	2,57(6)	2,61(9)	2,51(9)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,44(8)</b>	<b>2,40(8)</b>	<b>2,42(7)</b>	<b>2,4(1)</b>	<b>2,4(1)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,40(8)</b>	<b>2,40(8)</b>	<b>2,42(6)</b>	<b>2,4(1)</b>	<b>2,4(1)</b>

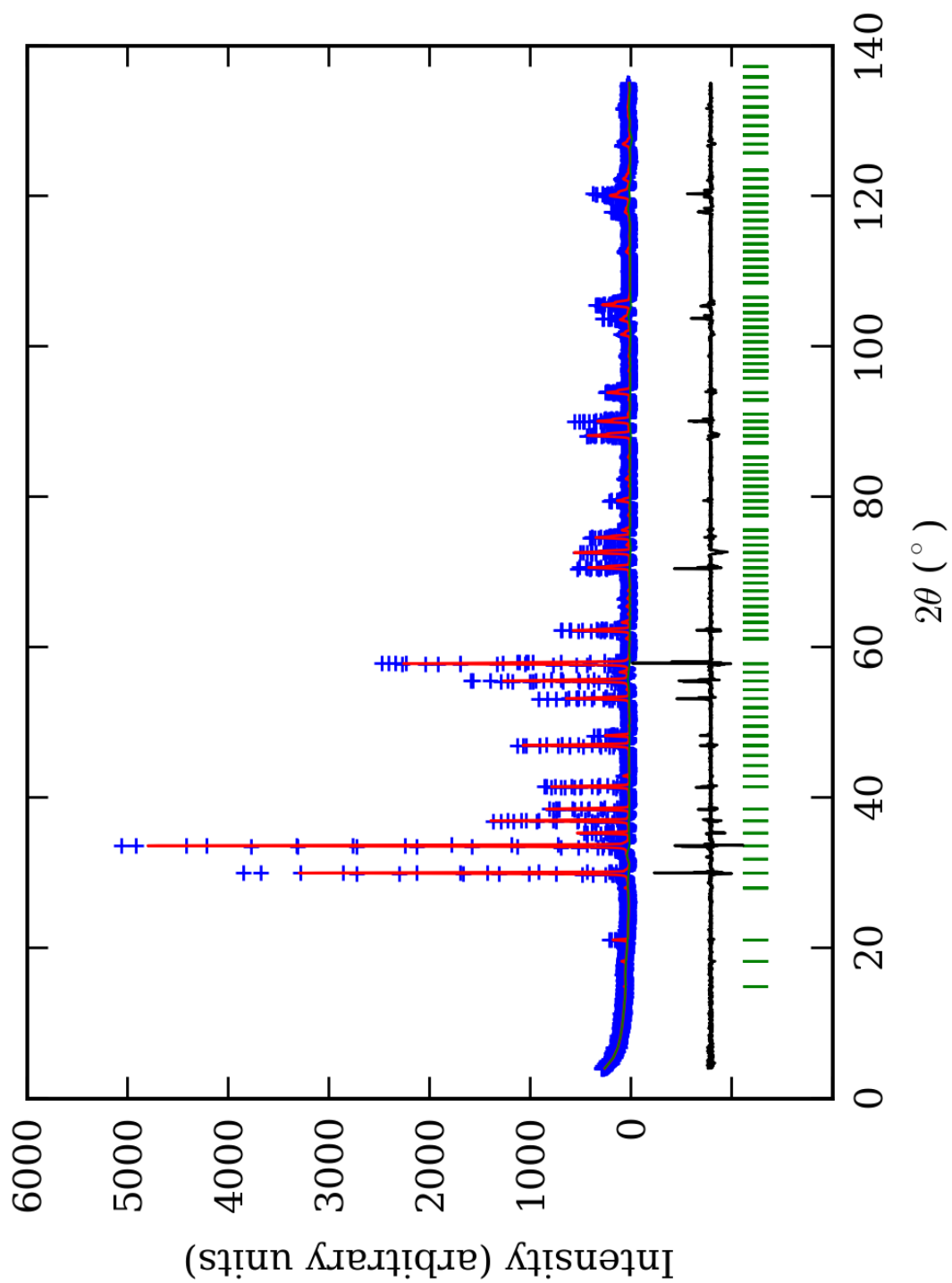
\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

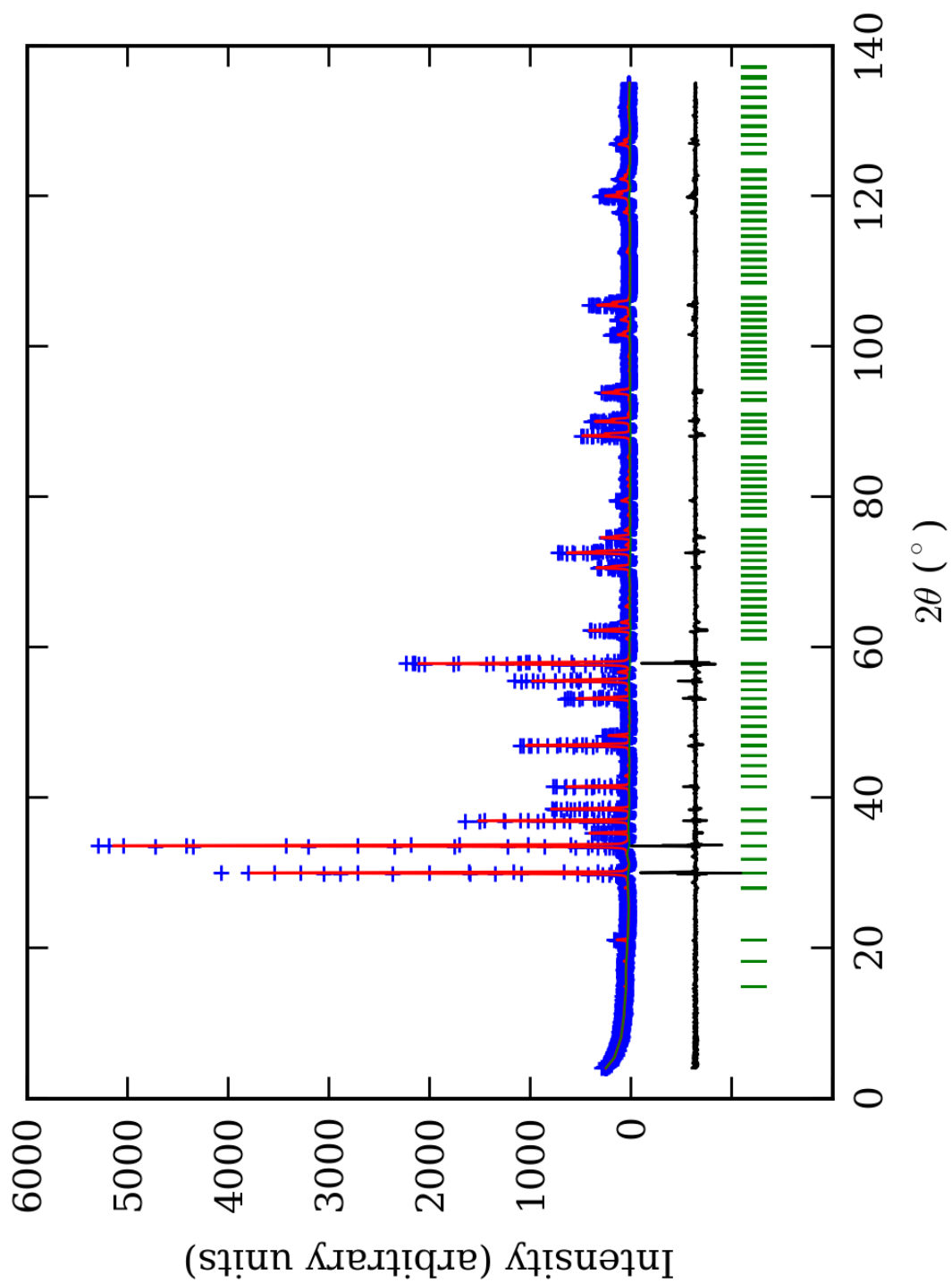




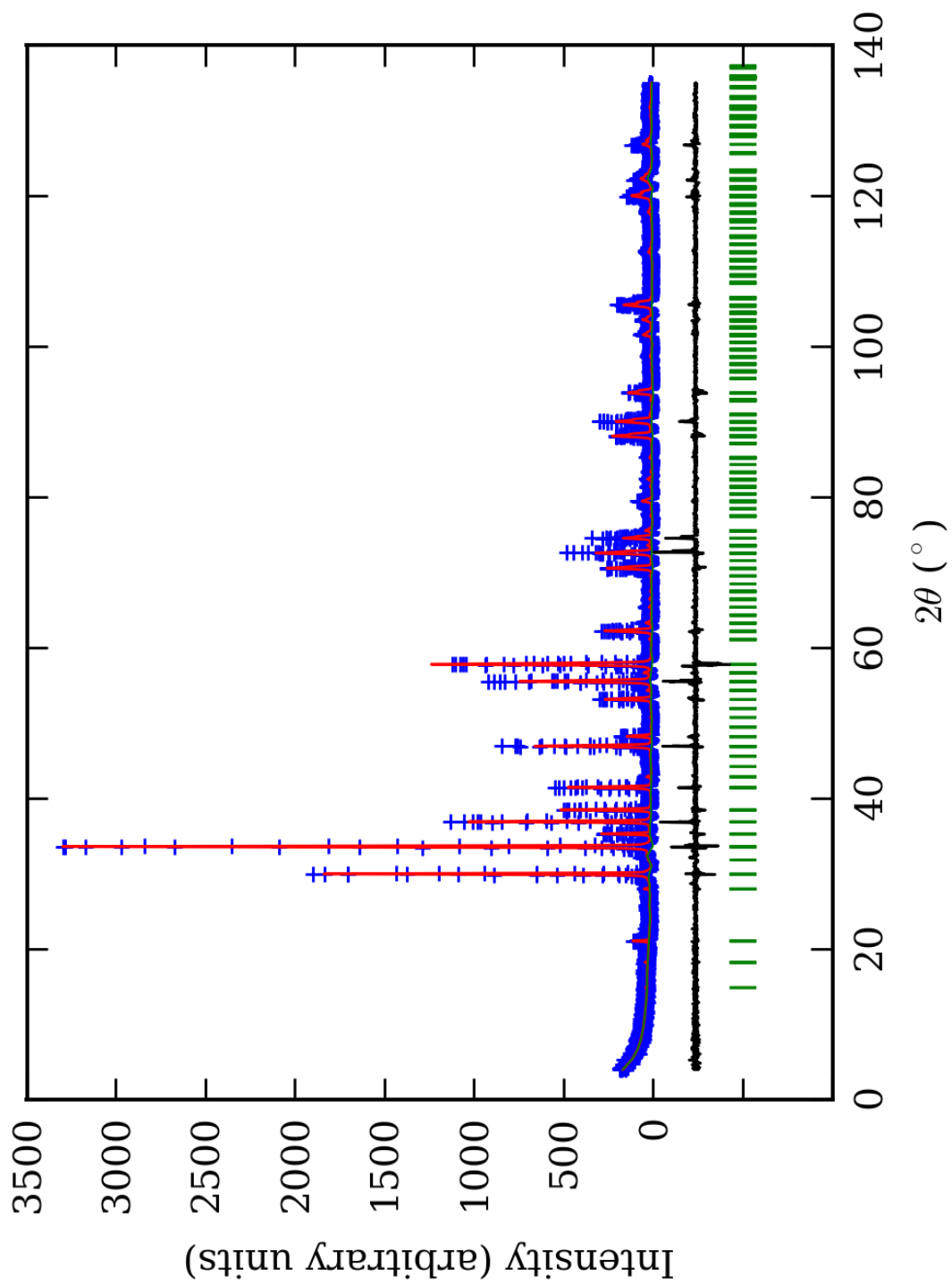
PRILOG 61. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u I4<sub>1</sub>/acd p.g.



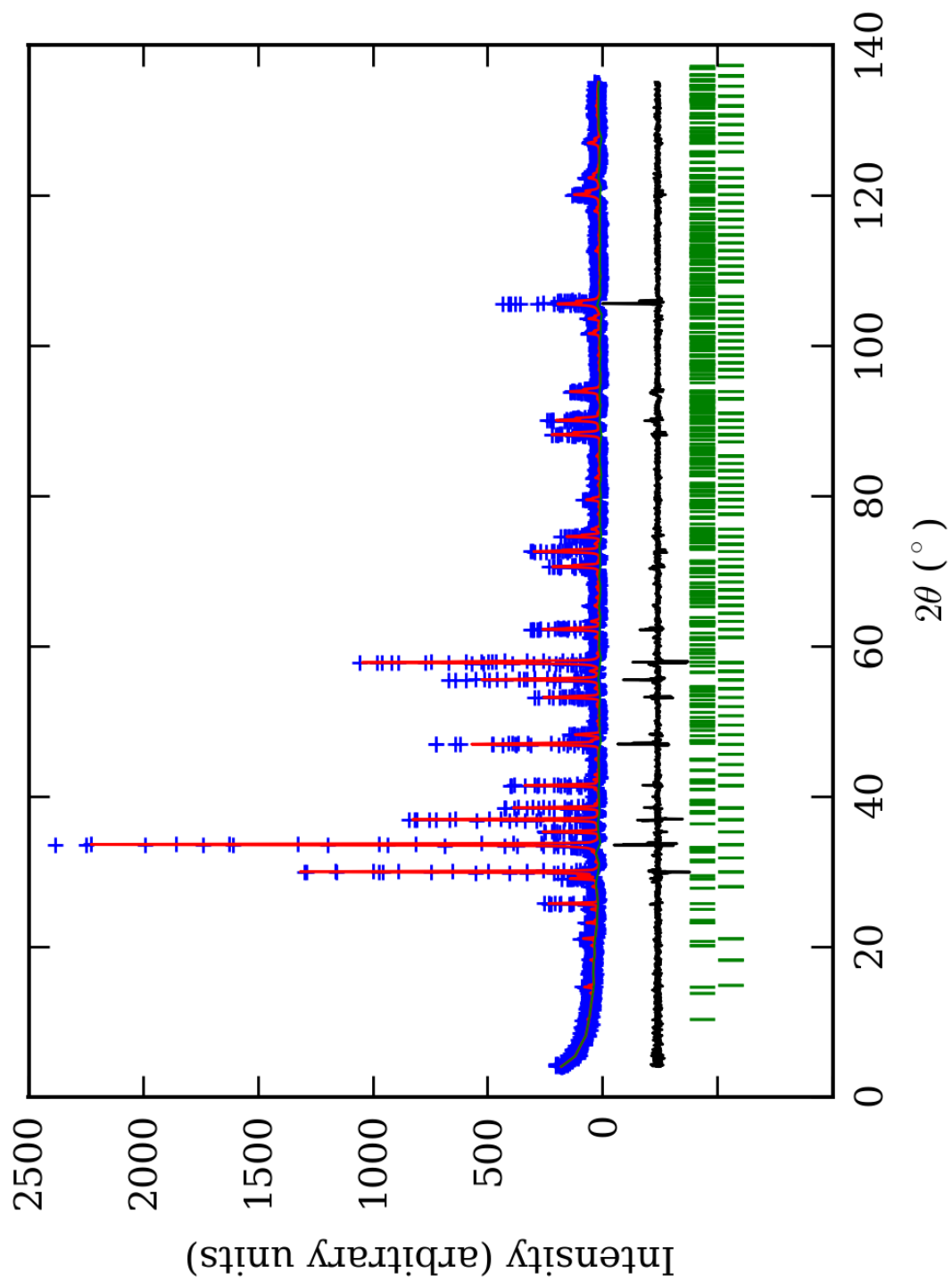
PRILOG 62. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u I4<sub>1</sub>/acd p.g.



PRILOG 63. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u I4<sub>1</sub>/acd p.g.



PRILOG 64. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I4<sub>1</sub>/acd p.g.



PRILOG 65. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u I4<sub>1</sub>/acd p.g.

PRILOG 66. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u  $I4_1/acd$  p.g.

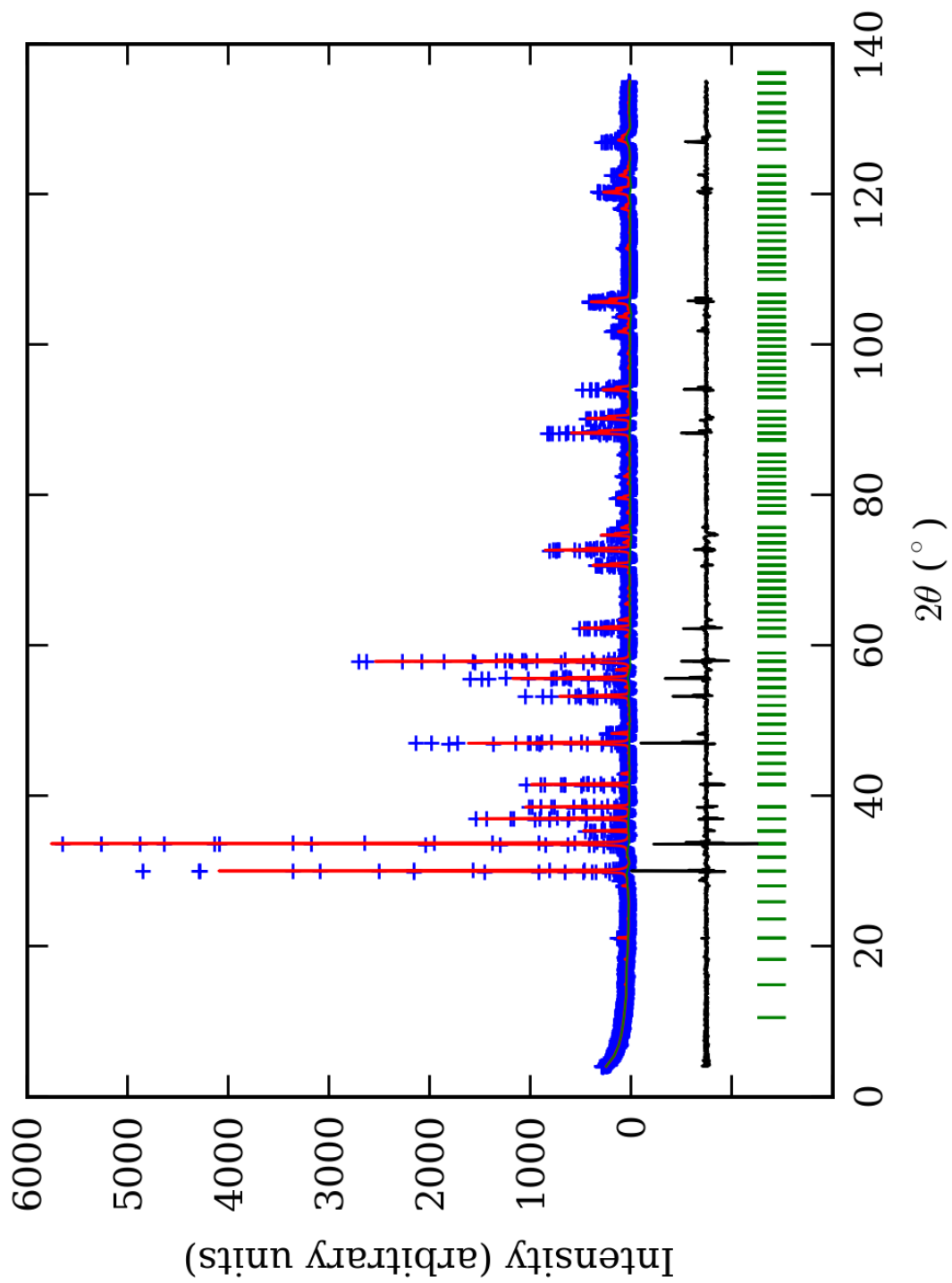
Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,3217	2,4184	1,8776	1,9130	1,6481	
Faktor skale	0,0000138(7)*	0,0000180(9)	0,0000162(6)	0,0000097(5)	0,0000073(3)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(8)	0,33(9)	0,14(5)	0,26(8)	0,11(7)	
Ukupni temp. faktor	0,1(1)	0,4(1)	0,35(7)	0,7(1)	0,3(1)	
Parametri polu-širine	U	0,034(7)	0,08(1)	0,009(5)	0,02(1)	0,024(7)
	V	-0,011(8)	-0,04(1)	0,018(7)	0,02(1)	-0,007(9)
	W	0,014(2)	0,026(4)	0,0159(21)	0,013(4)	0,027(3)
Preferentna orijent.	0,59(6)	0,38(6)	0,37(4)	0,32(4)	0,56(4)	
Parametri asimetrije	As 1	0,02(5)	0,16(4)	0,09(4)	0,09(6)	0,08(4)
	As 2	0,048(8)	0,065(7)	0,054(5)	0,044(7)	0,046(5)
X parametar	0,004(3)	0,002(2)	0,006(1)	0,004(2)	0,008(1)	
Nulta tačka	0,009(6)	0,030(8)	-0,001(6)	0,02(1)	-0,040(6)	
a <sub>0</sub>	11,9197(9)	11,934(1)	11,9371(7)	11,9292(8)	11,931(1)	
c <sub>0</sub>	11,917(1)	11,929(2)	11,9293(9)	11,949(2)	11,926(1)	
V <sub>0</sub>	1693,2(2)	1698,9(4)	1699,9(2)	1700,5(3)	1697,6(2)	
N-P+C	6424	6424	6424	6424	6401	
R <sub>p</sub>	14,6	14,1	11,9	13,4	13,1	
R <sub>wp</sub>	19,7	19,3	16,2	18,9	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,48	11,42	11,63	14,09	14,04	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,7	22,1	18,6	21,8	24,2	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	26,0	25,4	21,3	25,6	26,5	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,10	15,07	15,35	19,11	21,06	
Chi2	2,96	2,84	1,93	1,79	1,58	
Chi2 (Bragg contr.)	3,48	3,26	2,22	2,06	1,66	
DW-stat.	0,8720	0,8835	1,2572	1,3018	1,4119	
DW-exp.	1,9629	1,9629	1,9629	1,9629	1,9702	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>8,47</b>	<b>8,48</b>	<b>5,78</b>	<b>7,62</b>	<b>6,46</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,16</b>	<b>7,24</b>	<b>5,96</b>	<b>7,38</b>	<b>5,68</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 67. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I<sub>4</sub>/acd p.g.

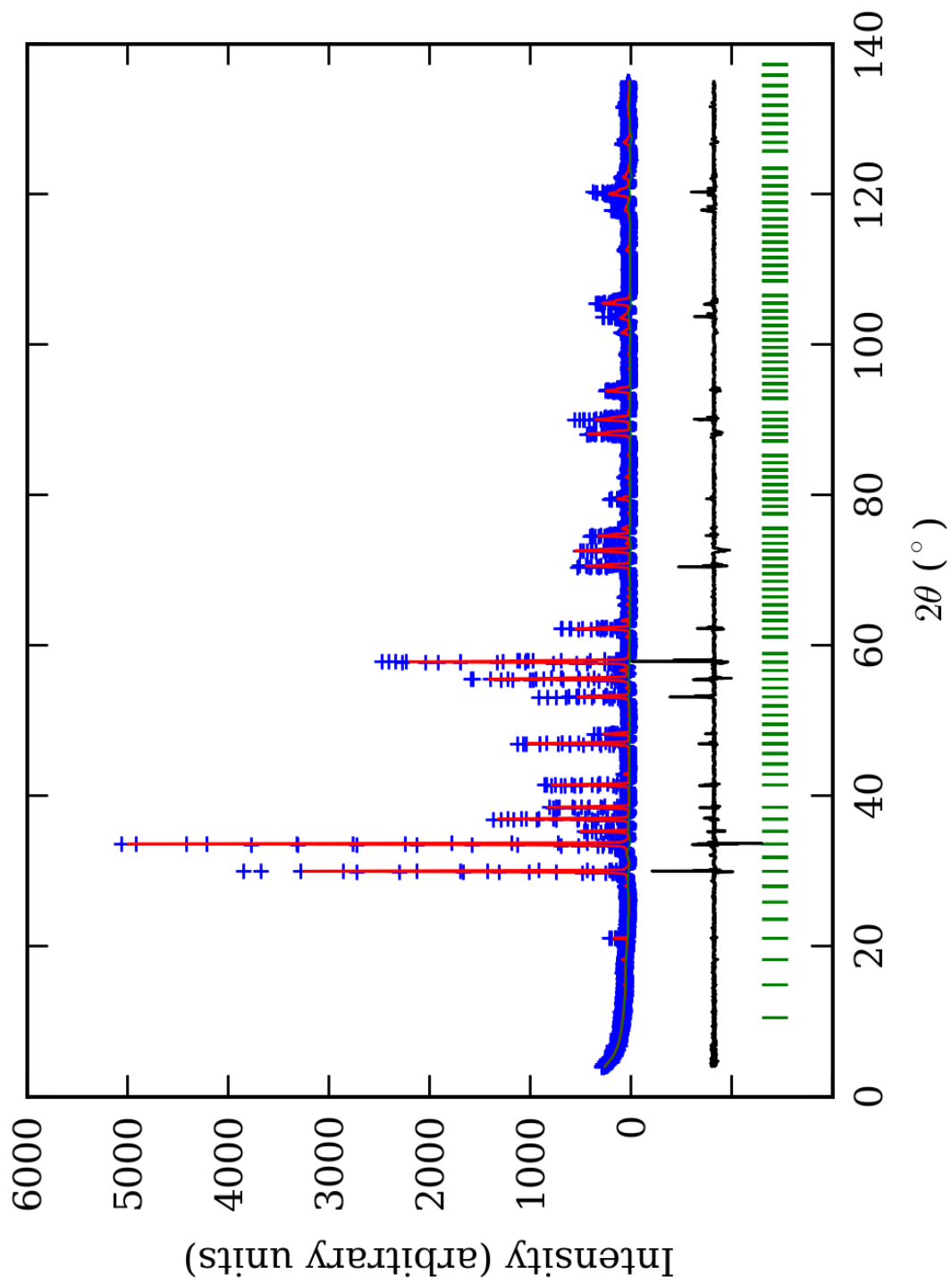
Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,3217		2,4184		1,8776		1,9130		1,6481	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,127(2)*	0,32 (7)	0,124(2)	0,49 (1)	0,127(8)	0,31 (4)	0,128(1)	0,47 (4)	0,123(2)	0,47 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Mn1	x	0,127(2)	0,18 (7)	/	/	0,127(8)	0,19 (4)	0,128(1)	0,03 (4)	/	/
	y	0,000		/		0,000		0,000		/	
	z	0,250		/		0,250		0,250		/	
Ca2	x	0,000	0,24 (1)	0,000	0,23 (1)	0,000	0,223 (6)	0,000	0,26 (1)	0,000	0,28 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,125		0,125		0,125		0,125		0,125	
Al	x	0,000	0,425 (9)	0,000	0,32 (1)	0,000	0,344 (8)	0,000	0,293 (8)	0,000	0,302 (8)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe	x	0,000	0,075 (9)	0,000	0,18 (1)	0,000	0,156 (8)	0,000	0,207 (8)	0,000	0,198 (8)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Si1	x	0,374(3)	0,500 (0)	0,384(2)	0,500 (0)	0,374(2)	0,500 (0)	0,368(2)	0,500 (0)	0,383(2)	0,500 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si2	x	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,375		0,375		0,375		0,375		0,375	
O1	x	0,302(4)	1,000 (0)	0,285(4)	1,000 (0)	0,306(2)	1,000 (0)	0,292(2)	1,000 (0)	0,284(3)	1,000 (0)
	y	0,100(4)		0,100(3)		0,095(2)		0,095(2)		0,097(3)	
	z	0,203(3)		0,199(4)		0,211(2)		0,206(3)		0,203(2)	
O2	x	0,092(5)	1,000 (0)	0,092(4)	1,000 (0)	0,097(2)	1,000 (0)	0,095(2)	1,000 (0)	0,096(3)	1,000 (0)
	y	0,202(4)		0,211(3)		0,200(2)		0,196(3)		0,205(4)	
	z	0,287(3)		0,282(3)		0,284(2)		0,292(3)		0,296(2)	
O3	x	0,205(4)	1,000 (0)	0,206(5)	1,000 (0)	0,206(2)	1,000 (0)	0,203(3)	1,000 (0)	0,196(4)	1,000 (0)
	y	0,290(4)		0,286(4)		0,284(2)		0,286(2)		0,287(4)	
	z	0,086(2)		0,099(3)		0,080(2)		0,102(3)		0,097(2)	
Ca1 (%)		64(14)		98(2)		76		94(8)		103	
Ca2 (%)		96(4)		92(4)		89(2)		104(4)		112(4)	
Al (%)		85(2)		64(2)		69(2)		59(2)		60(2)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

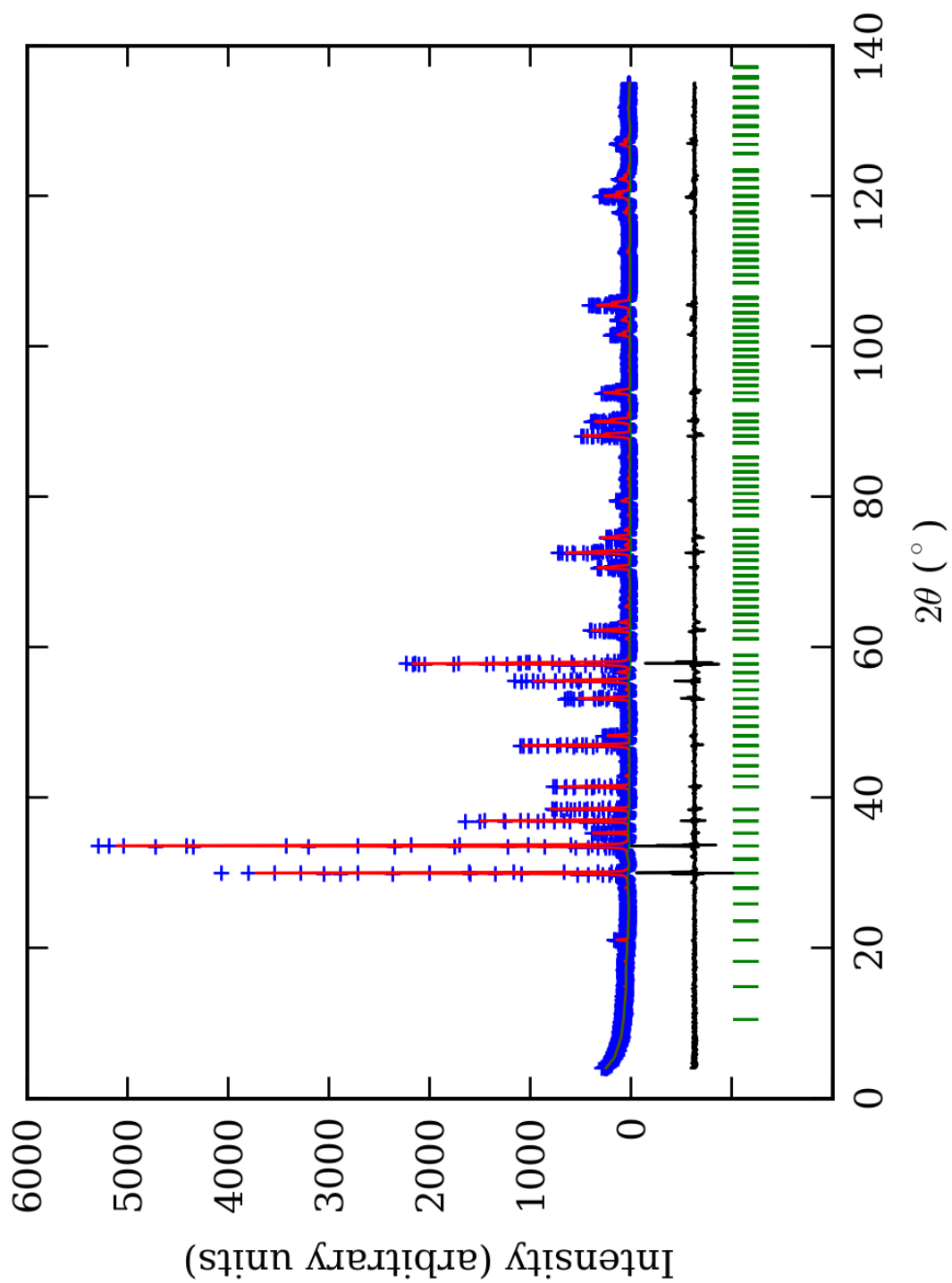


PRILOG 68. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u I4<sub>1/a</sub> p.g.

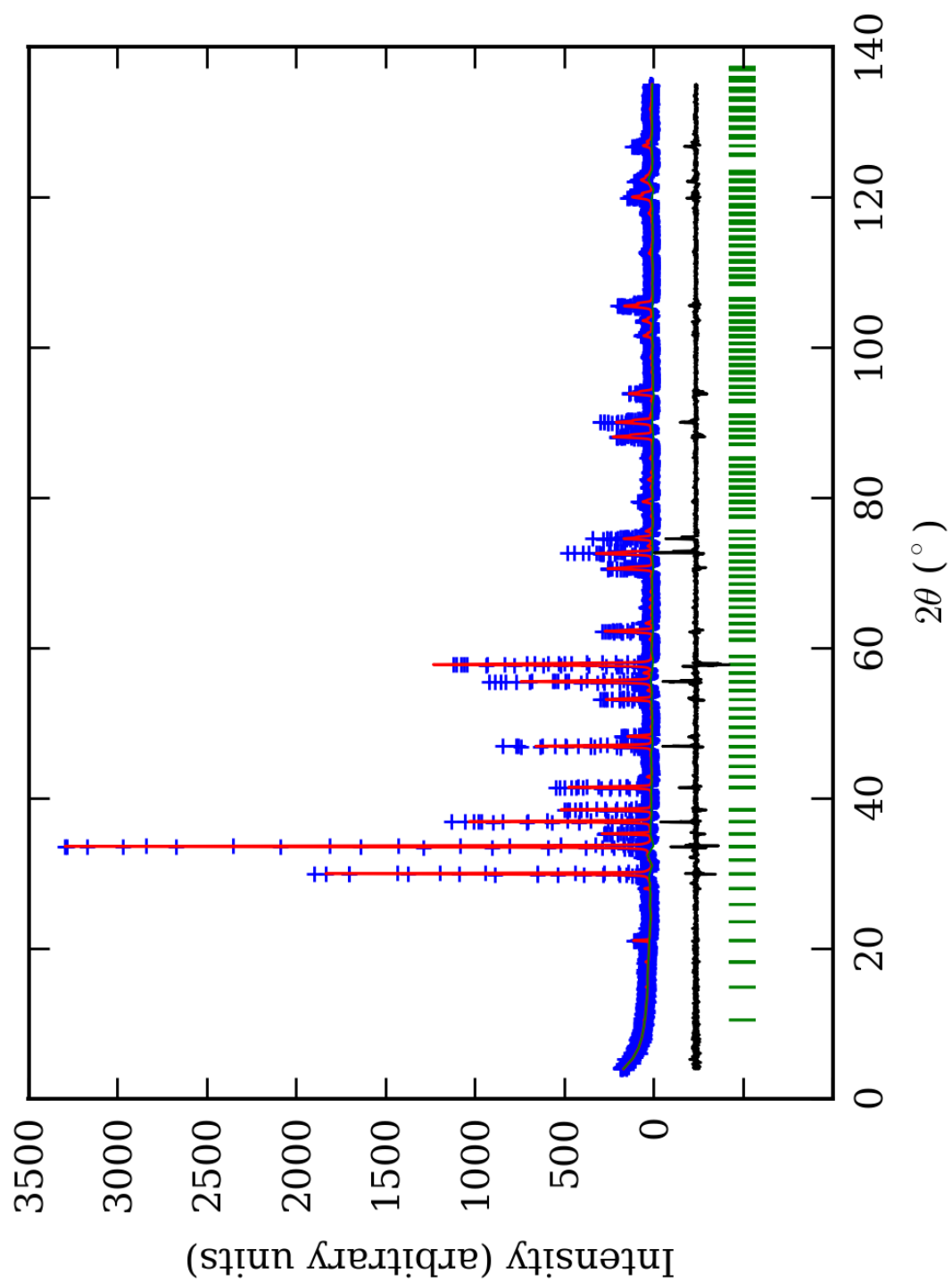




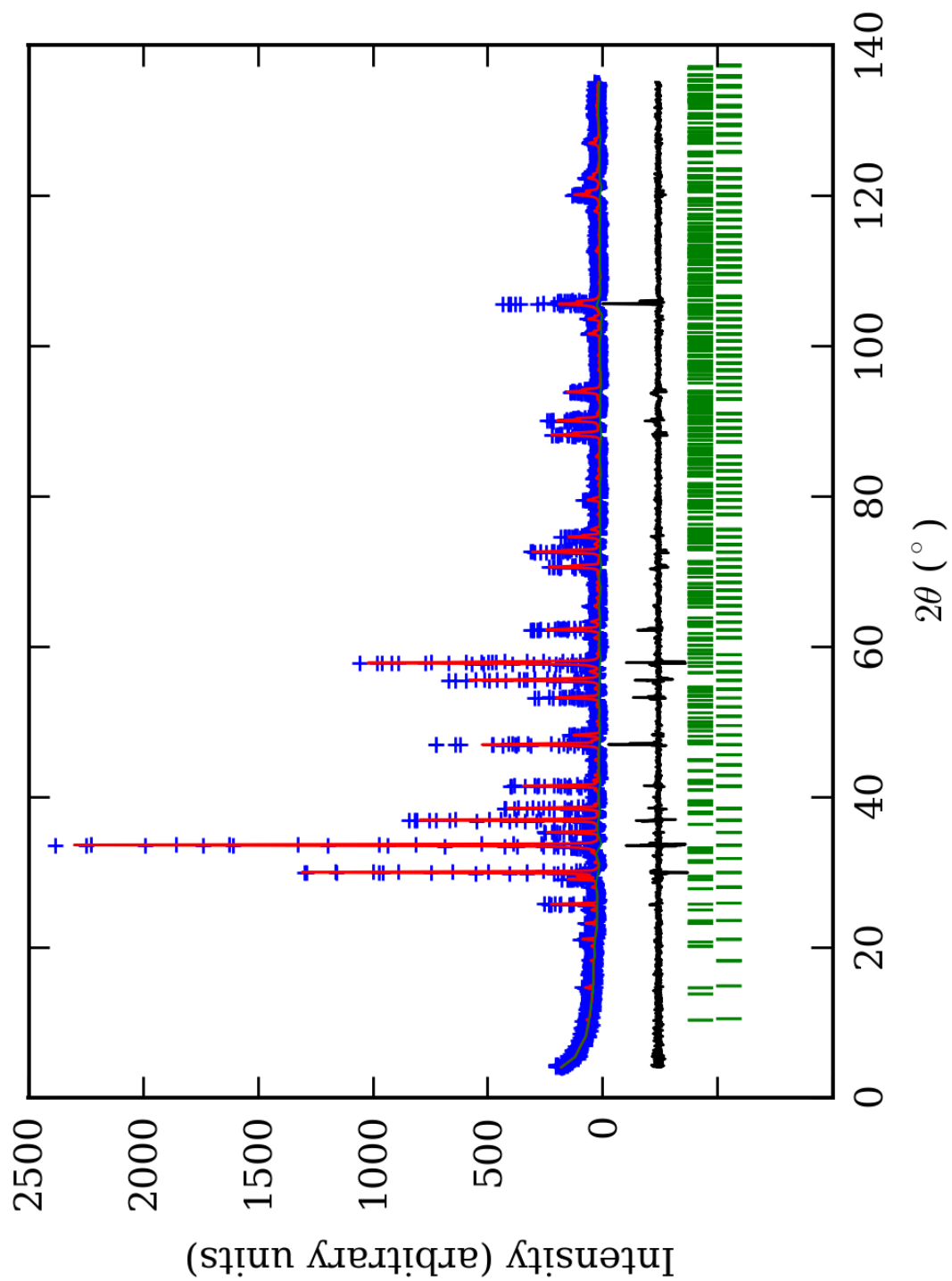
PRILOG 69. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u I4<sub>1</sub>/a p.g.



PRILOG 70. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u I4<sub>1</sub>/a p.g.



PRILOG 71. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I4<sub>1</sub>/a p.g.



PRILOG 72. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u I4<sub>1</sub>/a p.g.

PRILOG 73. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I4<sub>1</sub>/a p.g.

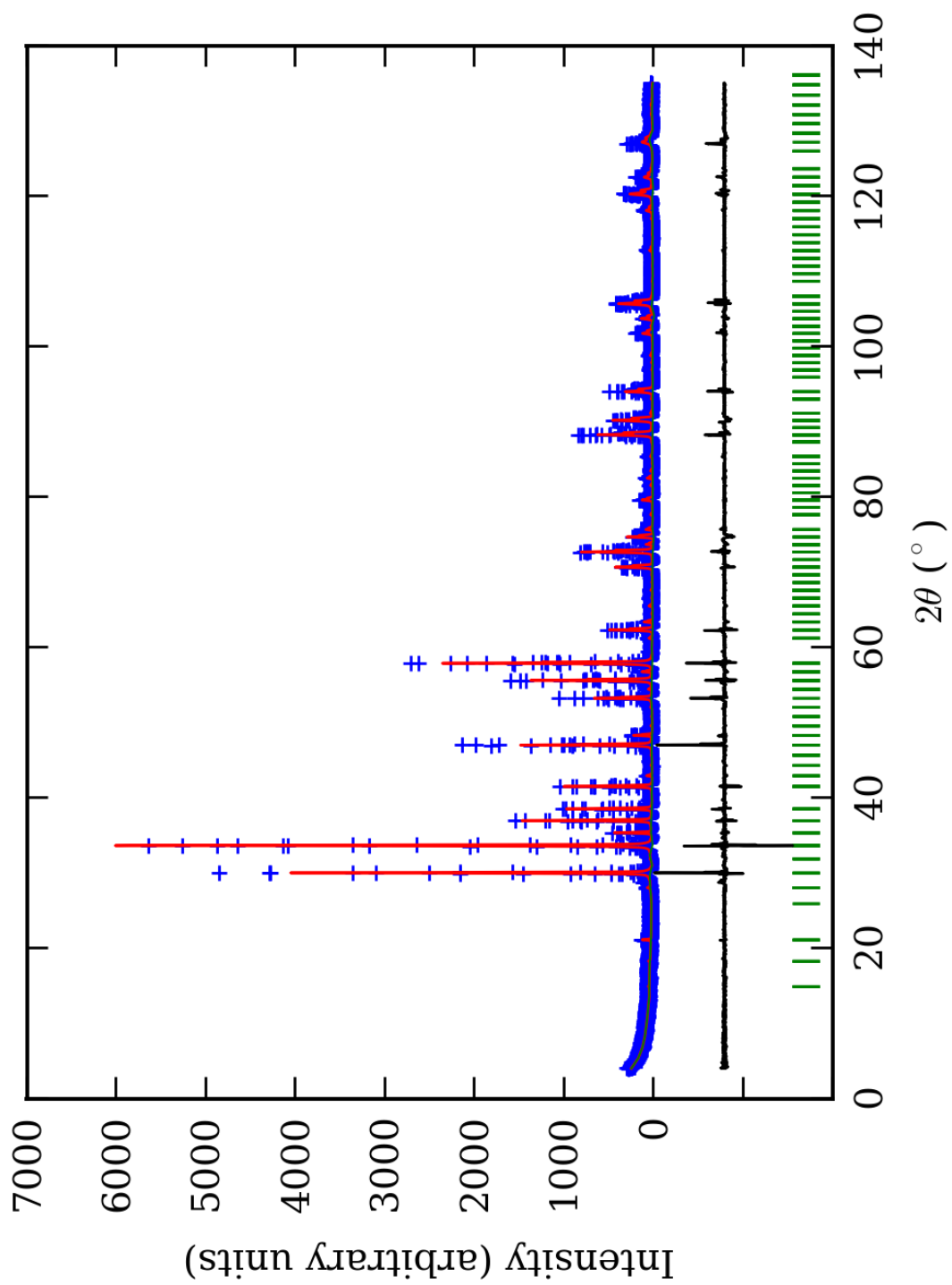
Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,2030	2,3463	1,8616	1,8786	1,6601	
Faktor skale	0,0000127(7)*	0,000017(1)	0,0000160(7)	0,0000096(5)	0,0000030(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(7)	0,34(8)	0,12(5)	0,24(8)	0,10(8)	
Ukupni temp. faktor	0,3(1)	0,3(1)	0,46(7)	0,6(1)	0,2(1)	
Parametri polu-širine	U	0,029(6)	0,08(1)	0,006(5)	0,01(1)	0,016(7)
	V	-0,005(7)	-0,04(1)	0,021(7)	0,03(1)	-0,005(9)
	W	0,012(2)	0,025(4)	0,015(2)	0,013(4)	0,027(3)
Preferentna orijent.	0,54(5)	0,25(5)	0,31(4)	0,33(4)	0,30(3)	
Parametri asimetrije	As 1	0,05(5)	0,16(4)	0,09(4)	0,10(6)	0,08(4)
	As 2	0,050(7)	0,065(6)	0,054(5)	0,044(6)	0,044(5)
X parametar	0,004(1)	0,001(2)	0,006(1)	0,005(2)	0,007(4)	
Nulta tačka	0,012(6)	0,029(8)	0,000(6)	0,023(9)	-0,039(7)	
a <sub>0</sub>	11,9200(7)	11,931(1)	11,9373(6)	11,9293(8)	11,9260(7)	
c <sub>0</sub>	11,9171(9)	11,935(3)	11,9288(8)	11,950(2)	11,937(2)	
V <sub>0</sub>	1693,2(2)	1698,8(6)	1699,8(2)	1700,5(3)	1697,8(3)	
N-P+C	6409	6409	6409	6409	6386	
R <sub>p</sub>	14,1	14,0	11,9	13,3	13,0	
R <sub>wp</sub>	19,3	19,2	16,2	18,8	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,47	11,41	11,62	14,07	14,03	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	21,7	21,9	18,5	21,6	23,9	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	25,2	25,3	21,3	25,4	26,4	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,01	15,02	15,26	19,00	20,97	
Chi2	2,83	2,84	1,94	1,79	1,59	
Chi2 (Bragg contr.)	3,15	3,06	2,11	1,95	1,67	
DW-stat.	0,9080	0,8833	1,2520	1,3060	1,4043	
DW-exp.	1,9677	1,9677	1,9677	1,9677	1,9750	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>7,82</b>	<b>8,75</b>	<b>5,72</b>	<b>7,54</b>	<b>6,25</b>	
R <sub>F</sub>	<b>6,52</b>	<b>7,49</b>	<b>6,19</b>	<b>7,52</b>	<b>5,75</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenju standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

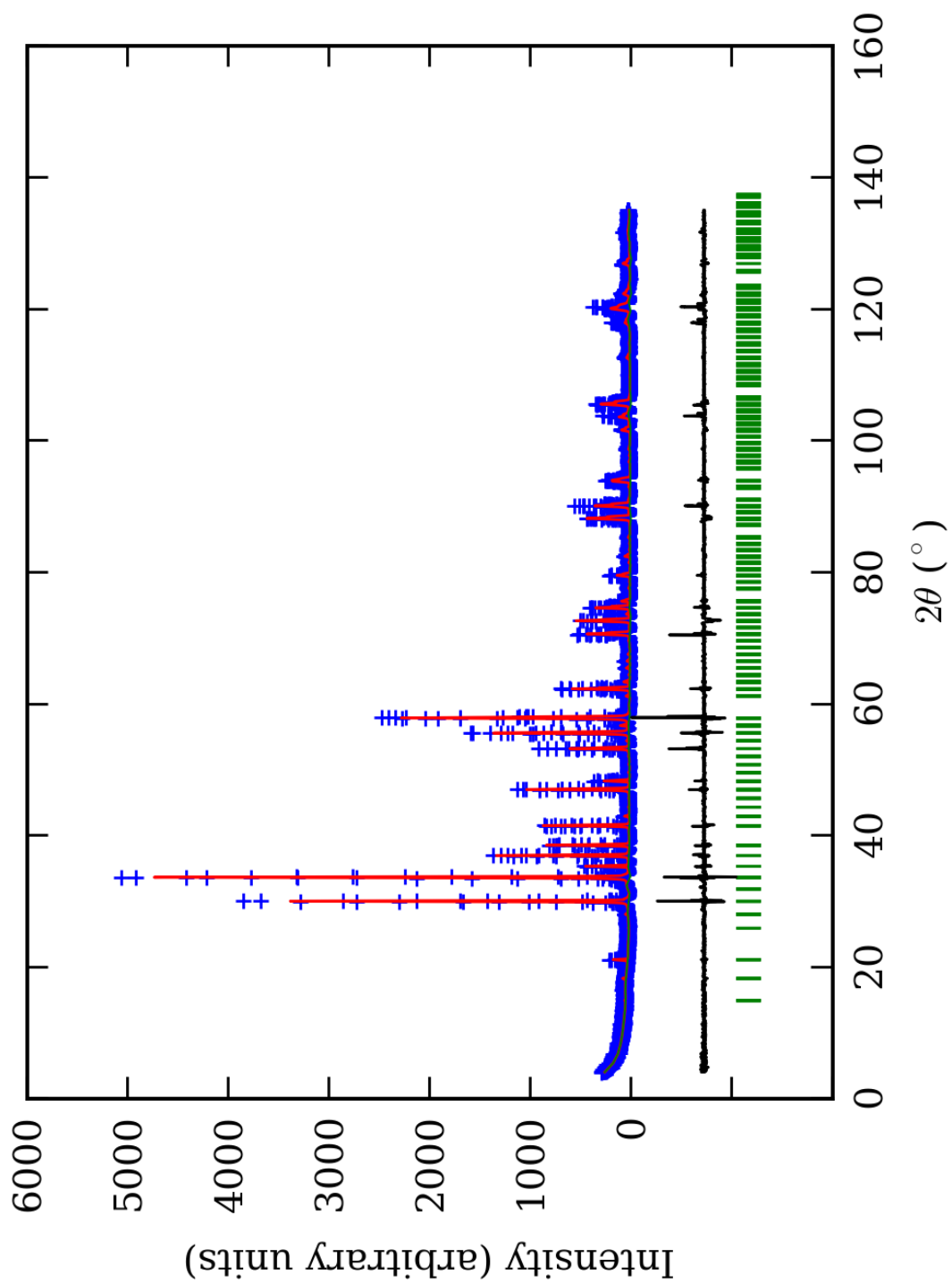
PRILOG 74. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I4/a p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,2030		2,3463		1,8616		1,8786		1,6601		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca1	x	0,627(2)*	1,12 (3)	0,628(2)	0,94 (4)	0,626(1)	1,11 (2)	0,629(2)	1,02 (2)	0,626(2)	1,00 (3)
	y	0,502(3)		0,499(4)		0,502(2)		0,498(4)		0,498(2)	
	z	0,248(3)		0,250(5)		0,250(3)		0,250(3)		0,244(2)	
Ca2	x	0,000	0,46 (3)	0,000	0,50 (3)	0,000	0,44 (2)	0,000	0,51 (3)	0,000	0,48 (2)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,878(5)		0,870(5)		0,875(7)		0,881(5)		0,877(3)	
Al1	x	0,000	0,42 (5)	0,000	0,30 (8)	0,000	0,31 (5)	0,000	0,32 (4)	0,000	0,32 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,08 (5)	0,000	0,20 (8)	0,000	0,19 (5)	0,000	0,18 (4)	0,000	0,18 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,000	0,45 (6)	0,000	0,34 (7)	0,000	0,36 (5)	0,000	0,27 (5)	0,000	0,27 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe2	x	0,000	0,05 (6)	0,000	0,16 (7)	0,000	0,14 (5)	0,000	0,23 (5)	0,000	0,23 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Si1	x	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,125		0,125		0,125		0,125		0,125	
Si2	x	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)	0,000	0,250 (0)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,625		0,625		0,625		0,625		0,625	
Si3	x	0,876(3)	1,000 (0)	0,867(3)	1,000 (0)	0,877(2)	1,000 (0)	0,869(3)	1,000 (0)	0,871(3)	1,000 (0)
	y	0,499(5)		0,497(6)		0,500(3)		0,499(6)		0,504(3)	
	z	0,252(6)		0,251(6)		0,250(5)		0,255(5)		0,253(4)	
O1	x	0,043(8)	1,000 (0)	0,03(1)	1,000 (0)	0,041(5)	1,000 (0)	0,033(7)	1,000 (0)	0,043(5)	1,000 (0)
	y	0,542(7)		0,55(1)		0,543(5)		0,549(7)		0,547(7)	
	z	0,671(4)		0,65(1)		0,673(5)		0,647(8)		0,670(8)	
O2	x	0,463(7)	1,000 (0)	0,468(8)	1,000 (0)	0,466(6)	1,000 (0)	0,461(9)	1,000 (0)	0,467(7)	1,000 (0)
	y	0,553(7)		0,54(1)		0,547(6)		0,544(7)		0,547(7)	
	z	0,337(5)		0,34(1)		0,328(6)		0,351(9)		0,358(7)	
O3	x	0,651(8)	1,000 (0)	0,648(7)	1,000 (0)	0,647(5)	1,000 (0)	0,659(7)	1,000 (0)	0,653(5)	1,000 (0)
	y	0,546(6)		0,529(9)		0,546(5)		0,544(9)		0,542(7)	
	z	0,039(6)		0,04(1)		0,044(6)		0,042(9)		0,044(7)	
O4	x	0,841(8)	1,000 (0)	0,835(5)	1,000 (0)	0,837(5)	1,000 (0)	0,850(7)	1,000 (0)	0,838(6)	1,000 (0)
	y	0,561(6)		0,535(7)		0,561(5)		0,541(9)		0,538(6)	
	z	0,948(6)		0,964(7)		0,962(6)		0,95(1)		0,928(8)	
O5	x	0,049(6)	1,000 (0)	0,049(9)	1,000 (0)	0,046(5)	1,000 (0)	0,050(7)	1,000 (0)	0,037(6)	1,000 (0)
	y	0,153(7)		0,152(9)		0,151(5)		0,149(7)		0,146(5)	
	z	0,033(5)		0,04(1)		0,027(6)		0,046(8)		0,048(6)	
O6	x	0,461(7)	1,000 (0)	0,450(8)	1,000 (0)	0,459(6)	1,000 (0)	0,443(6)	1,000 (0)	0,447(6)	1,000 (0)
	y	0,151(6)		0,15(1)		0,151(5)		0,161(6)		0,152(6)	
	z	0,975(5)		0,96(1)		0,975(6)		0,962(8)		0,966(8)	
Ca1 (%)	112(3)	102	94(4)	97	111(2)	100	102(2)	102	100(3)	98	
Ca2 (%)	92(6)	(4)	100(6)	(5)	88(4)	(3)	102(6)	(4)	96(4)	(4)	
Al1 (%)	84(10)	87	60(16)	64	62(10)	65	64(8)	59	64(10)	59	
Al2 (%)	90(12)	(11)	68(14)	(15)	72(10)	(10)	54(10)	(9)	54(10)	(10)	

\*Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

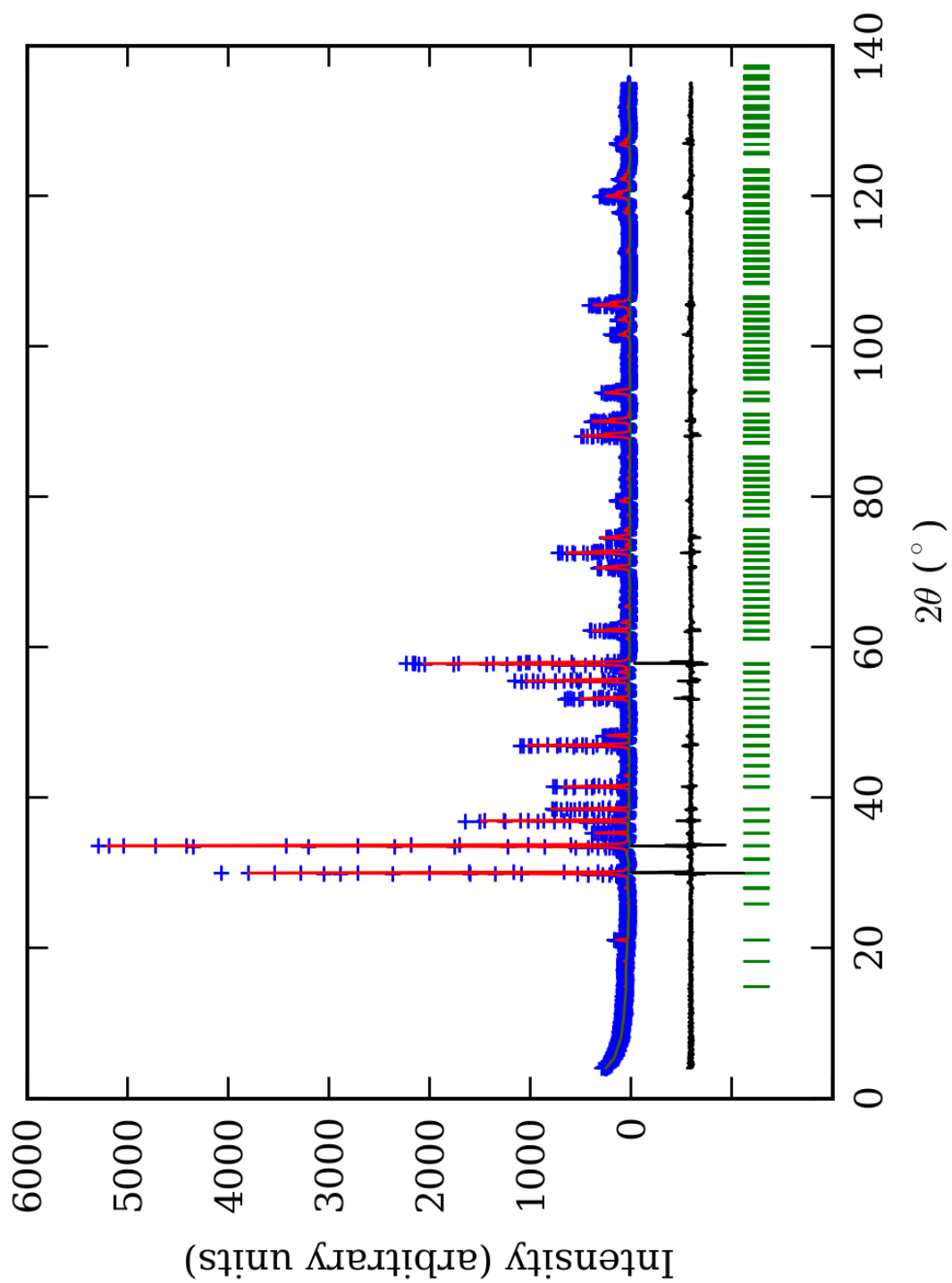


PRILOG 75. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u Ibca p.g.

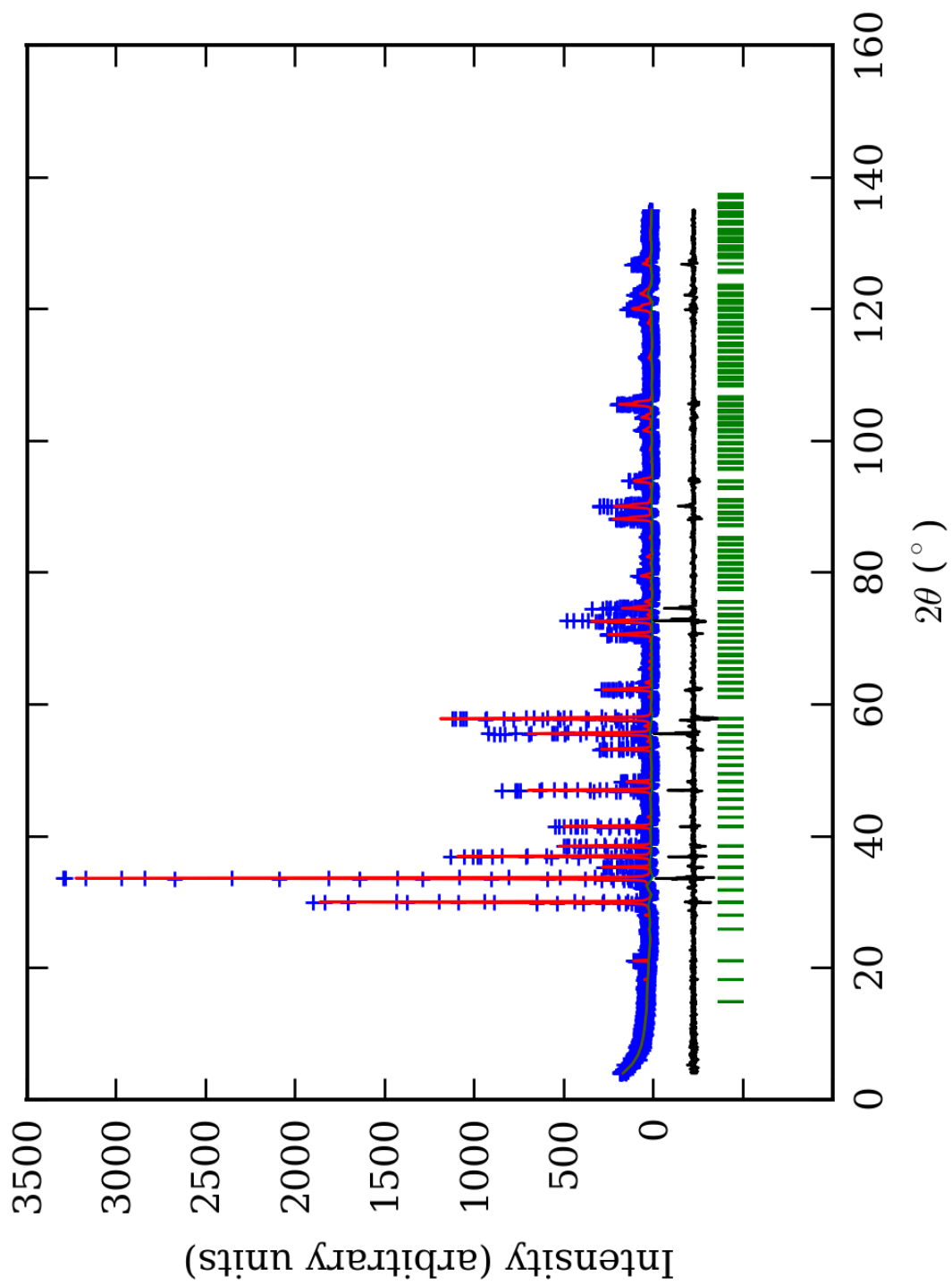


PRILOG 76. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u Ibca p.g.

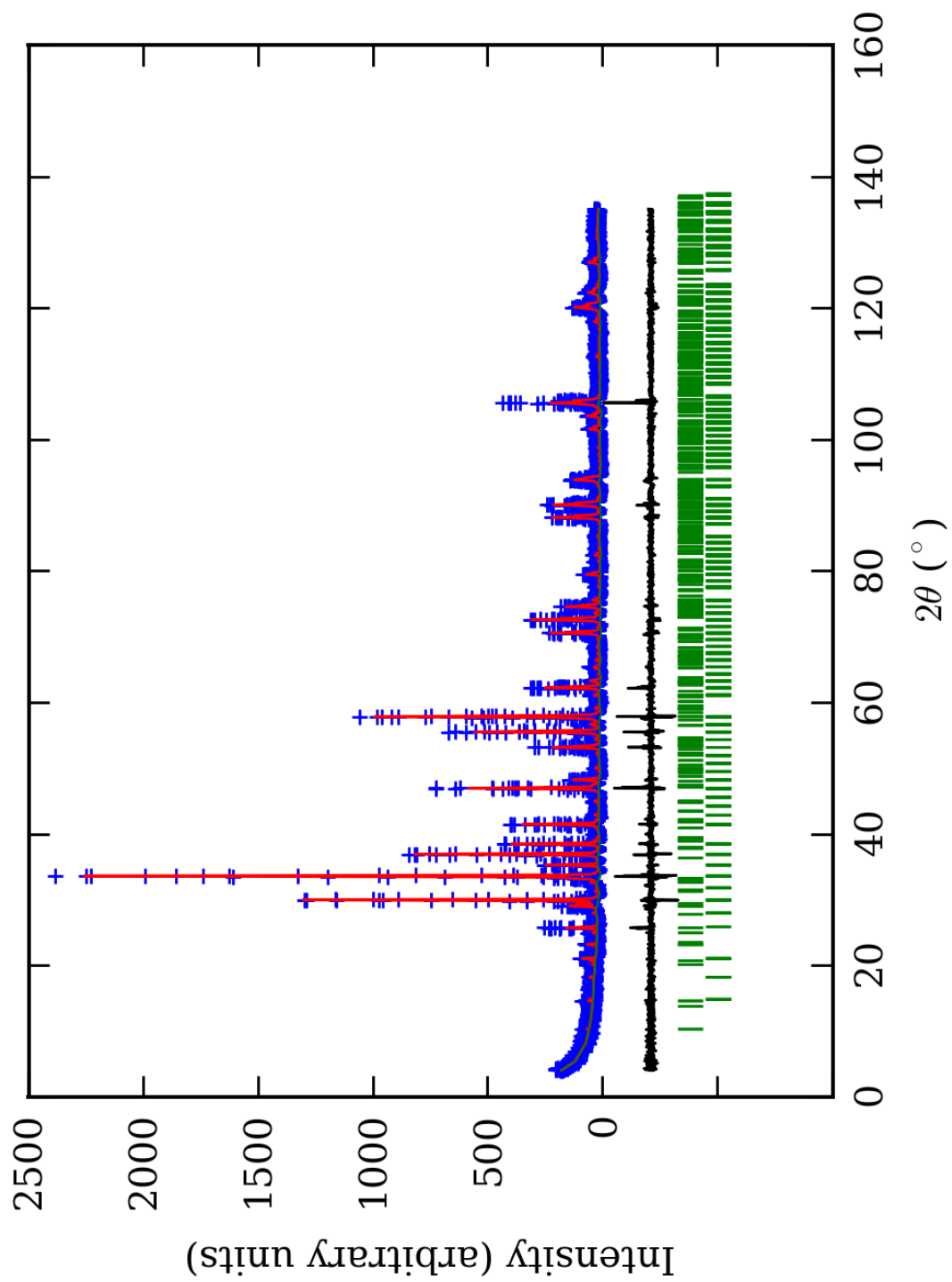




PRILOG 77. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u Ibca p.g.



PRILOG 78. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u Ibca p.g.



PRILOG 79. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u Ibca p.g.

PRILOG 80. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u Ibca p.g.

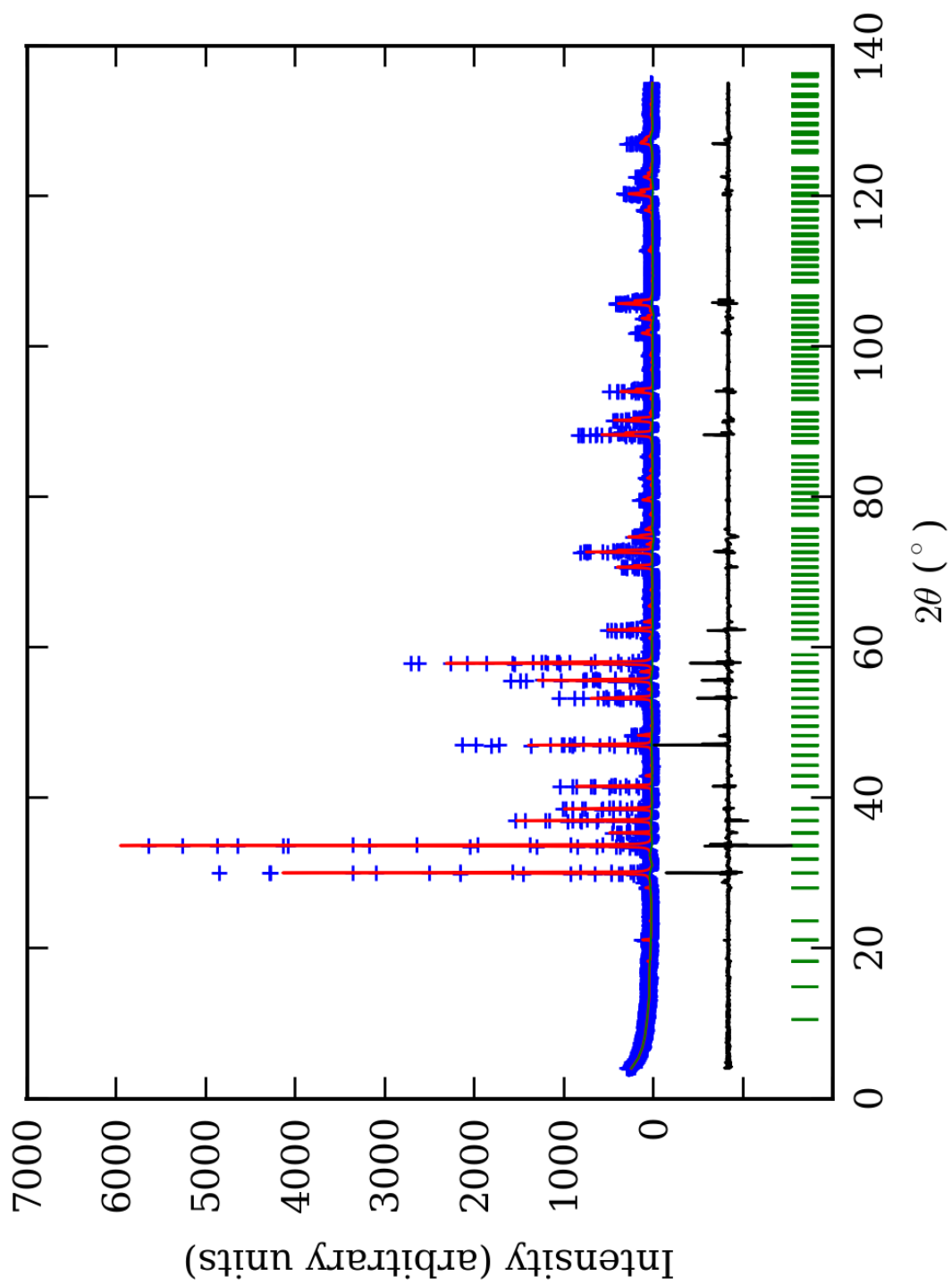
Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,2641	2,3075	1,7966	1,8360	1,6461	
Faktor skale	0,000077(4)*	0,000076(5)	0,000066(3)	0,000050(2)	0,0000101(9)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,33(8)	0,35(9)	0,12(5)	0,24(8)	0,01(8)	
Ukupni temp. faktor	0,3(1)	0,4(1)	0,36(7)	0,7(1)	0,4(1)	
Parametri polu-širine	U	0,029(7)	0,06(1)	0,007(5)	0,02(1)	0,009(5)
	V	-0,005(8)	-0,04(1)	0,013(7)	0,02(1)	-0,005(8)
	W	0,012(2)	0,026(4)	0,017(2)	0,015(3)	0,028(3)
Preferentna orijent.	-1,41(7)	-1,36(8)	-1,30(6)	-1,44(7)	-1,36(6)	
Parametri asimetrije	As 1	0,04(5)	0,18(4)	0,05(4)	0,08(6)	0,08(4)
	As 2	0,049(7)	0,065(7)	0,049(5)	0,044(6)	0,044(6)
X parametar	0,004(2)	0,002(2)	0,006(1)	0,004(2)	0,018(3)	
Nulta tačka	0,011(6)	0,033(7)	-0,003(6)	0,020(9)	-0,039(7)	
a <sub>0</sub>	11,9183(7)	11,952(2)	11,9332(5)	11,953(2)	11,921(2)	
b <sub>0</sub>	11,918(4)	11,919(2)	11,926(2)	11,921(2)	11,942(2)	
c <sub>0</sub>	11,921(5)	11,9303(8)	11,945(1)	11,9325(8)	11,9267(7)	
V <sub>0</sub>	1693,2(9)	1699,5(4)	1700,0(3)	1700,4(4)	1697,9(3)	
N-P+C	6408	6408	6408	6408	6385	
R <sub>p</sub>	14,5	13,6	11,7	13,2	13,0	
R <sub>wp</sub>	19,4	18,8	15,9	18,5	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,47	11,41	11,62	14,07	14,03	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,4	21,4	18,4	21,6	24,2	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	25,5	24,8	21,1	25,1	26,7	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,06	15,06	15,34	19,07	21,08	
Chi <sup>2</sup>	2,86	2,71	1,99	1,74	1,60	
Chi <sup>2</sup> (Bragg contr.)	3,32	3,06	2,12	1,95	1,69	
DW-stat.	0,9005	0,9234	1,2911	1,3483	1,3992	
DW-exp.	1,9680	1,9680	1,9680	1,9680	1,9753	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>8,42</b>	<b>8,02</b>	<b>5,69</b>	<b>6,94</b>	<b>5,61</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,21</b>	<b>7,57</b>	<b>6,04</b>	<b>7,23</b>	<b>5,85</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

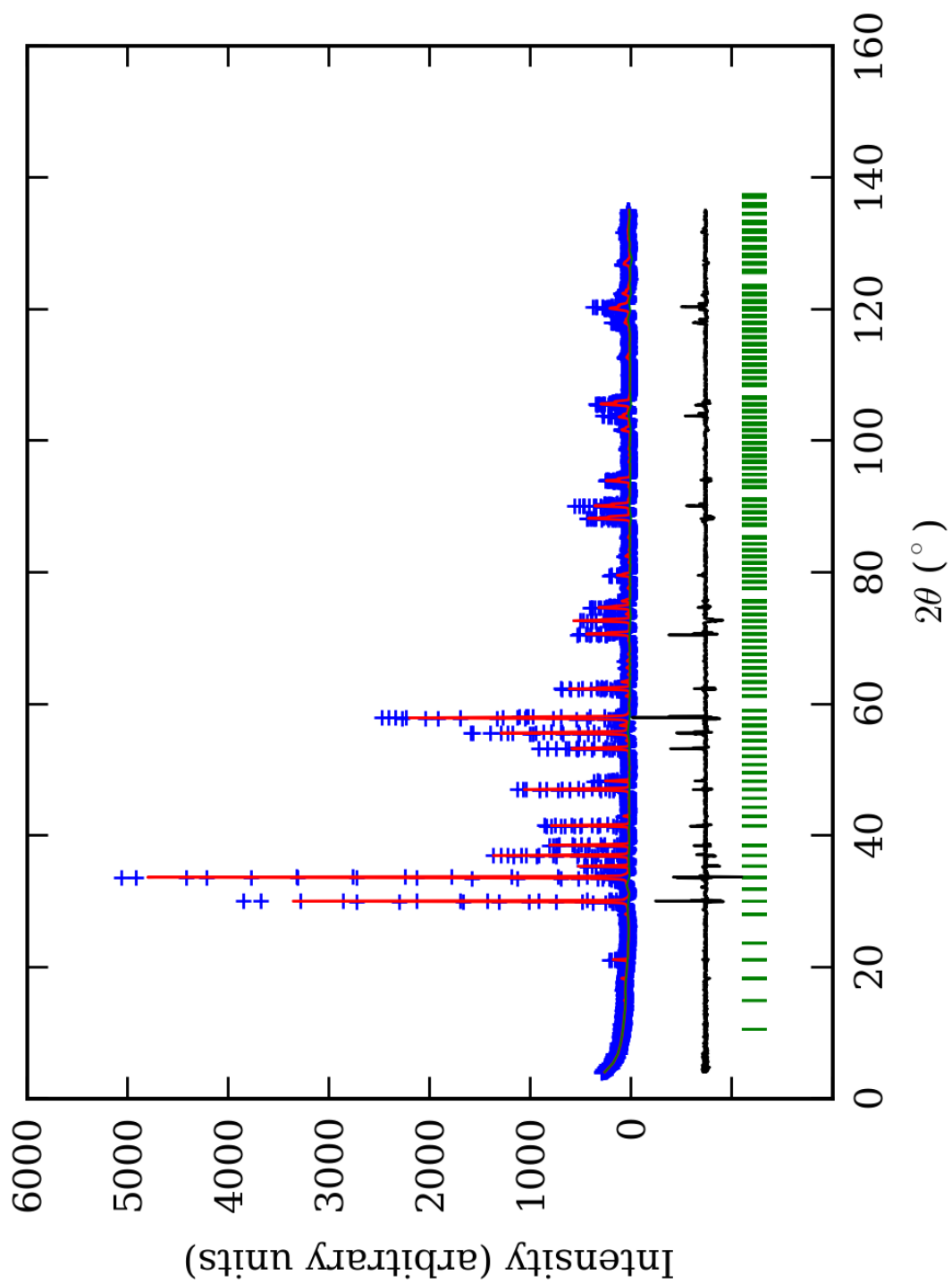
PRILOG 81. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u Ibca p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,2641		2,3075		1,7966		1,8360		1,6461	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,000	0,50 (4)	0,000	0,43 (2)	0,000	0,51 (2)	0,000	0,50 (1)	0,000	0,51 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,122(4)*		0,126(2)		0,126(2)		0,127(2)		0,125(3)	
Ca2	x	0,628(3)	0,49 (2)	0,623(3)	0,46 (2)	0,624(2)	0,47 (1)	0,627(3)	0,53 (3)	0,621(3)	0,46 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca3	x	0,250	0,52 (4)	0,250	0,53 (3)	0,250	0,54 (3)	0,250	0,47 (2)	0,250	0,45 (3)
	y	0,627(4)		0,623(2)		0,630(2)		0,631(4)		0,629(3)	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al1	x	0,000	0,40 (6)	0,000	0,34 (5)	0,000	0,35 (4)	0,000	0,31 (6)	0,000	0,31 (7)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,10 (6)	0,000	0,16 (5)	0,000	0,15 (4)	0,000	0,19 (6)	0,000	0,19 (7)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,250	0,47 (6)	0,250	0,31 (5)	0,250	0,36 (4)	0,250	0,32 (5)	0,250	0,32 (6)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Fe2	x	0,250	0,03 (6)	0,250	0,19 (5)	0,250	0,14 (4)	0,250	0,18 (5)	0,250	0,18 (6)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si1	x	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)
	y	0,025		0,025		0,025		0,025		0,025	
	z	0,373(6)		0,368(2)		0,368(2)		0,377(3)		0,375(5)	
Si2	x	0,871(3)	0,500 (0)	0,872(4)	0,500 (0)	0,875(2)	0,500 (0)	0,883(4)	0,500 (0)	0,874(3)	0,500 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si3	x	0,250	0,500 (0)	0,250	0,500 (0)	0,250	0,500 (0)	0,250	0,500 (0)	0,250	0,500 (0)
	y	0,378(7)		0,366(3)		0,376(4)		0,368(4)		0,360(4)	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
O1	x	0,037(3)	1,000 (0)	0,029(7)	1,000 (0)	0,036(2)	1,000 (0)	0,046(7)	1,000 (0)	0,032(7)	1,000 (0)
	y	0,035(9)		0,044(6)		0,061(4)		0,059(6)		0,067(6)	
	z	0,661(9)		0,652(3)		0,666(4)		0,654(4)		0,653(4)	
O2	x	0,208(4)	1,000 (0)	0,203(6)	1,000 (0)	0,210(3)	1,000 (0)	0,204(6)	1,000 (0)	0,207(6)	1,000 (0)
	y	0,802(7)		0,780(7)		0,791(6)		0,781(7)		0,794(6)	
	z	0,880(7)		0,905(3)		0,917(4)		0,906(3)		0,903(4)	
O3	x	0,660(5)	1,000 (0)	0,652(6)	1,000 (0)	0,668(3)	1,000 (0)	0,648(6)	1,000 (0)	0,642(7)	1,000 (0)
	y	0,048(8)		0,046(6)		0,030(4)		0,030(7)		0,035(6)	
	z	0,048(8)		0,049(4)		0,034(4)		0,050(3)		0,043(4)	
O4	x	0,214(4)	1,000 (0)	0,220(6)	1,000 (0)	0,213(2)	1,000 (0)	0,208(6)	1,000 (0)	0,210(8)	1,000 (0)
	y	0,422(9)		0,398(6)		0,396(4)		0,398(7)		0,404(7)	
	z	0,296(9)		0,301(4)		0,280(4)		0,294(3)		0,297(4)	
O5	x	0,048(4)	1,000 (0)	0,034(7)	1,000 (0)	0,046(3)	1,000 (0)	0,033(7)	1,000 (0)	0,042(9)	1,000 (0)
	y	0,656(6)		0,661(5)		0,642(4)		0,652(6)		0,663(8)	
	z	0,029(9)		0,036(3)		0,053(5)		0,033(2)		0,039(6)	
O6	x	0,585(5)	1,000 (0)	0,607(6)	1,000 (0)	0,585(2)	1,000 (0)	0,593(5)	1,000 (0)	0,586(7)	1,000 (0)
	y	0,796(9)		0,791(6)		0,801(5)		0,798(7)		0,789(8)	
	z	0,293(7)		0,280(3)		0,297(4)		0,298(3)		0,289(5)	
Ca1 (%)	100(8)	101 (7)	86(4)	95 (5)	102(4)	101 (4)	100(2)	100 (4)	102(2)	95 (5)	
Ca2 (%)	98(4)		92(4)		94(2)		106(6)		92(6)		
Ca3 (%)	104(8)		106(6)		108(6)		94(4)		90(6)		
Al1 (%)	80(12)	87 (12)	68(10)	65 (10)	70(8)	71 (8)	62(12)	63 (11)	62(14)	63 (13)	
Al2 (%)	94(12)		62(10)		72(8)		64(10)		64(12)		

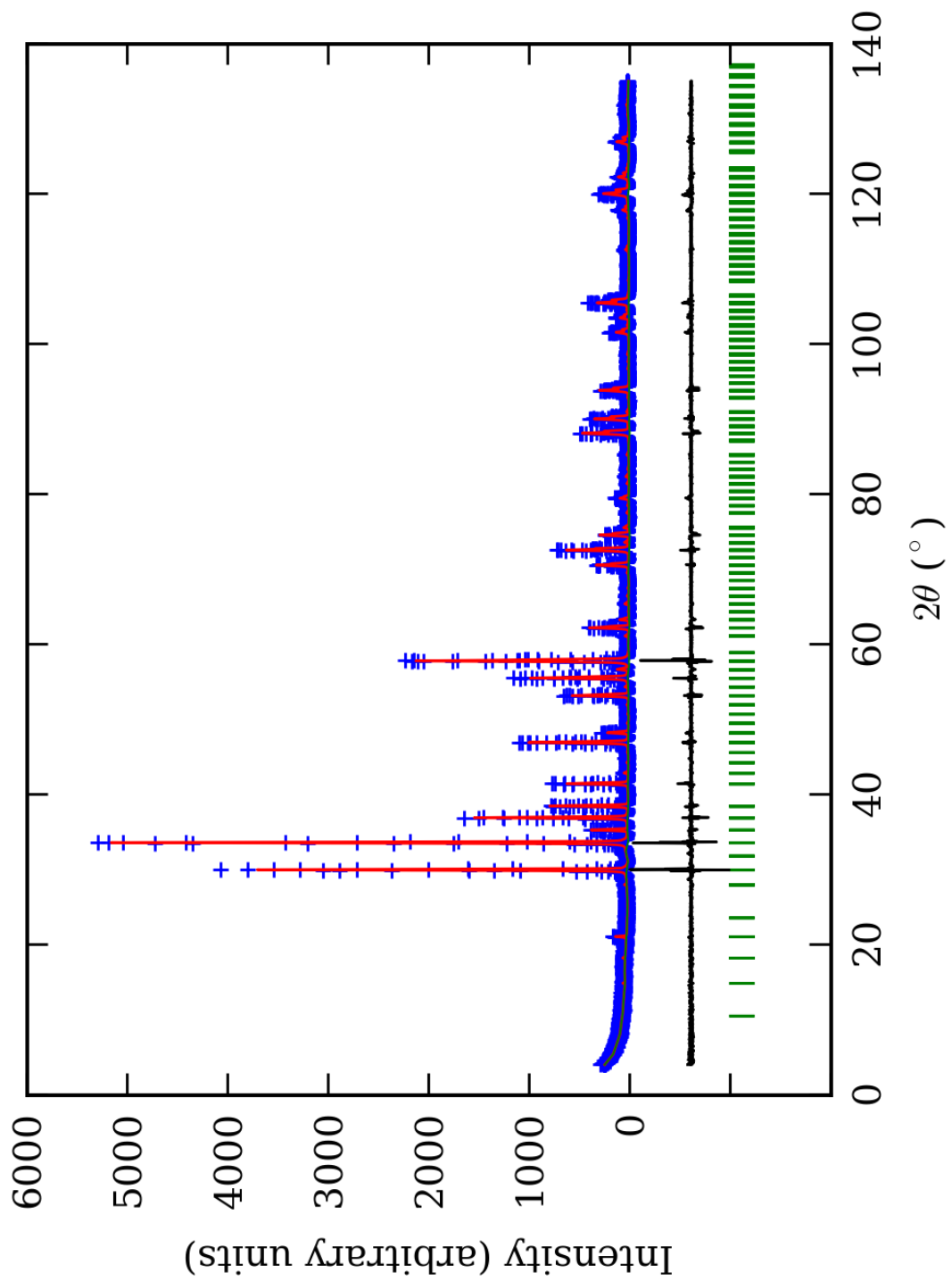
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



PRILOG 82. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u Fddd p.g.

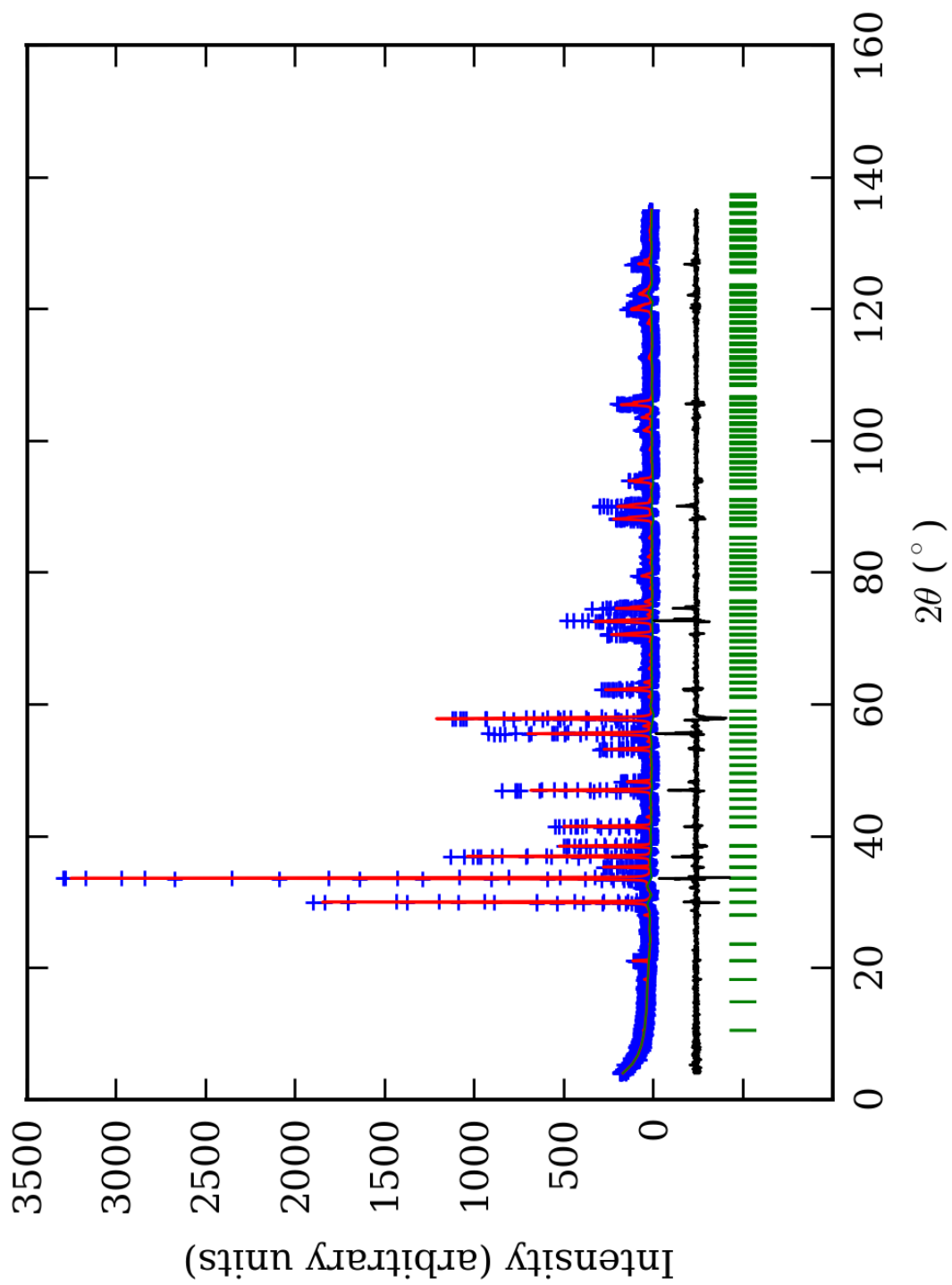


PRILOG 83. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u Fddd p.g.

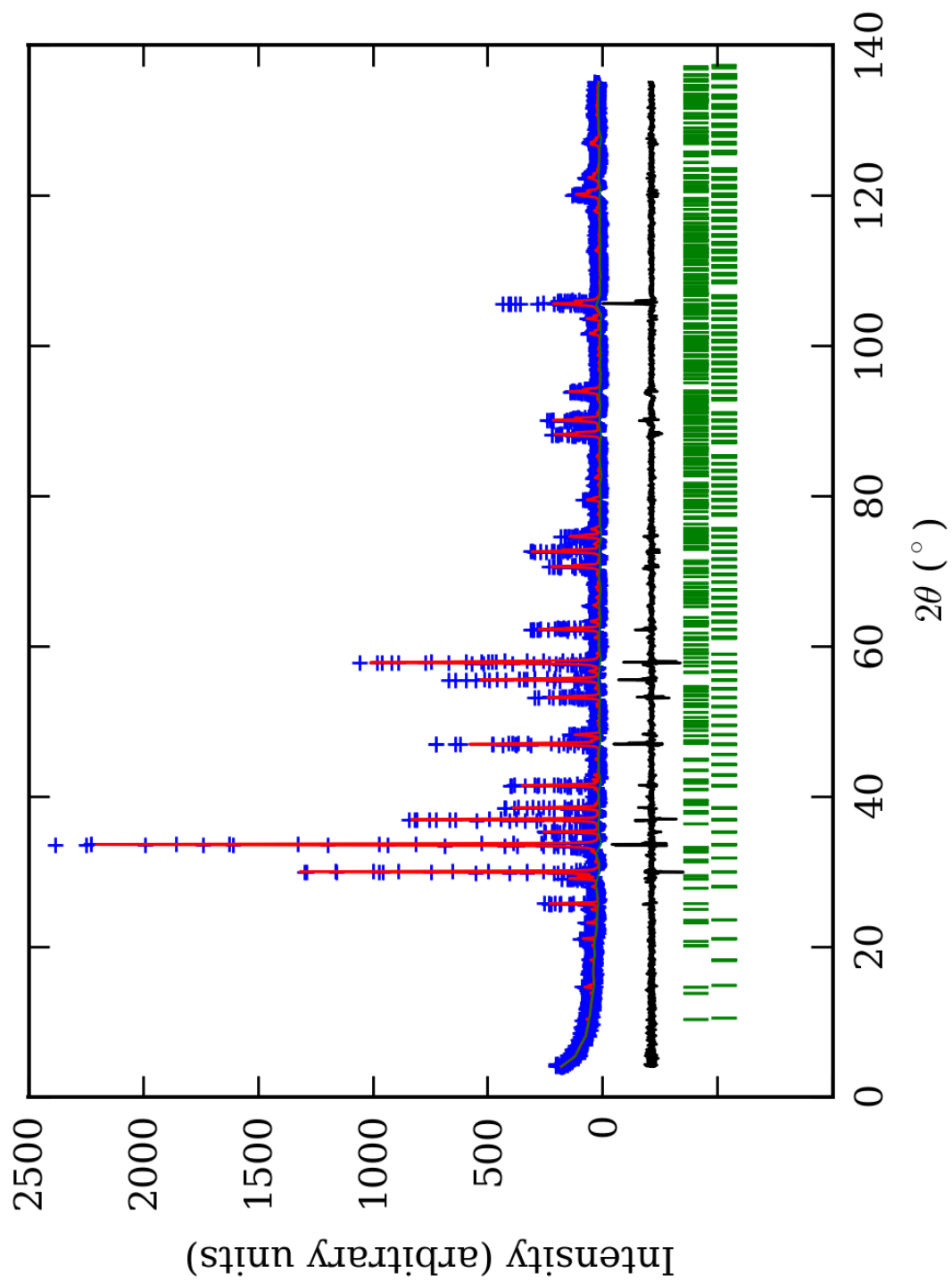


PRILOG 84. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u Fddd p.g.





PRILOG 85. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u Fddd p.g.



PRILOG 86. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u Fddd p.g.

PRILOG 87. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u Fddd p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,2850	2,3749	1,8482	1,8893	1,6218	
Faktor skale	0,000036(2)*	0,0000045(2)	0,0000034(2)	0,0000095(7)	0,0000027(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,28(9)	0,24(9)	0,06(5)	-0,20(6)	0,18(8)	
Ukupni temp. faktor	0,18(9)	0,4(1)	0,40(7)	0,65(9)	0,43(9)	
Parametri polu-širine	U	0,007(4)	0,04(1)	-0,003(3)	-0,003(4)	0,014(4)
	V	0,001(6)	-0,03(1)	0,016(6)	0,000(9)	-0,023(7)
	W	0,011(2)	0,024(4)	0,017(2)	0,024(3)	0,031(2)
Preferentna orijent.	0,54(6)	0,39(6)	0,37(5)	-0,96(8)	0,56(4)	
Parametri asimetrije	As 1	0,05(5)	0,16(4)	0,09(4)	0,09(5)	0,06(3)
	As 2	0,048(8)	0,068(7)	0,052(5)	0,048(7)	0,036(5)
X parametar	0,006(2)	0,004(2)	0,008(1)	0,016(1)	0,010(3)	
Nulta tačka	0,013(6)	0,030(8)	0,001(6)	0,018(8)	-0,037(6)	
a <sub>0</sub>	16,874(1)	16,895(2)	16,895(1)	16,861(2)	16,892(1)	
b <sub>0</sub>	16,849(1)	16,863(2)	16,873(1)	16,8919(9)	16,860(1)	
c <sub>0</sub>	11,9137(7)	11,927(1)	11,9292(7)	11,922(1)	11,9253(7)	
V <sub>0</sub>	3387,2(4)	3398,1(7)	3400,7(4)	3395,6(5)	3396,4(4)	
N-P+C	6407	6407	6407	6407	6384	
R <sub>p</sub>	14,2	13,8	11,8	13,5	12,8	
R <sub>wp</sub>	19,4	19,0	16,0	18,7	17,4	
R <sub>exp</sub>	11,47	11,40	11,62	14,07	14,03	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,1	21,6	18,4	21,9	23,9	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	25,5	25,0	21,1	25,2	26,2	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,11	15,02	15,29	18,95	21,09	
Chi2	2,85	2,77	1,90	1,76	1,54	
Chi2 (Bragg contr.)	3,25	3,04	2,09	1,92	1,62	
DW-stat.	0,8997	0,9009	1,2828	1,3303	1,4442	
DW-exp.	1,9683	1,9683	1,9683	1,9683	1,9757	
GoF	1,7	1,6	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>8,63</b>	<b>8,72</b>	<b>5,80</b>	<b>7,67</b>	<b>6,30</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,39</b>	<b>7,65</b>	<b>6,06</b>	<b>7,54</b>	<b>6,22</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 88. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u Fddd p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,2850		2,3749		1,8482		1,8893		1,6218	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,375	0,22 (2)*	0,375	0,24 (2)	0,375	0,23 (2)	0,375	0,23 (2)	0,375	0,28 (2)
	y	0,875		0,875		0,875		0,875		0,875	
	z	0,375		0,375		0,375		0,375		0,375	
Ca2	x	0,125	0,26 (3)	0,125	0,22 (2)	0,125	0,21 (2)	0,125	0,26 (1)	0,125	0,27 (2)
	y	0,625		0,625		0,625		0,625			
	z	0,125		0,125		0,125		0,125			
Ca3	x	0,437(1)	1,09 (3)	0,437(1)	0,98 (3)	0,436(1)	1,13 (2)	0,439(2)	0,98 (2)	0,440(1)	0,95 (2)
	y	0,564(2)		0,560(2)		0,5629(8)		0,5627(9)		0,562(2)	
	z	0,251(2)		0,250(3)		0,250(2)		0,251(3)		0,253(2)	
Al1	x	0,250	0,40 (4)	0,250	0,33 (5)	0,250	0,33 (4)	0,250	0,33 (3)	0,250	0,32 (4)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Fe1	x	0,250	0,10 (4)	0,250	0,17 (5)	0,250	0,17 (4)	0,250	0,17 (3)	0,250	0,18 (4)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Al2	x	0,250	0,42 (4)	0,250	0,33 (5)	0,250	0,34 (4)	0,250	0,31 (2)	0,250	0,30 (4)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Fe2	x	0,250	0,08 (4)	0,250	0,17 (5)	0,250	0,16 (4)	0,250	0,19 (2)	0,250	0,20 (4)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Si1	x	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)
	y	0,875		0,875		0,875		0,875			
	z	0,116(2)		0,131(3)		0,125(4)		0,115(4)		0,127(3)	
Si2	x	0,313(2)	1,000 (0)	0,309(2)	1,000 (0)	0,312(2)	1,000 (0)	0,308(2)	1,000 (0)	0,306(1)	1,000 (0)
	y	0,687(3)		0,691(2)		0,686(1)		0,686(1)		0,689(3)	
	z	0,251(2)		0,252(4)		0,252(3)		0,250(3)		0,246(2)	
O1	x	0,291(3)	1,000 (0)	0,288(4)	1,000 (0)	0,292(4)	1,000 (0)	0,290(4)	1,000 (0)	0,299(3)	1,000 (0)
	y	0,756(5)		0,753(5)		0,756(4)		0,749(2)		0,749(5)	
	z	0,335(5)		0,346(6)		0,327(5)		0,352(5)		0,348(4)	
O2	x	0,307(4)	1,000 (0)	0,304(4)	1,000 (0)	0,306(4)	1,000 (0)	0,311(4)	1,000 (0)	0,303(3)	1,000 (0)
	y	0,895(5)		0,902(5)		0,899(3)		0,898(2)		0,896(5)	
	z	0,218(4)		0,220(6)		0,216(6)		0,219(6)		0,205(5)	
O3	x	0,403(4)	1,000 (0)	0,408(4)	1,000 (0)	0,394(3)	1,000 (0)	0,406(4)	1,000 (0)	0,415(2)	1,000 (0)
	y	0,692(6)		0,691(5)		0,700(3)		0,694(2)		0,692(4)	
	z	0,205(5)		0,198(7)		0,218(4)		0,196(6)		0,195(4)	
O4	x	0,151(4)	1,000 (0)	0,151(4)	1,000 (0)	0,147(4)	1,000 (0)	0,145(4)	1,000 (0)	0,151(3)	1,000 (0)
	y	0,553(5)		0,565(4)		0,551(3)		0,550(2)		0,558(5)	
	z	0,294(5)		0,285(6)		0,277(5)		0,298(6)		0,294(4)	
O5	x	0,296(4)	1,000 (0)	0,307(5)	1,000 (0)	0,300(4)	1,000 (0)	0,313(4)	1,000 (0)	0,310(4)	1,000 (0)
	y	0,604(5)		0,593(5)		0,601(3)		0,599(2)		0,597(5)	
	z	0,299(4)		0,302(6)		0,290(5)		0,292(6)		0,293(4)	
O6	x	0,250(5)	1,000 (0)	0,245(5)	1,000 (0)	0,247(5)	1,000 (0)	0,241(4)	1,000 (0)	0,239(4)	1,000 (0)
	y	0,708(5)		0,709(2)		0,710(3)		0,711(2)		0,708(6)	
	z	0,165(6)		0,165(6)		0,168(5)		0,145(4)		0,154(4)	
Ca1 (%)	88(8)	100 (8)	96(8)	94 (6)	92(8)	96 (6)	92(8)	98 (5)	112(8)	105 (6)	
Ca2 (%)	104(12)		88(8)		84(8)		104(4)		108(8)		
Ca3 (%)	109(3)		98(3)		113(2)		98(2)		95(2)		
Al1 (%)	80(8)	82 (8)	66(10)	66 (10)	66(8)	67 (8)	66(6)	64 (5)	64(8)	62 (8)	
Al2 (%)	84(8)		66(10)		68(8)		62(4)		60(8)		

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 89. Odabrana međuatomska rastojanja (u Å) u Fddd p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si(1)-O(2)	2*	1,71(3) <sup>1</sup>	1,67(3)	1,64(4)	1,69(4)	1,57(4)
Si(1)-O(4)	2	1,55(3)	1,59(3)	1,75(3)	1,54(3)	1,57(5)
sr. vr. Si(1)-O		<b>1,63(3)</b>	<b>1,63(3)</b>	<b>1,70(4)</b>	<b>1,62(4)</b>	<b>1,57(4)</b>
O(2)-O(2)	1	2,38(4)	2,58(4)	2,47(5)	2,30(5)	2,54(5)
O(2)-O(4)	2	2,68(4)	2,76(4)	2,91(5)	2,73(4)	2,56(6)
O(2)-O(4)	2	2,76(4)	2,80(4)	2,85(5)	2,64(5)	2,65(5)
O(4)-O(4)	1	2,58(5)	2,20(4)	2,59(4)	2,63(3)	2,43(7)
sr. vr. O-O		<b>2,64(4)</b>	<b>2,65(4)</b>	<b>2,76(5)</b>	<b>2,61(4)</b>	<b>2,56(6)</b>
Si(2)-O(1)	1	1,57(3)	1,58(4)	1,52(4)	1,65(3)	1,59(5)
Si(2)-O(3)	1	1,61(3)	1,78(4)	1,47(3)	1,78(4)	1,94(3)
Si(2)-O(5)	1	1,54(4)	1,76(4)	1,51(3)	1,56(3)	1,65(6)
Si(2)-O(6)	1	1,52(3)	1,68(4)	1,53(5)	1,73(3)	1,61(4)
sr. vr. Si(2)-O		<b>1,56(3)</b>	<b>1,70(4)</b>	<b>1,51(4)</b>	<b>1,68(3)</b>	<b>1,70(4)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,60(3)</b>	<b>1,66(4)</b>	<b>1,60(4)</b>	<b>1,65(4)</b>	<b>1,64(4)</b>
O(1)-O(3)	1	2,66(4)	2,88(5)	2,36(4)	2,85(5)	2,85(5)
O(1)-O(5)	1	2,60(5)	2,77(5)	2,66(4)	2,67(3)	2,65(7)
O(1)-O(6)	1	2,29(4)	2,58(5)	2,17(5)	2,68(4)	2,62(5)
O(3)-O(5)	1	2,59(5)	2,67(5)	2,45(4)	2,53(4)	2,66(6)
O(3)-O(6)	1	2,63(5)	2,83(5)	2,55(6)	2,86(5)	3,03(4)
O(5)-O(6)	1	2,50(4)	2,88(5)	2,51(4)	2,85(4)	2,77(6)
sr. vr. O-O		<b>2,54(4)</b>	<b>2,77(5)</b>	<b>2,45(4)</b>	<b>2,74(4)</b>	<b>2,76(6)</b>
sr. vr. O-O		<b>2,59(4)</b>	<b>2,71(4)</b>	<b>2,60(4)</b>	<b>2,68(4)</b>	<b>2,66(6)</b>
Y(1)-O(1)	2	2,09(2)	1,95(4)	2,18(4)	1,89(4)	1,99(4)
Y(1)-O(2)	2	2,05(3)	1,92(3)	1,99(3)	2,04(2)	2,03(5)
Y(1)-O(3)	2	1,98(4)	1,95(3)	2,02(3)	1,95(3)	1,85(3)
sr. vr. Y(1)-O		<b>2,04(3)</b>	<b>1,94(3)</b>	<b>2,06(3)</b>	<b>1,96(3)</b>	<b>1,96(4)</b>
O(1)-O(2)	2	2,96(4)	2,73(5)	2,96(5)	2,79(4)	2,75(6)
O(1)-O(2)	2	2,89(4)	2,73(5)	2,95(5)	2,77(4)	2,93(6)
O(1)-O(3)	2	2,88(4)	2,68(5)	3,11(4)	2,70(5)	2,73(5)
O(1)-O(3)	2	2,88(4)	2,82(5)	2,84(4)	2,74(5)	2,72(5)
O(2)-O(3)	2	2,83(6)	2,74(5)	2,69(4)	2,74(3)	2,77(7)
O(2)-O(3)	2	2,88(4)	2,73(5)	2,97(4)	2,91(5)	2,72(5)
sr. vr. O-O		<b>2,89(4)</b>	<b>2,74(5)</b>	<b>2,92(4)</b>	<b>2,78(4)</b>	<b>2,77(6)</b>
Y(2)-O(4)	2	1,96(3)	2,05(3)	1,97(3)	2,04(3)	2,01(4)
Y(2)-O(5)	2	2,00(3)	1,94(3)	1,96(3)	2,04(3)	1,99(5)
Y(2)-O(6)	2	2,09(3)	1,90(4)	2,13(3)	1,86(2)	1,98(3)
sr. vr. Y(2)-O		<b>2,02(3)</b>	<b>1,96(3)</b>	<b>2,02(3)</b>	<b>1,98(3)</b>	<b>1,99(4)</b>
sr. vr. Y-O		<b>2,03(3)</b>	<b>1,95(3)</b>	<b>2,04(3)</b>	<b>1,97(3)</b>	<b>1,98(4)</b>
O(4)-O(5)	2	2,59(4)	2,69(4)	2,73(5)	2,95(5)	2,76(5)
O(4)-O(5)	2	3,00(5)	2,95(4)	2,84(4)	2,82(3)	2,89(7)
O(4)-O(6)	2	3,00(4)	2,73(4)	2,89(5)	2,82(4)	2,80(4)
O(4)-O(6)	2	2,72(4)	2,85(4)	2,91(5)	2,70(4)	2,83(6)
O(5)-O(6)	2	2,87(4)	2,75(5)	2,84(5)	2,73(4)	2,80(5)
O(5)-O(6)	2	2,92(4)	2,68(5)	2,94(4)	2,78(3)	2,82(6)
sr. vr. O-O		<b>2,85(4)</b>	<b>2,78(4)</b>	<b>2,86(5)</b>	<b>2,80(4)</b>	<b>2,82(6)</b>
sr. vr. O-O		<b>2,87(4)</b>	<b>2,76(4)</b>	<b>2,89(4)</b>	<b>2,79(4)</b>	<b>2,80(6)</b>
X(1)-O(1)	4	2,50(3)	2,55(3)	2,52(3)	2,57(3)	2,50(5)
X(1)-O(2)	4	2,21(2)	2,25(3)	2,26(3)	2,19(3)	2,39(4)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,36(2)</b>	<b>2,40(3)</b>	<b>2,39(3)</b>	<b>2,38(3)</b>	<b>2,44(4)</b>
O(1)-O(1)	2	2,98(4)	3,03(4)	3,03(5)	2,91(5)	2,65(5)
O(1)-O(1)	2	4,12(5)	4,17(5)	4,18(5)	4,28(3)	4,30(7)
O(1)-O(2)	4	2,74(4)	2,94(5)	2,77(4)	2,99(4)	3,02(7)
O(1)-O(2)	4	3,35(4)	3,46(4)	3,30(5)	3,44(4)	3,50(6)
O(1)-O(2)	4	2,89(4)	2,73(5)	2,95(5)	2,77(4)	2,93(6)
O(2)-O(2)	2	2,38(4)	2,58(4)	2,47(5)	2,30(4)	2,54(5)
sr. vr. O-O		<b>3,05(4)</b>	<b>3,12(5)</b>	<b>3,08(5)</b>	<b>3,10(4)</b>	<b>3,15(6)</b>

X(2)-O(4)	4	2,39(3)	2,20(3)	2,23(3)	2,45(3)	2,35(4)
X(2)-O(6)	4	2,58(3)	2,49(3)	2,57(4)	2,45(3)	2,41(5)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,48(3)</b>	<b>2,34(3)</b>	<b>2,40(4)</b>	<b>2,45(3)</b>	<b>2,38(4)</b>
O(4)-O(4)	2	4,12(3)	3,91(3)	3,70(5)	4,18(5)	4,13(5)
O(4)-O(4)	2	2,58(5)	2,20(4)	2,59(4)	2,63(3)	2,43(7)
O(4)-O(6)	4	3,46(4)	3,33(4)	3,42(4)	3,66(4)	3,37(6)
O(4)-O(6)	4	3,00(4)	2,73(4)	2,89(5)	2,82(4)	2,80(4)
O(4)-O(6)	4	2,99(4)	2,98(4)	2,76(6)	2,94(5)	2,91(5)
O(6)-O(6)	2	2,95(5)	2,89(5)	3,06(4)	2,95(3)	2,88(7)
sr. vr. O-O		<b>3,17(4)</b>	<b>3,01(4)</b>	<b>3,05(5)</b>	<b>3,18(4)</b>	<b>3,07(5)</b>
X(3)-O(1)	1	2,26(3)	2,26(4)	2,24(4)	2,36(3)	2,44(4)
X(3)-O(2)	1	2,48(3)	2,53(3)	2,54(3)	2,54(3)	2,43(4)
X(3)-O(3)	1	2,31(5)	2,35(4)	2,44(3)	2,38(2)	2,33(5)
X(3)-O(3)	1	2,52(3)	2,41(4)	2,70(3)	2,41(4)	2,40(3)
X(3)-O(4)	1	2,52(3)	2,61(3)	2,40(3)	2,44(3)	2,61(5)
X(3)-O(5)	1	2,54(3)	2,35(4)	2,43(3)	2,27(4)	2,32(4)
X(3)-O(5)	1	2,49(3)	2,43(4)	2,60(4)	2,54(4)	2,50(4)
X(3)-O(6)	1	2,30(3)	2,31(4)	2,24(3)	2,29(3)	2,24(5)
sr. vr. X(3)-O		<b>2,43(3)</b>	<b>2,41(4)</b>	<b>2,45(3)</b>	<b>2,40(3)</b>	<b>2,41(4)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,42(3)</b>	<b>2,38(3)</b>	<b>2,41(3)</b>	<b>2,41(3)</b>	<b>2,41(4)</b>
O(1)-O(2)	1	2,74(4)	2,94(5)	2,77(4)	2,99(4)	3,02(7)
O(1)-O(3)	1	2,88(4)	2,68(5)	3,11(4)	2,70(5)	2,73(5)
O(1)-O(4)	1	3,44(4)	3,46(4)	3,38(5)	3,30(5)	3,57(5)
O(1)-O(5)	1	4,06(4)	4,14(5)	4,09(5)	4,42(5)	4,40(5)
O(1)-O(6)	1	2,29(4)	2,58(5)	2,17(5)	2,68(4)	2,62(5)
O(2)-O(3)	1	2,88(4)	2,73(4)	2,97(4)	2,91(5)	2,72(5)
O(2)-O(3)	1	4,11(4)	3,99(5)	4,40(4)	4,07(5)	3,98(5)
O(2)-O(5)	1	2,75(4)	2,92(5)	2,88(5)	3,08(5)	2,85(5)
O(2)-O(6)	1	3,36(5)	3,51(5)	3,39(4)	3,48(3)	3,42(7)
O(3)-O(3)	1	2,95(4)	2,83(5)	3,35(4)	2,89(4)	2,81(6)
O(3)-O(5)	1	2,59(5)	2,68(5)	2,45(4)	2,53(4)	2,66(6)
O(3)-O(5)	1	3,39(4)	3,46(5)	3,46(4)	3,55(5)	3,54(5)
O(3)-O(4)	1	2,83(5)	3,02(4)	2,93(4)	2,65(4)	2,89(6)
O(3)-O(5)	1	3,61(4)	3,48(5)	3,56(4)	3,33(5)	3,41(4)
O(4)-O(5)	1	3,00(5)	2,95(4)	2,84(4)	2,82(3)	2,89(7)
O(4)-O(6)	1	2,99(4)	2,98(4)	2,76(6)	2,94(5)	2,91(5)
O(5)-O(5)	1	3,22(4)	2,88(5)	3,25(5)	2,89(5)	2,94(5)
O(5)-O(6)	1	2,92(4)	2,68(5)	2,94(4)	2,78(3)	2,82(6)
sr. vr. O-O		<b>3,11(4)</b>	<b>3,11(5)</b>	<b>3,15(4)</b>	<b>3,11(4)</b>	<b>3,12(6)</b>
sr. vr. O-O		<b>3,11(4)</b>	<b>3,08(5)</b>	<b>3,09(5)</b>	<b>3,13(4)</b>	<b>3,11(6)</b>

<sup>\*</sup>-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

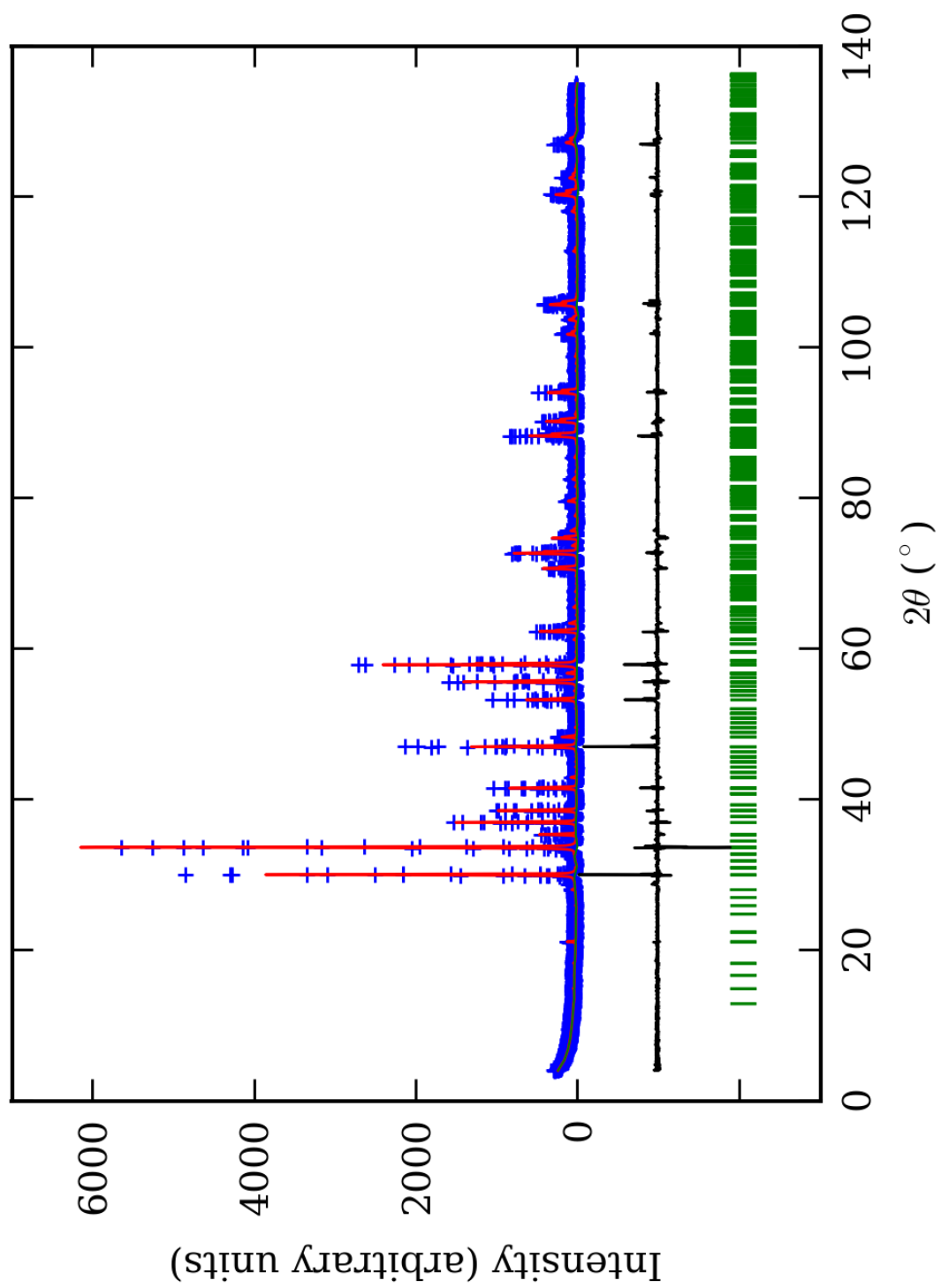
### PRILOG 90. Odabrani međuatomski uglovi ( $u^\circ$ ) u Fddd p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
O(2)-Si(1)-O(2)	1*	89(2) <sup>1</sup>	101(3)	97(3)	86(3)	108(4)
O(2)-Si(1)-O(4)	2	111(3)	116(3)	118(3)	115(3)	109(4)
O(2)-Si(1)-O(4)	2	116(3)	119(3)	114(3)	109(3)	115(4)
O(4)-Si(1)-O(4)	1	113(3)	87(3)	96(2)	117(2)	101(5)
sr. vr. O-Si(1)-O		<b>109(3)</b>	<b>110(3)</b>	<b>110(3)</b>	<b>108(3)</b>	<b>110(4)</b>
O(1)-Si(2)-O(3)	1	114(3)	118(3)	104(3)	112(3)	107(3)
O(1)-Si(2)-O(5)	1	113(3)	112(3)	122(3)	113(2)	110(5)
O(1)-Si(2)-O(6)	1	95(3)	105(3)	91(4)	105(3)	110(3)
O(3)-Si(2)-O(5)	1	110(3)	98(3)	111(3)	98(3)	95(3)
O(3)-Si(2)-O(6)	1	114(3)	110(3)	117(4)	109(3)	117(3)
O(5)-Si(2)-O(6)	1	109(3)	114(3)	110(4)	120(3)	117(4)
sr. vr. O-Si(2)-O		<b>109(3)</b>	<b>110(3)</b>	<b>109(4)</b>	<b>110(3)</b>	<b>109(4)</b>

<b>sr. vr. O-Si-O</b>		<b>109(3)</b>	<b>110(3)</b>	<b>110(4)</b>	<b>109(3)</b>	<b>110(4)</b>
<b>O(1)-Y(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	92(2)	90(2)	90(2)	90(2)	86(3)
<b>O(1)-Y(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	88(2)	90(3)	90(2)	90(2)	94(3)
<b>O(1)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	90(2)	87(2)	95(2)	89(2)	90(3)
<b>O(1)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	90(2)	93(3)	85(2)	91(2)	90(2)
<b>O(2)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	89(3)	90(2)	84(2)	87(2)	91(3)
<b>O(2)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	91(2)	90(2)	96(2)	93(2)	89(3)
<b>sr. vr. O-Y(1)-O</b>		<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(3)</b>
<b>O(4)-Y(2)-O(5)</b>	<b>2</b>	81(2)	85(2)	88(2)	93(2)	87(3)
<b>O(4)-Y(2)-O(5)</b>	<b>2</b>	99(2)	95(2)	92(2)	87(2)	93(3)
<b>O(4)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	96(2)	88(2)	90(2)	93(2)	89(2)
<b>O(4)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	84(2)	92(2)	90(2)	87(2)	91(3)
<b>O(5)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	89(2)	91(3)	88(2)	89(2)	90(2)
<b>O(5)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	91(2)	89(2)	92(2)	91(2)	90(3)
<b>sr. vr. O-Y(2)-O</b>		<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(3)</b>
<b>sr. vr. O-Y-O</b>		<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(2)</b>	<b>90(3)</b>
<b>O(1)-X(1)-O(1)</b>	<b>2</b>	73(1)	73(2)	74(2)	69(1)	64(2)
<b>O(1)-X(1)-O(1)</b>	<b>2</b>	111(2)	110(2)	112(2)	112(1)	118(3)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>4</b>	71(2)	75(2)	70(2)	77(2)	76(2)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>4</b>	90(2)	92(2)	87(2)	92(2)	91(2)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>4</b>	75(2)	69(2)	76(2)	71(2)	74(2)
<b>O(2)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	65(2)	70(2)	66(2)	63(2)	64(2)
<b>sr. vr. O-X(1)-O</b>		<b>80(2)</b>	<b>81(2)</b>	<b>80(2)</b>	<b>80(2)</b>	<b>81(2)</b>
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	119(2)	125(2)	112(2)	117(2)	123(3)
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	65(2)	60(1)	71(2)	65(1)	62(2)
<b>O(4)-X(2)-O(6)</b>	<b>4</b>	88(2)	90(2)	91(2)	97(2)	90(2)
<b>O(4)-X(2)-O(6)</b>	<b>4</b>	74(1)	71(2)	74(2)	70(2)	72(2)
<b>O(4)-X(2)-O(6)</b>	<b>4</b>	74(2)	79(2)	70(2)	74(2)	75(2)
<b>O(6)-X(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	70(2)	71(2)	73(2)	74(1)	74(2)
<b>sr. vr. O-X(2)-O</b>		<b>81(2)</b>	<b>82(2)</b>	<b>81(2)</b>	<b>82(2)</b>	<b>81(2)</b>
<b>O(1)-X(3)-O(2)</b>	<b>1</b>	70(2)	76(2)	70(2)	75(2)	77(2)
<b>O(1)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	74(2)	70(2)	78(2)	69(2)	68(2)
<b>O(1)-X(3)-O(4)</b>	<b>1</b>	92(2)	90(2)	94(2)	87(2)	90(2)
<b>O(1)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	117(2)	124(2)	115(2)	128(2)	126(3)
<b>O(1)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	60(2)	69(2)	58(2)	70(2)	68(2)
<b>O(2)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	74(2)	68(2)	73(2)	72(2)	70(2)
<b>O(2)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	111(2)	108(2)	114(2)	111(2)	111(2)
<b>O(2)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	67(1)	72(2)	68(2)	75(2)	70(2)
<b>O(2)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	89(2)	93(2)	90(2)	92(2)	94(3)
<b>O(3)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	75(2)	73(2)	81(1)	74(2)	73(2)
<b>O(3)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	64(2)	69(2)	61(1)	66(2)	70(2)
<b>O(3)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	90(2)	93(2)	87(2)	92(2)	94(2)
<b>O(3)-X(3)-O(4)</b>	<b>1</b>	68(2)	74(2)	70(1)	66(2)	70(2)
<b>O(3)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	91(2)	94(2)	88(2)	91(2)	92(2)
<b>O(4)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	73(2)	73(2)	72(2)	74(2)	71(2)
<b>O(4)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	76(2)	74(2)	73(2)	77(2)	73(2)
<b>O(5)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	80(2)	74(2)	80(2)	74(2)	75(2)
<b>O(5)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	75(2)	69(2)	74(2)	70(2)	73(2)
<b>sr. vr. O-X(3)-O</b>		<b>80(2)</b>	<b>81(2)</b>	<b>80(2)</b>	<b>81(2)</b>	<b>81(2)</b>
<b>sr. vr. O-X-O</b>		<b>80(2)</b>	<b>81(2)</b>	<b>80(2)</b>	<b>81(2)</b>	<b>81(2)</b>

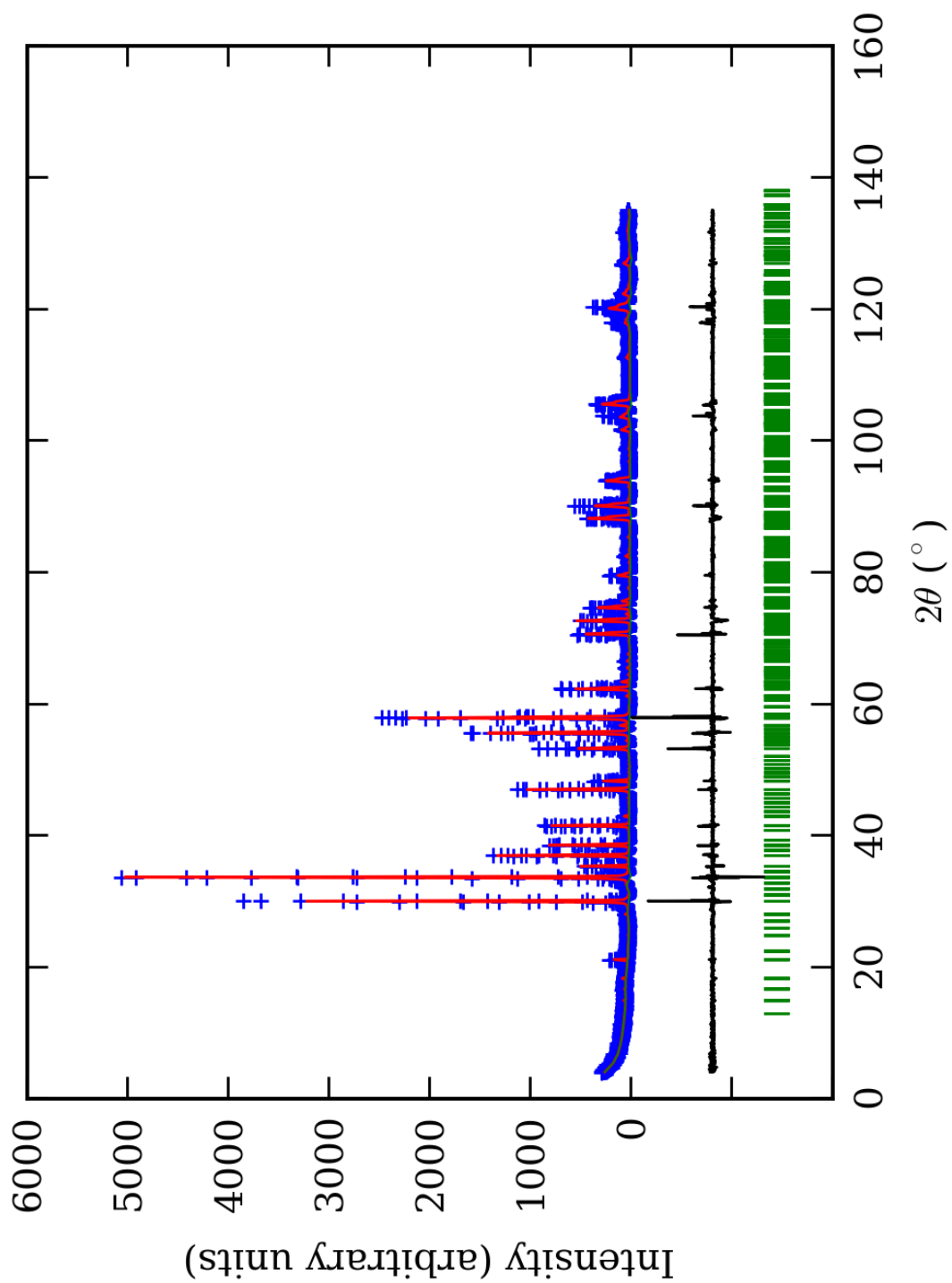
\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenju standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

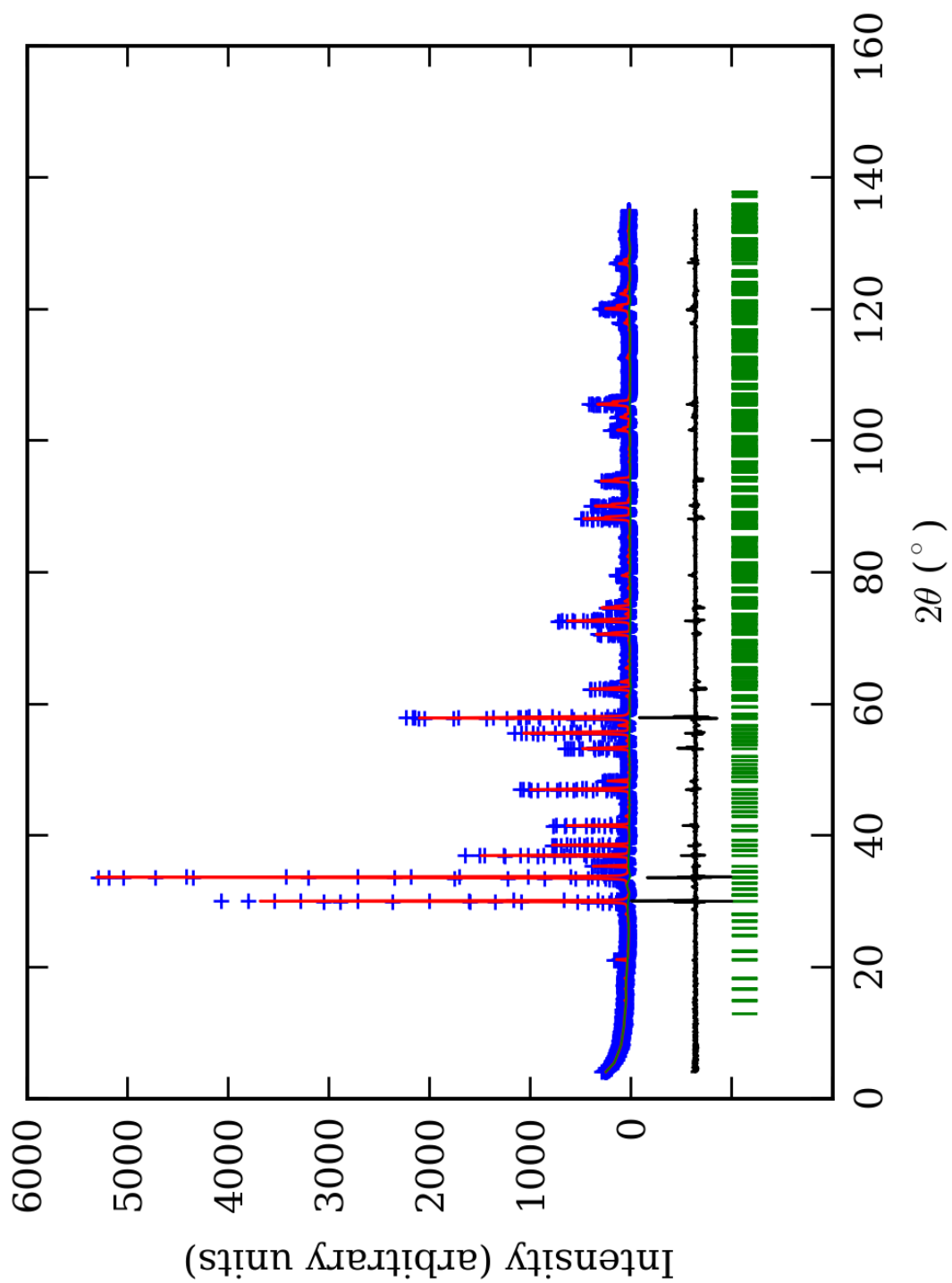


PRILOG 91. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u Pbca p.g.

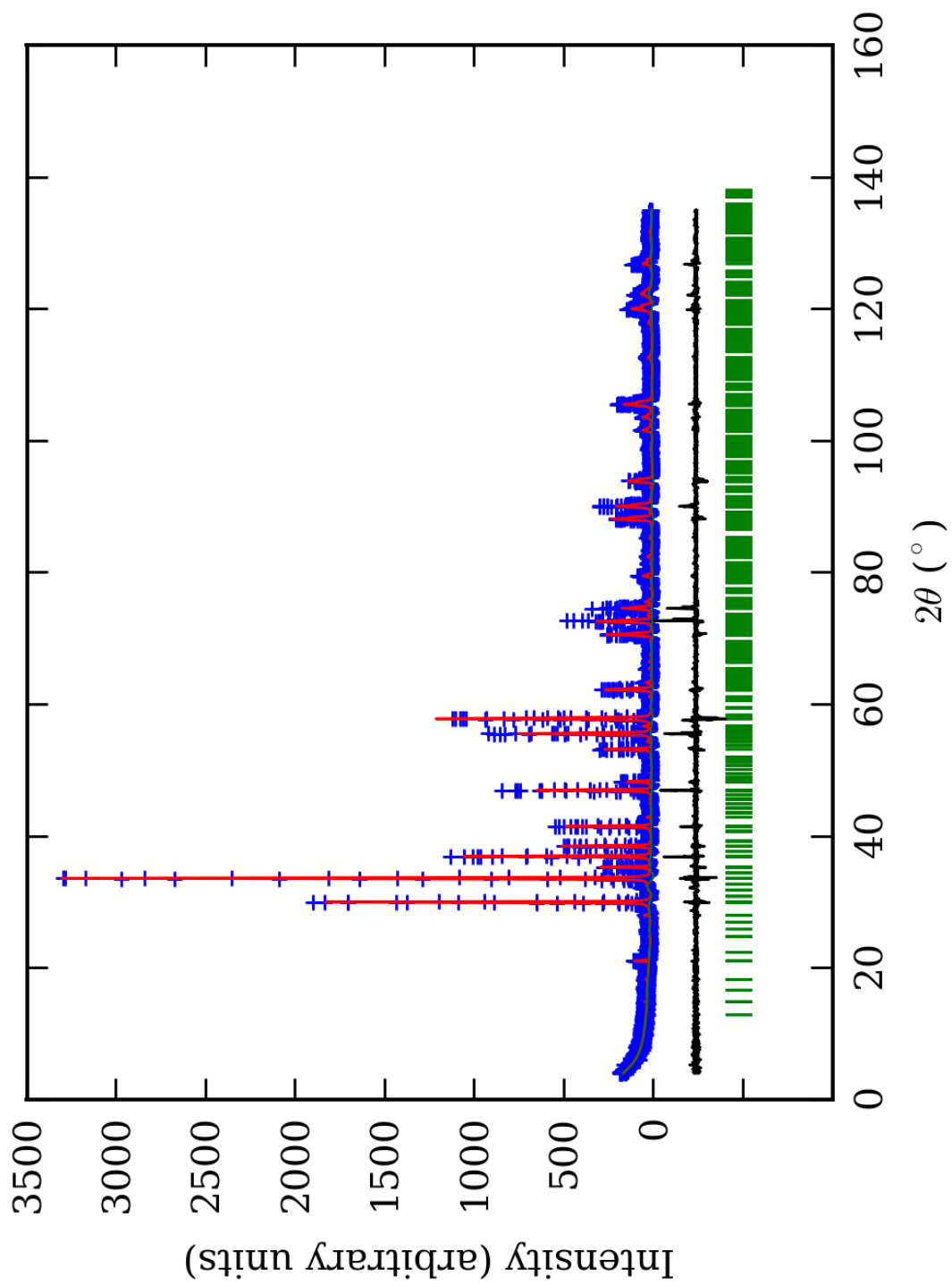




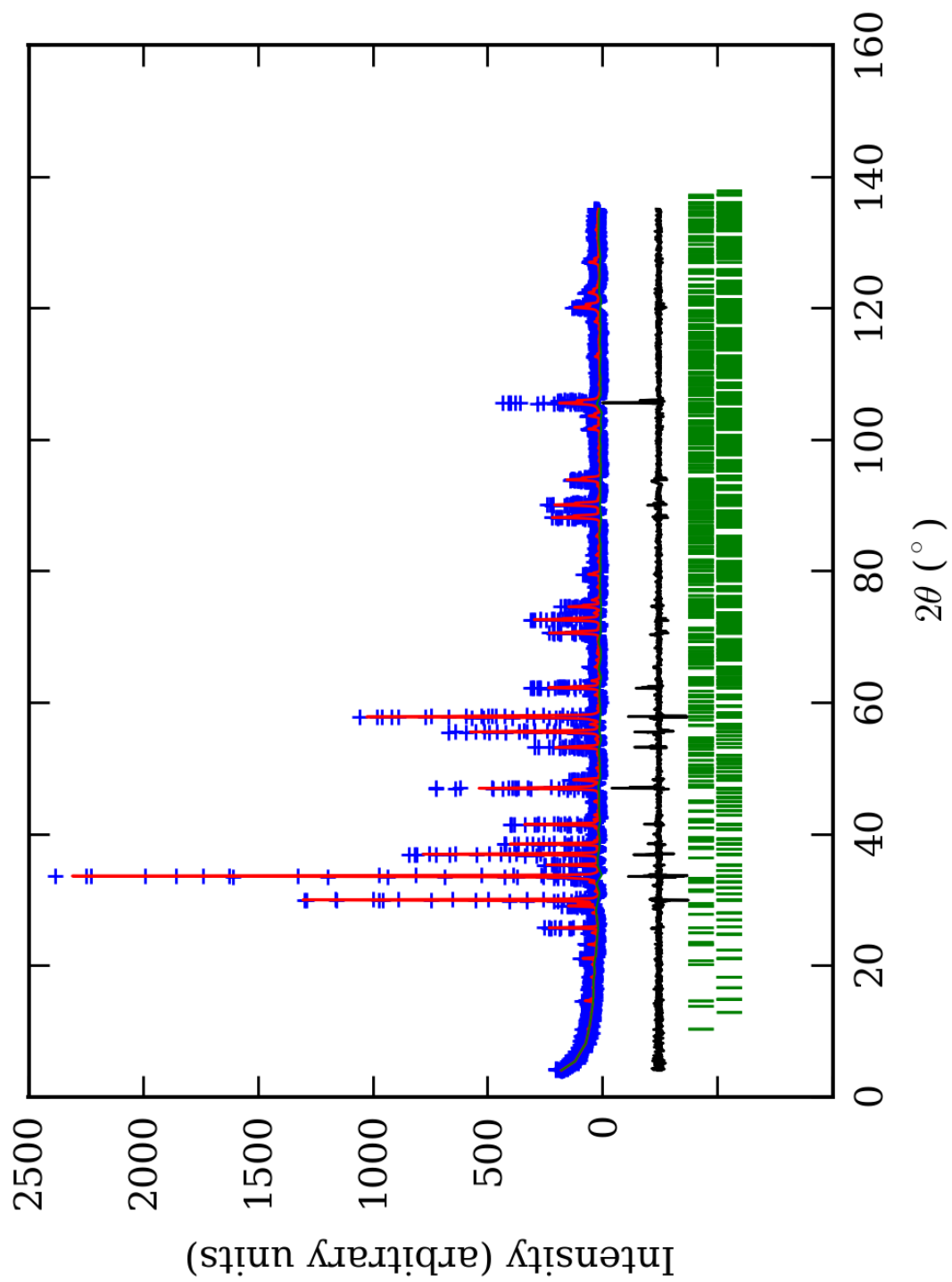
PRILOG 92. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u Pbca p.g.



PRILOG 93. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u Pbca p.g.



PRILOG 94. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u Pbca p.g.



PRILOG 95. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u Pbca p.g.

PRILOG 96. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u Pbca p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,3464	2,2922	1,8455	1,8541	1,6630	
Faktor skale	0,0000148(9)*	0,000017(1)	0,0000168(9)	0,0000099(6)	0,0000076(53)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,25(9)	0,36(8)	0,14(6)	0,25(8)	0,10(8)	
Ukupni temp. faktor	0,0(1)	0,2(1)	0,38(8)	0,5(1)	0,1(1)	
Parametri polu-širine	U	0,018(7)	0,08(1)	0,005(5)	0,02(1)	0,015(7)
	V	-0,004(7)	-0,04(1)	0,017(7)	0,02(1)	-0,003(9)
	W	0,012(2)	0,025(4)	0,016(2)	0,014(4)	0,026(3)
Preferentna orijent.	0,30(4)	0,24(5)	0,19(3)	0,32(4)	0,29(4)	
Parametri asimetrije	As 1	0,05(6)	0,16(4)	0,08(4)	0,10(6)	0,08(4)
	As 2	0,054(8)	0,065(6)	0,052(5)	0,044(6)	0,044(6)
X parametar	0,006(2)	0,001(2)	0,006(1)	0,005(2)	0,009(1)	
Nulta tačka	0,010(7)	0,030(7)	0,000(6)	0,024(9)	-0,038(7)	
a <sub>0</sub>	11,922(2)	11,932(6)	11,943(1)	11,928(2)	11,937(2)	
b <sub>0</sub>	11,911(1)	11,931(6)	11,929(1)	11,931(2)	11,926(3)	
c <sub>0</sub>	11,923(5)	11,934(3)	11,932(2)	11,950(2)	11,926(3)	
V <sub>0</sub>	1693,1(4)	1699(1)	1700,0(4)	1700,6(4)	1697,8(6)	
N-P+C	6374	6374	6374	6374	6351	
R <sub>p</sub>	14,9	14,0	11,9	13,2	13,0	
R <sub>wp</sub>	20,0	19,2	16,2	18,8	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,44	11,38	11,59	14,04	13,99	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,6	21,5	18,5	21,0	23,6	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	25,9	25,1	21,3	25,2	26,3	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	14,86	14,88	15,23	18,80	20,78	
Chi2	3,04	2,84	1,96	1,79	1,60	
Chi2 (Bragg contr.)	3,30	3,03	2,10	1,92	1,67	
DW-stat.	0,8459	0,8908	1,2464	1,3109	1,4005	
DW-exp.	1,9789	1,9789	1,9789	1,9789	1,9863	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>9,93</b>	<b>8,77</b>	<b>6,20</b>	<b>7,30</b>	<b>6,51</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,61</b>	<b>7,55</b>	<b>7,10</b>	<b>7,67</b>	<b>6,19</b>	

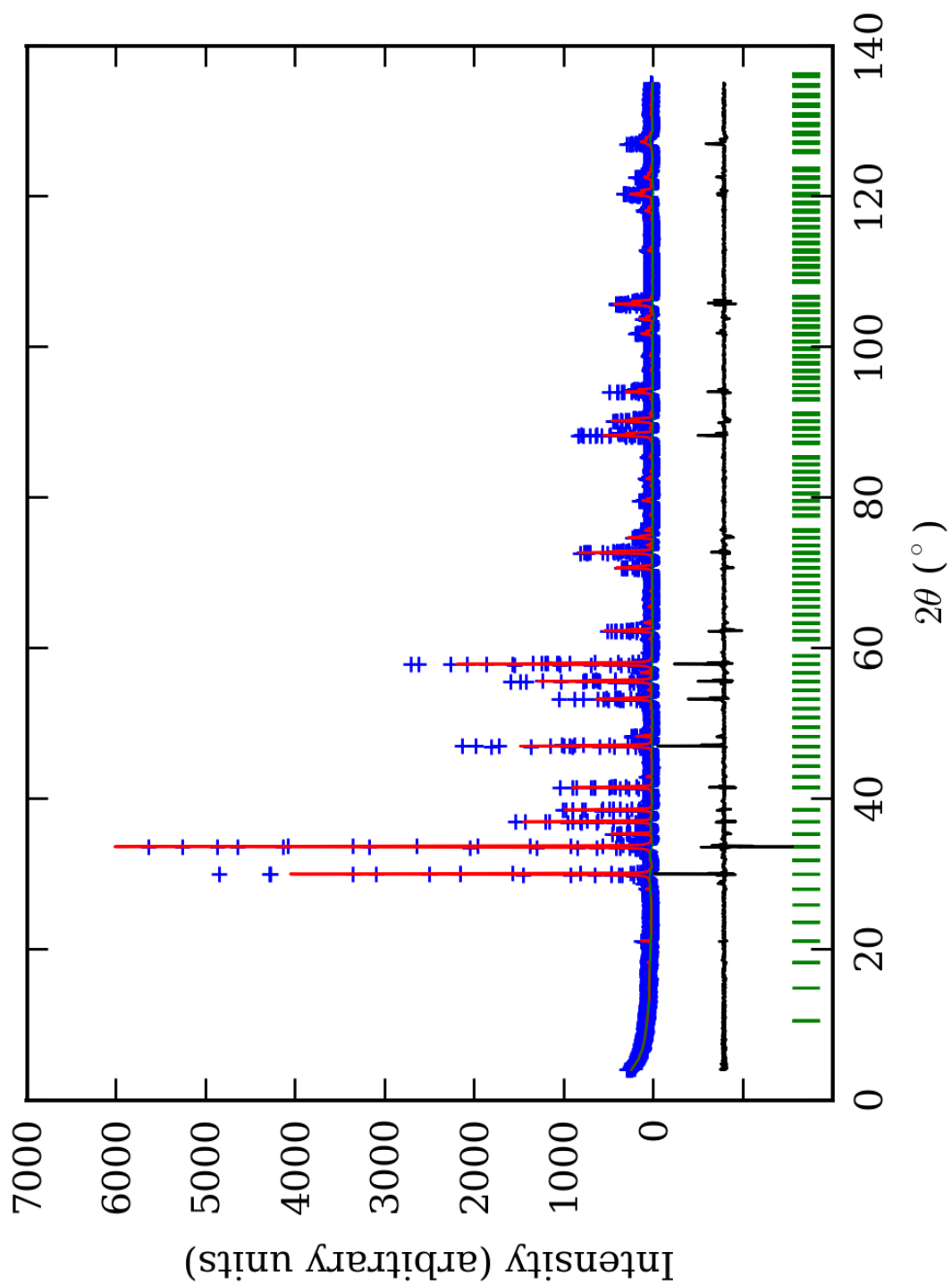
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 97. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u Pbca p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,3464		2,2922		1,8455		1,8541		1,6630	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,00(1)*	1,0 (1)	0,00(1)	1,0 (1)	0,001(7)	1,04 (8)	0,000(9)	1,05 (6)	0,00(1)	0,98 (9)
	y	0,249(9)		0,252(8)		0,250(7)		0,251(4)		0,253(8)	
	z	0,626(4)		0,623(6)		0,627(4)		0,628(5)		0,624(4)	
Ca2	x	0,128(3)	1,14 (7)	0,13(1)	0,9 (1)	0,123(5)	1,16 (5)	0,129(4)	1,03 (8)	0,128(3)	0,95 (6)
	y	0,001(6)		-0,00(1)		0,000(7)		0,001(5)		0,001(6)	
	z	0,251(4)		0,253(7)		0,251(4)		0,253(6)		0,251(4)	
Ca3	x	0,25(1)	0,95 (9)	0,25(1)	0,9 (2)	0,250(6)	0,88 (5)	0,250(7)	0,94 (8)	0,25(1)	1,03 (8)
	y	0,123(4)		0,12(1)		0,128(4)		0,123(3)		0,123(4)	
	z	-0,000(8)		-0,00(1)		0,000(8)		0,001(9)		-0,000(8)	
Al1	x	0,000	0,4 (1)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,1 (1)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,000	0,4 (1)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe2	x	0,000	0,1 (1)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al3	x	0,25(1)	0,8 (1)	0,25(3)	0,6 (3)	0,255(5)	0,7 (1)	0,250(8)	0,6 (1)	0,250(8)	0,6 (2)
	y	0,247(9)		0,251(6)		0,251(9)		0,250(6)		0,25(1)	
	z	0,25(1)		0,25(1)		0,253(7)		0,25(1)		0,25(1)	
Fe3	x	0,25(1)	0,2 (1)	0,25(3)	0,4 (3)	0,255(5)	0,3 (1)	0,250(8)	0,4 (1)	0,250(8)	0,4 (2)
	y	0,247(9)		0,251(6)		0,251(9)		0,250(6)		0,25(1)	
	z	0,25(1)		0,25(1)		0,253(7)		0,25(1)		0,25(1)	
Si1	x	0,00(2)	1,000 (0)	-0,00(1)	1,000 (0)	0,00(1)	1,000 (0)	-0,00(1)	1,000 (0)	0,00(2)	1,000 (0)
	y	0,25(1)		0,26(1)		0,25(1)		0,258(5)		0,25(1)	
	z	0,378(6)		0,363(8)		0,375(6)		0,375(8)		0,375(8)	
Si2	x	0,864(6)	1,000 (0)	0,87(2)	1,000 (0)	0,874(8)	1,000 (0)	0,871(7)	1,000 (0)	0,881(8)	1,000 (0)
	y	-0,006(7)		-0,00(1)		-0,001(9)		-0,00(1)		-0,00(1)	
	z	0,260(5)		0,26(1)		0,252(7)		0,259(8)		0,26(1)	
Si3	x	0,25(2)	1,000 (0)	0,25(2)	1,000 (0)	0,252(7)	1,000 (0)	0,25(1)	1,000 (0)	0,237(7)	1,000 (0)
	y	0,371(5)		0,38(2)		0,373(5)		0,386(4)		0,364(5)	
	z	0,00(1)		-0,00(1)		0,00(2)		0,00(1)		0,00(1)	
O1	x	0,05(2)	1,000 (0)	0,03(2)	1,000 (0)	0,05(2)	1,000 (0)	0,04(2)	1,000 (0)	0,04(2)	1,000 (0)
	y	0,04(1)		0,05(2)		0,04(1)		0,05(1)		0,04(2)	
	z	0,65(1)		0,65(2)		0,65(1)		0,64(2)		0,66(1)	
O2	x	0,55(2)	1,000 (0)	0,53(2)	1,000 (0)	0,56(1)	1,000 (0)	0,54(2)	1,000 (0)	0,54(2)	1,000 (0)
	y	0,54(1)		0,55(2)		0,53(1)		0,54(1)		0,55(1)	
	z	0,15(1)		0,16(2)		0,16(1)		0,14(2)		0,16(1)	
O3	x	0,20(2)	1,000 (0)	0,20(2)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)	0,20(2)	1,000 (0)	0,19(2)	1,000 (0)
	y	0,78(2)		0,78(2)		0,78(2)		0,78(2)		0,79(2)	
	z	0,91(1)		0,90(2)		0,91(1)		0,90(2)		0,92(2)	
O4	x	0,71(2)	1,000 (0)	0,70(2)	1,000 (0)	0,70(2)	1,000 (0)	0,70(2)	1,000 (0)	0,68(2)	1,000 (0)
	y	0,29(1)		0,28(2)		0,28(2)		0,28(2)		0,29(2)	
	z	0,41(1)		0,40(2)		0,41(1)		0,40(1)		0,41(2)	
O5	x	0,66(2)	1,000 (0)	0,65(2)	1,000 (0)	0,65(2)	1,000 (0)	0,66(2)	1,000 (0)	0,66(2)	1,000 (0)
	y	0,03(1)		0,03(2)		0,03(1)		0,03(1)		0,04(1)	
	z	0,04(1)		0,04(2)		0,05(1)		0,04(1)		0,05(2)	
O6	x	0,15(2)	1,000 (0)	0,15(2)	1,000 (0)	0,15(2)	1,000 (0)	0,16(2)	1,000 (0)	0,17(2)	1,000 (0)
	y	0,54(1)		0,53(2)		0,53(1)		0,54(1)		0,54(1)	
	z	0,55(1)		0,54(3)		0,55(1)		0,55(1)		0,55(2)	

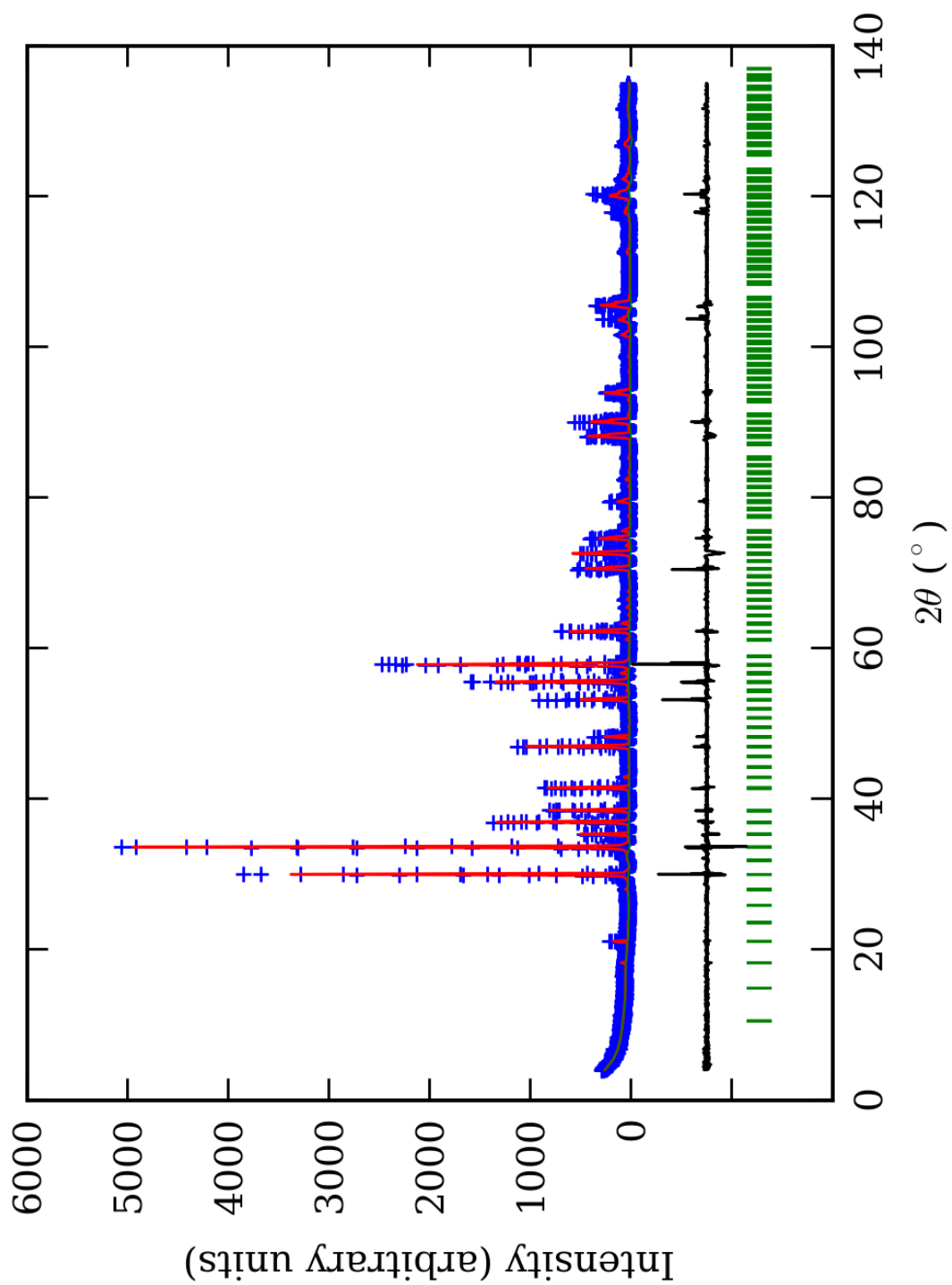
<b>O7</b>	<b>x</b>	0,20(2)	1,000 (0)	0,22(3)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,41(1)		0,40(2)		0,42(1)		0,40(2)		0,39(1)	
	<b>z</b>	0,30(2)		0,29(2)		0,30(1)		0,29(2)		0,30(2)	
<b>O8</b>	<b>x</b>	0,70(2)	1,000 (0)	0,71(2)	1,000 (0)	0,71(2)	1,000 (0)	0,71(1)	1,000 (0)	0,71(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,91(1)		0,92(1)		0,92(1)		0,90(2)		0,89(2)	
	<b>z</b>	0,79(1)		0,78(2)		0,80(2)		0,79(2)		0,79(2)	
<b>O9</b>	<b>x</b>	0,06(2)	1,000 (0)	0,05(2)	1,000 (0)	0,05(1)	1,000 (0)	0,05(2)	1,000 (0)	0,04(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,67(2)		0,66(2)		0,68(1)		0,65(1)		0,65(2)	
	<b>z</b>	0,03(1)		0,05(2)		0,03(1)		0,04(1)		0,05(1)	
<b>O10</b>	<b>x</b>	0,56(2)	1,000 (0)	0,55(2)	1,000 (0)	0,54(2)	1,000 (0)	0,55(2)	1,000 (0)	0,55(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,18(1)		0,15(2)		0,17(2)		0,16(1)		0,15(2)	
	<b>z</b>	0,53(1)		0,54(2)		0,54(2)		0,53(1)		0,54(1)	
<b>O11</b>	<b>x</b>	0,59(2)	1,000 (0)	0,60(2)	1,000 (0)	0,60(2)	1,000 (0)	0,60(1)	1,000 (0)	0,60(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,79(1)		0,80(2)		0,79(1)		0,80(2)		0,79(2)	
	<b>z</b>	0,28(2)		0,28(2)		0,30(1)		0,30(1)		0,29(2)	
<b>O12</b>	<b>x</b>	0,09(2)	1,000 (0)	0,10(2)	1,000 (0)	0,10(1)	1,000 (0)	0,08(1)	1,000 (0)	0,10(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,29(2)		0,30(3)		0,28(1)		0,312(9)		0,29(2)	
	<b>z</b>	0,78(2)		0,79(3)		0,79(1)		0,828(9)		0,79(2)	
<b>Ca1 (%)</b>	100(10)	103 (9)	100(10)	93 (13)	104(8)	103 (6)	105(6)	101 (7)	98(9)	99 (8)	
<b>Ca2 (%)</b>	114(7)		90(10)		116(5)		103(8)		95(6)		
<b>Ca3 (%)</b>	95(9)		90(20)		88(5)		94(8)		103(8)		
<b>Al1 (%)</b>	80(20)	80 (20)	60(40)	60 (37)	60(40)	63 (23)	60(20)	60 (17)	60(20)	60 (20)	
<b>Al2 (%)</b>	80(20)		60(40)		60(20)		60(20)		60(20)		
<b>Al3 (%)</b>	80(20)		60(30)		70(10)		60(10)		60(20)		

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

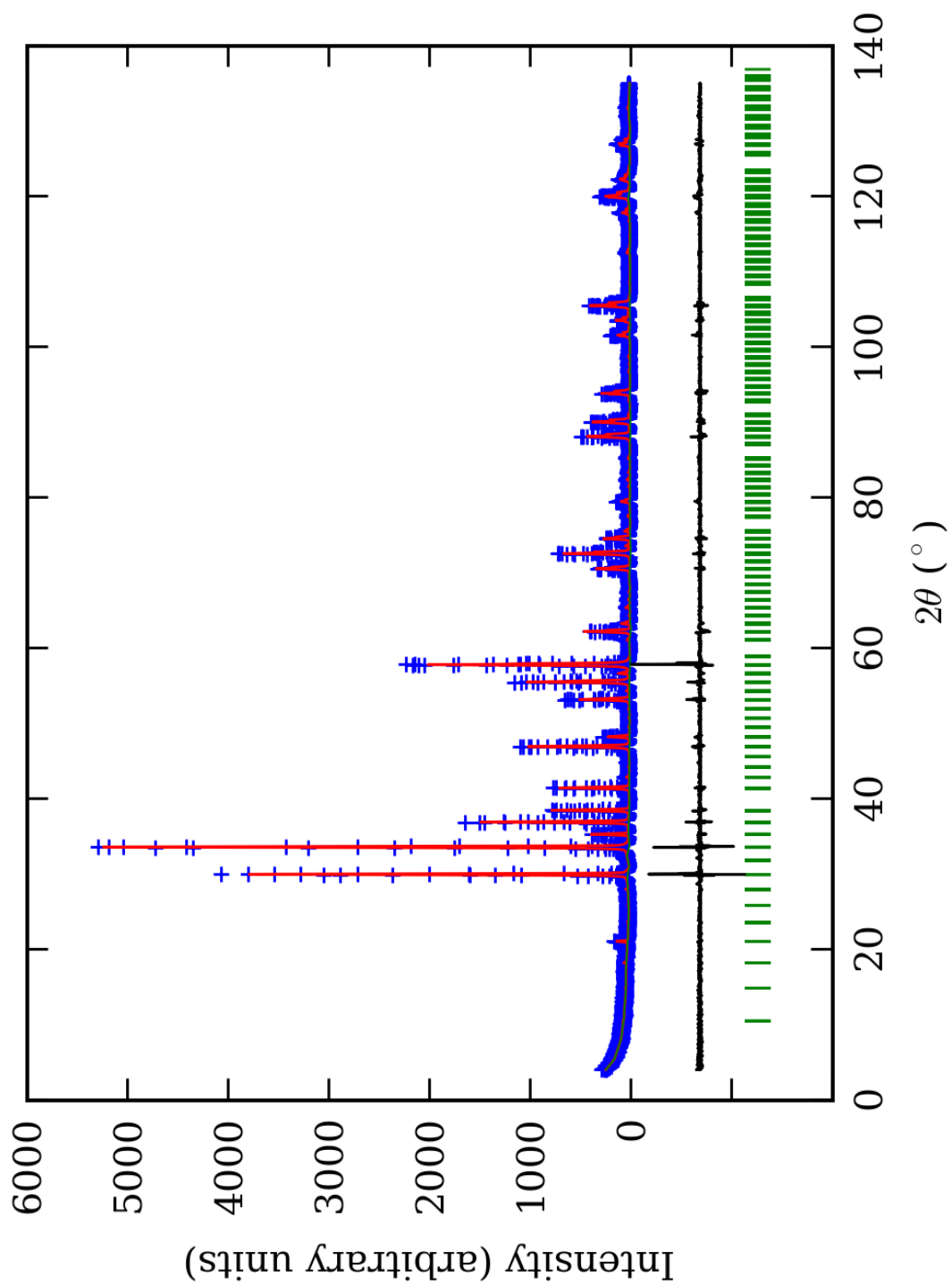


PRILOG 98. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u I2/a p.g.

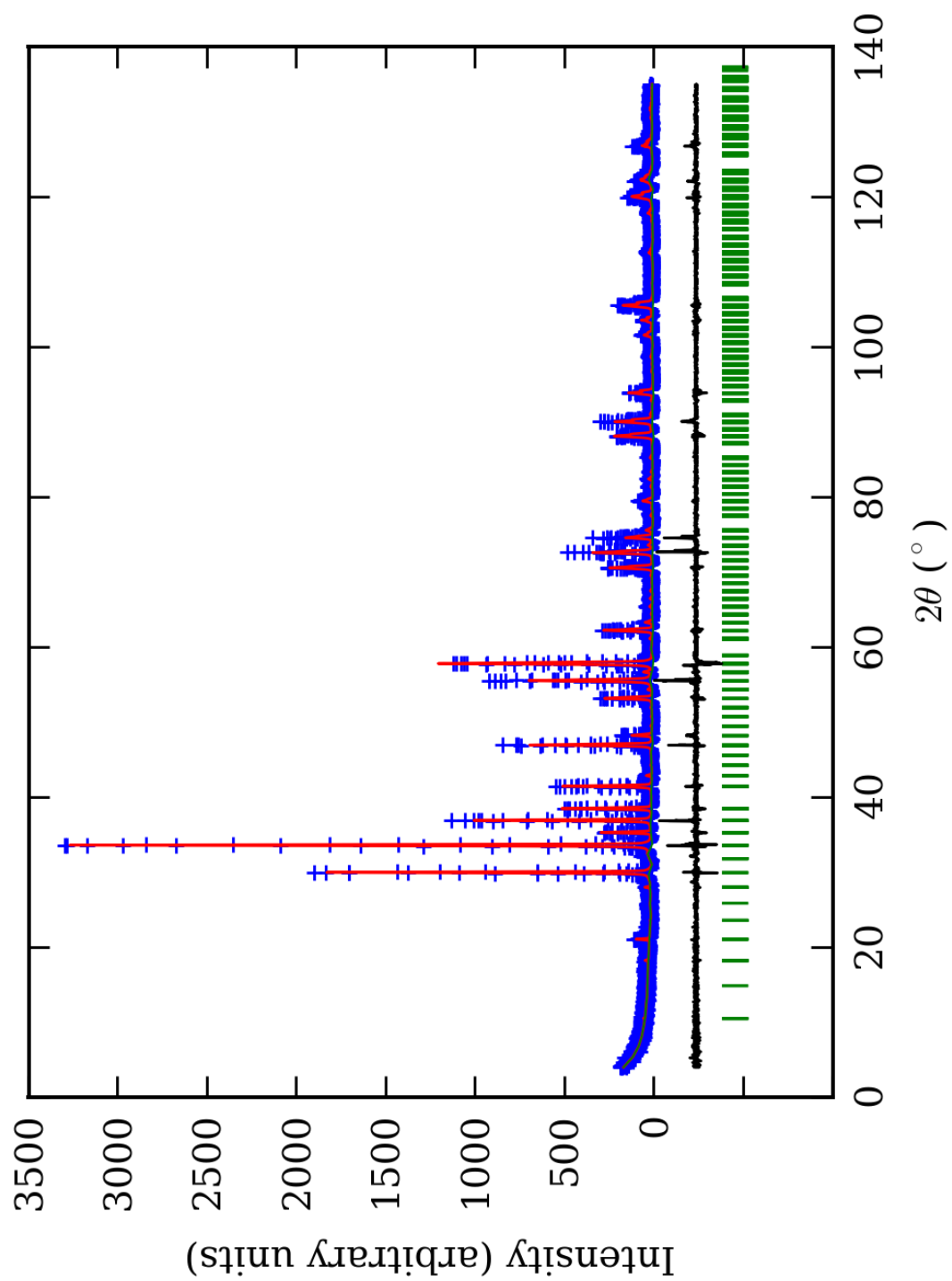




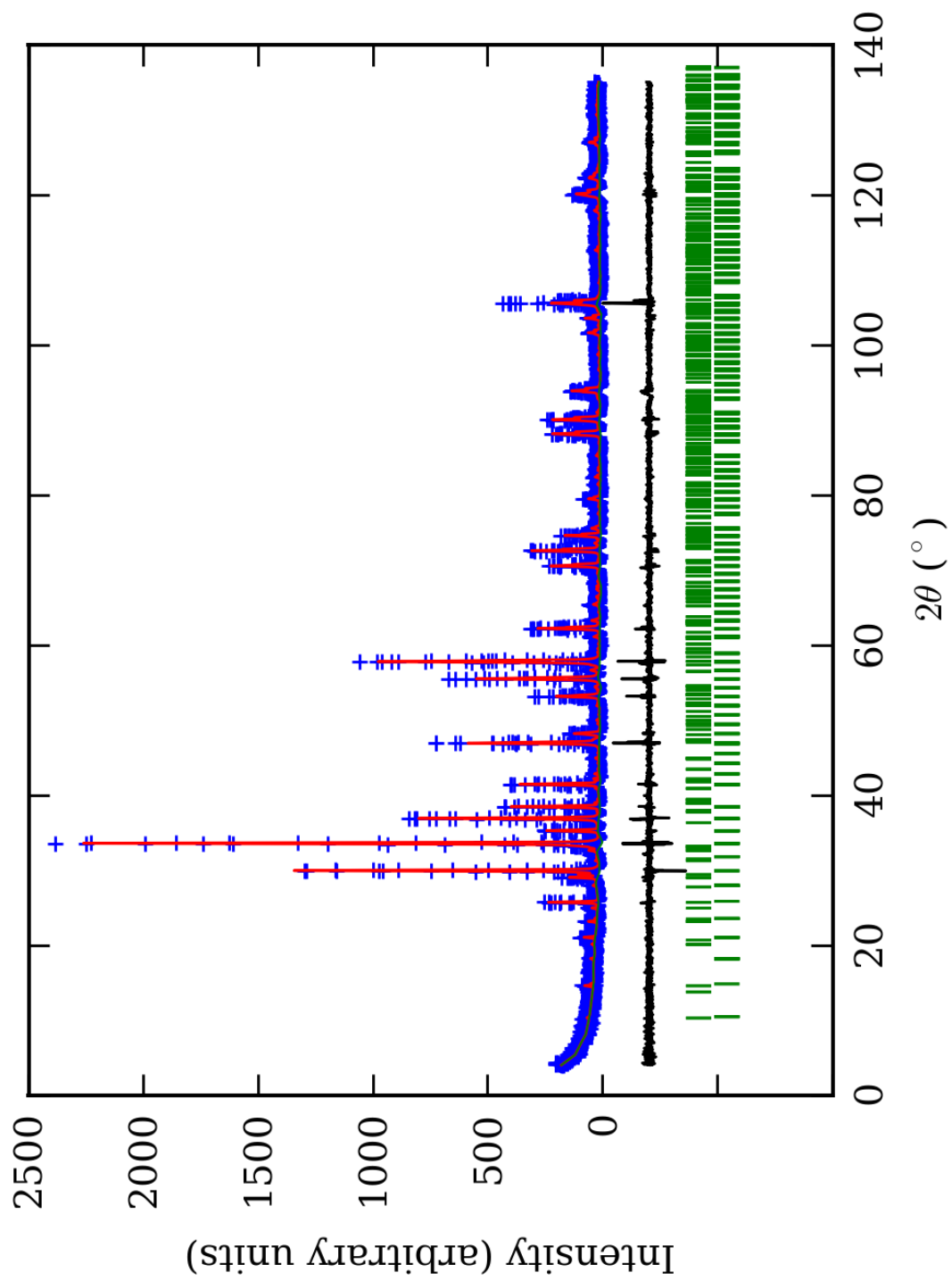
PRILOG 99. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u I2/a p.g.



PRILOG 100. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u I2/a p.g.



PRILOG 101. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I2/a p.g.



PRILOG 102. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u I2/a p.g.

PRILOG 103. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I2/a p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,2187	2,4037	1,6749	1,9031	1,5855	
Faktor skale	0,0000125(9)*	0,000018(1)	0,0000142(5)	0,0000114(5)	0,0000074(3)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,14(9)	0,23(9)	-0,26(4)	0,01(8)	0,20(8)	
Ukupni temp. faktor	0,0(1)	0,3(1)	0,37(6)	0,61(9)	0,40(9)	
Parametri polu-širine	U	0,010(5)	0,026(9)	0,008(1)	-0,010(5)	0,015(4)
	V	-0,004(7)	-0,03(1)	-0,027(3)	0,02(1)	-0,029(7)
	W	0,013(2)	0,024(3)	0,028(1)	0,017(3)	0,031(2)
Preferentna orijent.	0,45(5)	0,20(4)	0,34(2)	0,22(3)	0,36(3)	
Parametri asimetrije	As 1	-0,02(5)	0,13(5)	0,09(3)	0,07(6)	0,05(3)
	As 2	0,041(8)	0,065(8)	0,052(5)	0,044(8)	0,034(5)
X parametar	0,008(2)	0,005(2)	0,0174(9)	0,010(2)	0,008(2)	
Nulta tačka	0,005(6)	0,027(8)	0,004(4)	0,020(9)	-0,034(6)	
a <sub>0</sub>	10,330(1)	10,343(1)	10,3403(5)	10,344(1)	10,3448(8)	
b <sub>0</sub>	16,849(2)	16,871(2)	16,8774(6)	16,873(1)	16,861(1)	
c <sub>0</sub>	10,318(1)	10,324(1)	10,3297(3)	10,3270(8)	10,3273(7)	
β <sub>0</sub>	109,43(1)	109,396(9)	109,378(3)	109,378(7)	109,428(7)	
V <sub>0</sub>	1693,5(3)	1699,2(3)	1700,6(1)	1700,3(3)	1698,7(2)	
N-P+C	6375	6375	6375	6375	6352	
R <sub>p</sub>	14,5	13,7	11,3	13,2	12,5	
R <sub>wp</sub>	19,3	18,9	15,6	18,6	17,2	
R <sub>exp</sub>	11,44	11,38	11,59	14,04	13,99	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,2	21,5	17,9	21,5	23,3	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	25,2	25,0	20,7	25,2	25,8	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	14,94	15,03	15,36	18,98	21,03	
Chi2	2,85	2,76	1,82	1,76	1,50	
Chi2 (Bragg contr.)	3,17	2,98	1,95	1,90	1,58	
DW-stat.	0,9063	0,9034	1,3554	1,3336	1,4842	
DW-exp.	1,9786	1,9786	1,9786	1,9786	1,9860	
GoF	1,7	1,6	1,3	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>9,02</b>	<b>8,78</b>	<b>5,71</b>	<b>7,36</b>	<b>5,79</b>	
R <sub>F</sub>	<b>6,99</b>	<b>8,09</b>	<b>7,10</b>	<b>7,43</b>	<b>6,54</b>	

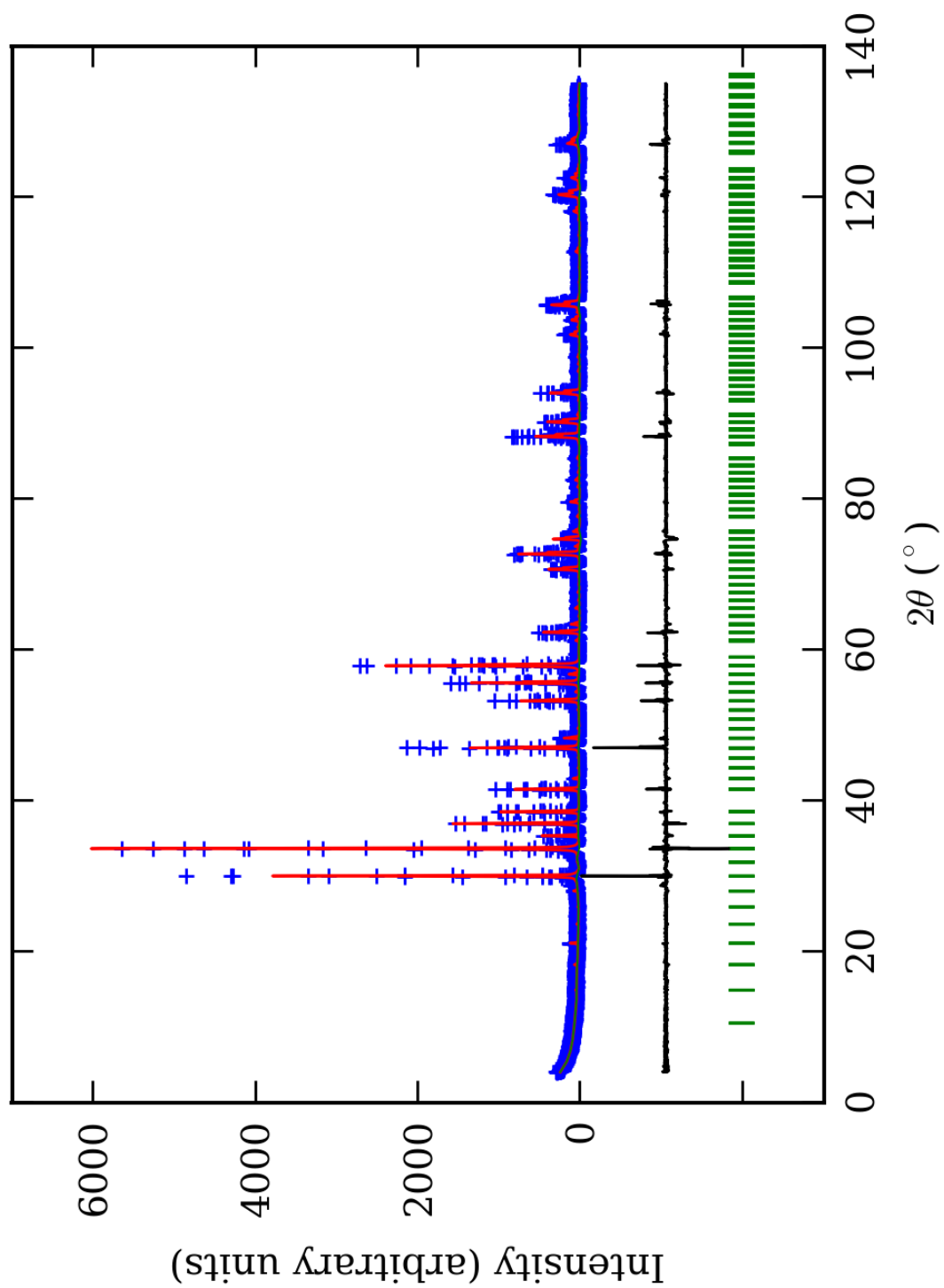
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 104. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I2/a p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,2187		2,4037		1,6749		1,9031		1,5855	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,250	0,51 (9)	0,250	0,5 (1)	0,250	0,54 (5)	0,250	0,5 (1)	0,250	0,47 (8)
	y	0,625(7)*		0,625(9)		0,621(3)		0,627(7)		0,632(5)	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Ca2	x	0,939(7)	1,0 (1)	0,934(7)	0,94 (9)	0,941(3)	1,01 (8)	0,935(9)	1,01 (8)	0,940(5)	1,0 (1)
	y	0,686(5)		0,685(5)		0,687(3)		0,687(6)		0,685(4)	
	z	0,060(8)		0,064(7)		0,062(4)		0,064(7)		0,062(7)	
Ca3	x	0,250	0,56 (9)	0,250	0,5 (1)	0,250	0,58 (5)	0,250	0,5 (1)	0,250	0,47 (8)
	y	0,122(6)		0,124(8)		0,124(3)		0,126(7)		0,126(5)	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Ca4	x	0,184(7)	1,0 (1)	0,190(7)	0,92 (8)	0,189(4)	0,94 (8)	0,183(8)	1,02 (9)	0,179(4)	1,0 (1)
	y	0,937(5)		0,938(5)		0,935(3)		0,937(5)		0,940(4)	
	z	0,815(8)		0,815(8)		0,812(4)		0,813(7)		0,815(6)	
Al1	x	0,000	0,4 (2)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,4 (1)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,3 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,1 (2)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,1 (1)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,2 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,000	0,4 (2)	0,000	0,4 (2)	0,000	0,4 (1)	0,000	0,4 (2)	0,000	0,3 (1)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe2	x	0,000	0,1 (2)	0,000	0,1 (2)	0,000	0,1 (1)	0,000	0,1 (2)	0,000	0,2 (1)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al3	x	0,750	0,4 (2)	0,750	0,3 (2)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,3 (2)	0,750	0,3 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Fe3	x	0,750	0,1 (2)	0,750	0,2 (2)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,2 (2)	0,750	0,2 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Al4	x	0,250	0,4 (2)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,30 (7)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,3 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Fe4	x	0,250	0,1 (2)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,20 (7)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,2 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Si1	x	0,319(9)	1,000 (0)	0,314(9)	1,000 (0)	0,320(5)	1,000 (0)	0,32(1)	1,000 (0)	0,317(7)	1,000 (0)
	y	0,072(3)		0,064(6)		0,067(2)		0,066(7)		0,064(4)	
	z	0,69(1)		0,687(8)		0,693(5)		0,688(8)		0,684(8)	
Si2	x	-0,00(1)	1,000 (0)	-0,00(1)	1,000 (0)	-0,001(7)	1,000 (0)	-0,00(1)	1,000 (0)	0,002(8)	1,000 (0)
	y	0,627(5)		0,627(4)		0,626(3)		0,623(5)		0,620(3)	
	z	0,75(1)		0,75(1)		0,750(6)		0,759(9)		0,75(1)	
Si3	x	0,936(9)	1,000 (0)	0,935(8)	1,000 (0)	0,935(6)	1,000 (0)	0,936(9)	1,000 (0)	0,939(6)	1,000 (0)
	y	0,312(5)		0,318(6)		0,313(3)		0,310(6)		0,313(5)	
	z	0,56(1)		0,571(8)		0,561(6)		0,565(8)		0,56(1)	
O1	x	0,39(2)	1,000 (0)	0,38(2)	1,000 (0)	0,39(1)	1,000 (0)	0,40(2)	1,000 (0)	0,40(1)	1,000 (0)
	y	0,68(1)		0,69(1)		0,677(5)		0,69(1)		0,695(8)	
	z	0,70(2)		0,70(2)		0,70(1)		0,70(2)		0,70(2)	
O2	x	0,41(2)	1,000 (0)	0,40(2)	1,000 (0)	0,430(8)	1,000 (0)	0,40(2)	1,000 (0)	0,42(1)	1,000 (0)
	y	0,30(1)		0,30(1)		0,317(5)		0,30(1)		0,307(7)	
	z	0,69(2)		0,69(2)		0,709(9)		0,68(2)		0,70(1)	
O3	x	0,20(2)	1,000 (0)	0,19(2)	1,000 (0)	0,19(1)	1,000 (0)	0,20(2)	1,000 (0)	0,18(1)	1,000 (0)
	y	0,50(1)		0,51(1)		0,503(6)		0,50(1)		0,506(8)	
	z	0,12(2)		0,11(2)		0,12(1)		0,11(2)		0,10(2)	

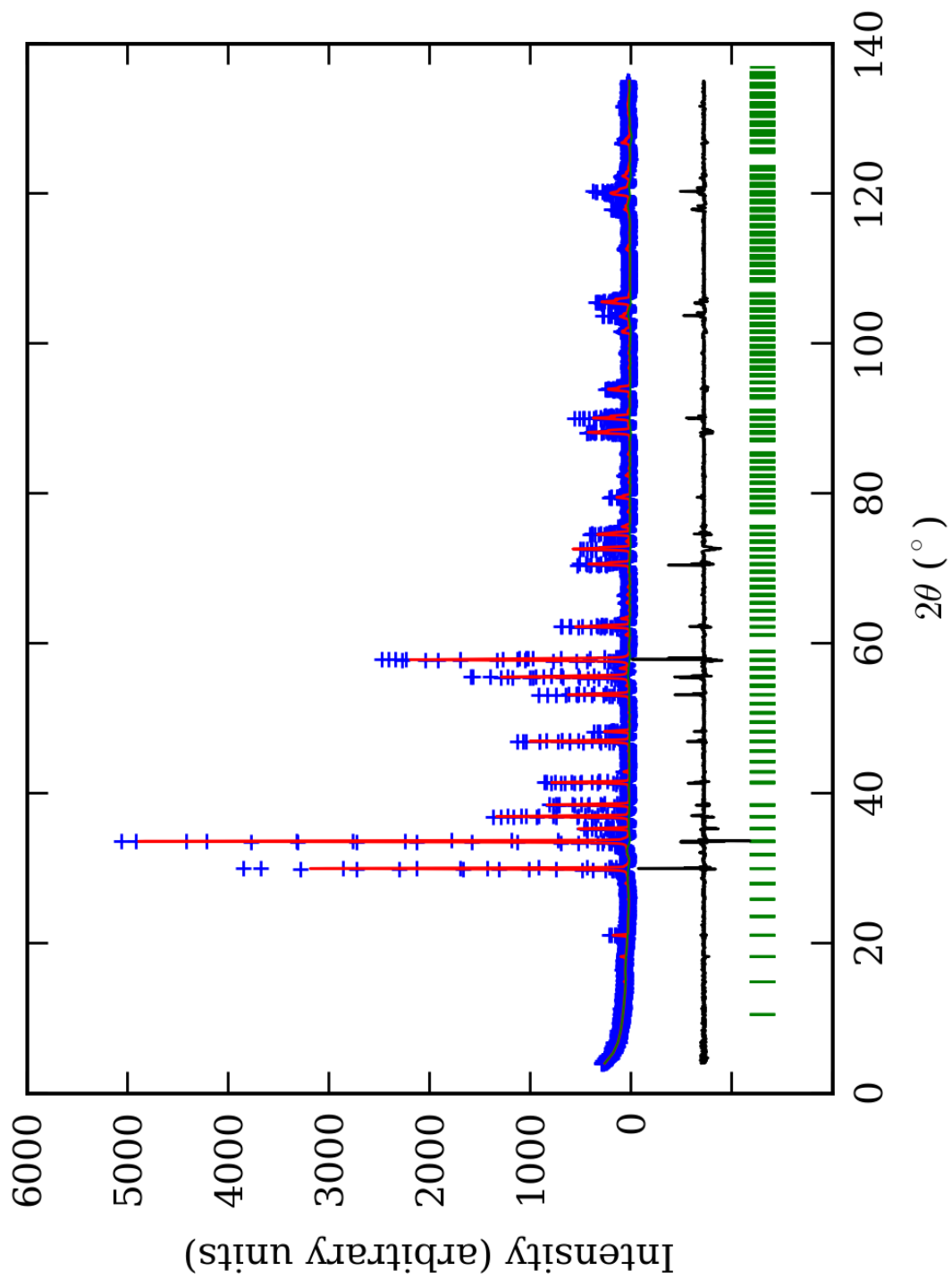
<b>O4</b>	x	0,77(2)	1,000 (0)	0,78(2)	1,000 (0)	0,77(1)	1,000 (0)	0,76(2)	1,000 (0)	0,75(2)	1,000 (0)
	y	0,65(1)		0,65(1)		0,647(7)		0,65(1)		0,65(1)	
	z	0,14(2)		0,16(2)		0,14(1)		0,14(2)		0,14(2)	
<b>O5</b>	x	0,02(2)	1,000 (0)	0,01(2)	1,000 (0)	0,01(1)	1,000 (0)	0,00(2)	1,000 (0)	0,01(2)	1,000 (0)
	y	0,61(1)		0,60(1)		0,607(7)		0,60(1)		0,60(1)	
	z	0,90(2)		0,92(2)		0,90(1)		0,91(2)		0,90(2)	
<b>O6</b>	x	0,86(2)	1,000 (0)	0,87(2)	1,000 (0)	0,86(1)	1,000 (0)	0,86(2)	1,000 (0)	0,86(1)	1,000 (0)
	y	0,25(1)		0,25(1)		0,248(7)		0,24(1)		0,25(1)	
	z	0,45(2)		0,45(2)		0,45(1)		0,44(2)		0,45(2)	
<b>O7</b>	x	0,44(2)	1,000 (0)	0,46(2)	1,000 (0)	0,44(1)	1,000 (0)	0,45(2)	1,000 (0)	0,46(1)	1,000 (0)
	y	0,06(1)		0,06(1)		0,062(8)		0,05(1)		0,06(1)	
	z	0,64(2)		0,64(2)		0,66(1)		0,63(2)		0,65(2)	
<b>O8</b>	x	0,18(2)	1,000 (0)	0,16(2)	1,000 (0)	0,16(1)	1,000 (0)	0,16(2)	1,000 (0)	0,21(1)	1,000 (0)
	y	0,639(8)		0,65(1)		0,642(6)		0,64(1)		0,639(6)	
	z	0,78(2)		0,77(2)		0,78(1)		0,77(2)		0,77(1)	
<b>O9</b>	x	0,10(2)	1,000 (0)	0,12(2)	1,000 (0)	0,09(1)	1,000 (0)	0,12(2)	1,000 (0)	0,12(1)	1,000 (0)
	y	0,30(1)		0,29(1)		0,298(7)		0,29(1)		0,294(9)	
	z	0,60(2)		0,59(2)		0,60(1)		0,59(2)		0,59(2)	
<b>O10</b>	x	0,40(2)	1,000 (0)	0,39(2)	1,000 (0)	0,40(1)	1,000 (0)	0,40(2)	1,000 (0)	0,40(1)	1,000 (0)
	y	0,60(1)		0,60(1)		0,600(7)		0,60(1)		0,60(1)	
	z	0,52(2)		0,53(2)		0,53(1)		0,51(2)		0,51(2)	
<b>O11</b>	x	0,46(2)	1,000 (0)	0,44(2)	1,000 (0)	0,45(1)	1,000 (0)	0,44(2)	1,000 (0)	0,44(1)	1,000 (0)
	y	0,44(1)		0,45(1)		0,440(6)		0,45(1)		0,445(9)	
	z	0,65(2)		0,64(2)		0,64(1)		0,64(2)		0,63(2)	
<b>O12</b>	x	0,84(2)	1,000 (0)	0,84(2)	1,000 (0)	0,83(1)	1,000 (0)	0,85(2)	1,000 (0)	0,84(1)	1,000 (0)
	y	0,958(9)		0,96(9)		0,955(6)		0,96(1)		0,955(9)	
	z	0,85(2)		0,85(2)		0,85(1)		0,85(2)		0,85(2)	
<b>Ca1 (%)</b>		102(18)		100(20)		108(10)		100(20)		94(16)	
<b>Ca2 (%)</b>		100(10)	104 (14)	94(18)	96 (18)	101(8)	105 (9)	101(8)	101 (14)	100(10)	97 (13)
<b>Ca3 (%)</b>		112(18)		100(20)		116(10)		100(20)			
<b>Ca4 (%)</b>		100(10)		92(16)		94(8)		102(9)		100(10)	
<b>Al1 (%)</b>		80(40)		60(20)		80(20)		60(40)		60(20)	
<b>Al2 (%)</b>		80(40)	80 (40)	80(40)	65 (30)	80(20)	70 (18)	80(40)	65 (35)	60(20)	60 (20)
<b>Al3 (%)</b>		80(40)		60(40)		60(20)		60(40)			
<b>Al4 (%)</b>		80(40)		60(20)		60(14)		60(20)			

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

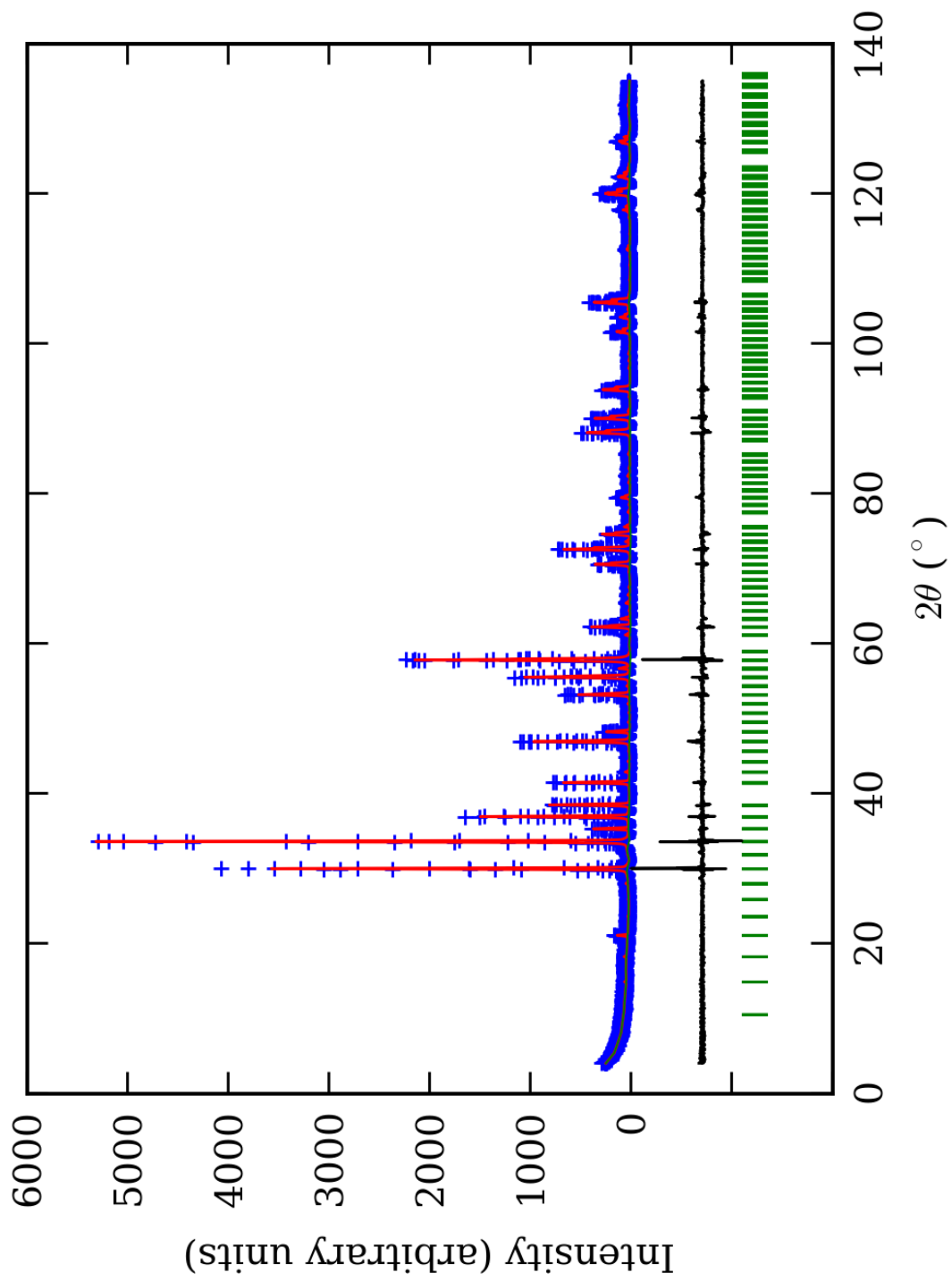


PRILOG 105. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u I2/b p.g.

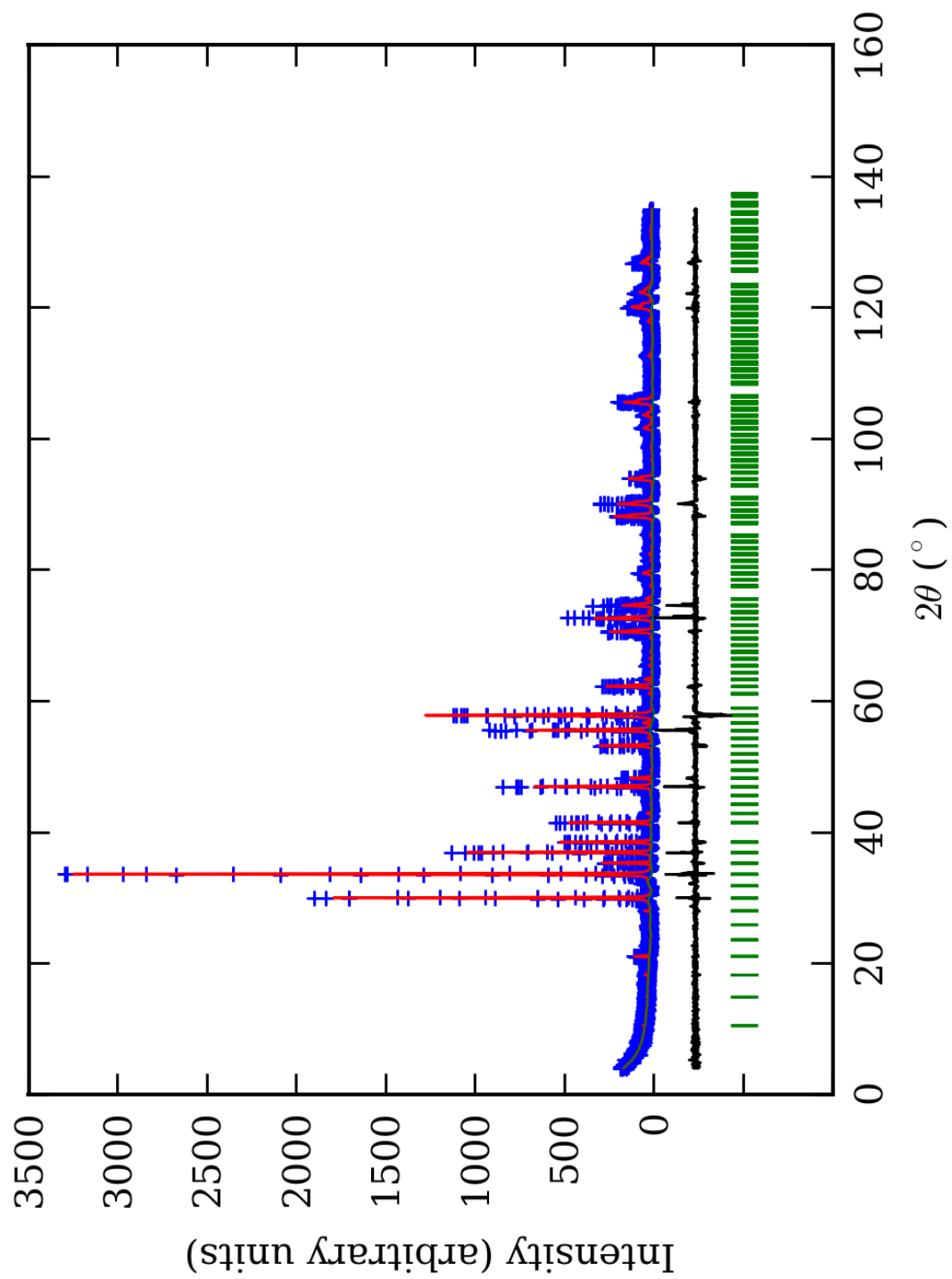




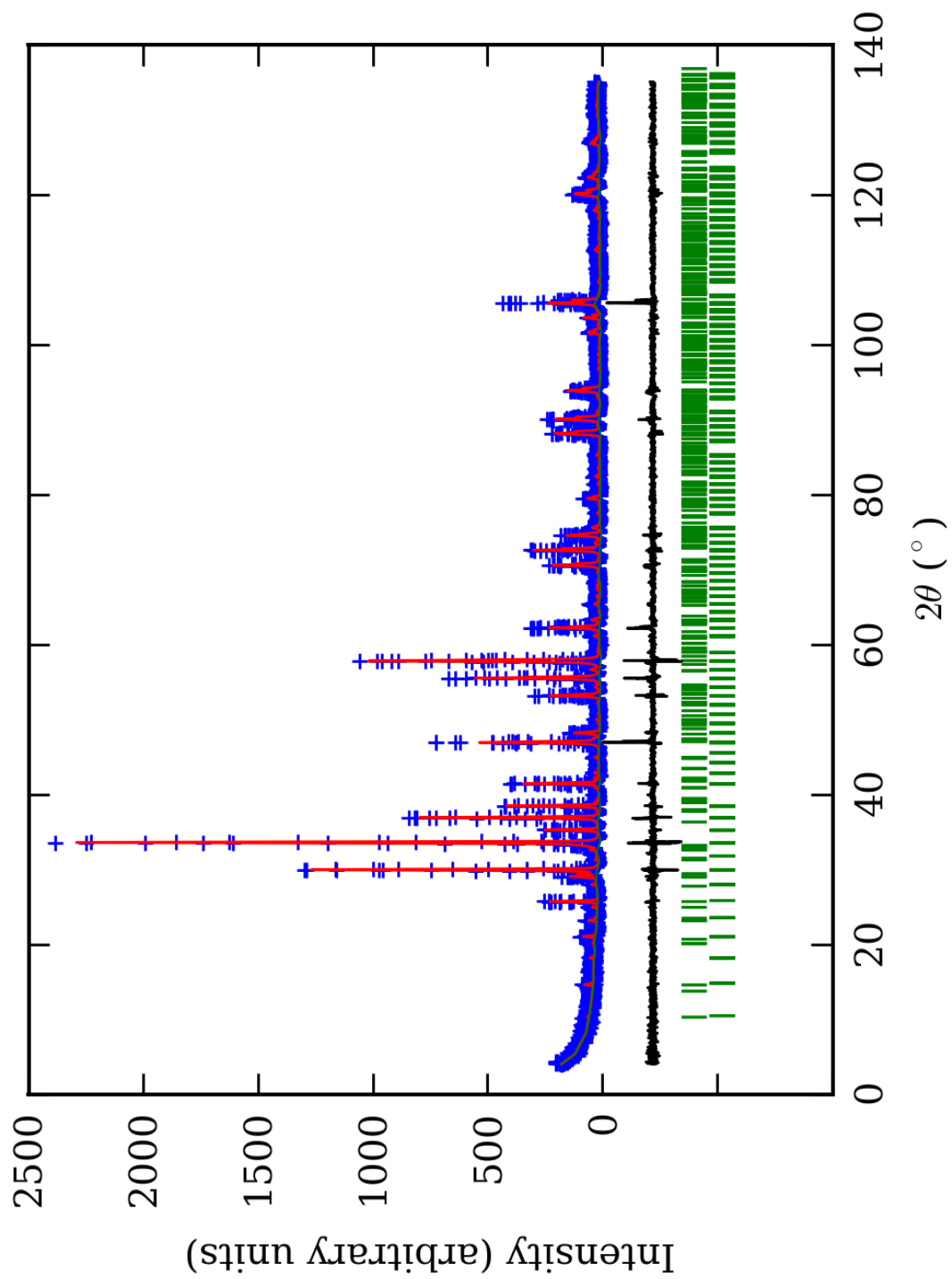
PRILOG 106. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u I2/b p.g.



PRILOG 107. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u I2/b p.g.



PRILOG 108. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I2/b p.g.



*PRILOG 109. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u I2/b p.g.*

PRILOG 110. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I2/b p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,3647	2,3514	1,7632	1,9959	1,6460	
Faktor skale	0,000016(1)*	0,000018(1)	0,000026(1)	0,0000120(9)	0,0000086(5)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,2(1)	0,2(1)	-0,35(4)	-0,03(8)	-0,33(6)	
Ukupni temp. faktor	0,3(1)	0,4(1)	0,58(5)	0,67(9)	0,57(8)	
Parametri polu-širine	U	0,006(4)	0,022(7)	0,010(1)	-0,005(5)	0,019(1)
	V	-0,005(6)	-0,03(1)	-0,033(2)	0,01(1)	-0,055(3)
	W	0,012(2)	0,024(3)	0,030(1)	0,020(3)	0,041(2)
Preferentna orijent.	0,28(5)	0,24(6)	-0,15(5)	0,19(6)	0,23(4)	
Parametri asimetrije	As 1	0,08(6)	0,18(4)	0,10(3)	0,08(6)	0,05(3)
	As 2	0,051(8)	0,066(8)	0,055(5)	0,045(8)	0,038(6)
X parametar	0,008(2)	0,006(2)	0,0195(8)	0,012(2)	0,020(1)	
Nulta tačka	0,014(7)	0,031(7)	0,002(4)	0,017(9)	-0,041(5)	
a <sub>0</sub>	11,920(2)	11,925(2)	11,9278(4)	11,930(2)	11,9365(6)	
b <sub>0</sub>	11,924(2)	11,942(1)	11,9435(4)	11,944(1)	11,9252(7)	
c <sub>0</sub>	11,9119(8)	11,928(1)	11,9330(4)	11,927(1)	11,9242(6)	
γ <sub>0</sub>	90,074(5)	90,113(6)	90,086(2)	90,104(6)	90,100(3)	
V <sub>0</sub>	1693,1(4)	1698,6(3)	1700,0(1)	1699,4(4)	1697,3(2)	
N-P+C	6376	6376	6376	6376	6353	
R <sub>p</sub>	14,5	14,0	11,8	13,7	13,1	
R <sub>wp</sub>	19,9	19,1	16,0	18,9	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,44	11,38	11,59	14,04	13,99	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,6	22,0	18,8	22,1	25,1	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	26,2	25,2	21,2	25,5	27,0	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,09	15,03	15,43	18,97	21,37	
Chi2	3,02	2,81	1,90	1,81	1,60	
Chi2 (Bragg contr.)	3,38	3,03	2,05	1,95	1,67	
DW-stat.	0,8528	0,8884	1,3050	1,2924	1,4052	
DW-exp.	1,9782	1,9782	1,9782	1,9782	1,9857	
GoF	1,7	1,7	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>9,81</b>	<b>9,71</b>	<b>6,55</b>	<b>8,58</b>	<b>7,24</b>	
R <sub>F</sub>	<b>7,51</b>	<b>8,76</b>	<b>7,90</b>	<b>7,74</b>	<b>8,42</b>	

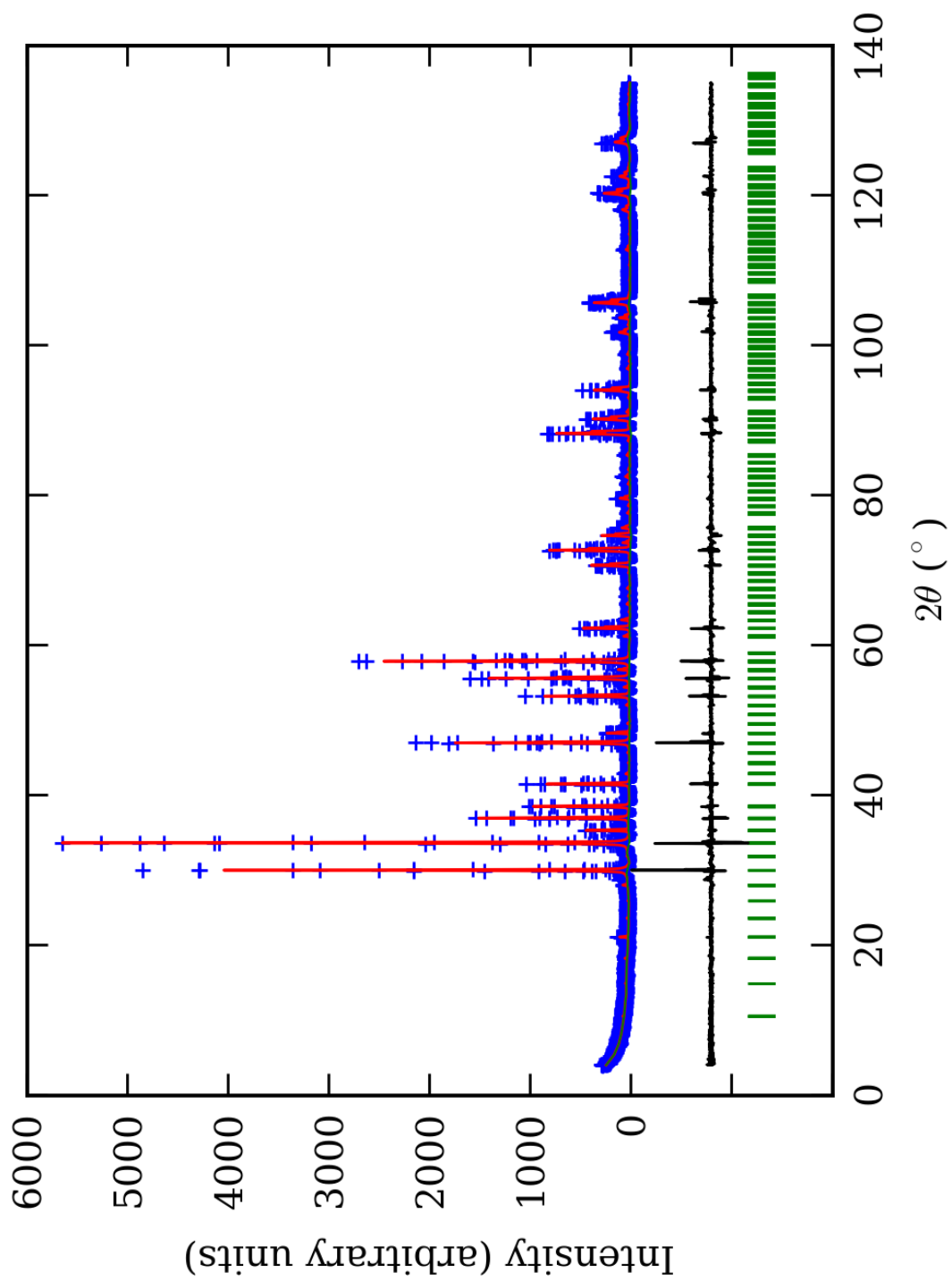
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 111. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I2/b p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,3647		2,3514		1,7632		1,9959		1,6460	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,000	0,50 (7)	0,000	0,45 (7)	0,000	0,54 (5)	0,000	0,49 (6)	0,000	0,506 (3)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,37(2)*		0,385(7)		0,376(6)		0,38(1)		0,375(9)	
Ca2	x	0,000	0,43 (5)	0,000	0,46 (8)	0,000	0,56 (6)	0,000	0,48 (7)	0,000	0,512 (5)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,88(2)		0,88(2)		0,873(5)		0,87(1)		0,878(9)	
Ca3	x	0,250(7)	1,0 (1)	0,251(6)	1,01 (9)	0,253(2)	1,09 (9)	0,250(5)	1,08 (8)	0,248(4)	1,05 (3)
	y	0,122(5)		0,126(6)		0,125(3)		0,127(4)		0,125(5)	
	z	-0,004(9)		-0,001(6)		-0,000(4)		-0,003(7)		-0,006(5)	
Ca4	x	0,623(5)	1,1 (1)	0,625(5)	1,0 (1)	0,625(5)	0,86 (3)	0,621(4)	1,0 (1)	0,619(5)	0,95 (2)
	y	0,501(6)		0,498(4)		0,498(3)		0,500(4)		0,498(4)	
	z	0,252(9)		0,250(8)		0,250(5)		0,255(6)		0,254(7)	
Al1	x	0,000	0,4 (2)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,31 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,1 (2)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,19 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,750	0,4 (2)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,32 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Fe2	x	0,750	0,1 (2)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,18 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Al3	x	0,000	0,4 (2)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,26 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe3	x	0,000	0,1 (2)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,24 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al4	x	0,750	0,4 (2)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,31 (1)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Fe4	x	0,750	0,1 (2)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,19 (1)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si1	x	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,13(1)		0,111(7)		0,126(8)		0,12(1)		0,123(9)	
Si2	x	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,62(1)		0,62(1)		0,626(7)		0,63(1)		0,626(8)	
Si3	x	0,25(1)	1,000 (0)	0,248(8)	1,000 (0)	0,244(3)	1,000 (0)	0,251(8)	1,000 (0)	0,259(5)	1,000 (0)
	y	0,378(8)		0,374(8)		0,374(4)		0,368(6)		0,371(7)	
	z	0,00(1)		-0,001(7)		-0,002(5)		0,001(7)		-0,004(7)	
Si4	x	0,381(8)	1,000 (0)	0,382(6)	1,000 (0)	0,375(6)	1,000 (0)	0,383(6)	1,000 (0)	0,383(6)	1,000 (0)
	y	0,497(8)		0,500(6)		0,497(4)		0,505(6)		0,503(6)	
	z	0,25(1)		0,251(8)		0,252(4)		0,251(8)		0,250(8)	
O1	x	0,04(2)	1,000 (0)	0,04(2)	1,000 (0)	0,03(1)	1,000 (0)	0,04(2)	1,000 (0)	0,04(1)	1,000 (0)
	y	0,54(2)		0,55(2)		0,542(9)		0,54(2)		0,54(1)	
	z	0,67(1)		0,65(1)		0,65(1)		0,65(2)		0,65(2)	
O2	x	0,20(2)	1,000 (0)	0,20(2)	1,000 (0)	0,21(1)	1,000 (0)	0,20(2)	1,000 (0)	0,18(1)	1,000 (0)
	y	0,28(2)		0,29(1)		0,302(8)		0,28(1)		0,28(1)	
	z	0,92(2)		0,90(1)		0,90(1)		0,90(2)		0,90(1)	

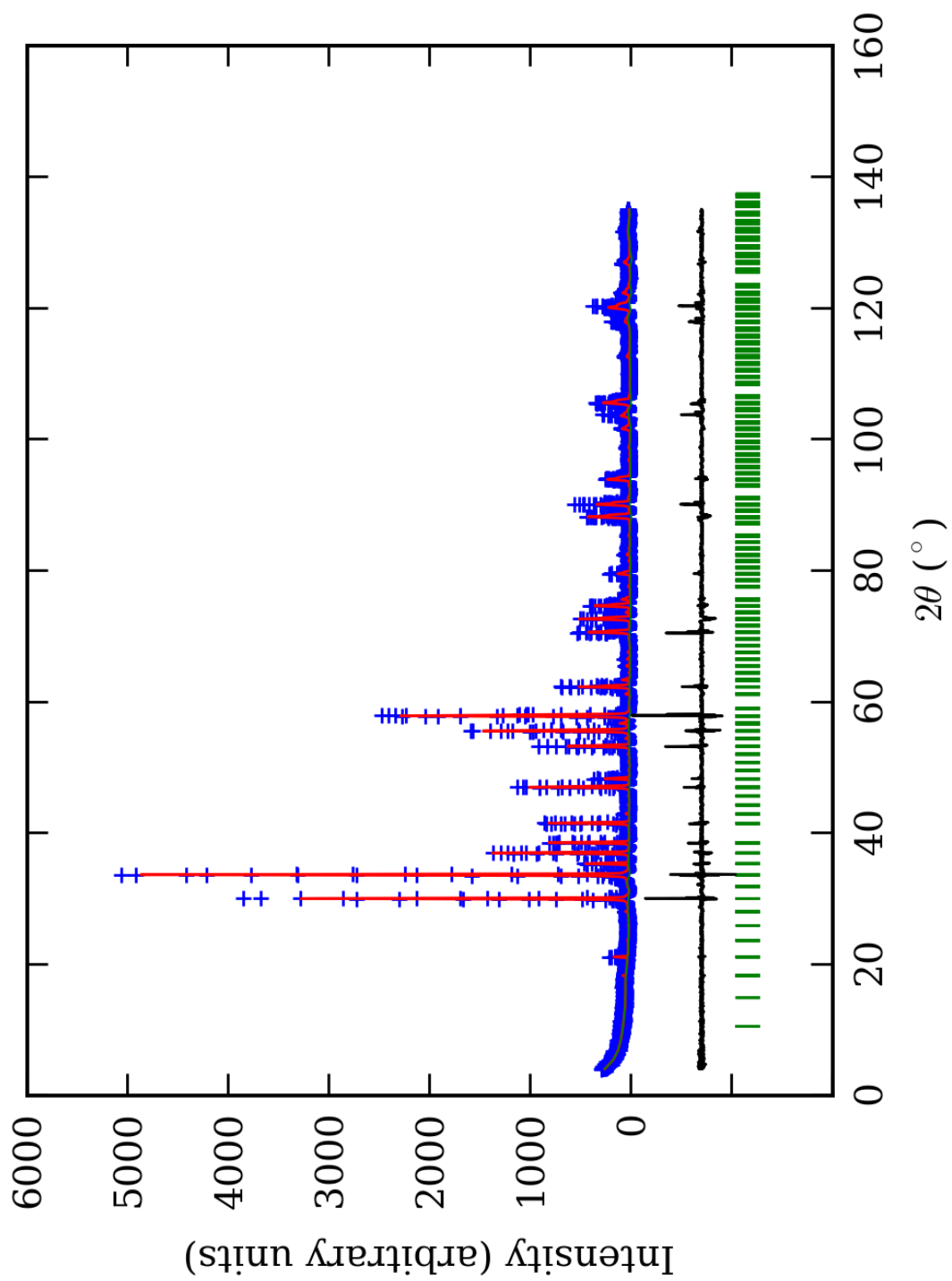
<b>O3</b>	<b>x</b>	0,46(2)	1,000 (0)	0,47(2)	1,000 (0)	0,47(1)	1,000 (0)	0,46(2)	1,000 (0)	0,46(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,54(2)		0,54(2)		0,55(1)		0,55(2)		0,55(1)	
	<b>z</b>	0,34(2)		0,35(1)		0,34(1)		0,35(2)		0,35(1)	
<b>O4</b>	<b>x</b>	0,20(1)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)	0,217(9)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)	0,20(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,72(2)		0,71(1)		0,712(9)		0,71(2)		0,71(2)	
	<b>z</b>	0,57(1)		0,60(1)		0,60(1)		0,60(2)		0,59(1)	
<b>O5</b>	<b>x</b>	0,65(2)	1,000 (0)	0,65(1)	1,000 (0)	0,66(1)	1,000 (0)	0,66(1)	1,000 (0)	0,65(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,55(2)		0,53(1)		0,539(9)		0,55(1)		0,54(2)	
	<b>z</b>	0,04(2)		0,05(2)		0,05(1)		0,07(1)		0,05(1)	
<b>O6</b>	<b>x</b>	0,20(2)	1,000 (0)	0,22(1)	1,000 (0)	0,23(1)	1,000 (0)	0,22(1)	1,000 (0)	0,21(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,91(2)		0,90(1)		0,899(9)		0,90(1)		0,90(1)	
	<b>z</b>	0,29(2)		0,30(2)		0,29(1)		0,30(1)		0,29(1)	
<b>O7</b>	<b>x</b>	0,84(2)	1,000 (0)	0,84(1)	1,000 (0)	0,812(8)	1,000 (0)	0,817(9)	1,000 (0)	0,83(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,54(2)		0,54(1)		0,538(8)		0,54(1)		0,54(1)	
	<b>z</b>	0,96(2)		0,96(1)		0,951(9)		0,96(1)		0,96(1)	
<b>O8</b>	<b>x</b>	0,20(2)	1,000 (0)	0,21(2)	1,000 (0)	0,22(1)	1,000 (0)	0,21(1)	1,000 (0)	0,21(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,10(2)		0,09(1)		0,086(9)		0,10(1)		0,10(2)	
	<b>z</b>	0,20(2)		0,20(1)		0,20(1)		0,20(2)		0,20(1)	
<b>O9</b>	<b>x</b>	0,05(2)	1,000 (0)	0,05(2)	1,000 (0)	0,032(9)	1,000 (0)	0,04(1)	1,000 (0)	0,03(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,16(2)		0,15(1)		0,15(1)		0,14(2)		0,14(1)	
	<b>z</b>	0,03(2)		0,03(1)		0,05(1)		0,04(2)		0,05(1)	
<b>O10</b>	<b>x</b>	0,60(2)	1,000 (0)	0,58(1)	1,000 (0)	0,571(9)	1,000 (0)	0,59(1)	1,000 (0)	0,59(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,29(2)		0,28(1)		0,300(8)		0,29(2)		0,30(1)	
	<b>z</b>	0,29(2)		0,28(1)		0,28(1)		0,28(2)		0,28(1)	
<b>O11</b>	<b>x</b>	0,46(2)	1,000 (0)	0,46(1)	1,000 (0)	0,459(9)	1,000 (0)	0,46(1)	1,000 (0)	0,44(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,15(2)		0,15(1)		0,154(9)		0,15(1)		0,16(1)	
	<b>z</b>	0,96(2)		0,97(1)		0,97(1)		0,96(2)		0,96(1)	
<b>O12</b>	<b>x</b>	0,59(2)	1,000 (0)	0,60(2)	1,000 (0)	0,577(9)	1,000 (0)	0,60(2)	1,000 (0)	0,60(1)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,70(2)		0,70(1)		0,714(9)		0,71(2)		0,70(2)	
	<b>z</b>	0,22(2)		0,22(1)		0,207(9)		0,21(2)		0,21(1)	
<b>Ca1 (%)</b>		100(14)		90(14)		108(10)		98(12)		101,2(6)	
<b>Ca2 (%)</b>		86(10)	99	92(16)	96	112(12)	104	96(14)	100	102(1)	101
<b>Ca3 (%)</b>		100(10)	(11)	101(9)	(12)	109(9)	(8)	108(8)	(11)	105(3)	(2)
<b>Ca4 (%)</b>		110(10)		100(10)		86(3)		100(10)		95(2)	
<b>Al1 (%)</b>		80(40)		60(20)		60(20)		60(40)		62(2)	
<b>Al2 (%)</b>		80(40)	80	60(20)	60	60(20)	60	60(20)	60	64(2)	60
<b>Al3 (%)</b>		80(40)	(40)	60(20)	(20)	60(20)	(20)	60(40)	(30)	52(2)	(2)
<b>Al4 (%)</b>		80(40)		60(20)		60(20)		60(20)		62(2)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

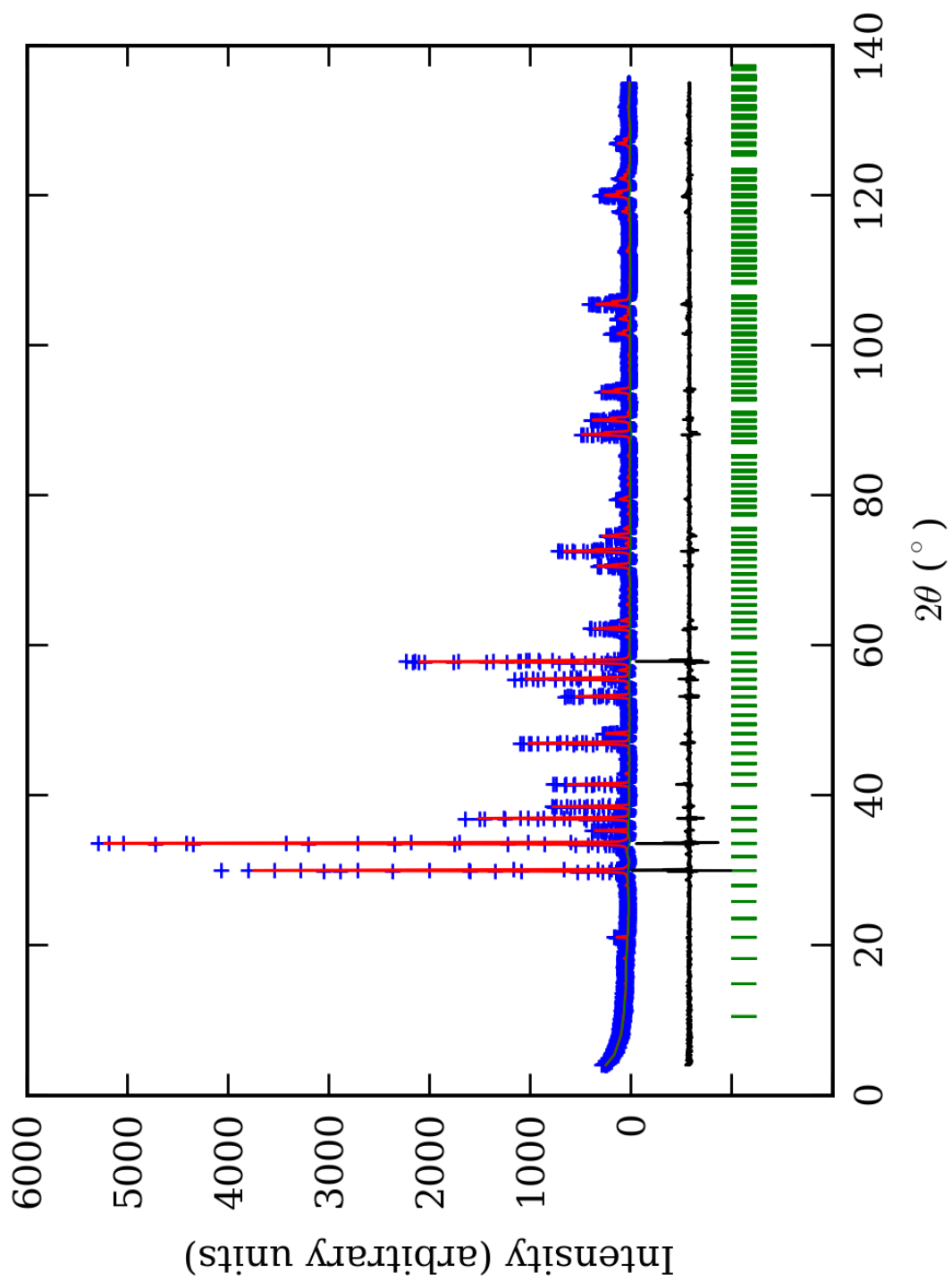


PRILOG 112. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u I2/c p.g.

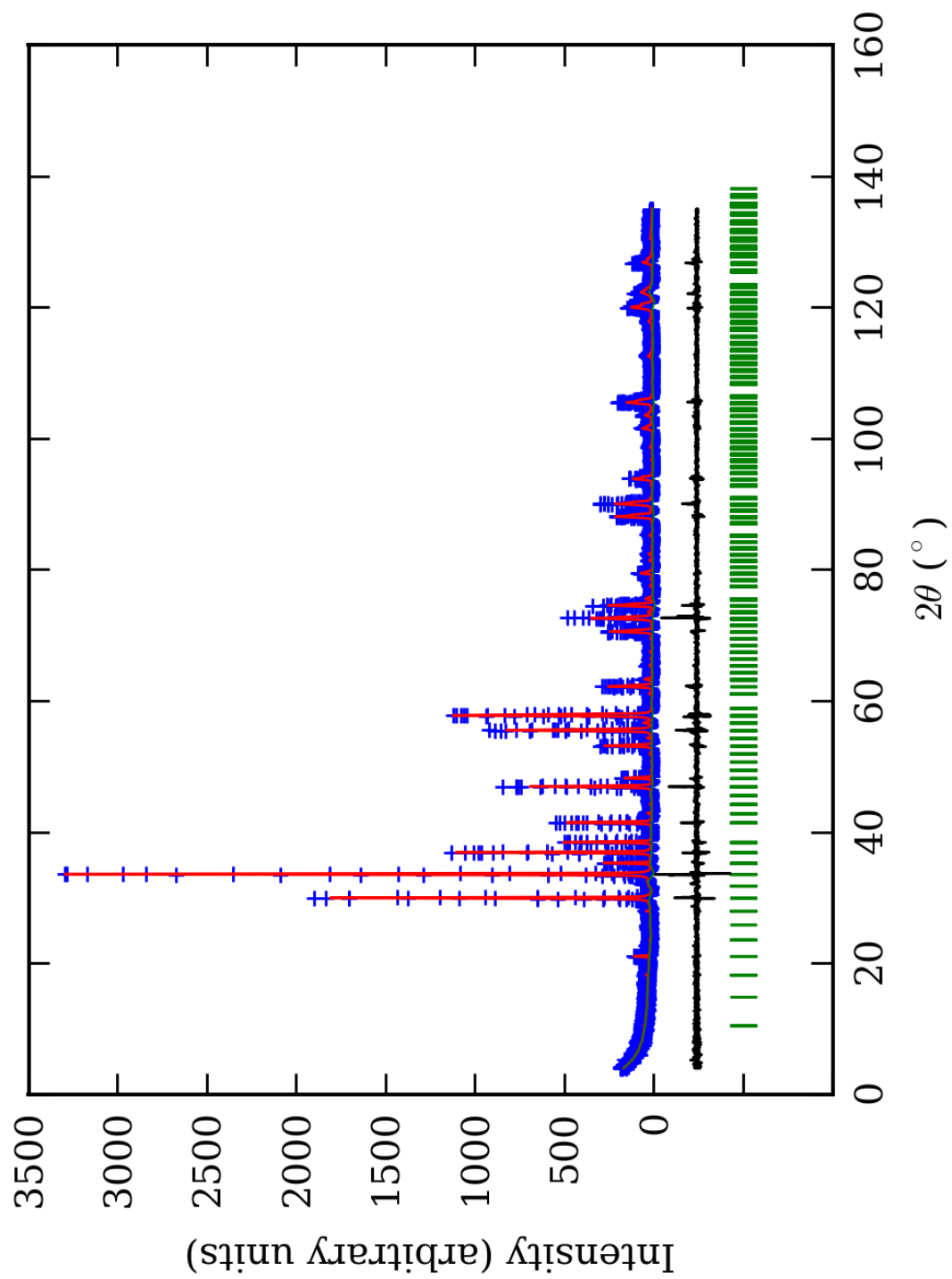




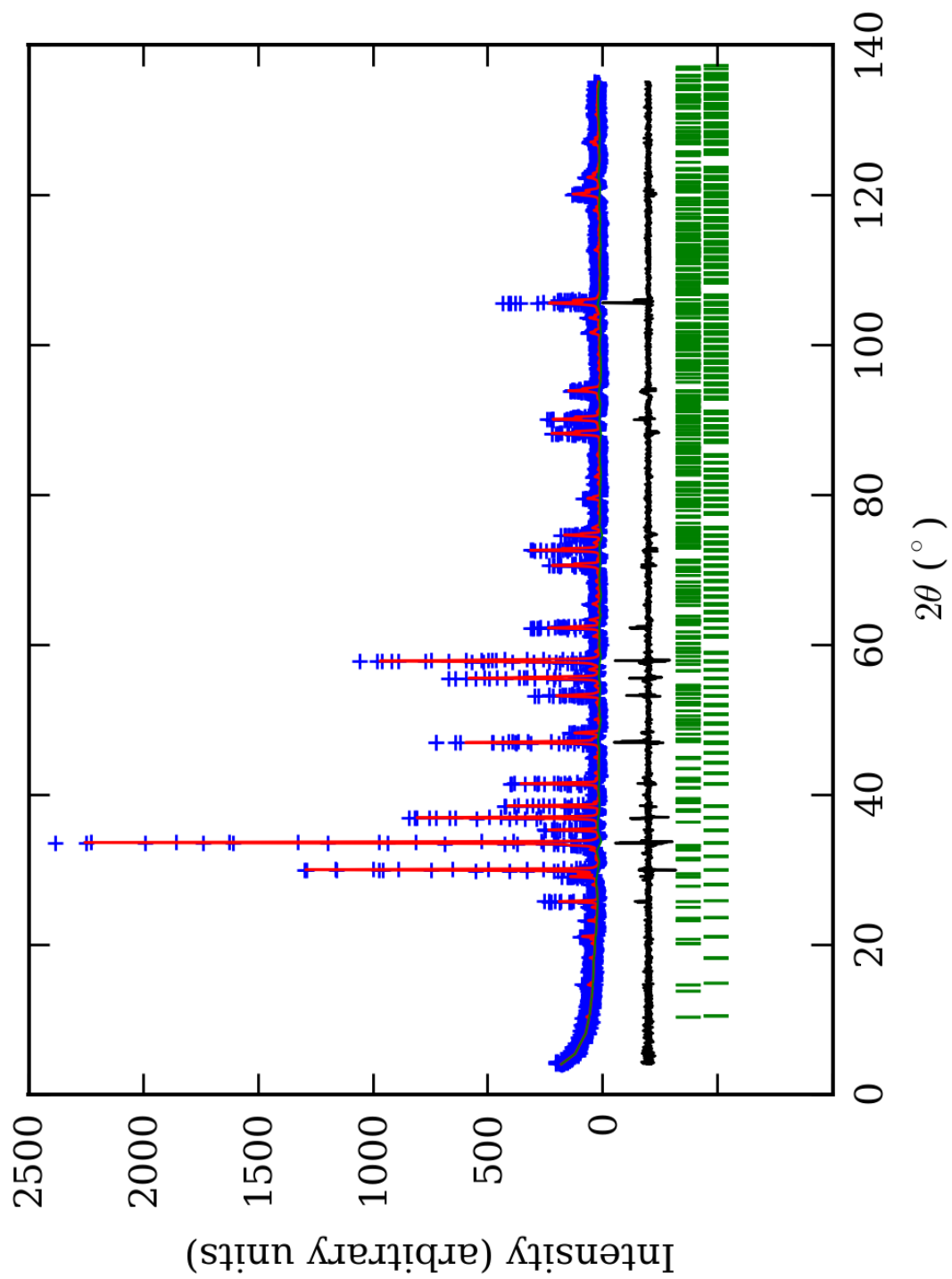
PRILOG 113. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u I2/c p.g.



PRILOG 114. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u I2/c p.g.



PRILOG 115. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u I2/c p.g.



PRILOG 116. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u I2/c p.g.

PRILOG 117. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I2/c p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	1,9602	2,2010	1,7022	1,5854	1,6402	
Faktor skale	0,000139(9)*	0,00010(1)	0,000090(6)	0,00012(1)	0,000030(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(7)	0,30(8)	0,09(5)	0,22(6)	0,06(8)	
Ukupni temp. faktor	0,4(1)	0,5(2)	0,33(7)	0,5(1)	0,5(1)	
Parametri polu-širine	U	0,023(5)	0,06(1)	0,000(4)	0,034(9)	0,009(4)
	V	-0,013(6)	-0,03(1)	0,014(6)	0,01(1)	0,00(1)
	W	0,014(2)	0,024(4)	0,017(2)	0,018(3)	-0,021(8)
Preferentna orijent.	-2,5(1)	-1,7(2)	-1,9(1)	-3,4(2)	-1,02(7)	
Parametri asimetrije	As 1	-0,00(4)	0,17(4)	0,10(3)	0,08(5)	0,04(4)
	As 2	0,043(6)	0,066(6)	0,052(4)	0,043(5)	0,034(6)
X parametar	0,004(1)	0,002(2)	0,008(1)	0,005(1)	0,009(2)	
Nulta tačka	0,014(5)	0,030(7)	0,003(5)	0,021(7)	-0,037(6)	
a <sub>0</sub>	10,3258(5)	10,3302(9)	10,3326(4)	10,3363(6)	10,3274(6)	
b <sub>0</sub>	16,849(3)	16,897(4)	16,903(2)	16,896(4)	16,902(2)	
c <sub>0</sub>	10,342(1)	10,324(3)	10,328(2)	10,353(2)	10,320(1)	
β <sub>0</sub>	70,445(5)	70,55(1)	70,549(6)	70,450(7)	70,553(5)	
V <sub>0</sub>	1695,4(3)	1699,4(7)	1700,8(3)	1703,9(6)	1698,6(3)	
N-P+C	6375	6375	6375	6375	6352	
R <sub>p</sub>	13,1	13,6	11,4	12,5	12,8	
R <sub>wp</sub>	18,2	18,8	15,6	17,9	17,5	
R <sub>exp</sub>	11,44	11,38	11,59	14,04	13,99	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	20,2	21,2	17,7	19,5	24,0	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	23,8	24,7	20,4	23,6	26,4	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,00	14,96	15,20	18,56	21,14	
Chi <sup>2</sup>	2,52	2,72	1,81	1,62	1,57	
Chi <sup>2</sup> (Bragg contr.)	2,80	2,94	1,96	1,75	1,64	
DW-stat.	1,0096	0,9273	1,3463	1,4463	1,4341	
DW-exp.	1,9786	1,9786	1,9786	1,9786	1,9860	
GoF	1,6	1,6	1,3	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>6,78</b>	<b>7,90</b>	<b>5,17</b>	<b>4,76</b>	<b>5,67</b>	
R <sub>F</sub>	<b>6,65</b>	<b>7,75</b>	<b>5,62</b>	<b>5,46</b>	<b>6,41</b>	

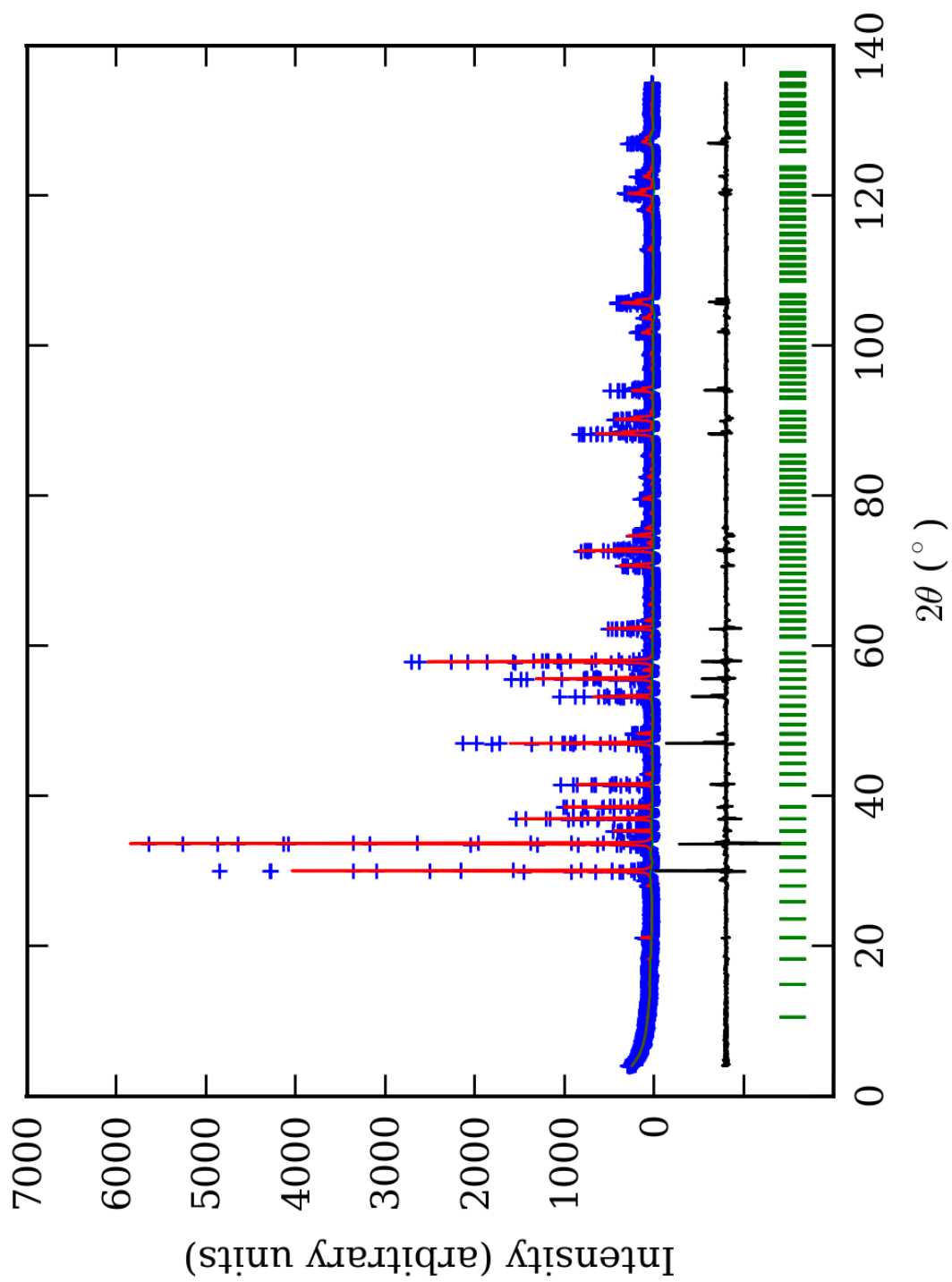
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 118. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I2/c p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		1,9602		2,2010		1,7022		1,5854		1,6402	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,000	0,39 (4)	0,000	0,40 (8)	0,000	0,42 (5)	0,000	0,49 (5)	0,000	0,48 (7)
	y	0,875(7)*		0,872(9)		0,873(5)		0,871(5)		0,873(5)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca2	x	0,000	0,46 (5)	0,000	0,42 (9)	0,000	0,43 (4)	0,000	0,46 (5)	0,000	0,51 (7)
	y	0,380(6)		0,372(8)		0,373(5)		0,372(5)		0,381(4)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca3	x	0,189(3)	1,03 (5)	0,188(6)	0,99 (8)	0,184(2)	1,08 (5)	0,186(2)	1,00 (5)	0,191(5)	1,00 (7)
	y	0,566(4)		0,562(8)		0,564(3)		0,563(4)		0,557(4)	
	z	0,186(6)		0,19(1)		0,193(4)		0,188(7)		0,184(8)	
Ca4	x	0,066(2)	1,05 (5)	0,065(4)	1,00 (6)	0,066(2)	1,13 (6)	0,065(2)	0,95 (5)	0,063(5)	0,90 (7)
	y	0,184(3)		0,187(6)		0,185(3)		0,186(4)		0,189(5)	
	z	0,068(5)		0,06(1)		0,062(4)		0,054(7)		0,061(7)	
Al1	x	0,000	0,49 (8)	0,000	0,4 (1)	0,000	0,32 (9)	0,000	0,35 (6)	0,000	0,3 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,01 (8)	0,000	0,1 (1)	0,000	0,18 (9)	0,000	0,15 (6)	0,000	0,2 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,750	0,52 (7)	0,750	0,3 (1)	0,750	0,43 (8)	0,750	0,30 (8)	0,750	0,3 (2)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Fe2	x	0,750	-0,02 (7)	0,750	0,2 (1)	0,750	0,07 (8)	0,750	0,20 (8)	0,750	0,2 (2)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Al3	x	0,000	0,51 (7)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,36 (8)	0,000	0,32 (8)	0,000	0,4 (1)
	y	0,050		0,050		0,050		0,050		0,050	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe3	x	0,000	-0,01 (7)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,14 (8)	0,000	0,18 (8)	0,000	0,1 (1)
	y	0,050		0,050		0,050		0,050		0,050	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al4	x	0,750	0,44 (6)	0,750	0,30 (9)	0,750	0,40 (6)	0,750	0,31 (5)	0,750	0,29 (7)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Fe4	x	0,750	0,06 (6)	0,750	0,20 (9)	0,750	0,10 (6)	0,750	0,19 (5)	0,750	0,21 (7)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Si1	x	0,254(4)	1,000 (0)	0,252(6)	1,000 (0)	0,250(4)	1,000 (0)	0,253(3)	1,000 (0)	0,253(6)	1,000 (0)
	y	0,123(3)		0,122(5)		0,118(3)		0,111(4)		0,123(4)	
	z	0,500(9)		0,50(2)		0,500(8)		0,50(1)		0,501(9)	
Si2	x	0,061(3)	1,000 (0)	0,058(6)	1,000 (0)	0,064(3)	1,000 (0)	0,051(2)	1,000 (0)	0,053(5)	1,000 (0)
	y	0,690(5)		0,691(8)		0,690(4)		0,691(6)		0,697(3)	
	z	0,069(8)		0,06(1)		0,064(7)		0,050(7)		0,070(7)	
Si3	x	0,189(4)	1,000 (0)	0,193(6)	1,000 (0)	0,188(3)	1,000 (0)	0,189(3)	1,000 (0)	0,188(5)	1,000 (0)
	y	0,064(6)		0,059(7)		0,060(4)		0,064(7)		0,059(4)	
	z	0,183(8)		0,20(1)		0,186(7)		0,191(8)		0,18(1)	
O1	x	0,939(4)	1,000 (0)	0,91(1)	1,000 (0)	0,933(5)	1,000 (0)	0,887(5)	1,000 (0)	0,92(1)	1,000 (0)
	y	0,291(7)		0,29(1)		0,291(6)		0,288(7)		0,298(9)	
	z	0,10(1)		0,10(2)		0,09(1)		0,04(1)		0,10(2)	
O2	x	0,174(5)	1,000 (0)	0,169(9)	1,000 (0)	0,156(6)	1,000 (0)	0,148(5)	1,000 (0)	0,16(1)	1,000 (0)
	y	0,457(8)		0,47(1)		0,452(8)		0,44(1)		0,45(1)	
	z	0,35(1)		0,33(1)		0,33(1)		0,36(1)		0,35(2)	
O3	x	0,456(6)	1,000 (0)	0,45(1)	1,000 (0)	0,452(7)	1,000 (0)	0,447(4)	1,000 (0)	0,45(1)	1,000 (0)
	y	0,768(8)		0,75(1)		0,756(6)		0,75(1)		0,750(9)	
	z	0,14(1)		0,14(3)		0,11(1)		0,11(1)		0,13(2)	

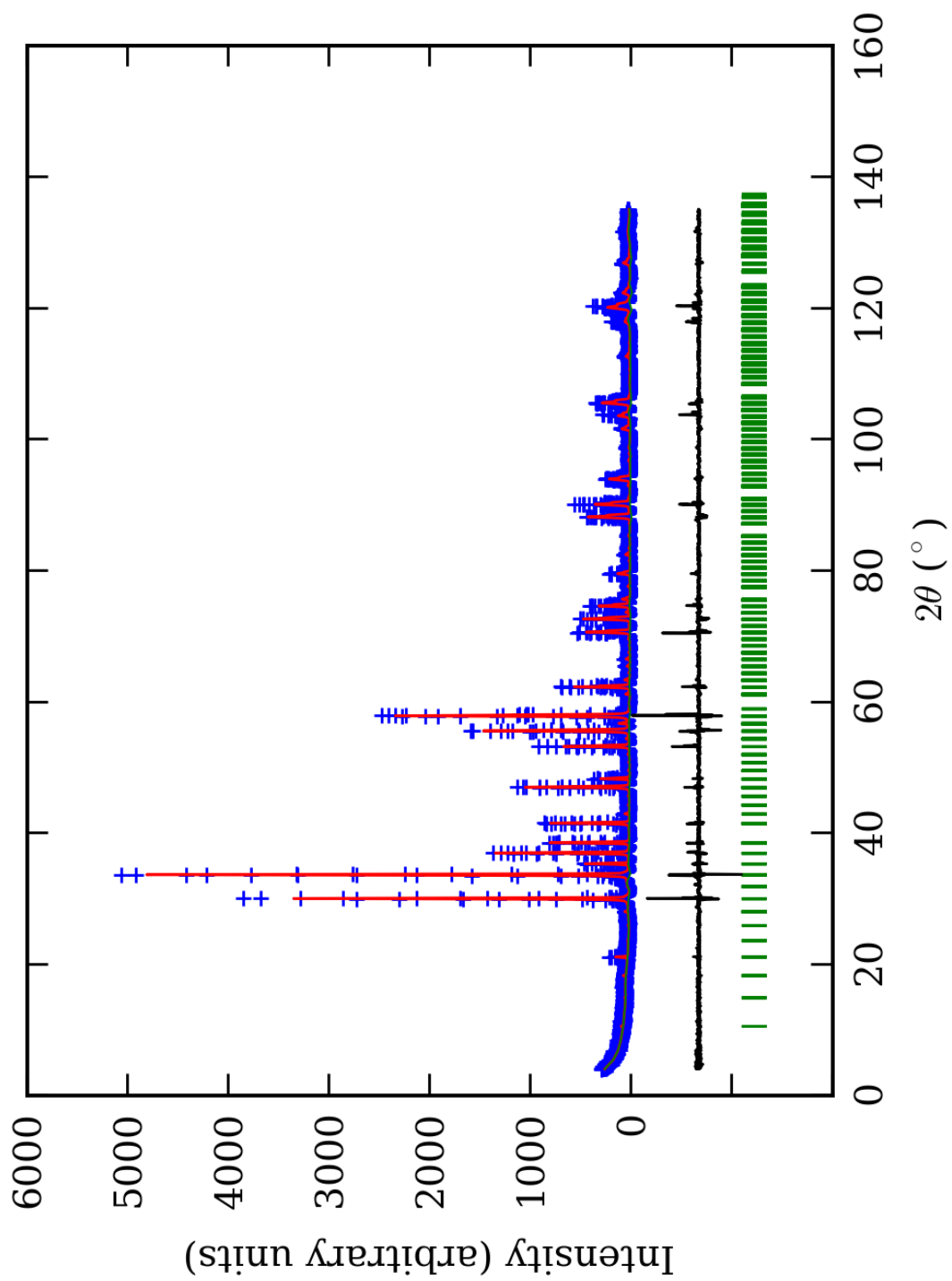
<b>O4</b>	x	0,117(5)	1,000 (0)	0,10(1)	1,000 (0)	0,124(7)	1,000 (0)	0,108(5)	1,000 (0)	0,103(8)	1,000 (0)
	y	0,022(8)		0,02(1)		-0,000(7)		0,02(1)		0,030(7)	
	z	0,75(1)		0,82(2)		0,77(2)		0,82(2)		0,81(1)	
<b>O5</b>	x	0,987(4)	1,000 (0)	0,99(1)	1,000 (0)	0,972(5)	1,000 (0)	0,982(5)	1,000 (0)	0,99(1)	1,000 (0)
	y	0,571(8)		0,58(1)		0,596(7)		0,58(1)		0,574(8)	
	z	0,40(1)		0,38(2)		0,42(1)		0,42(1)		0,39(1)	
<b>O6</b>	x	0,841(6)	1,000 (0)	0,85(1)	1,000 (0)	0,828(5)	1,000 (0)	0,861(6)	1,000 (0)	0,86(1)	1,000 (0)
	y	0,146(9)		0,15(1)		0,138(8)		0,156(9)		0,155(7)	
	z	0,26(1)		0,27(2)		0,26(1)		0,27(2)		0,26(2)	
<b>O7</b>	x	0,628(5)	1,000 (0)	0,64(1)	1,000 (0)	0,643(7)	1,000 (0)	0,637(4)	1,000 (0)	0,64(1)	1,000 (0)
	y	0,545(8)		0,55(1)		0,550(8)		0,557(9)		0,557(8)	
	z	0,58(1)		0,55(2)		0,57(1)		0,60(2)		0,56(2)	
<b>O8</b>	x	0,690(6)	1,000 (0)	0,70(1)	1,000 (0)	0,685(6)	1,000 (0)	0,685(6)	1,000 (0)	0,69(1)	1,000 (0)
	y	0,175(9)		0,19(1)		0,207(8)		0,26(1)		0,190(8)	
	z	0,60(1)		0,61(2)		0,60(1)		0,62(1)		0,61(2)	
<b>O9</b>	x	0,585(5)	1,000 (0)	0,58(1)	1,000 (0)	0,585(7)	1,000 (0)	0,600(4)	1,000 (0)	0,60(1)	1,000 (0)
	y	0,611(8)		0,60(1)		0,619(8)		0,584(8)		0,594(8)	
	z	0,01(1)		0,01(2)		0,01(1)		0,02(2)		0,02(2)	
<b>O10</b>	x	0,207(5)	1,000 (0)	0,21(1)	1,000 (0)	0,226(6)	1,000 (0)	0,257(5)	1,000 (0)	0,23(1)	1,000 (0)
	y	0,188(9)		0,16(1)		0,149(7)		0,125(8)		0,165(9)	
	z	0,68(1)		0,66(2)		0,68(1)		0,70(1)		0,66(2)	
<b>O11</b>	x	0,644(5)	1,000 (0)	0,621(9)	1,000 (0)	0,640(7)	1,000 (0)	0,636(4)	1,000 (0)	0,64(1)	1,000 (0)
	y	0,925(8)		0,95(1)		0,939(6)		0,94(1)		0,942(9)	
	z	0,57(1)		0,57(2)		0,56(2)		0,58(1)		0,56(2)	
<b>O12</b>	x	0,691(6)	1,000 (0)	0,69(1)	1,000 (0)	0,689(6)	1,000 (0)	0,682(6)	1,000 (0)	0,69(1)	1,000 (0)
	y	0,807(9)		0,82(1)		0,799(7)		0,80(1)		0,802(8)	
	z	0,62(1)		0,62(2)		0,62(1)		0,60(2)		0,62(2)	
<b>Ca1 (%)</b>		78(8)		80(16)		84(10)		98(10)		96(14)	
<b>Ca2 (%)</b>		92(10)	94	84(18)	91	86(8)	98	92(10)	96	102(14)	97
<b>Ca3 (%)</b>		103(5)	(7)	99(8)	(12)	108(5)	(7)	100(5)	(8)	100(7)	(10)
<b>Ca4 (%)</b>		105(5)		100(6)		113(6)		95(5)		90(7)	
<b>AI1 (%)</b>		98(16)		80(20)		64(18)		70(12)		60(20)	
<b>AI2 (%)</b>		104(14)	98	60(20)	65	86(16)	76	60(16)	64	60(40)	64
<b>AI3 (%)</b>		102(14)	(14)	60(20)	(20)	72(16)	(16)	64(16)	(14)	80(20)	(24)
<b>AI4 (%)</b>		88(12)		60(18)		80(12)		62(10)		58(14)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

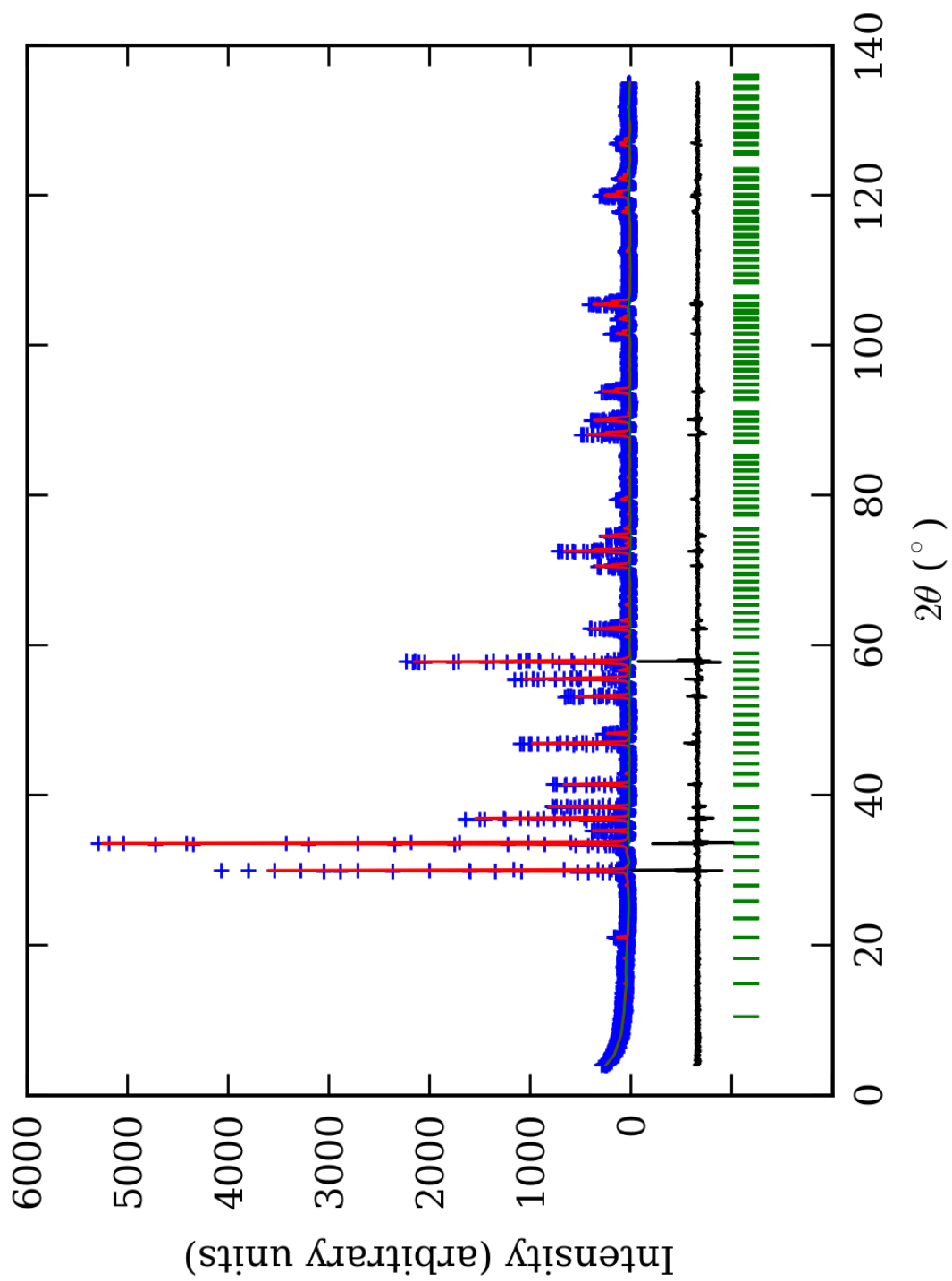


PRILOG 119. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u C2/c p.g.

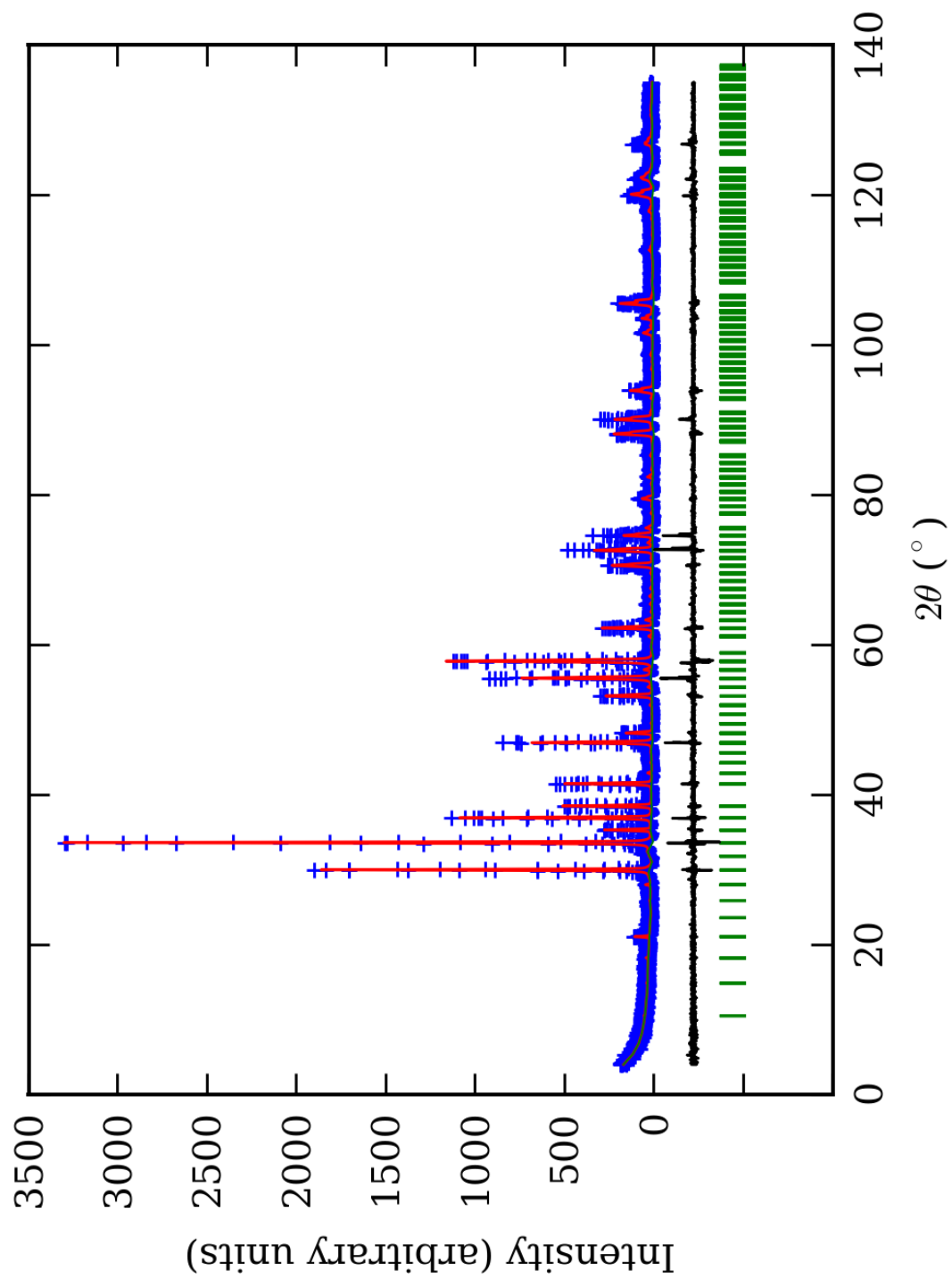




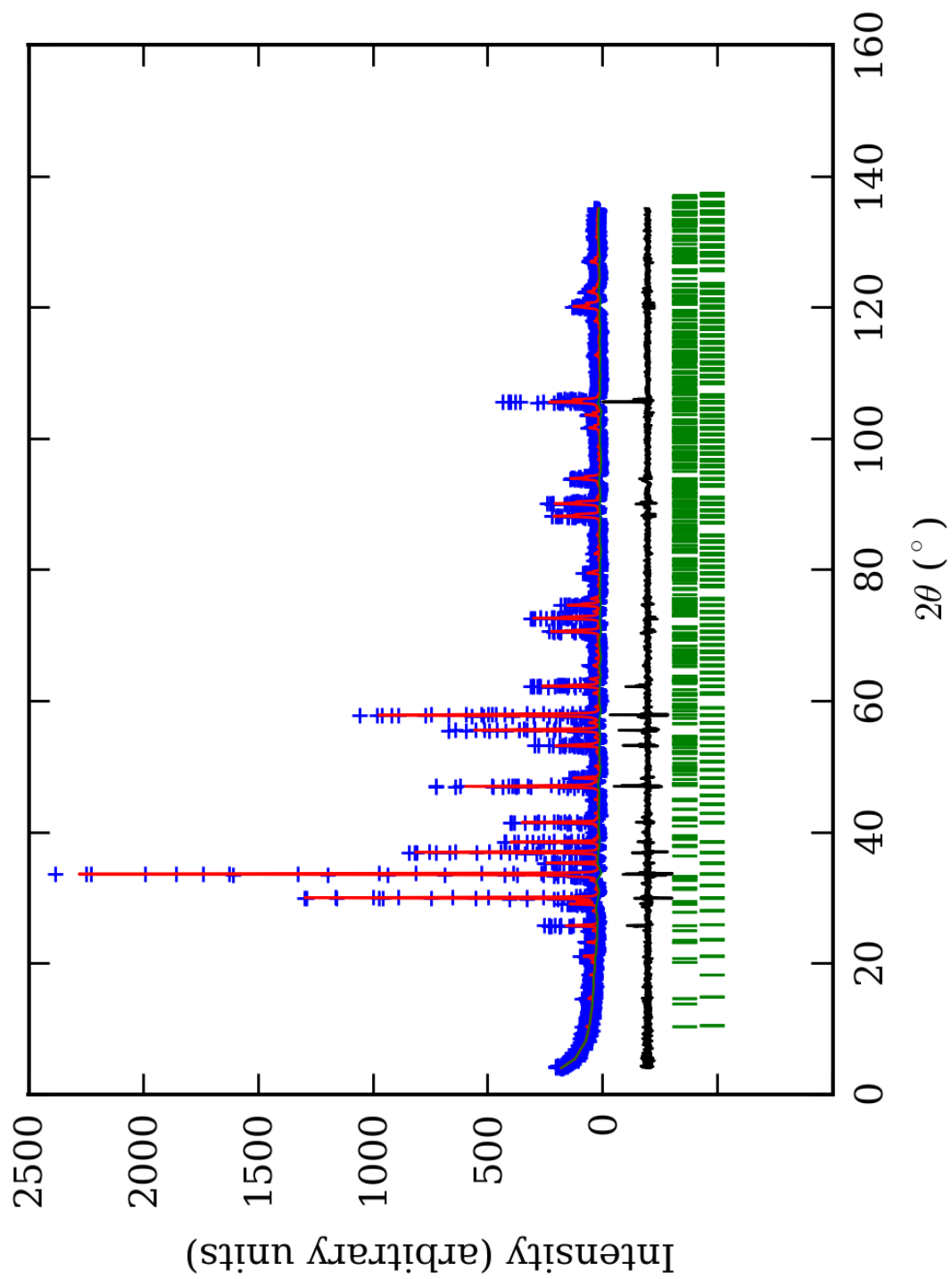
PRILOG 120. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u C2/c p.g.



PRILOG 121. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u C2/c p.g.



PRILOG 122. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u C2/c p.g.



PRILOG 123. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u C2/c p.g.

PRILOG 124. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u C2/c p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,1433	2,0216	1,7629	1,7536	1,6051	
Faktor skale	0,0000034(7)*	0,00014(1)	0,000027(2)	0,000052(3)	0,000038(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,24(8)	0,29(7)	-0,37(4)	0,13(7)	0,03(8)	
Ukupni temp. faktor	0,1(1)	0,3(1)	0,62(5)	0,5(1)	0,4(1)	
Parametri polu-širine	U	0,020(7)	0,06(1)	0,011(1)	0,003(8)	0,007(4)
	V	-0,008(7)	-0,04(1)	-0,035(2)	0,02(1)	-0,014(8)
	W	0,013(2)	0,027(3)	0,031(1)	0,016(3)	0,030(2)
Preferentna orijent.	1,3(1)	-2,6(2)	-0,15(5)	-1,51(8)	-1,34(7)	
Parametri asimetrije	As 1	0,03(5)	0,16(4)	0,11(3)	0,04(6)	0,06(4)
	As 2	0,053(7)	0,066(6)	0,056(5)	0,039(7)	0,038(6)
X parametar	0,006(2)	0,003(1)	0,021(7)	0,007(2)	0,010(2)	
Nulta tačka	0,010(6)	0,031(6)	0,003(4)	0,014(9)	-0,040(7)	
a <sub>0</sub>	16,861(2)	16,894(4)	16,8923(5)	16,900(2)	16,888(1)	
b <sub>0</sub>	11,9205(6)	11,951(2)	11,9329(4)	11,924(3)	11,922(2)	
c <sub>0</sub>	11,910(1)	11,943(3)	11,9432(4)	11,945(3)	11,943(2)	
β <sub>0</sub>	134,97(1)	135,08(1)	134,079(1)	135,084(5)	135,071(4)	
V <sub>0</sub>	1693,5(3)	1702,9(7)	1699,9(1)	1700,1(6)	1698,2(4)	
N-P+C	6376	6376	6376	6376	6353	
R <sub>p</sub>	13,9	13,3	11,8	12,7	12,9	
R <sub>wp</sub>	18,9	18,3	16,0	18,3	17,6	
R <sub>exp</sub>	11,44	11,38	11,59	14,04	13,99	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	21,4	20,4	18,8	20,4	23,9	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	24,7	23,9	21,3	24,5	26,4	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	14,95	14,86	15,43	18,84	21,02	
Chi2	2,72	2,58	1,90	1,69	1,58	
Chi2 (Bragg contr.)	3,02	2,78	2,05	1,83	1,65	
DW-stat.	0,9417	0,9740	1,3015	1,3858	1,4289	
DW-exp.	1,9782	1,9782	1,9782	1,9782	1,9857	
GoF	1,6	1,6	1,4	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>7,54</b>	<b>7,30</b>	<b>6,73</b>	<b>6,25</b>	<b>5,33</b>	
R <sub>F</sub>	<b>6,48</b>	<b>6,95</b>	<b>8,38</b>	<b>7,03</b>	<b>5,53</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 125. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u C2/c p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,1433		2,0216		1,7629		1,7536		1,6051	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,000	0,53 (7)	0,000	0,48 (5)	0,000	0,54 (5)	0,000	0,46 (5)	0,000	0,43 (7)
	y	0,129(6)*		0,121(9)		0,122(5)		0,136(8)		0,13(1)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca2	x	0,000	0,49 (5)	0,000	0,47 (4)	0,000	0,56 (6)	0,000	0,46 (5)	0,000	0,46 (8)
	y	0,619(4)		0,62(1)		0,627(5)		0,625(7)		0,62(1)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca3	x	0,249(9)	0,97 (6)	0,249(3)	1,02 (7)	0,253(2)	1,10 (9)	0,248(3)	1,04 (7)	0,249(3)	0,93 (9)
	y	0,505(4)		0,503(5)		0,500(4)		0,501(8)		0,50(1)	
	z	0,37(1)		0,368(3)		0,378(4)		0,375(5)		0,371(9)	
Ca4	x	0,124(9)	1,08 (7)	0,120(3)	0,85 (5)	0,124(5)	0,86 (3)	0,127(2)	1,01 (3)	0,126(5)	1,00 (3)
	y	0,751(4)		0,749(9)		0,749(6)		0,751(6)		0,755(7)	
	z	0,13(1)		0,120(3)		0,122(8)		0,130(6)		0,12(1)	
Al1	x	0,000	0,5 (1)	0,000	0,29 (7)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,0 (1)	0,000	0,21 (7)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,250	0,41 (9)	0,250	0,28 (8)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,36 (9)	0,250	0,4 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe2	x	0,250	0,09 (9)	0,250	0,22 (8)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,14 (9)	0,250	0,1 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al3	x	0,000	0,6 (1)	0,000	0,40 (7)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe3	x	0,000	-0,1 (1)	0,000	0,10 (7)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al4	x	0,250	0,5 (1)	0,250	0,43 (9)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,3 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe4	x	0,250	0,0 (1)	0,250	0,07 (9)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,2 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Si1	x	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)
	y	0,883(6)		0,88(1)		0,874(8)		0,86(1)		0,86(1)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si2	x	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)
	y	0,372(7)		0,37(1)		0,375(8)		0,37(1)		0,38(1)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si3	x	0,25(1)	1,000 (0)	0,247(4)	1,000 (0)	0,243(3)	1,000 (0)	0,252(4)	1,000 (0)	0,254(4)	1,000 (0)
	y	0,498(5)		0,501(8)		0,499(5)		0,497(9)		0,496(7)	
	z	0,13(2)		0,128(5)		0,119(6)		0,132(8)		0,13(1)	
Si4	x	0,37(1)	1,000 (0)	0,377(4)	1,000 (0)	0,377(6)	1,000 (0)	0,381(3)	1,000 (0)	0,373(6)	1,000 (0)
	y	0,744(4)		0,735(6)		0,752(4)		0,748(9)		0,740(7)	
	z	0,37(2)		0,366(4)		0,375(9)		0,382(8)		0,38(1)	
O1	x	0,28(2)	1,000 (0)	0,31(1)	1,000 (0)	0,292(9)	1,000 (0)	0,293(7)	1,000 (0)	0,298(8)	1,000 (0)
	y	0,083(8)		0,11(1)		0,099(9)		0,11(2)		0,08(2)	
	z	0,00(4)		0,01(1)		-0,01(1)		0,00(1)		0,00(2)	
O2	x	0,55(2)	1,000 (0)	0,530(8)	1,000 (0)	0,524(9)	1,000 (0)	0,531(7)	1,000 (0)	0,54(1)	1,000 (0)
	y	0,156(9)		0,12(1)		0,15(1)		0,16(1)		0,17(1)	
	z	0,49(3)		0,483(9)		0,48(1)		0,50(2)		0,49(2)	

<b>O3</b>	x	0,06(3)	1,000 (0)	0,045(6)	1,000 (0)	0,031(9)	1,000 (0)	0,034(7)	1,000 (0)	0,033(9)	1,000 (0)
	y	0,836(8)		0,80(1)		0,84(1)		0,85(2)		0,84(1)	
	z	0,61(4)		0,565(9)		0,57(1)		0,57(2)		0,57(2)	
<b>O4</b>	x	0,71(2)	1,000 (0)	0,695(9)	1,000 (0)	0,717(9)	1,000 (0)	0,703(8)	1,000 (0)	0,71(1)	1,000 (0)
	y	0,421(9)		0,39(1)		0,40(1)		0,40(1)		0,39(1)	
	z	0,92(4)		0,924(8)		0,92(2)		0,91(2)		0,92(2)	
<b>O5</b>	x	0,29(2)	1,000 (0)	0,276(8)	1,000 (0)	0,274(9)	1,000 (0)	0,309(4)	1,000 (0)	0,29(1)	1,000 (0)
	y	0,71(1)		0,74(1)		0,71(1)		0,71(1)		0,71(1)	
	z	0,39(3)		0,383(9)		0,37(2)		0,37(1)		0,37(2)	
<b>O6</b>	x	0,15(2)	1,000 (0)	0,168(8)	1,000 (0)	0,185(9)	1,000 (0)	0,159(8)	1,000 (0)	0,146(6)	1,000 (0)
	y	0,54(1)		0,54(1)		0,55(1)		0,56(1)		0,58(1)	
	z	0,12(3)		0,121(8)		0,15(2)		0,12(2)		0,14(2)	
<b>O7</b>	x	0,65(2)	1,000 (0)	0,641(8)	1,000 (0)	0,663(8)	1,000 (0)	0,648(7)	1,000 (0)	0,66(1)	1,000 (0)
	y	0,458(9)		0,45(1)		0,49(1)		0,44(1)		0,46(2)	
	z	0,18(3)		0,181(9)		0,20(1)		0,20(1)		0,20(2)	
<b>O8</b>	x	0,70(2)	1,000 (0)	0,641(8)	1,000 (0)	0,72(1)	1,000 (0)	0,707(6)	1,000 (0)	0,71(1)	1,000 (0)
	y	0,814(9)		0,79(1)		0,80(1)		0,80(1)		0,79(1)	
	z	0,28(3)		0,308(9)		0,31(2)		0,32(2)		0,30(2)	
<b>O9</b>	x	0,90(2)	1,000 (0)	0,910(8)	1,000 (0)	0,93(1)	1,000 (0)	0,906(7)	1,000 (0)	0,904(8)	1,000 (0)
	y	0,697(8)		0,71(1)		0,718(1)		0,72(1)		0,71(1)	
	z	0,60(4)		0,625(9)		0,63(2)		0,61(2)		0,60(2)	
<b>O10</b>	x	0,54(2)	1,000 (0)	0,552(7)	1,000 (0)	0,541(9)	1,000 (0)	0,547(6)	1,000 (0)	0,55(1)	1,000 (0)
	y	0,548(9)		0,52(2)		0,54(1)		0,52(1)		0,53(2)	
	z	0,87(4)		0,903(7)		0,89(1)		0,88(2)		0,89(2)	
<b>O11</b>	x	0,06(2)	1,000 (0)	0,038(6)	1,000 (0)	0,032(8)	1,000 (0)	0,053(7)	1,000 (0)	0,043(7)	1,000 (0)
	y	0,461(9)		0,48(2)		0,45(1)		0,47(2)		0,46(1)	
	z	0,23(3)		0,194(8)		0,18(2)		0,20(2)		0,18(2)	
<b>O12</b>	x	0,09(2)	1,000 (0)	0,101(9)	1,000 (0)	0,077(8)	1,000 (0)	0,089(7)	1,000 (0)	0,095(8)	1,000 (0)
	y	0,778(7)		0,78(1)		0,793(9)		0,78(1)		0,80(1)	
	z	0,30(3)		0,31(1)		0,29(1)		0,29(2)		0,30(2)	
<b>Ca1 (%)</b>		106(14)		96(10)		108(10)		92(10)		86(14)	
<b>Ca2 (%)</b>		98(10)	102	94(8)	94	112(12)	106	92(10)	97	92(16)	93
<b>Ca3 (%)</b>		97(6)	(9)	102(7)	(8)	110(9)	(8)	104(7)	(8)	93(9)	(10)
<b>Ca4 (%)</b>		108(7)		85(5)		86(3)		101(3)		100(3)	
<b>Al1 (%)</b>		100(20)		58(14)		60(20)		60(20)		60(20)	
<b>Al2 (%)</b>		98(18)	104	56(16)	70	60(20)	60	72(18)	63	80(20)	65
<b>Al3 (%)</b>		120(20)	(20)	80(14)	(16)	60(20)	(20)	60(20)	(20)	60(20)	(20)
<b>Al4 (%)</b>		100(20)		86(18)		60(20)		60(20)		60(20)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

*PRILOG 126. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja (u Å) u C2/c p.g.*

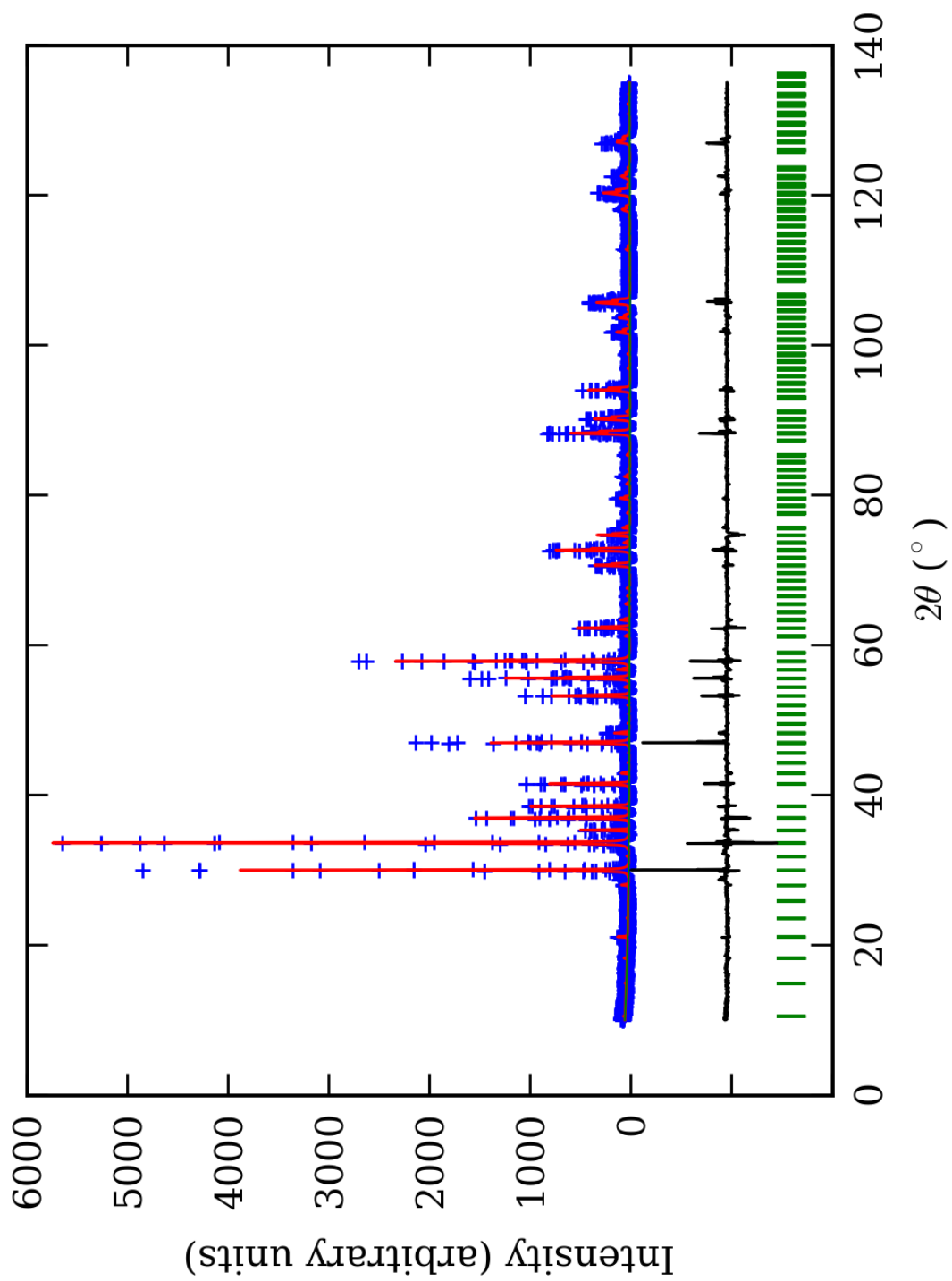
Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>Si(1)-O(10)</b>	<b>2*</b>	1,4(2) <sup>1</sup>	1,81(9)	1,64(9)	1,8(1)	1,8(1)
<b>Si(1)-O(12)</b>	<b>2</b>	1,8(1)	1,8(1)	1,39(9)	1,6(1)	1,4(1)
<b>sr. vr. Si(1)-O</b>		<b>1,6(2)</b>	<b>1,8(1)</b>	<b>1,52(9)</b>	<b>1,7(1)</b>	<b>1,6(1)</b>
<b>Si(2)-O(9)</b>	<b>2</b>	1,5(1)	1,56(8)	1,52(8)	1,62(9)	1,7(1)
<b>Si(2)-O(11)</b>	<b>2</b>	1,6(2)	1,8(1)	1,5(1)	1,8(1)	1,8(1)
<b>sr. vr. Si(2)-O</b>		<b>1,6(2)</b>	<b>1,68(9)</b>	<b>1,51(9)</b>	<b>1,7(1)</b>	<b>1,8(1)</b>
<b>Si(3)-O(1)</b>	<b>1</b>	1,6(2)	1,77(8)	1,53(8)	1,8(1)	1,5(1)
<b>Si(3)-O(4)</b>	<b>1</b>	1,5(2)	1,99(9)	1,6(1)	1,7(1)	1,8(2)
<b>Si(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	1,7(2)	1,38(9)	1,4(1)	1,6(1)	2,1(1)
<b>Si(3)-O(7)</b>	<b>1</b>	1,7(1)	1,73(5)	1,62(7)	1,58(8)	1,5(1)
<b>sr. vr. Si(3)-O</b>		<b>1,6(2)</b>	<b>1,72(8)</b>	<b>1,54(9)</b>	<b>1,7(1)</b>	<b>1,7(1)</b>
<b>Si(4)-O(2)</b>	<b>1</b>	1,6(1)	2,14(8)	1,72(7)	1,56(8)	1,6(1)
<b>Si(4)-O(3)</b>	<b>1</b>	1,4(2)	1,01(5)	1,65(9)	1,6(1)	1,6(1)

Si(4)-O(5)	1	1,6(3)	1,86(9)	1,8(1)	1,20(9)	1,4(2)
Si(4)-O(8)	1	1,6(1)	1,62(5)	1,67(8)	1,79(9)	1,6(2)
sr. vr. Si(4)-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,66(7)</b>	<b>1,71(8)</b>	<b>1,54(9)</b>	<b>1,6(2)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,72(8)</b>	<b>1,57(9)</b>	<b>1,7(1)</b>	<b>1,7(1)</b>
Y(1)-O(3)	2	2,18(8)	2,50(7)	1,96(7)	1,8(1)	1,9(1)
Y(1)-O(7)	2	1,9(1)	1,84(4)	2,09(5)	2,02(5)	2,02(7)
Y(1)-O(10)	2	2,1(2)	1,90(7)	2,0(1)	2,1(1)	1,9(2)
sr. vr. Y(1)-O		<b>2,1(1)</b>	<b>2,08(6)</b>	<b>2,02(7)</b>	<b>1,97(8)</b>	<b>1,9(1)</b>
Y(2)-O(4)	2	2,15(6)	1,79(8)	1,89(7)	1,90(9)	1,8(1)
Y(2)-O(8)	2	2,2(2)	1,95(6)	2,1(1)	1,8(1)	2,0(2)
Y(2)-O(9)	2	2,0(2)	2,00(6)	2,22(8)	1,97(7)	1,99(9)
sr. vr. Y(2)-O		<b>2,1(2)</b>	<b>1,91(7)</b>	<b>2,07(8)</b>	<b>1,89(9)</b>	<b>1,9(1)</b>
Y(3)-O(2)	2	2,0(1)	1,61(8)	1,92(9)	1,96(8)	2,2(1)
Y(3)-O(6)	2	1,8(1)	2,15(6)	2,33(7)	2,07(7)	1,98(6)
Y(3)-O(11)	2	2,2(2)	1,93(5)	2,0(1)	1,9(1)	1,8(1)
sr. vr. Y(3)-O		<b>2,0(1)</b>	<b>1,90(6)</b>	<b>2,08(9)</b>	<b>1,98(8)</b>	<b>1,99(9)</b>
Y(4)-O(1)	2	2,06(8)	1,92(9)	1,96(7)	1,8(1)	2,1(1)
Y(4)-O(5)	2	2,0(2)	1,74(7)	1,9(1)	2,44(9)	2,1(2)
Y(4)-O(12)	2	2,0(1)	1,89(5)	2,16(5)	2,03(5)	2,00(6)
sr. vr. Y(4)-O		<b>2,0(1)</b>	<b>1,85(7)</b>	<b>2,01(7)</b>	<b>2,09(8)</b>	<b>2,1(1)</b>
sr. vr. Y-O		<b>2,0(1)</b>	<b>1,94(6)</b>	<b>2,04(8)</b>	<b>1,98(8)</b>	<b>2,0(1)</b>
X(1)-O(3)	2	2,5(3)	2,97(7)	2,6(1)	2,6(1)	2,6(2)
X(1)-O(4)	2	2,6(2)	2,34(5)	2,65(7)	2,51(6)	2,52(9)
X(1)-O(9)	2	2,45(8)	2,28(9)	2,18(8)	2,14(9)	2,2(1)
X(1)-O(10)	2	2,4(1)	2,2(1)	2,26(8)	2,2(1)	2,4(1)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,5(2)</b>	<b>2,45(8)</b>	<b>2,42(8)</b>	<b>2,36(9)</b>	<b>2,4(1)</b>
X(2)-O(1)	2	2,6(1)	2,38(5)	2,58(5)	2,52(4)	2,52(6)
X(2)-O(2)	2	2,4(2)	2,46(7)	2,5(1)	2,7(1)	2,5(2)
X(2)-O(11)	2	2,3(1)	2,1(1)	2,4(1)	2,3(1)	2,5(1)
X(2)-O(12)	2	2,3(1)	2,3(1)	2,22(7)	2,21(9)	2,4(1)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,4(1)</b>	<b>2,31(8)</b>	<b>2,42(8)</b>	<b>2,43(8)</b>	<b>2,5(1)</b>
X(3)-O(1)	1	2,2(3)	2,5(1)	2,5(1)	2,4(1)	2,4(2)
X(3)-O(4)	1	2,3(2)	2,38(7)	2,4(1)	2,4(1)	2,2(2)
X(3)-O(5)	1	2,47(8)	2,87(9)	2,51(8)	2,7(1)	2,7(1)
X(3)-O(6)	1	2,2(2)	2,25(5)	2,2(1)	2,3(1)	2,2(1)
X(3)-O(7)	1	2,2(2)	2,38(9)	2,3(1)	2,6(1)	2,4(2)
X(3)-O(8)	1	2,38(6)	2,58(9)	2,43(8)	2,5(1)	2,6(1)
X(3)-O(10)	1	2,6(1)	2,41(4)	2,52(5)	2,50(5)	2,50(7)
X(3)-O(11)	1	2,3(1)	2,57(5)	2,71(7)	2,37(6)	2,51(7)
sr. vr. X(3)-O		<b>2,3(2)</b>	<b>2,49(7)</b>	<b>2,45(8)</b>	<b>2,47(9)</b>	<b>2,4(1)</b>
X(4)-O(2)	1	2,4(2)	2,39(8)	2,17(9)	2,21(7)	2,4(1)
X(4)-O(3)	1	2,5(1)	2,06(4)	2,22(6)	2,33(7)	2,22(8)
X(4)-O(5)	1	2,4(1)	2,26(3)	2,22(7)	2,32(4)	2,22(9)
X(4)-O(6)	1	2,53(7)	2,58(9)	2,56(8)	2,4(1)	2,11(9)
X(4)-O(7)	1	2,50(6)	2,50(9)	2,48(8)	2,3(1)	2,5(1)
X(4)-O(8)	1	2,5(2)	2,39(8)	2,2(1)	2,4(1)	2,3(2)
X(4)-O(9)	1	2,5(2)	2,62(7)	2,5(1)	2,6(1)	2,4(2)
X(4)-O(12)	1	2,5(3)	2,50(9)	2,7(1)	2,5(1)	2,6(2)
sr. vr. X(4)-O		<b>2,5(2)</b>	<b>2,41(7)</b>	<b>2,38(8)</b>	<b>2,38(8)</b>	<b>2,3(1)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,4(2)</b>	<b>2,42(8)</b>	<b>2,42(8)</b>	<b>2,41(8)</b>	<b>2,4(1)</b>

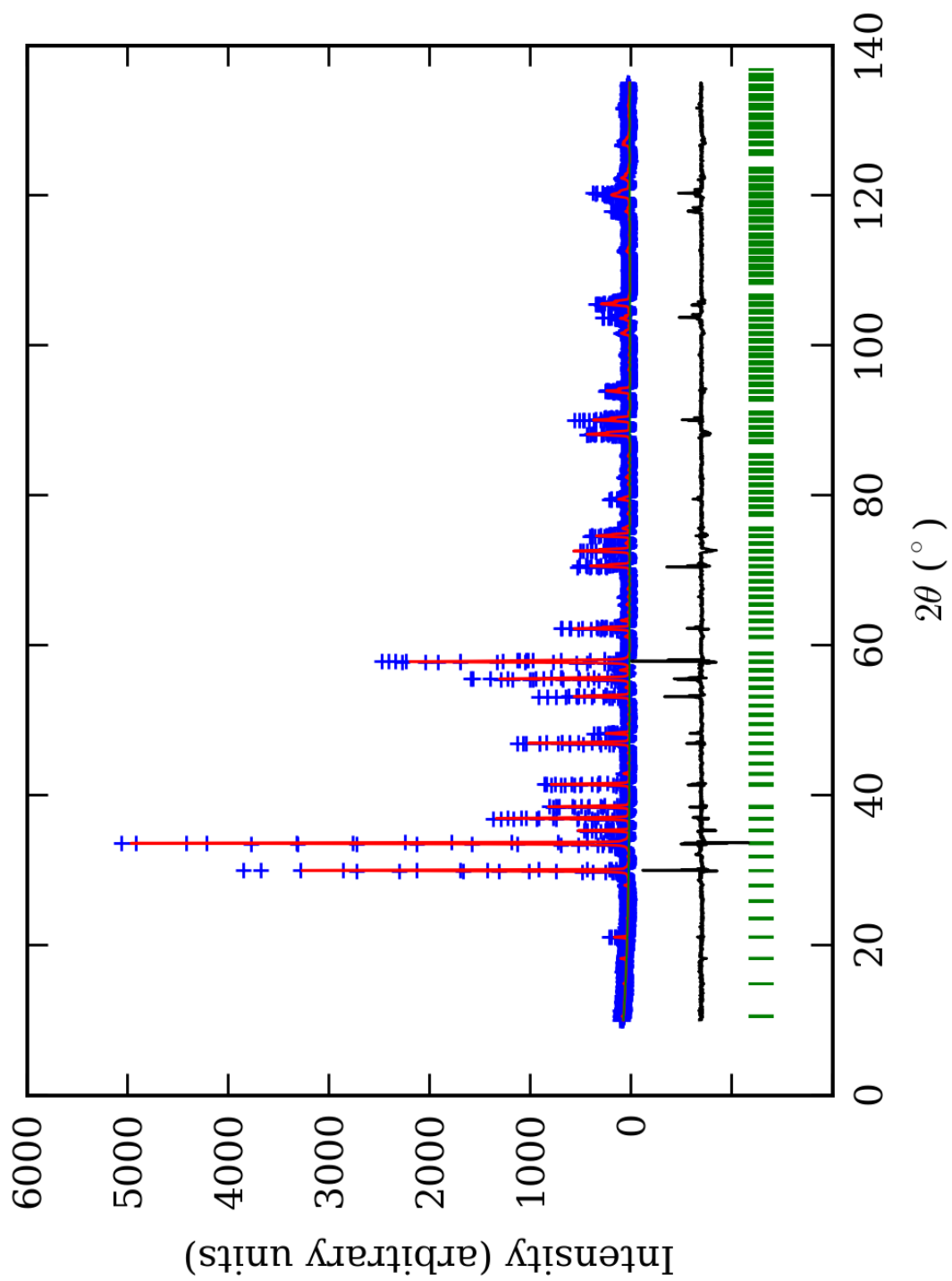
\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

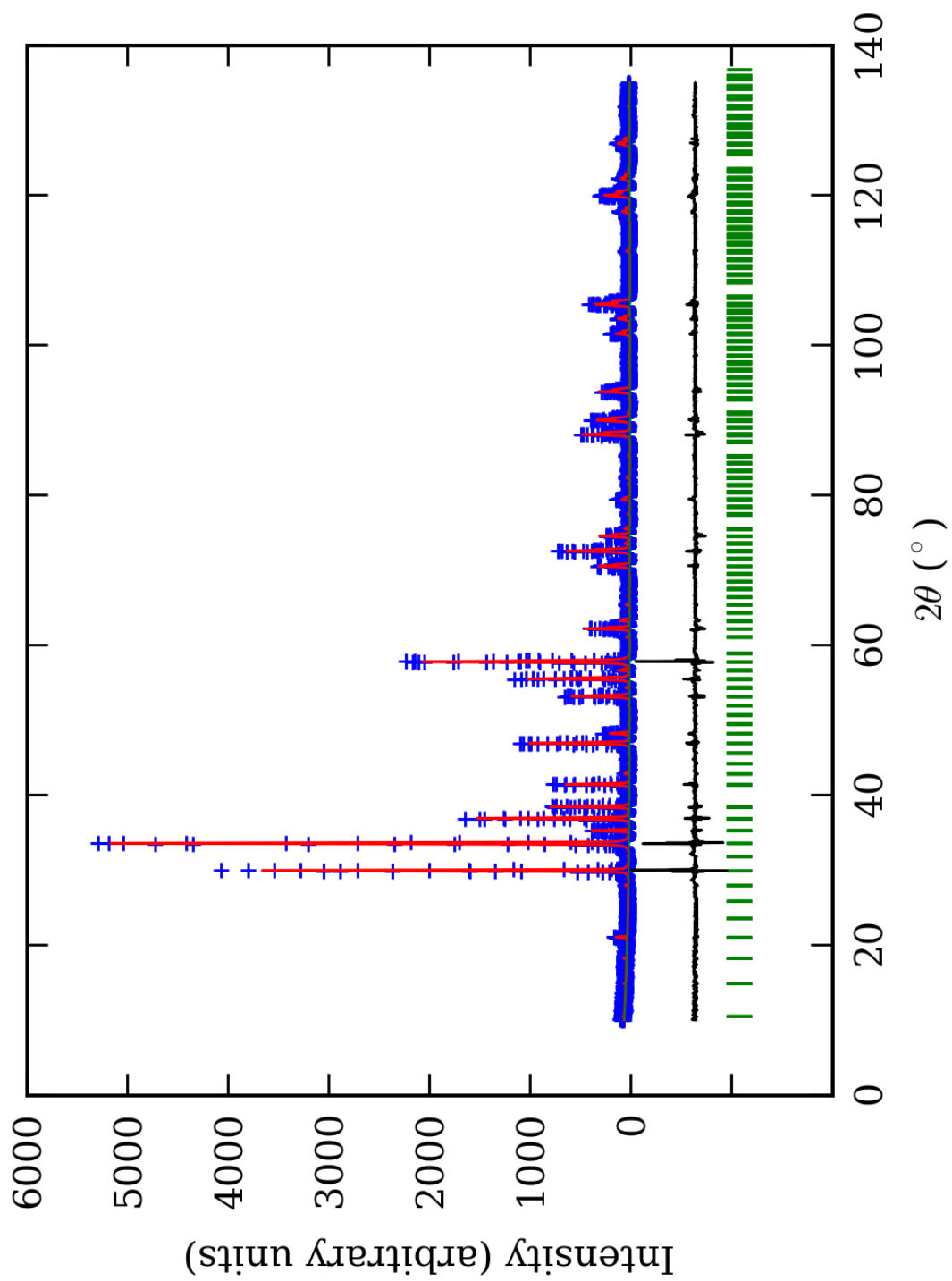




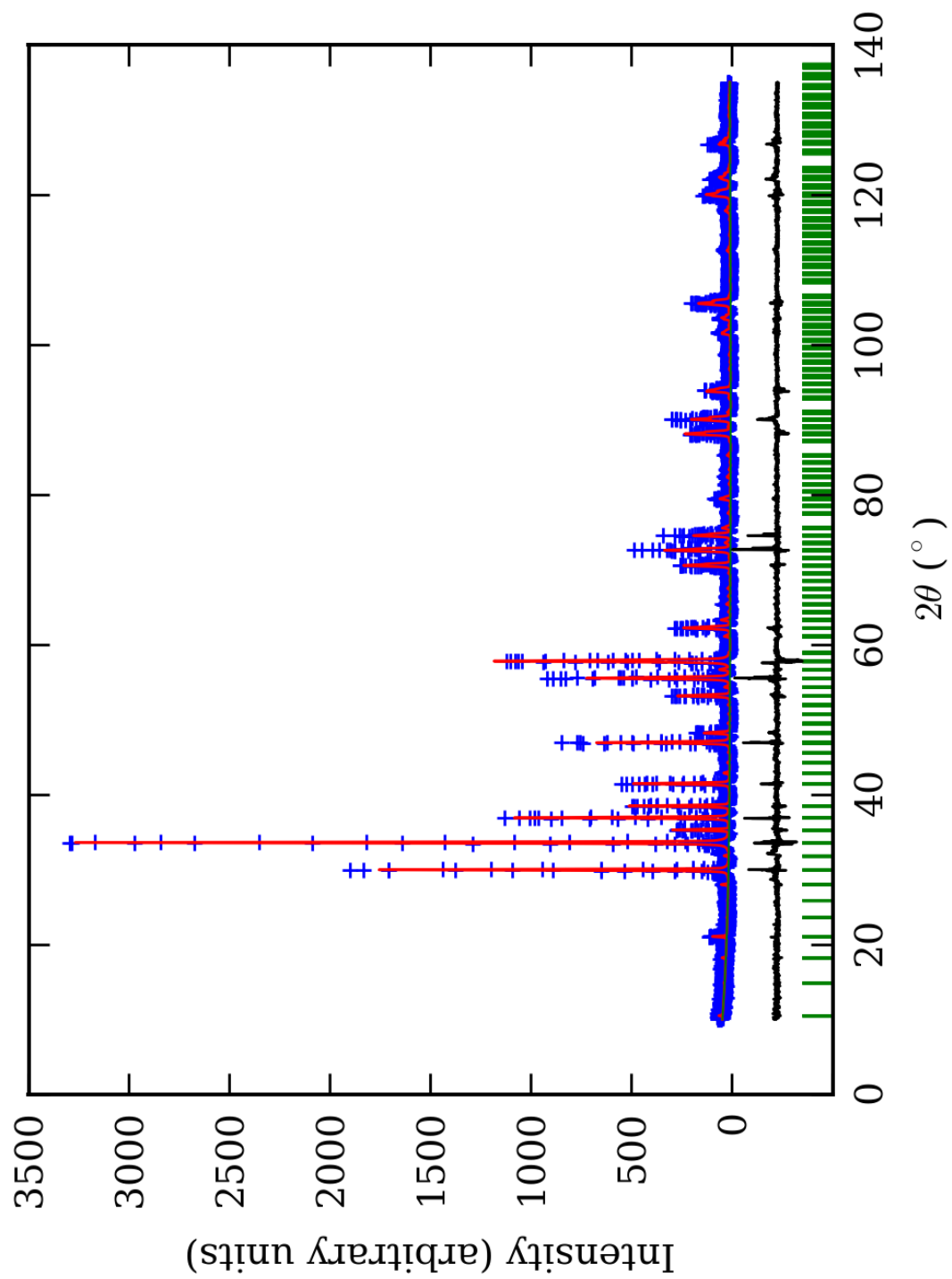
PRILOG 127. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $I\bar{1}$  p.g.



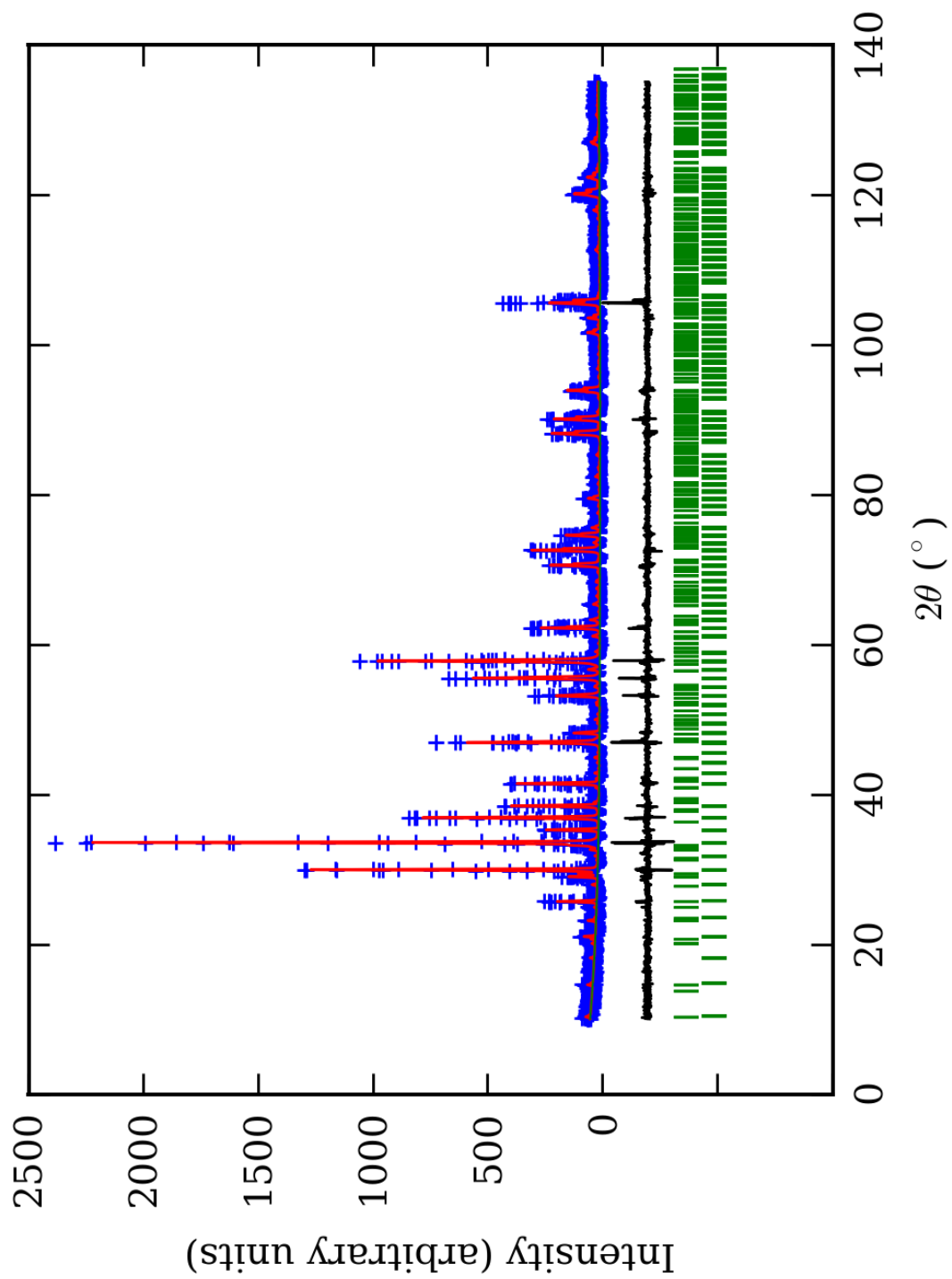
PRILOG 128. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $I\bar{1}$  p.g.



PRILOG 129. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $I\bar{1}$  p.g.



PRILOG 130. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u  $I\bar{1}$  p.g.



PRILOG 131. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $I\bar{1}$  p.g.

PRILOG 132. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I $\bar{1}$  p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,7890	3,0879	2,2768	2,3167	1,7755	
Faktor skale	0,000010(2)*	0,000017(2)	0,000014(1)	0,000042(7)	0,000027(3)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,2(1)	0,2(1)	-0,18(5)	0,09(8)	-0,33(6)	
Ukupni temp. faktor	0,2(1)	0,5(1)	0,46(7)	0,6(1)	0,41(9)	
Parametri polu-širine	U	0,010(5)	0,019(8)	0,009(2)	-0,006(6)	0,014(2)
	V	-0,013(8)	-0,03(1)	-0,029(5)	0,01(1)	-0,044(5)
	W	0,015(3)	0,025(4)	0,028(2)	0,018(4)	0,039(2)
Preferentna orijent.	0,6(1)	0,3(1)	0,38(6)	-1,1(2)	-0,81(9)	
Parametri asimetrije	As 1	-0,03(6)	0,14(2)	0,09(4)	0,04(8)	0,04(4)
	As 2	0,04(1)	0,07(7)	0,054(7)	0,044(1)	0,036(8)
X parametar	0,008(2)	0,008(3)	0,016(1)	0,009(2)	0,019(1)	
Nulta tačka	0,008(8)	0,03(1)	0,004(6)	0,01(1)	-0,037(7)	
a <sub>0</sub>	11,927(2)	11,926(3)	11,9467(8)	11,941(2)	11,931(1)	
b <sub>0</sub>	11,910(2)	11,945(2)	11,931(1)	11,925(2)	11,9260(9)	
c <sub>0</sub>	11,920(1)	11,929(2)	11,9303(8)	11,928(2)	11,940(1)	
$\alpha_0$	90,01(2)	89,96(1)	90,060(4)	89,98(1)	89,96(7)	
$\beta_0$	90,081(9)	90,04(1)	90,007(5)	90,11(1)	90,12(5)	
$\gamma_0$	89,98(2)	89,89(1)	89,922(4)	89,94(1)	90,03(6)	
V <sub>0</sub>	1693,4(4)	1699,3(5)	1700,5(2)	1698,5(4)	1698,9(3)	
N-P+C	6105	6105	6105	6105	6082	
R <sub>p</sub>	16,0	15,8	13,0	14,4	13,9	
R <sub>wp</sub>	21,7	21,6	17,7	20,4	18,9	
R <sub>exp</sub>	11,70	11,67	11,88	14,40	14,40	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	22,4	22,4	18,5	21,1	23,5	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	27,1	27,3	22,3	26,2	27,1	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	14,63	14,72	14,97	18,51	20,70	
Chi2	3,44	3,44	2,21	2,01	1,72	
Chi2 (Bragg contr.)	3,65	3,56	2,28	2,07	1,73	
DW-stat.	0,7587	0,7321	1,1094	1,1774	1,3188	
DW-exp.	1,9690	1,9690	1,9690	1,9690	1,9768	
GoF	1,8	1,8	1,5	1,4	1,3	
R <sub>B</sub>	<b>11,2</b>	<b>12,0</b>	<b>7,94</b>	<b>9,01</b>	<b>7,65</b>	
R <sub>F</sub>	<b>9,71</b>	<b>11,6</b>	<b>10,3</b>	<b>9,35</b>	<b>8,21</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 133. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u  $I\bar{1}$  p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,7890		3,0879		2,2768		2,3167		1,7755	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,13(1)*	1,2 (5)	0,12(2)	1,0 (5)	0,13(1)	1,1 (2)	0,13(1)	1,1 (2)	0,13(1)	1,0 (2)
	y	0,00(2)		-0,00(2)		0,00(1)		0,00(1)		0,00(1)	
	z	0,25(1)		0,25(1)		0,25(1)		0,25(1)		0,25(1)	
Ca2	x	0,25(2)	1,0 (3)	0,25(2)	1,0 (3)	0,25(1)	1,1 (3)	0,25(1)	0,8 (2)	0,25(1)	1,0 (2)
	y	0,12(2)		0,12(2)		0,12(1)		0,13(1)		0,12(1)	
	z	0,00(2)		0,00(2)		-0,00(1)		0,00(2)		0,00(1)	
Ca3	x	-0,00(2)	0,9 (2)	-0,00(2)	0,9 (3)	0,00(2)	0,9 (2)	0,00(1)	0,9 (2)	-0,00(1)	0,8 (1)
	y	0,25(3)		0,25(2)		0,25(1)		0,25(2)		0,25(2)	
	z	0,12(2)		0,12(2)		0,13(1)		0,13(2)		0,12(1)	
Ca4	x	0,63(1)	1,1 (5)	0,62(2)	1,0 (4)	0,63(1)	1,1 (2)	0,63(1)	1,0 (2)	0,62(1)	0,9 (2)
	y	0,00(1)		-0,00(2)		0,00(1)		0,00(2)		-0,00(1)	
	z	0,25(1)		0,25(2)		0,25(1)		0,25(1)		0,25(1)	
Ca5	x	0,24(2)	1,1 (2)	0,25(2)	1,0 (4)	0,25(1)	1,1 (3)	0,25(1)	1,0 (2)	0,25(1)	1,0 (2)
	y	0,62(2)		0,62(2)		0,62(1)		0,62(1)		0,63(1)	
	z	-0,00(1)		-0,00(2)		-0,00(2)		0,00(2)		0,01(1)	
Ca6	x	-0,00(2)	1,0 (3)	-0,00(2)	0,9 (3)	-0,00(1)	0,9 (2)	0,00(1)	1,0 (2)	0,01(1)	0,9 (2)
	y	0,25(2)		0,25(2)		0,25(1)		0,25(1)		0,25(1)	
	z	0,63(2)		0,62(2)		0,63(1)		0,62(2)		0,62(1)	
Al1	x	0,000	0,4 (5)	0,000	0,4 (5)	0,000	0,4 (5)	0,000	0,3 (3)	0,000	0,2 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,1 (5)	0,000	0,1 (5)	0,000	0,1 (5)	0,000	0,2 (3)	0,000	0,3 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,000	0,4 (4)	0,000	0,3 (4)	0,000	0,4 (4)	0,000	0,4 (4)	0,000	0,3 (4)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe2	x	0,000	0,1 (4)	0,000	0,2 (4)	0,000	0,1 (4)	0,000	0,1 (4)	0,000	0,2 (4)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al3	x	0,500	0,4 (5)	0,500	0,3 (4)	0,500	0,4 (4)	0,500	0,4 (4)	0,500	0,4 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe3	x	0,500	0,1 (5)	0,500	0,2 (4)	0,500	0,1 (4)	0,500	0,1 (4)	0,500	0,1 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al4	x	0,500	0,4 (4)	0,500	0,3 (5)	0,500	0,4 (4)	0,500	0,4 (4)	0,500	0,3 (3)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe4	x	0,500	0,1 (4)	0,500	0,2 (5)	0,500	0,1 (4)	0,500	0,1 (4)	0,500	0,2 (3)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al5	x	0,250	0,4 (4)	0,250	0,4 (4)	0,250	0,4 (3)	0,250	0,4 (3)	0,250	0,4 (3)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Fe5	x	0,250	0,1 (4)	0,250	0,1 (4)	0,250	0,1 (3)	0,250	0,1 (3)	0,250	0,1 (3)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Al6	x	0,250	0,4 (6)	0,250	0,3 (4)	0,250	0,4 (3)	0,250	0,4 (3)	0,250	0,3 (4)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Fe6	x	0,250	0,1 (6)	0,250	0,2 (4)	0,250	0,1 (3)	0,250	0,1 (3)	0,250	0,2 (4)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	

Al7	x	0,750	0,4 (5)	0,750	0,3 (6)	0,750	0,3 (3)	0,750	0,2 (4)	0,750	0,3 (3)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Fe7	x	0,750	0,1 (5)	0,750	0,2 (6)	0,750	0,2 (3)	0,750	0,3 (4)	0,750	0,2 (3)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Al8	x	0,750	0,4 (4)	0,750	0,3 (6)	0,750	0,4 (4)	0,750	0,3 (3)	0,750	0,4 (4)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Fe8	x	0,750	0,1 (4)	0,750	0,2 (6)	0,750	0,1 (4)	0,750	0,2 (3)	0,750	0,1 (4)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si1	x	0,37(2)	1,000 (0)	0,38(2)	1,000 (0)	0,38(1)	1,000 (0)	0,37(1)	1,000 (0)	0,37(1)	1,000 (0)
	y	-0,00(2)		0,00(2)		-0,00(2)		-0,00(1)		-0,00(1)	
	z	0,25(2)		0,25(2)		0,25(1)		0,25(2)		0,24(1)	
Si2	x	0,25(3)	1,000 (0)	0,25(2)	1,000 (0)	0,25(1)	1,000 (0)	0,25(2)	1,000 (0)	0,26(2)	1,000 (0)
	y	0,38(2)		0,39(1)		0,38(1)		0,37(2)		0,38(2)	
	z	-0,00(2)		-0,00(2)		0,00(1)		-0,00(2)		-0,00(2)	
Si3	x	0,00(2)	1,000 (0)	0,00(2)	1,000 (0)	0,00(2)	1,000 (0)	0,00(2)	1,000 (0)	0,00(1)	1,000 (0)
	y	0,25(3)		0,25(2)		0,25(2)		0,25(2)		0,25(2)	
	z	0,38(2)		0,38(2)		0,368(9)		0,38(2)		0,38(1)	
Si4	x	0,87(2)	1,000 (0)	0,88(2)	1,000 (0)	0,87(1)	1,000 (0)	0,88(1)	1,000 (0)	0,88(1)	1,000 (0)
	y	-0,00(2)		0,00(2)		0,00(1)		-0,00(2)		-0,00(2)	
	z	0,25(2)		0,25(2)		0,25(1)		0,25(2)		0,25(1)	
Si5	x	0,25(2)	1,000 (0)	0,25(2)	1,000 (0)	0,25(1)	1,000 (0)	0,26(2)	1,000 (0)	0,25(2)	1,000 (0)
	y	0,87(2)		0,87(2)		0,87(1)		0,87(2)		0,87(2)	
	z	0,00(2)		0,00(2)		0,00(1)		-0,00(2)		0,00(2)	
Si6	x	0,00(2)	1,000 (0)	0,00(2)	1,000 (0)	0,00(2)	1,000 (0)	-0,01(2)	1,000 (0)	-0,01(1)	1,000 (0)
	y	0,25(3)		0,25(3)		0,25(2)		0,25(2)		0,25(1)	
	z	0,87(2)		0,88(2)		0,87(1)		0,87(2)		0,89(1)	
O1	x	0,06(4)	1,000 (0)	0,03(5)	1,000 (0)	0,04(3)	1,000 (0)	0,04(3)	1,000 (0)	0,04(3)	1,000 (0)
	y	0,04(6)		0,05(4)		0,05(3)		0,06(3)		0,05(3)	
	z	0,66(3)		0,65(5)		0,67(3)		0,65(4)		0,65(3)	
O2	x	0,55(4)	1,000 (0)	0,53(5)	1,000 (0)	0,54(3)	1,000 (0)	0,54(3)	1,000 (0)	0,53(3)	1,000 (0)
	y	0,45(4)		0,45(5)		0,45(3)		0,46(3)		0,46(3)	
	z	0,34(4)		0,35(5)		0,34(3)		0,35(4)		0,32(3)	
O3	x	0,98(4)	1,000 (0)	0,97(5)	1,000 (0)	0,97(3)	1,000 (0)	0,96(3)	1,000 (0)	0,96(2)	1,000 (0)
	y	0,55(5)		0,55(4)		0,55(3)		0,56(3)		0,53(3)	
	z	0,84(4)		0,85(4)		0,83(3)		0,84(4)		0,83(3)	
O4	x	0,46(5)	1,000 (0)	0,46(5)	1,000 (0)	0,46(3)	1,000 (0)	0,48(3)	1,000 (0)	0,48(3)	1,000 (0)
	y	0,95(5)		0,96(4)		0,94(3)		0,95(4)		0,95(3)	
	z	0,17(4)		0,16(4)		0,17(3)		0,16(5)		0,15(3)	
O5	x	0,64(4)	1,000 (0)	0,65(5)	1,000 (0)	0,66(3)	1,000 (0)	0,66(3)	1,000 (0)	0,66(3)	1,000 (0)
	y	0,04(5)		0,03(4)		0,04(3)		0,03(4)		0,04(3)	
	z	0,04(4)		0,05(5)		0,04(3)		0,03(4)		0,04(4)	
O6	x	0,16(5)	1,000 (0)	0,14(5)	1,000 (0)	0,16(3)	1,000 (0)	0,14(3)	1,000 (0)	0,13(3)	1,000 (0)
	y	0,45(6)		0,46(5)		0,45(3)		0,46(3)		0,47(3)	
	z	0,96(5)		0,95(5)		0,97(3)		0,96(4)		0,97(3)	
O7	x	0,34(4)	1,000 (0)	0,35(5)	1,000 (0)	0,34(3)	1,000 (0)	0,33(3)	1,000 (0)	0,35(3)	1,000 (0)
	y	0,53(5)		0,54(5)		0,54(3)		0,53(3)		0,53(3)	
	z	0,46(4)		0,46(5)		0,46(3)		0,46(3)		0,45(3)	
O8	x	0,85(4)	1,000 (0)	0,85(5)	1,000 (0)	0,85(3)	1,000 (0)	0,85(3)	1,000 (0)	0,84(3)	1,000 (0)
	y	0,96(5)		0,96(5)		0,95(3)		0,96(3)		0,96(3)	
	z	0,55(4)		0,55(4)		0,53(3)		0,54(4)		0,54(3)	
O9	x	0,04(5)	1,000 (0)	0,05(6)	1,000 (0)	0,05(3)	1,000 (0)	0,04(3)	1,000 (0)	0,04(3)	1,000 (0)
	y	0,66(5)		0,65(5)		0,66(3)		0,66(3)		0,66(5)	
	z	0,03(5)		0,03(6)		0,03(3)		0,03(4)		0,03(3)	
O10	x	0,55(5)	1,000 (0)	0,55(5)	1,000 (0)	0,55(3)	1,000 (0)	0,54(3)	1,000 (0)	0,56(3)	1,000 (0)
	y	0,84(5)		0,85(5)		0,85(3)		0,86(4)		0,85(3)	
	z	0,97(4)		0,97(4)		0,97(3)		0,95(4)		0,96(3)	



<b>O11</b>	<b>x</b>	0,94(4)	1,000 (0)	0,95(6)	1,000 (0)	0,95(3)	1,000 (0)	0,95(3)	1,000 (0)	0,96(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,17(4)		0,15(5)		0,16(3)		0,15(4)		0,15(3)	
	<b>z</b>	0,48(4)		0,47(5)		0,47(3)		0,45(4)		0,46(4)	
<b>O12</b>	<b>x</b>	0,44(4)	1,000 (0)	0,45(5)	1,000 (0)	0,45(3)	1,000 (0)	0,44(3)	1,000 (0)	0,45(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,34(5)		0,35(5)		0,35(3)		0,34(3)		0,34(3)	
	<b>z</b>	0,54(4)		0,53(3)		0,52(3)		0,53(4)		0,54(3)	
<b>O13</b>	<b>x</b>	0,30(4)	1,000 (0)	0,28(5)	1,000 (0)	0,31(3)	1,000 (0)	0,32(2)	1,000 (0)	0,29(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,90(5)		0,90(4)		0,92(3)		0,95(2)		0,91(3)	
	<b>z</b>	0,29(4)		0,30(4)		0,29(3)		0,29(3)		0,29(3)	
<b>O14</b>	<b>x</b>	0,81(4)	1,000 (0)	0,79(5)	1,000 (0)	0,80(3)	1,000 (0)	0,79(3)	1,000 (0)	0,77(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,59(6)		0,60(5)		0,61(2)		0,61(3)		0,64(2)	
	<b>z</b>	0,72(4)		0,71(5)		0,72(2)		0,68(4)		0,74(3)	
<b>O15</b>	<b>x</b>	0,69(4)	1,000 (0)	0,71(4)	1,000 (0)	0,69(3)	1,000 (0)	0,71(3)	1,000 (0)	0,73(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,40(5)		0,41(5)		0,40(3)		0,40(3)		0,40(3)	
	<b>z</b>	0,21(4)		0,20(4)		0,21(3)		0,20(4)		0,19(3)	
<b>O16</b>	<b>x</b>	0,20(4)	1,000 (0)	0,22(5)	1,000 (0)	0,19(2)	1,000 (0)	0,22(3)	1,000 (0)	0,22(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,11(5)		0,10(5)		0,10(2)		0,08(3)		0,09(3)	
	<b>z</b>	0,79(3)		0,80(4)		0,76(2)		0,79(4)		0,79(3)	
<b>O17</b>	<b>x</b>	0,30(4)	1,000 (0)	0,26(4)	1,000 (0)	0,30(3)	1,000 (0)	0,29(3)	1,000 (0)	0,30(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,28(6)		0,28(3)		0,28(3)		0,28(4)		0,28(3)	
	<b>z</b>	0,93(4)		0,93(3)		0,92(3)		0,90(4)		0,91(3)	
<b>O18</b>	<b>x</b>	0,80(5)	1,000 (0)	0,80(5)	1,000 (0)	0,80(3)	1,000 (0)	0,79(3)	1,000 (0)	0,80(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,21(6)		0,22(5)		0,21(3)		0,21(3)		0,20(3)	
	<b>z</b>	0,09(4)		0,10(5)		0,09(2)		0,10(4)		0,06(3)	
<b>O19</b>	<b>x</b>	0,70(5)	1,000 (0)	0,70(5)	1,000 (0)	0,71(3)	1,000 (0)	0,72(3)	1,000 (0)	0,70(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,79(6)		0,79(5)		0,78(3)		0,80(3)		0,79(3)	
	<b>z</b>	0,59(4)		0,60(5)		0,57(3)		0,61(4)		0,56(2)	
<b>O20</b>	<b>x</b>	0,22(4)	1,000 (0)	0,20(5)	1,000 (0)	0,22(2)	1,000 (0)	0,21(3)	1,000 (0)	0,14(2)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,71(5)		0,71(4)		0,70(3)		0,72(3)		0,72(2)	
	<b>z</b>	0,43(4)		0,41(4)		0,44(2)		0,40(4)		0,44(2)	
<b>O21</b>	<b>x</b>	0,90(5)	1,000 (0)	0,93(4)	1,000 (0)	0,90(3)	1,000 (0)	0,91(3)	1,000 (0)	0,90(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,30(5)		0,28(3)		0,30(3)		0,29(3)		0,30(3)	
	<b>z</b>	0,28(4)		0,28(3)		0,28(3)		0,28(4)		0,29(3)	
<b>O22</b>	<b>x</b>	0,42(5)	1,000 (0)	0,40(5)	1,000 (0)	0,40(4)	1,000 (0)	0,39(3)	1,000 (0)	0,38(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,20(5)		0,20(5)		0,20(3)		0,20(4)		0,22(3)	
	<b>z</b>	0,73(3)		0,73(5)		0,72(3)		0,71(4)		0,72(3)	
<b>O23</b>	<b>x</b>	0,10(5)	1,000 (0)	0,10(5)	1,000 (0)	0,10(3)	1,000 (0)	0,10(3)	1,000 (0)	0,10(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,80(6)		0,79(5)		0,80(3)		0,81(3)		0,79(3)	
	<b>z</b>	0,20(4)		0,22(5)		0,21(3)		0,19(3)		0,21(3)	
<b>O24</b>	<b>x</b>	0,59(4)	1,000 (0)	0,60(4)	1,000 (0)	0,60(3)	1,000 (0)	0,58(3)	1,000 (0)	0,60(3)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,70(5)		0,70(4)		0,70(3)		0,71(3)		0,70(3)	
	<b>z</b>	0,78(4)		0,78(4)		0,77(2)		0,78(4)		0,77(3)	
<b>Ca1 (%)</b>	120(50)	105 (33)	100(50)	97 (37)	110(20)	103 (23)	110(20)	97 (20)	100(20)	93 (18)	
<b>Ca2 (%)</b>	100(30)		100(30)		110(30)		80(20)		100(20)		
<b>Ca3 (%)</b>	90(20)		90(30)		90(20)		90(20)		80(10)		
<b>Ca4 (%)</b>	110(50)		100(40)		110(20)		100(20)		90(20)		
<b>Ca5 (%)</b>	110(20)		100(40)		110(30)		100(20)		100(20)		
<b>Ca6 (%)</b>	100(30)		90(30)		90(20)		100(20)		90(20)		
<b>A11 (%)</b>	80(100)	80 (92)	80(100)	65 (95)	80(100)	78 (72)	60(60)	70 (70)	40(60)	65 (68)	
<b>A12 (%)</b>	80(80)		60(80)		80(80)		80(80)		60(80)		
<b>A13 (%)</b>	80(100)		60(80)		80(80)		80(80)		80(60)		
<b>A14 (%)</b>	80(80)		60(100)		80(80)		80(80)		60(60)		
<b>A15 (%)</b>	80(80)		80(80)		80(60)		80(60)		80(60)		
<b>A16 (%)</b>	80(120)		60(80)		80(60)		80(60)		60(80)		
<b>A17 (%)</b>	80(100)		60(120)		60(60)		40(80)		60(60)		
<b>A18 (%)</b>	80(80)		60(120)		80(60)		60(60)		80(80)		

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 134. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja (u Å) u  $\bar{1}\bar{1}$  p.g.

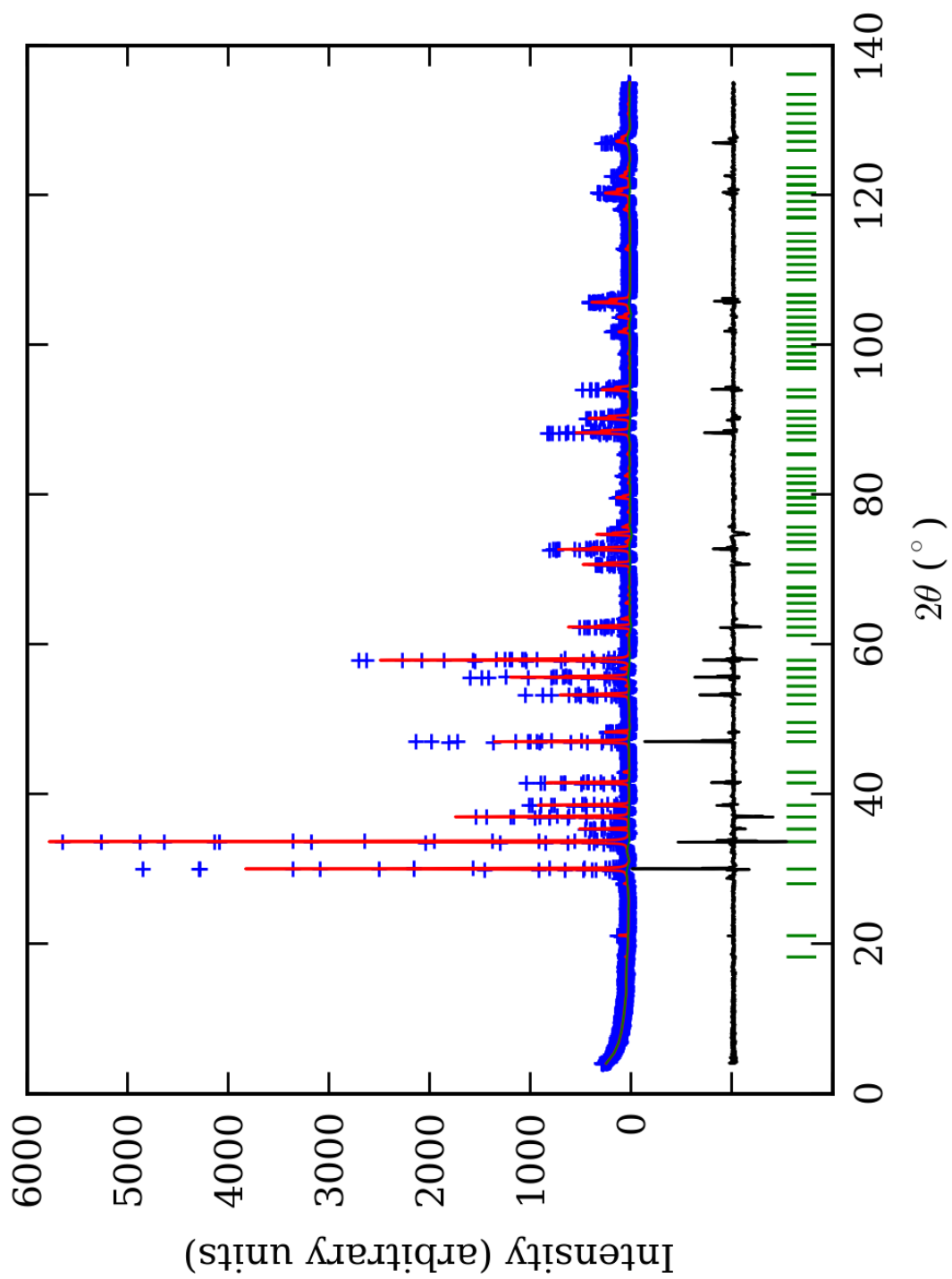
Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si(1)-O(3)	1*	1,8(2) <sup>1</sup>	1,7(2)	1,6(2)	1,8(2)	1,6(2)
Si(1)-O(4)	1	1,6(2)	1,5(2)	1,5(2)	1,7(2)	1,8(2)
Si(1)-O(13)	1	1,5(2)	1,8(2)	1,4(2)	0,9(2)	1,5(2)
Si(1)-O(14)	1	1,4(2)	1,7(2)	1,6(2)	1,9(2)	2,0(2)
sr. vr. Si(1)-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,5(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,7(2)</b>
Si(2)-O(6)	1	1,4(2)	1,6(2)	1,4(2)	1,8(2)	1,9(2)
Si(2)-O(8)	1	1,6(2)	1,6(2)	1,6(2)	1,6(2)	1,4(2)
Si(2)-O(17)	1	1,5(2)	1,5(1)	1,6(2)	1,7(2)	1,6(2)
Si(2)-O(19)	1	1,7(2)	1,9(2)	1,4(2)	1,7(2)	1,5(2)
sr. vr. Si(2)-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,5(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,6(2)</b>
Si(3)-O(10)	1	1,6(2)	1,7(2)	1,8(2)	1,6(2)	1,6(2)
Si(3)-O(11)	1	1,6(2)	1,7(2)	1,6(2)	1,6(2)	1,6(2)
Si(3)-O(21)	1	1,8(2)	1,6(2)	1,7(2)	1,7(2)	1,7(2)
Si(3)-O(24)	1	1,7(2)	1,8(2)	1,8(2)	1,7(2)	1,8(2)
sr. vr. Si(3)-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,7(2)</b>
Si(4)-O(1)	1	1,4(2)	1,7(2)	1,5(2)	1,7(2)	1,6(2)
Si(4)-O(2)	1	1,7(2)	1,7(2)	1,6(2)	1,6(2)	1,5(2)
Si(4)-O(15)	1	1,5(2)	1,6(2)	1,5(2)	1,6(2)	1,9(2)
Si(4)-O(16)	1	1,6(2)	1,8(2)	1,4(2)	1,6(2)	1,6(2)
sr. vr. Si(4)-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,5(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,6(2)</b>
Si(5)-O(5)	1	1,7(2)	1,8(2)	1,6(2)	1,6(2)	1,7(2)
Si(5)-O(7)	1	1,6(2)	1,6(2)	1,6(2)	1,7(2)	1,7(2)
Si(5)-O(18)	1	1,6(2)	1,7(2)	1,5(2)	1,7(2)	1,3(2)
Si(5)-O(20)	1	1,3(2)	1,5(2)	1,2(2)	1,7(2)	1,9(2)
sr. vr. Si(5)-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,5(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,6(2)</b>
Si(6)-O(9)	1	1,7(2)	1,7(2)	1,7(2)	1,7(2)	1,5(2)
Si(6)-O(12)	1	1,7(2)	1,7(2)	1,8(2)	1,8(2)	1,6(2)
Si(6)-O(22)	1	1,7(2)	1,9(2)	1,7(2)	1,7(2)	2,0(2)
Si(6)-O(23)	1	1,6(2)	1,8(2)	1,7(2)	1,4(2)	1,7(2)
sr. vr. Si(6)-O		<b>1,7(2)</b>	<b>1,8(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,7(2)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,6(2)</b>	<b>1,7(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,6(2)</b>	<b>1,6(2)</b>
Y(1)-O(2)	2	2,0(2)	1,9(2)	2,1(1)	2,0(2)	2,2(2)
Y(1)-O(7)	2	2,1(2)	1,9(2)	2,0(2)	2,1(2)	2,0(2)
Y(1)-O(12)	2	2,0(2)	1,9(2)	2,0(2)	2,1(2)	2,1(2)
sr. vr. Y(1)-O		<b>2,0(2)</b>	<b>1,9(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,1(2)</b>	<b>2,1(2)</b>
Y(2)-O(4)	2	2,1(2)	2,1(2)	2,2(1)	2,0(2)	1,9(2)
Y(2)-O(5)	2	1,9(2)	2,0(2)	2,0(2)	2,0(2)	2,0(2)
Y(2)-O(10)	2	2,0(2)	1,9(2)	1,9(2)	1,8(2)	2,0(2)
sr. vr. Y(2)-O		<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>1,9(2)</b>	<b>2,0(2)</b>
Y(3)-O(3)	2	2,0(2)	1,9(2)	2,1(2)	2,0(2)	2,1(2)
Y(3)-O(6)	2	2,1(2)	1,8(2)	2,0(2)	1,9(2)	1,6(2)
Y(3)-O(9)	2	2,0(2)	1,9(2)	2,0(2)	2,1(2)	2,0(2)
sr. vr. Y(3)-O		<b>2,0(2)</b>	<b>1,9(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>1,9(2)</b>
Y(4)-O(1)	2	2,1(2)	2,0(2)	2,2(1)	1,9(2)	2,0(2)
Y(4)-O(8)	2	1,9(2)	2,0(2)	1,9(2)	1,9(2)	2,1(2)
Y(4)-O(11)	2	2,2(2)	1,9(2)	2,0(2)	2,0(2)	1,9(2)
sr. vr. Y(4)-O		<b>2,1(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>1,9(2)</b>	<b>2,0(2)</b>
Y(5)-O(14)	2	2,1(2)	1,9(2)	1,9(1)	1,9(2)	1,4(2)
Y(5)-O(19)	2	2,0(2)	1,9(2)	2,2(1)	1,8(2)	2,4(2)
Y(5)-O(24)	2	2,0(2)	1,9(2)	1,9(1)	2,1(2)	1,9(2)
sr. vr. Y(5)-O		<b>2,0(2)</b>	<b>1,9(2)</b>	<b>2,0(1)</b>	<b>1,9(2)</b>	<b>1,9(2)</b>
Y(6)-O(15)	2	2,0(2)	2,0(2)	2,0(2)	2,0(2)	1,9(2)
Y(6)-O(18)	2	2,0(2)	1,9(2)	2,1(1)	1,9(2)	2,4(2)
Y(6)-O(21)	2	1,9(2)	2,2(1)	2,0(2)	2,0(2)	2,0(2)
sr. vr. Y(6)-O		<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,1(2)</b>

Y(7)-O(13)	2	2,0(2)	2,0(2)	2,2(1)	2,6(1)	2,0(2)
Y(7)-O(20)	2	2,2(2)	2,0(2)	2,4(1)	1,9(2)	2,6(1)
Y(7)-O(23)	2	2,0(2)	1,9(2)	2,0(2)	2,1(2)	1,9(2)
sr. vr. Y(7)-O		<b>2,1(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,2(1)</b>	<b>2,2(2)</b>	<b>2,2(2)</b>
Y(8)-O(16)	2	1,8(2)	1,9(2)	2,0(1)	2,1(2)	2,0(2)
Y(8)-O(17)	2	2,2(2)	2,2(1)	2,2(1)	1,9(2)	2,0(2)
Y(8)-O(22)	2	2,1(2)	1,9(2)	2,0(1)	1,9(2)	1,6(2)
sr. vr. Y(8)-O		<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,1(1)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>1,9(2)</b>
sr. vr. Y-O		<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>	<b>2,0(2)</b>
X(1)-O(1)	1	2,5(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,4(2)	2,3(2)
X(1)-O(2)	1	2,4(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,1(2)
X(1)-O(7)	1	2,6(2)	2,6(2)	2,5(2)	2,6(2)	2,5(2)
X(1)-O(8)	1	2,5(2)	2,4(2)	2,7(2)	2,6(2)	2,5(2)
X(1)-O(13)	1	2,5(2)	2,3(2)	2,4(2)	2,4(1)	2,3(2)
X(1)-O(14)	1	2,5(2)	2,4(2)	2,5(2)	2,4(2)	2,4(2)
X(1)-O(23)	1	2,5(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,4(2)	2,6(2)
X(1)-O(24)	1	2,5(2)	2,5(2)	2,4(2)	2,6(2)	2,4(2)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,5(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,5(2)</b>	<b>2,4(2)</b>
X(2)-O(5)	1	2,4(2)	2,2(2)	2,3(2)	2,2(2)	2,3(2)
X(2)-O(7)	1	2,2(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,2(2)	2,2(2)
X(2)-O(10)	1	2,5(2)	2,4(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,4(2)
X(2)-O(12)	1	2,3(2)	2,5(2)	2,4(2)	2,4(2)	2,4(2)
X(2)-O(14)	1	2,6(2)	2,5(2)	2,7(1)	2,2(2)	2,8(2)
X(2)-O(16)	1	2,6(2)	2,5(2)	2,9(1)	2,6(2)	2,5(2)
X(2)-O(17)	1	2,1(2)	2,1(2)	2,2(2)	2,2(2)	2,3(2)
X(2)-O(19)	1	2,3(2)	2,4(2)	2,2(2)	2,4(2)	2,2(2)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,3(2)</b>	<b>2,4(2)</b>
X(3)-O(2)	1	2,5(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,6(2)	2,6(2)
X(3)-O(3)	1	2,4(2)	2,4(2)	2,4(2)	2,3(2)	2,7(2)
X(3)-O(9)	1	2,2(2)	2,2(2)	2,3(2)	2,2(2)	2,2(2)
X(3)-O(12)	1	2,3(2)	2,2(2)	2,2(2)	2,2(2)	2,3(2)
X(3)-O(18)	1	2,5(2)	2,4(2)	2,5(2)	2,6(2)	2,6(2)
X(3)-O(19)	1	2,5(2)	2,5(2)	2,6(2)	2,6(2)	2,5(2)
X(3)-O(21)	1	2,3(2)	2,1(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,4(2)
X(3)-O(24)	1	2,3(2)	2,4(2)	2,1(2)	2,0(2)	2,2(2)
sr. vr. X(3)-O		<b>2,4(2)</b>	<b>2,3(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>
X(4)-O(3)	1	2,2(2)	2,3(2)	2,2(2)	2,4(2)	2,2(2)
X(4)-O(4)	1	2,3(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,1(2)	2,2(2)
X(4)-O(5)	1	2,5(2)	2,4(2)	2,6(2)	2,6(2)	2,6(2)
X(4)-O(6)	1	2,6(2)	2,4(2)	2,7(2)	2,5(2)	2,6(2)
X(4)-O(15)	1	2,4(2)	2,4(2)	2,5(2)	2,4(2)	2,2(2)
X(4)-O(16)	1	2,5(2)	2,3(2)	2,5(1)	2,2(2)	2,2(2)
X(4)-O(21)	1	2,4(2)	2,8(2)	2,4(2)	2,6(2)	2,5(2)
X(4)-O(22)	1	2,5(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,6(2)
sr. vr. X(4)-O		<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,5(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>
X(5)-O(6)	1	2,4(2)	2,4(2)	2,3(2)	2,4(2)	2,4(2)
X(5)-O(8)	1	2,4(2)	2,3(2)	2,4(2)	2,3(2)	2,3(2)
X(5)-O(9)	1	2,5(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,5(2)
X(5)-O(11)	1	2,5(2)	2,4(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,6(2)
X(5)-O(13)	1	2,6(2)	2,4(2)	2,7(2)	2,8(2)	2,5(2)
X(5)-O(15)	1	2,6(2)	2,5(2)	2,6(1)	2,5(2)	2,4(2)
X(5)-O(18)	1	2,3(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,2(2)
X(5)-O(20)	1	2,2(2)	2,4(2)	2,2(2)	2,3(2)	2,4(2)
sr. vr. X(5)-O		<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>
X(6)-O(1)	1	2,6(3)	2,4(2)	2,5(2)	2,4(2)	2,4(2)
X(6)-O(4)	1	2,5(2)	2,6(2)	2,4(2)	2,4(2)	2,4(2)
X(6)-O(10)	1	2,3(2)	2,2(2)	2,3(2)	2,5(2)	2,3(2)

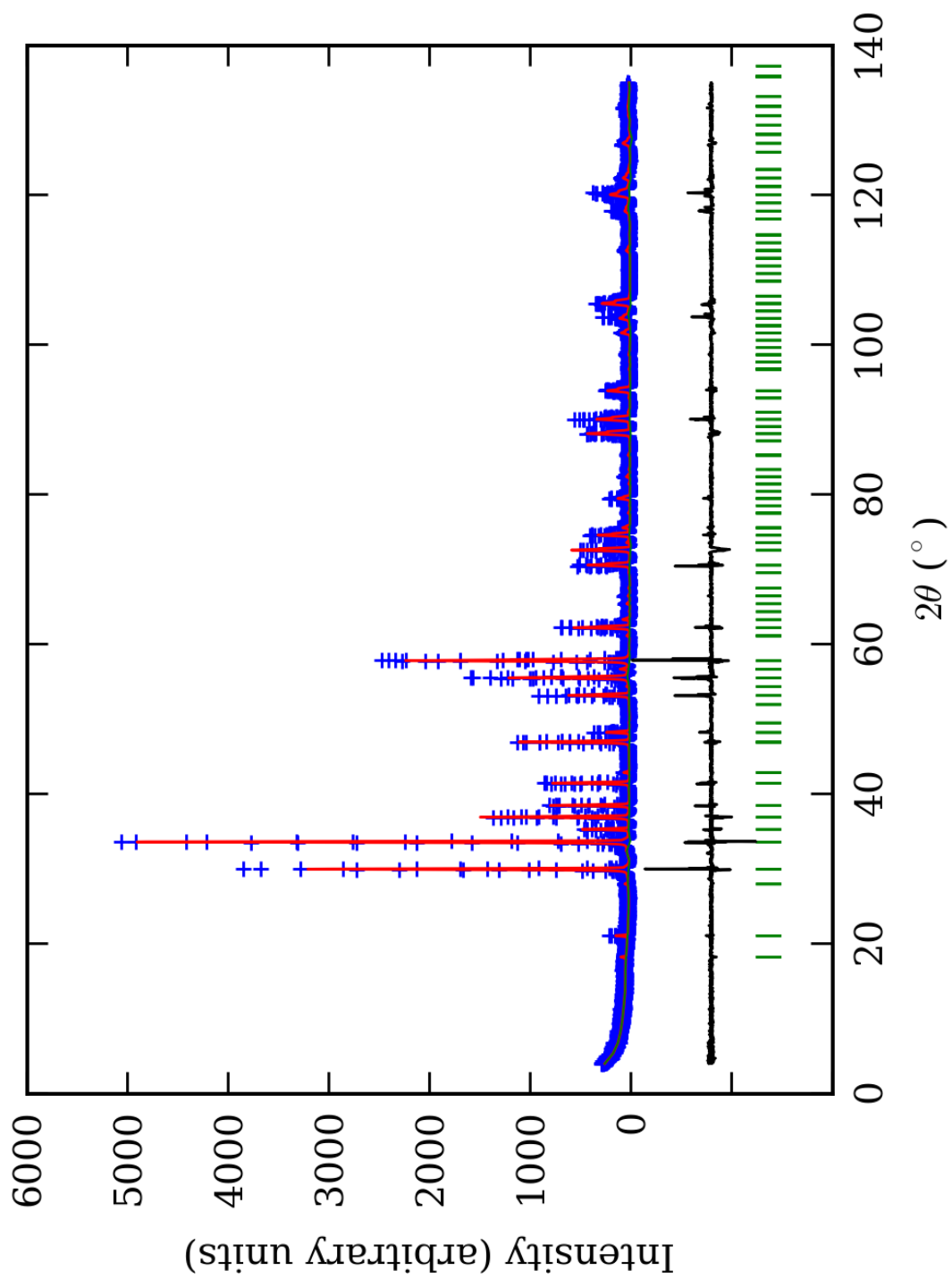
<b>X(6)-O(11)</b>	<b>1</b>	2,1(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,5(2)	2,4(2)
<b>X(6)-O(17)</b>	<b>1</b>	2,6(2)	2,9(2)	2,5(2)	2,5(2)	2,3(2)
<b>X(6)-O(20)</b>	<b>1</b>	2,7(2)	2,5(2)	2,7(2)	2,6(2)	2,0(2)
<b>X(6)-O(22)</b>	<b>1</b>	2,1(2)	2,2(2)	2,2(2)	2,4(2)	2,3(2)
<b>X(6)-O(23)</b>	<b>1</b>	2,4(2)	2,3(2)	2,3(2)	2,6(2)	2,5(2)
<b>sr. vr. X(6)-O</b>		<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,5(2)</b>	<b>2,3(2)</b>
<b>sr. vr. X-O</b>		<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>	<b>2,4(2)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja

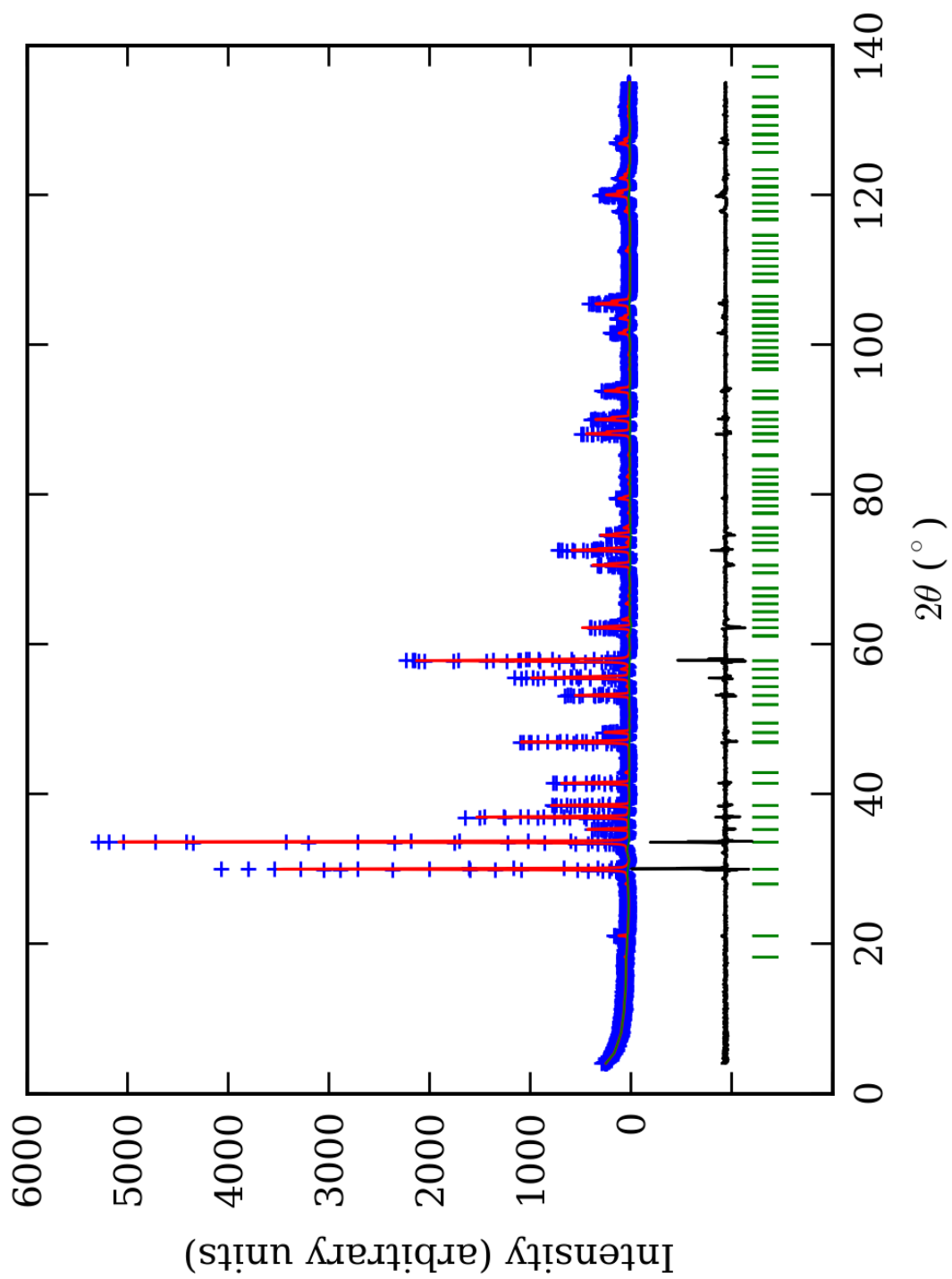
<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



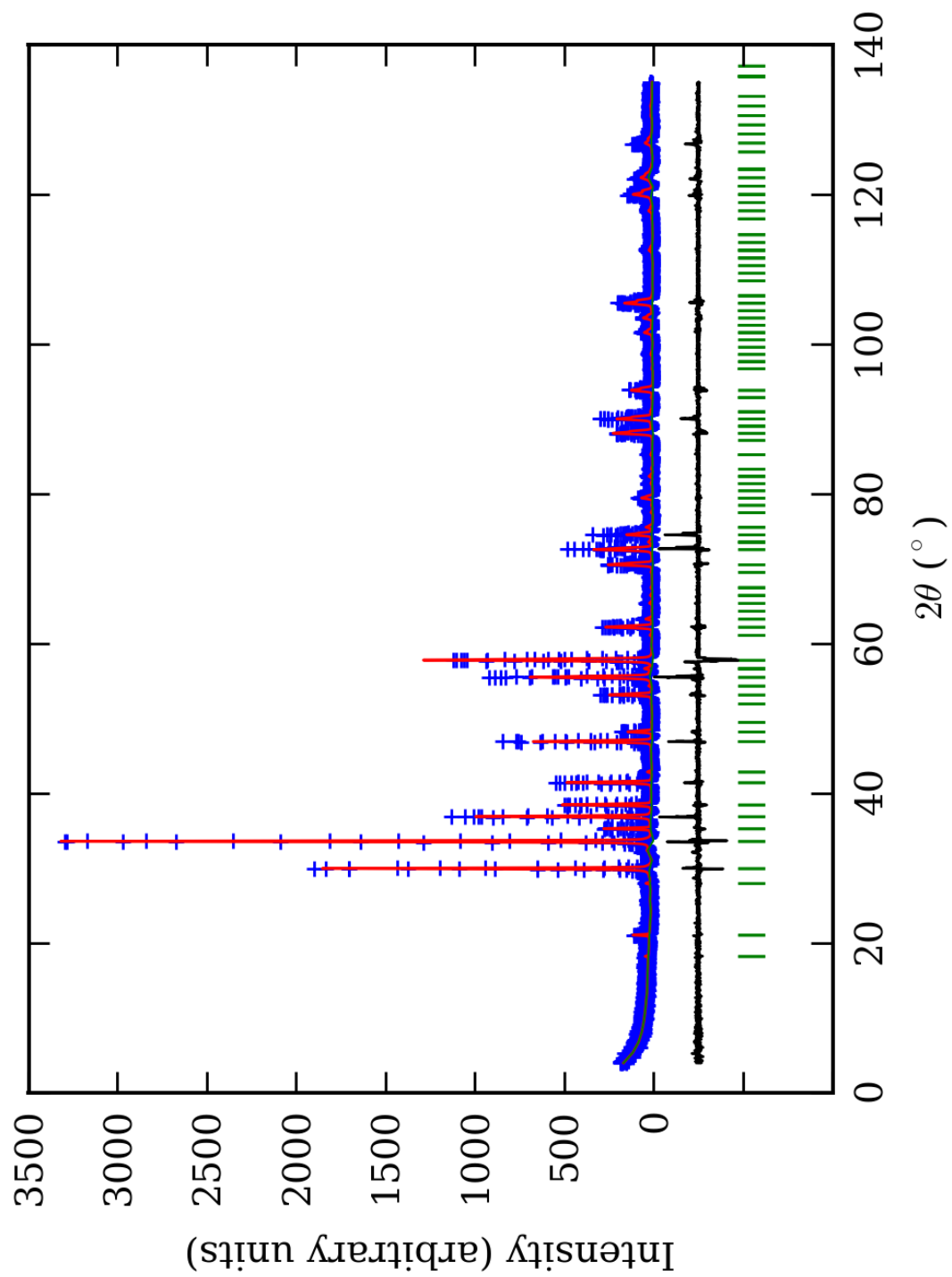
PRILOG 135. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $Ia\bar{3}d$  p.g.



PRILOG 136. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

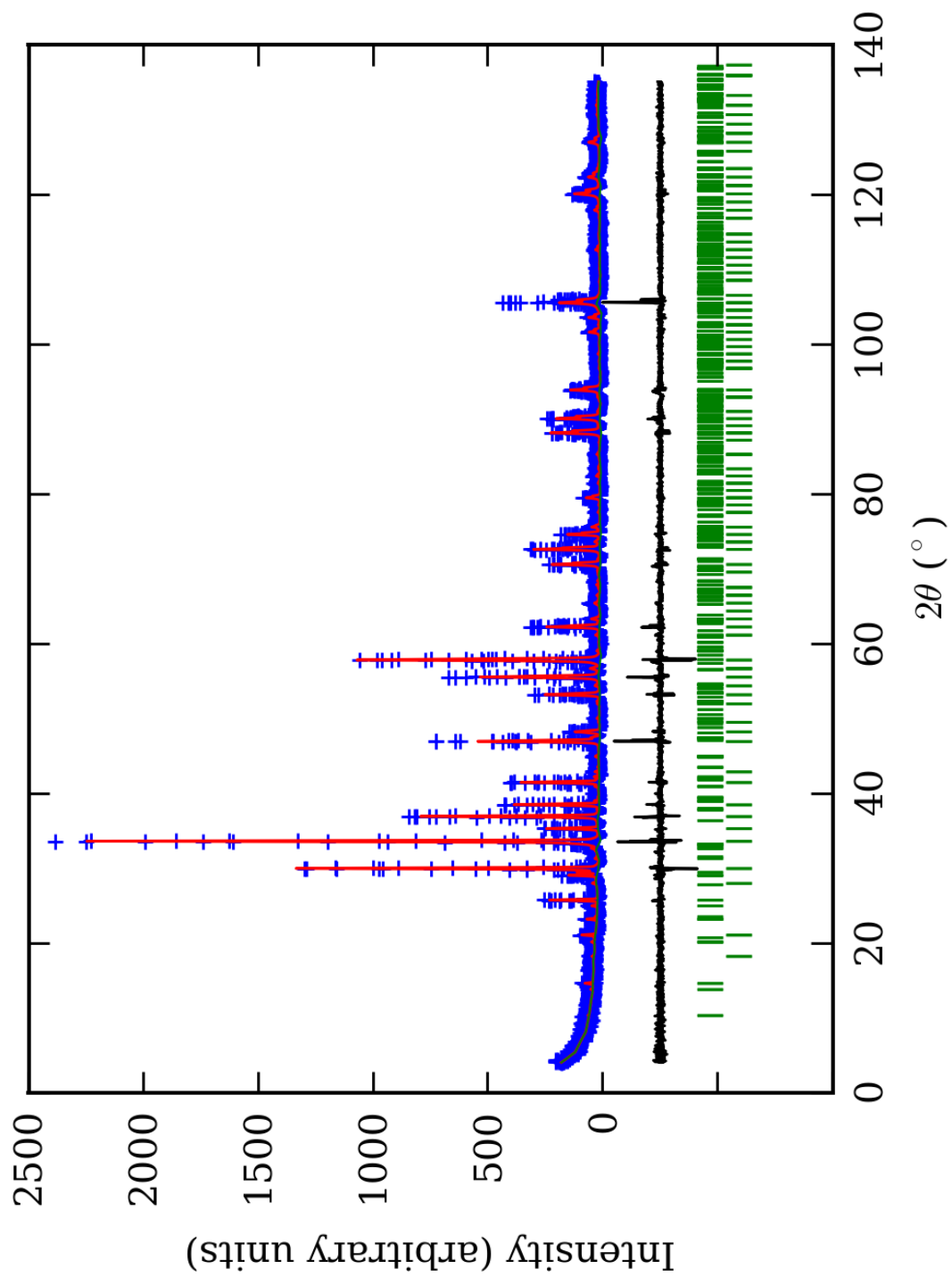


PRILOG 137. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u Ia  $\bar{3}d$  p.g.



PRILOG 138. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u Ia  $\bar{3}d$  p.g.





PRILOG 139. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $Ia\bar{3}d$  p.g.

PRILOG 140. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u Ia 3d p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,5362	2,5202	2,1965	2,0739	1,7162	
Faktor skale	0,0000196(6)*	0,0000206(7)	0,0000205(4)	0,0000167(4)	0,0000102(2)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,3(1)	0,4(1)	0,18(7)	0,32(9)	0,12(8)	
Ukupni temp. faktor	0,4(1)	0,4(1)	0,60(9)	0,8(1)	0,4(1)	
Parametri polu-širine	U	0,029(8)	0,08(1)	0,005(6)	0,03(1)	0,024(7)
	V	-0,00(1)	-0,04(2)	0,029(9)	0,03(2)	-0,00(1)
	W	0,012(3)	0,026(4)	0,013(3)	0,012(4)	0,027(3)
Preferentna orijent.	0,54(7)	0,38(6)	0,41(5)	-0,32(5)	0,36(4)	
Parametri asimetrije	As 1	0,02(6)	0,16(5)	0,06(5)	0,05(7)	0,06(4)
	As 2	0,047(9)	0,064(7)	0,050(7)	0,041(8)	0,045(6)
X parametar	0,003(2)	0,001(2)	0,005(1)	0,002(2)	0,008(1)	
Nulta tačka	0,010(8)	0,030(9)	-0,002(8)	0,02(1)	-0,042(7)	
a <sub>0</sub>	11,9191(7)	11,9320(8)	11,9342(6)	11,9342(8)	11,9287(6)	
V <sub>0</sub>	1693,3(2)	1698,8(2)	1699,7(1)	1699,7(2)	1697,4(1)	
N-P+C	6436	6436	6436	6436	6413	
R <sub>p</sub>	15,4	14,5	12,7	13,9	13,2	
R <sub>wp</sub>	20,7	19,6	17,1	19,1	17,8	
R <sub>exp</sub>	11,49	11,43	11,64	14,10	14,06	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	24,4	23,0	20,3	23,0	24,9	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	27,5	26,0	22,7	26,1	26,9	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,21	15,17	15,47	19,27	21,25	
Chi2	3,26	2,93	2,16	1,84	1,60	
Chi2 (Bragg contr.)	4,05	3,52	2,60	2,19	1,69	
DW-stat.	0,7923	0,8568	1,1284	1,2729	1,3863	
DW-exp.	1,9591	1,9591	1,9591	1,9591	1,9664	
GoF	1,8	1,7	1,5	1,3	1,3	
R <sub>B</sub>	<b>10,8</b>	<b>9,50</b>	<b>6,96</b>	<b>8,04</b>	<b>6,84</b>	
R <sub>F</sub>	<b>8,09</b>	<b>7,39</b>	<b>6,34</b>	<b>6,91</b>	<b>5,81</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 141. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u  $Ia\bar{3}d$  p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,5362		2,5202		2,1965		2,0739		1,7162		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca	x	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Mn	x	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Al	x	0,000	0,107 (0)	0,000	0,103 (0)	0,000	0,098 (0)	0,000	0,097 (0)	0,000	0,097 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Fe	x	0,000	0,060 (0)	0,000	0,063 (0)	0,000	0,068 (0)	0,000	0,070 (0)	0,000	0,070 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Si	x	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
O	x	0,0387(6)*	1,000 (0)	0,0354(5)	1,000 (0)	0,0380(5)	1,000 (0)	0,0384(4)	1,000 (0)	0,0393(4)	1,000 (0)
	y	0,0448(6)		0,0449(5)		0,0438(4)		0,0475(5)		0,0480(4)	
	z	0,6541(5)		0,6531(5)		0,6558(4)		0,6533(4)		0,6533(4)	
Ca (%)	98		98		98		98		98		
Al (%)	64		62		59		58		58		

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenju standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 142. Odabrana međuatomska rastojanja (u Å) u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

Rastojanja		Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si-O(1)	4 <sup>3</sup>	1,645(1)*	1,643(2)	1,628(2)	1,667(2)	1,617(2)	1,650(2)	1,644(3)
O(1)-O(2)	2	2,567(2)	2,564(4)	2,523(3)	2,559(3)	2,479(3)	2,571(3)	2,575(3)
O(1)-O(3)	4	2,745(1)	2,739(3)	2,723(3)	2,801(3)	2,718(3)	2,755(3)	2,738(4)
srednje O-O		2,686(1)	2,681(3)	2,656(3)	2,720(3)	2,638(3)	2,694(3)	2,684(4)
Y-O(1)	6	1,924(1)	2,024(2)	1,968(2)	1,953(2)	1,985(2)	1,969(2)	1,972(2)
O(1)-O(4)	6	2,756(2)	2,890(3)	2,823(3)	2,763(3)	2,845(3)	2,806(3)	2,818(4)
O(1)-O(5)	6	2,686(2)	2,834(4)	2,742(3)	2,762(3)	2,768(3)	2,764(3)	2,760(3)
srednje O-O		2,721(2)	2,862(4)	2,782(3)	2,762(3)	2,806(3)	2,785(3)	2,789(4)
X(1)-O(4)	4	2,319(1)	2,366(2)	2,324(2)	2,302(2)	2,307(2)	2,335(2)	2,345(3)
X(2)-O(4)	4	2,490(1)	2,500(2)	2,513(2)	2,494(2)	2,529(2)	2,483(2)	2,479(2)
srednje X-O		2,405(1)	2,433(2)	2,418(2)	2,398(2)	2,418(2)	2,409(2)	2,412(2)
$\Delta(X-O)^2$		0,171(1)	0,134(2)	0,189(2)	0,192(2)	0,222(3)	0,148(2)	0,134(2)
O(1)-O(2)	2	2,567(2)	2,564(4)	2,523(3)	2,559(3)	2,479(3)	2,571(3)	2,575(3)
O(1)-O(4)	4	2,756(2)	2,890(3)	2,823(3)	2,763(3)	2,845(3)	2,806(3)	2,818(4)
O(4)-O(6)	4	2,973(2)	2,936(4)	2,967(3)	2,924(3)	2,954(3)	2,935(3)	2,941(4)
O(4)-O(7)	2	2,866(2)	2,847(4)	2,891(3)	2,925(3)	2,932(3)	2,852(3)	2,828(4)
O(1)-O(7)	4	3,450(1)	3,485(2)	3,452(3)	3,454(3)	3,441(3)	3,462(3)	3,463(4)
O(8)-O(7)	2	4,121(2)	4,175(3)	4,169(3)	4,097(3)	4,186(3)	4,120(3)	4,128(3)
srednje O-O		3,101(2)	3,134(3)	3,119(3)	3,096(3)	3,120(3)	3,105(3)	3,108(4)

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

<sup>2</sup>-Ovaj rad

<sup>3</sup>-Učestalost pojavljivanja

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 143. Odabrani međuatomske uglovi (u °) u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

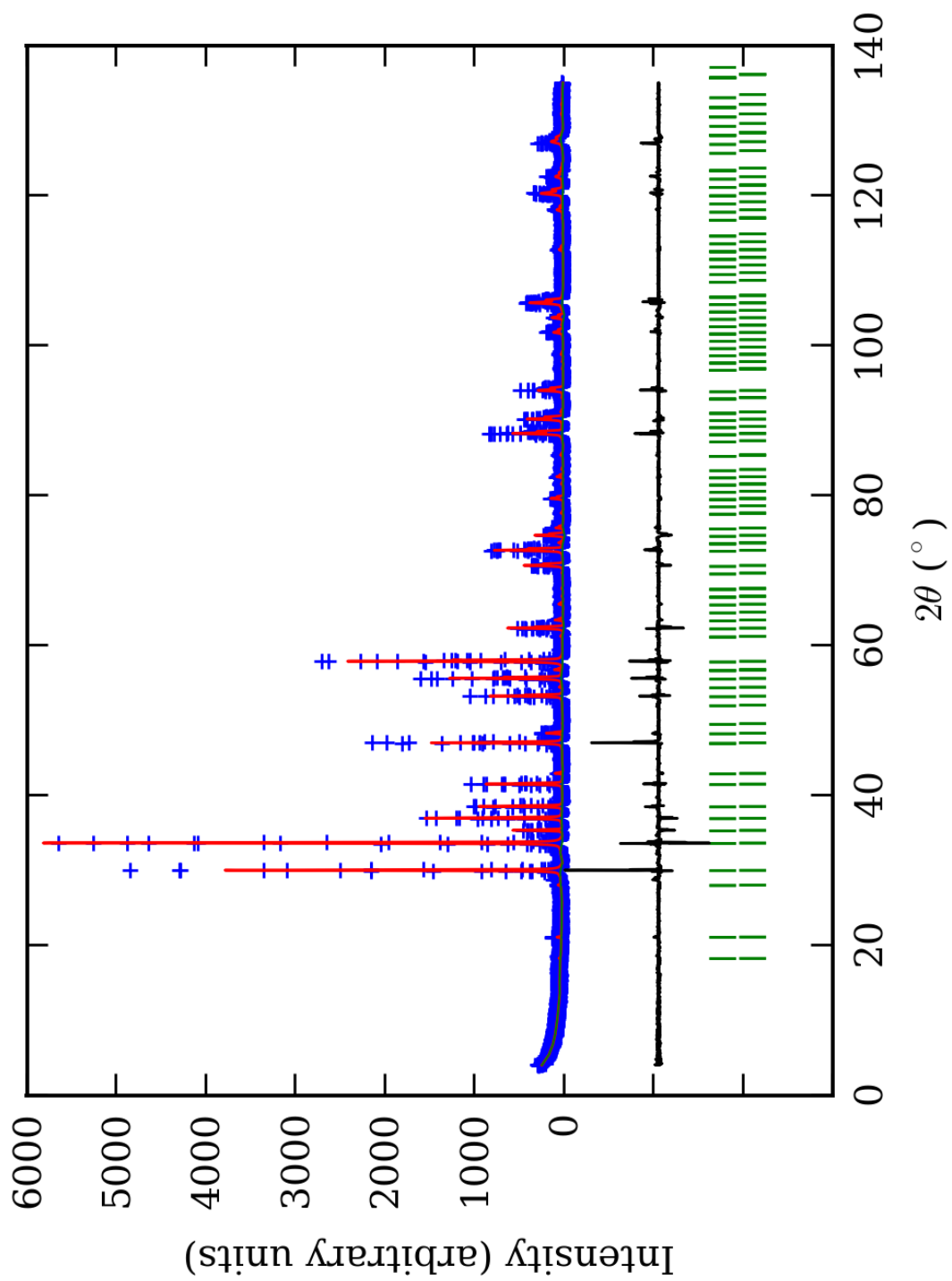
Uglovi		Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
O(1)-Si-O(2)	2 <sup>3</sup>	102,53(8)*	102,64(7)	101,6(2)	100,2(2)	100,1(2)	102,3(2)	103,1(2)
O(1)-Si-O(3)	4	113,05(4)	112,99(8)	113,5(2)	114,3(2)	114,3(2)	113,1(2)	112,8(3)
srednje O-Si-O <sup>2</sup>		109,54(5)	109,54(8)	109,5(2)	109,6(2)	109,6(2)	109,5(2)	109,6(3)
O(1)-Y-O(4)	6	91,46(5)	91,12(7)	91,7(2)	90,0(2)	91,6(2)	90,9(2)	91,2(2)
O(1)-Y-O(5)	6	88,54(5)	88,88(7)	88,3(2)	90,0(2)	88,4(2)	89,1(2)	88,8(2)
srednje O-Y-O <sup>2</sup>		90,00(5)	90,00(7)	90,0(2)	90,0(2)	90,0(2)	90,0(2)	90,0(2)
O(1)-X(2)-O(2)	2	67,20(6)	65,6(1)	65,8(1)	67,5(1)	65,0(1)	66,8(1)	66,6(1)
O(1)-X(2)-O(4)	4	69,84(4)	72,8(1)	71,3(1)	70,2(1)	71,9(1)	71,2(1)	71,4(2)
O(4)-X(2)-O(6)	4	76,28(6)	74,17(7)	75,6(1)	75,0(1)	75,1(1)	75,0(1)	75,1(2)
O(4)-X(2)-O(7)	2	70,27(6)	69,43(9)	70,2(1)	71,8(1)	70,9(1)	70,1(1)	69,6(1)
O(1)-X(2)-O(7)	4	91,61(4)	91,44(5)	91,0(1)	92,0(1)	90,6(1)	91,8(1)	91,7(2)
O(8)-X(2)-O(7)	2	111,66(6)	113,25(9)	112,1(2)	110,4(1)	111,7(1)	112,2(2)	112,7(2)
srednje O-X(2)-O <sup>2</sup>		80,51(5)	80,58(8)	80,4(1)	80,5(1)	80,3(1)	80,6(1)	80,6(2)

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

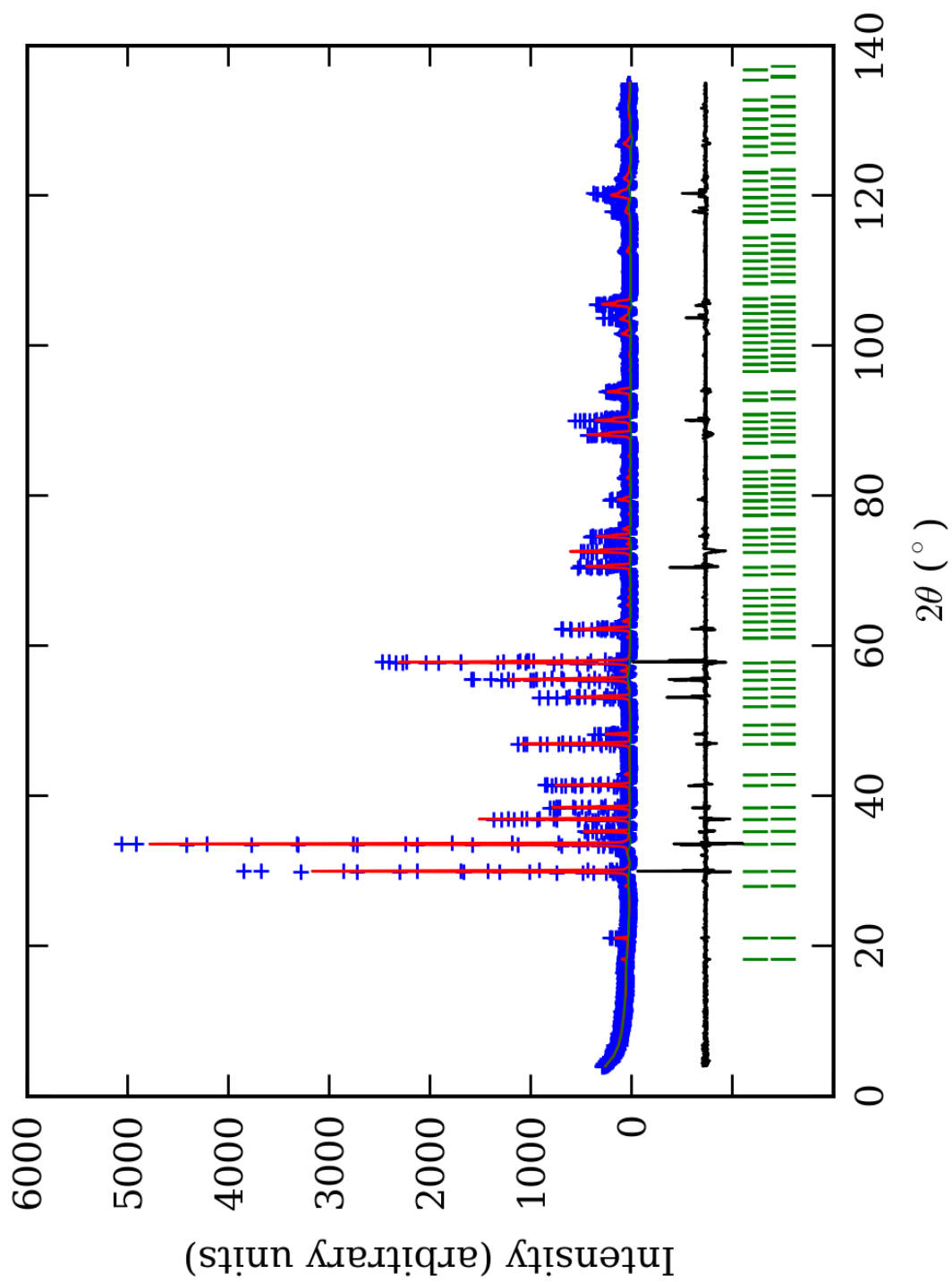
<sup>2</sup>-Ovaj rad

<sup>3</sup>-Učestalost pojavljivanja

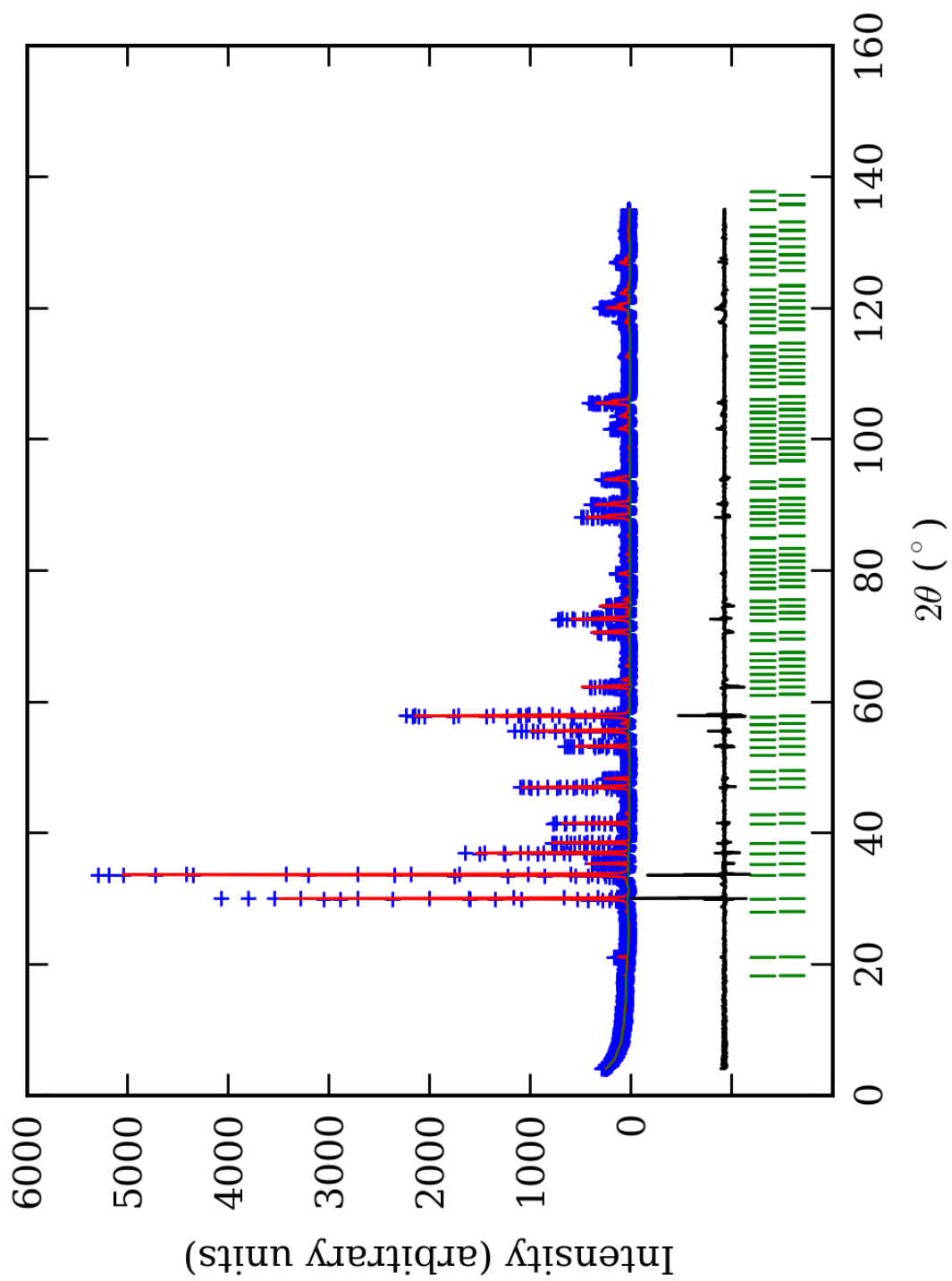
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



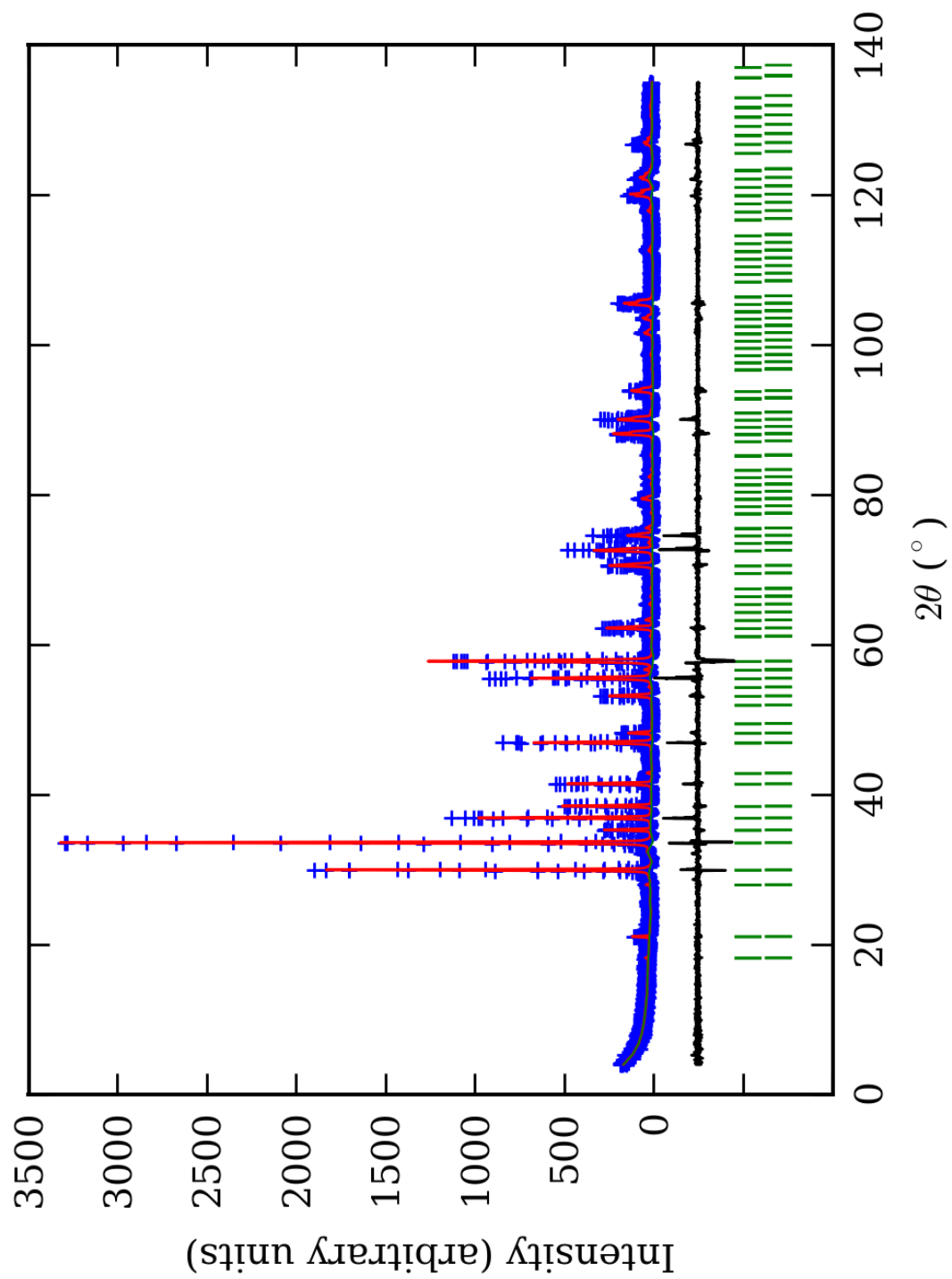
PRILOG 144. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u istim  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.



PRILOG 145. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u istim  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.

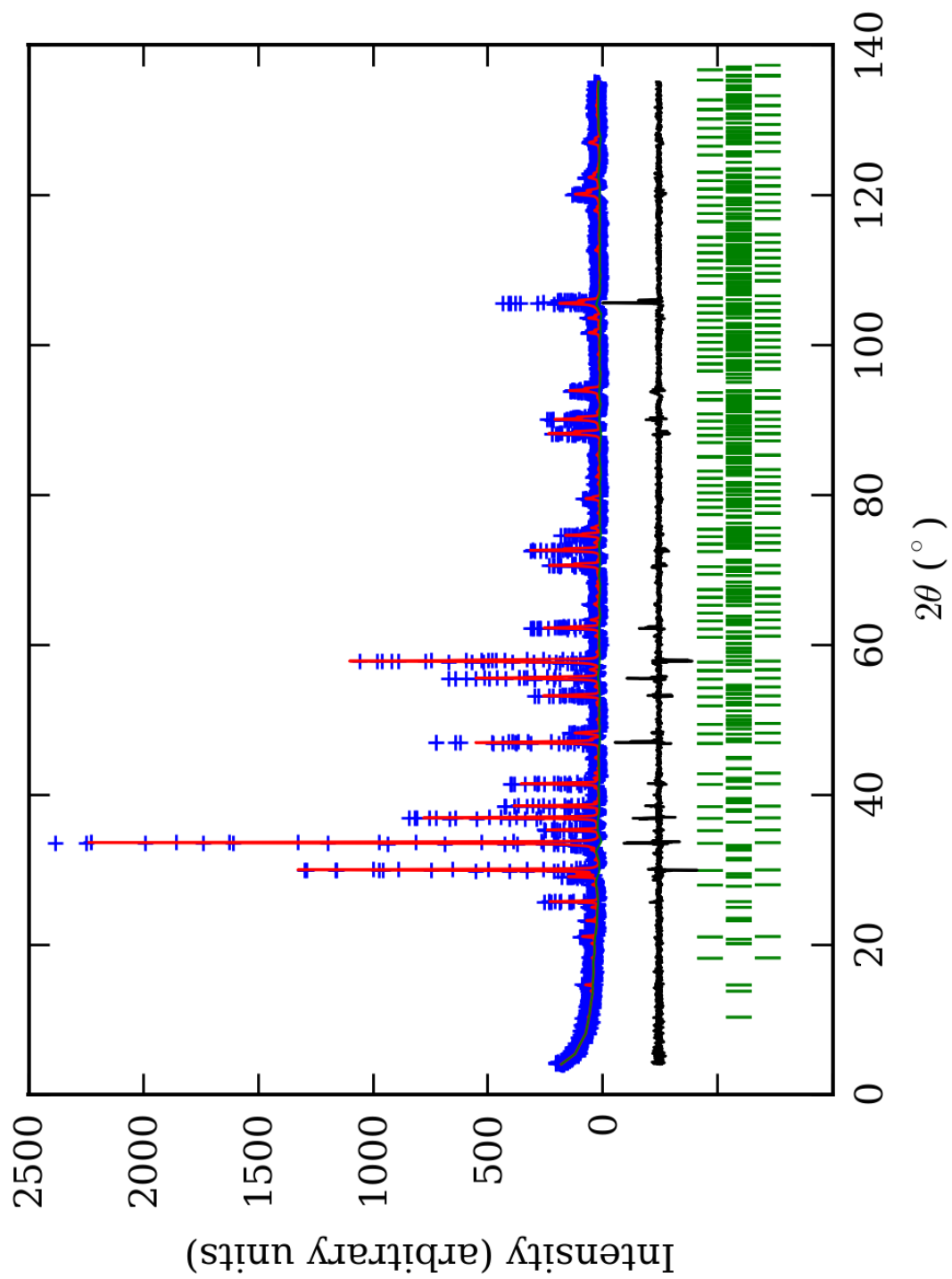


PRILOG 146. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u istim  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.



PRILOG 147. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u istim  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.





PRILOG 148. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u istim  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.

PRILOG 149. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u istim  $Ia\bar{3}d$  i  $Ia\bar{3}d$  p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Scor		2,3689	2,5360	2,2207	2,0883	1,6616
Izr. sadržaj faza (%)	1	86(5)*	74(7)	93(4)	54(6)	76(4)
	2	14(3)	26(5)	7(2)	46(5)	17(2)
Faktor skale	1	0,0000168(7)	0,000015(1)	0,0000193(6)	0,0000091(7)	0,0000084(3)
	2	0,0000028(5)	0,000005(1)	0,0000013(3)	0,0000075(7)	0,0000084(3)
Eta (p-v) ili m(p-vii)		0,5(1)	0,4(1)	0,16(8)	0,10(9)	0,35(9)
Ukupni temp. faktor		0,4(1)	0,5(1)	0,6(1)	0,7(1)	0,5(1)
Parametri polu-širine	U	0,041(7)	0,09(1)	0,014(6)	-0,004(6)	0,044(6)
	V	-0,020(9)	-0,07(2)	0,020(9)	0,02(1)	-0,031(9)
	W	0,014(3)	0,031(4)	0,014(3)	0,017(4)	0,028(3)
Preferentna orijent.		0,71(7)	0,38(6)	0,41(5)	-0,32(5)	0,36(4)
Parametri asimetrije	As 1	-0,02(6)	0,15(3)	0,04(6)	0,07(6)	0,04(3)
	As 2	0,02(1)	0,05(1)	0,038(9)	0,044(8)	0,023(6)
X parametar	1	-0,002(2)	-0,004(2)	0,003(2)	0,007(2)	0,000(2)
	2	0,013(3)	0,012(3)	0,022(4)	0,009(2)	0,012(2)
Nulta tačka		0,017(7)	0,042(5)	0,002(8)	0,02(1)	-0,027(6)
a <sub>0</sub>	1	11,9192(6)	11,9321(9)	11,9344(6)	11,9284(8)	11,9291(5)
	2	11,938(2)	11,951(2)	11,970(3)	11,9412(9)	11,954(1)
V <sub>0</sub>	1	1693,3(1)	1698,8(2)	1699,8(1)	1697,3(2)	1697,5(1)
	2	1701,5(5)	1707,1(5)	1715,0(7)	1703,0(2)	1708,3(3)
N-P+C		6429	6429	6429	6429	6406
R <sub>p</sub>		14,8	14,3	12,6	13,7	12,9
R <sub>wp</sub>		20,0	19,4	16,9	18,8	17,5
R <sub>exp</sub>		11,49	11,42	11,64	14,10	14,05
Konvencionalni R <sub>p</sub>		23,4	23,0	20,2	22,6	24,7
Konvencionalni R <sub>wp</sub>		26,5	25,9	22,6	25,6	26,6
Konvencionalni R <sub>exp</sub>		15,26	15,25	15,51	19,18	21,35
Chi2		3,03	2,88	2,12	1,78	1,55
Chi2 (Bragg contr.)		3,79	3,49	2,54	2,14	1,64
DW-stat.		0,9169	0,8681	1,1475	1,3064	1,4270
DW-exp.		1,9613	1,9613	1,9613	1,9613	1,9686
GoF		1,7	1,7	1,4	1,3	1,2
R <sub>B</sub>	1	<b>10,5</b>	<b>10,4</b>	<b>7,28</b>	<b>8,07</b>	<b>7,35</b>
	2	<b>8,12</b>	<b>8,93</b>	<b>7,01</b>	<b>8,26</b>	<b>7,12</b>
R <sub>F</sub>	1	<b>8,59</b>	<b>8,52</b>	<b>6,54</b>	<b>6,71</b>	<b>6,15</b>
	2	<b>7,38</b>	<b>7,80</b>	<b>6,82</b>	<b>7,16</b>	<b>6,76</b>
Srednja vrednost R <sub>B</sub>		<b>10,1</b>	<b>10,0</b>	<b>7,27</b>	<b>8,16</b>	<b>8,34<sup>1</sup></b>
Srednja vrednost R <sub>F</sub>		<b>8,40</b>	<b>8,33</b>	<b>6,56</b>	<b>6,92</b>	<b>7,05<sup>1</sup></b>

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj.  
Sve R vrednosti su izražene kao procenti

<sup>1</sup>-Sa skapolitom

PRILOG 150. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) faze 1 u Ia  $\bar{3}d$

p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,3689		2,5360		2,2207		2,0883		1,6616	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca	x	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Mn	x	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Al	x	0,000	0,138 (1)	0,000	0,097 (1)	0,000	0,097 (1)	0,000	0,116 (1)	0,000	0,097 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Fe	x	0,000	0,028 (1)	0,000	0,070 (1)	0,000	0,070 (1)	0,000	0,050 (1)	0,000	0,070 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Si	x	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
O	x	0,0400(6)*	1,000 (0)	0,0353(6)	1,000 (0)	0,0379(5)	1,000 (0)	0,0381(6)	1,000 (0)	0,0391(4)	1,000 (0)
	y	0,0463(5)		0,0456(6)		0,0438(4)		0,0473(6)		0,0476(4)	
	z	0,6568(6)		0,6533(6)		0,6560(4)		0,6537(6)		0,6534(4)	
Ca (%)		98		98		98		98		98	
Al (%)		83(1)		58(1)		58(1)		70(1)		58(1)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 151. Odabrana međuatomska rastojanja (u Å) faze 1 u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

Rastojanja		Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si-O(1)	4 <sup>3</sup>	<b>1,645(1)*</b>	<b>1,643(2)</b>	<b>1,613(3)</b>	<b>1,665(2)</b>	<b>1,616(2)</b>	<b>1,647(4)</b>	<b>1,643(3)</b>
O(1)-O(2)	2	2,567(2)	2,564(4)	2,498(3)	2,551(3)	2,475(3)	2,560(5)	2,569(3)
O(1)-O(3)	4	2,745(1)	2,739(3)	2,701(4)	2,799(3)	2,718(3)	2,752(5)	2,739(4)
srednje O-O		<b>2,686(1)</b>	<b>2,681(3)</b>	<b>2,633(4)</b>	<b>2,716(3)</b>	<b>2,637(3)</b>	<b>2,688(5)</b>	<b>2,682(4)</b>
Y-O(1)	6	<b>1,924(1)</b>	<b>2,024(2)</b>	<b>1,992(2)</b>	<b>1,954(2)</b>	<b>1,986(2)</b>	<b>1,971(4)</b>	<b>1,972(2)</b>
O(1)-O(4)	6	2,756(2)	2,890(3)	2,856(4)	2,765(3)	2,846(3)	2,808(5)	2,817(4)
O(1)-O(5)	6	2,686(2)	2,834(4)	2,777(3)	2,762(3)	2,771(3)	2,768(5)	2,760(3)
srednje O-O		<b>2,721(2)</b>	<b>2,862(4)</b>	<b>2,816(4)</b>	<b>2,764(3)</b>	<b>2,808(3)</b>	<b>2,788(5)</b>	<b>2,788(4)</b>
X(1)-O(4)	4	2,319(1)	2,366(2)	2,323(3)	2,299(2)	2,305(2)	2,329(4)	2,341(3)
X(2)-O(4)	4	2,490(1)	2,500(2)	2,504(2)	2,498(2)	2,529(2)	2,484(4)	2,482(2)
srednje X-O		<b>2,405(1)</b>	<b>2,433(2)</b>	<b>2,414(2)</b>	<b>2,398(2)</b>	<b>2,417(2)</b>	<b>2,406(4)</b>	<b>2,412(2)</b>
$\Delta(X-O)^2$		<b>0,171(1)</b>	<b>0,134(2)</b>	<b>0,181(2)</b>	<b>0,199(2)</b>	<b>0,224(2)</b>	<b>0,155(4)</b>	<b>0,141(2)</b>
O(1)-O(2)	2	2,567(2)	2,564(4)	2,498(3)	2,551(3)	2,475(3)	2,560(5)	2,569(3)
O(1)-O(4)	4	2,756(2)	2,890(3)	2,856(4)	2,765(3)	2,846(3)	2,808(5)	2,817(4)
O(4)-O(6)	4	2,973(2)	2,936(4)	2,936(4)	2,924(3)	2,952(3)	2,929(5)	2,941(4)
O(4)-O(7)	2	2,866(2)	2,847(4)	2,873(4)	2,932(3)	2,935(3)	2,752(5)	2,837(4)
O(1)-O(7)	4	3,450(1)	3,485(2)	3,441(4)	3,452(3)	3,439(3)	3,456(5)	3,462(4)
O(8)-O(7)	2	4,121(2)	4,175(3)	4,168(3)	4,101(3)	4,186(3)	4,119(5)	4,130(3)
srednje O-O		<b>3,101(2)</b>	<b>3,134(3)</b>	<b>3,112(4)</b>	<b>3,096(3)</b>	<b>3,119(3)</b>	<b>3,091(5)</b>	<b>3,108(4)</b>

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

<sup>2</sup>-Ovaj rad

<sup>3</sup>-Učestalost pojavljivanja

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 152. Odabrani međuatomski uglovi ( $u^\circ$ ) faze 1 u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

Uglovi		Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
O(1)-Si-O(2)	2 <sup>3</sup>	102,53(8)*	102,64(7)	101,4(2)	100,0(2)	100,0(2)	102,0(3)	102,8(2)
O(1)-Si-O(3)	4	113,05(4)	112,99(8)	113,6(3)	114,4(2)	114,4(2)	113,3(3)	112,9(3)
srednje O-Si-O <sup>2</sup>		<b>109,54(5)</b>	<b>109,54(8)</b>	<b>109,5(3)</b>	<b>109,6(2)</b>	<b>109,6(2)</b>	<b>109,5(3)</b>	<b>109,5(3)</b>
O(1)-Y-O(4)	6	91,46(5)	91,12(7)	91,6(2)	90,1(2)	91,5(2)	90,8(3)	91,2(2)
O(1)-Y-O(5)	6	88,54(5)	88,88(7)	88,4(2)	89,9(2)	88,5(2)	89,2(3)	88,8(2)
srednje O-Y-O <sup>2</sup>		<b>90,00(5)</b>	<b>90,00(7)</b>	<b>90,0(2)</b>	<b>90,0(2)</b>	<b>90,0(2)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(2)</b>
O(1)-X(2)-O(2)	2	67,20(6)	65,6(1)	65,0(2)	67,4(1)	65,0(1)	66,7(2)	66,5(1)
O(1)-X(2)-O(4)	4	69,84(4)	72,8(1)	72,4(2)	70,3(1)	72,0(1)	71,3(2)	71,4(2)
O(4)-X(2)-O(6)	4	76,28(6)	74,17(7)	74,8(2)	75,0(1)	75,1(1)	74,9(2)	75,1(2)
O(4)-X(2)-O(7)	2	70,27(6)	69,43(9)	70,0(1)	71,9(1)	70,9(1)	70,3(2)	69,7(1)
O(1)-X(2)-O(7)	4	91,61(4)	91,44(5)	90,8(2)	92,0(1)	90,6(1)	91,7(2)	91,7(2)
O(8)-X(2)-O(7)	2	111,66(6)	113,25(9)	112,6(2)	110,3(2)	111,7(1)	112,0(2)	112,6(2)
srednje O-X(2)-O <sup>2</sup>		<b>80,51(5)</b>	<b>80,58(8)</b>	<b>80,4(2)</b>	<b>80,5(1)</b>	<b>80,3(1)</b>	<b>80,5(2)</b>	<b>80,6(2)</b>

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

<sup>2</sup>-Ovaj rad

<sup>3</sup>-Učestalost pojavljivanja

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 153. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) faze 2 u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)		
Scor	2,3689		2,5360		2,2207		2,0883		1,6616		
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	
Ca	x	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Mn	x	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)	0,125	0,005 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Al	x	0,000	0,075 (1)	0,000	0,110 (1)	0,000	0,100 (1)	0,000	0,077 (3)	0,000	0,096 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Fe	x	0,000	0,092 (1)	0,000	0,057 (1)	0,000	0,067 (1)	0,000	0,090 (3)	0,000	0,070 (1)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,000		0,000		0,000		0,000			
Si	x	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)	0,375	0,250 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
O	x	0,0387(9)*	1,000 (0)	0,0374(9)	1,000 (0)	0,0384(8)	1,000 (0)	0,0388(7)	1,000 (0)	0,0390(6)	1,000 (0)
	y	0,0468(9)		0,0465(9)		0,0464(8)		0,0474(7)		0,0473(6)	
	z	0,6525(8)		0,6523(8)		0,6531(7)		0,6532(6)		0,6532(5)	
Ca (%)	98		98		98		98		98		
Al (%)	45(1)		66(1)		60(1)		46(2)		58(1)		

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 154. Odabrana međuatomska rastojanja ( $u \text{ \AA}$ ) faze 2 u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

Rastojanja		Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si-O(1)	4 <sup>3</sup>	1,645(1)*	1,643(2)	1,648(4)	1,658(4)	1,651(4)	1,648(4)	1,648(4)
O(1)-O(2)	2	2,567(2)	2,564(4)	2,572(5)	2,571(5)	2,570(5)	2,574(5)	2,576(5)
O(1)-O(3)	4	2,745(1)	2,739(3)	2,748(6)	2,773(6)	2,757(6)	2,748(5)	2,747(6)
srednje O-O		2,686(1)	2,681(3)	2,689(6)	2,706(6)	2,695(6)	2,690(5)	2,690(6)
Y-O(1)	6	1,924(1)	2,024(2)	1,956(4)	1,963(4)	1,970(4)	1,970(4)	1,973(4)
O(1)-O(4)	6	2,756(2)	2,890(3)	2,802(6)	2,794(6)	2,815(6)	2,813(5)	2,819(6)
O(1)-O(5)	6	2,686(2)	2,834(4)	2,731(6)	2,758(6)	2,758(6)	2,760(5)	2,760(6)
srednje O-O		2,721(2)	2,862(4)	2,766(6)	2,776(6)	2,786(6)	2,786(5)	2,790(6)
X(1)-O(4)	4	2,319(1)	2,366(2)	2,339(5)	2,328(5)	2,340(5)	2,342(4)	2,346(5)
X(2)-O(4)	4	2,490(1)	2,500(2)	2,503(5)	2,495(5)	2,503(5)	2,486(4)	2,490(5)
srednje X-O		2,405(1)	2,433(2)	2,421(5)	2,412(5)	2,422(5)	2,414(4)	2,418(5)
$\Delta(X-O)^2$		0,171(1)	0,134(2)	0,164(5)	0,167(5)	0,163(5)	0,144(4)	0,144(5)
O(1)-O(2)	2	2,567(2)	2,564(4)	2,572(5)	2,571(5)	2,570(5)	2,574(5)	2,576(5)
O(1)-O(4)	4	2,756(2)	2,890(3)	2,802(6)	2,794(6)	2,815(6)	2,813(5)	2,819(6)
O(4)-O(6)	4	2,973(2)	2,936(4)	2,977(6)	2,946(6)	2,963(6)	2,946(5)	2,953(6)
O(4)-O(7)	2	2,866(2)	2,847(4)	2,870(7)	2,773(7)	2,877(7)	2,847(5)	2,848(7)
O(1)-O(7)	4	3,450(1)	3,485(2)	3,471(7)	3,466(7)	3,473(7)	3,466(5)	3,471(7)
O(8)-O(7)	2	4,121(2)	4,175(3)	4,153(6)	4,126(6)	4,152(6)	4,132(5)	4,141(6)
srednje O-O		3,101(2)	3,134(3)	3,122(6)	3,098(6)	3,122(6)	3,111(5)	3,117(6)

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

<sup>2</sup>-Ovaj rad

<sup>3</sup>-Učestalost pojavljivanja

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 155. Odabrani međuatomske uglovi ( $u^\circ$ ) faze 2 u Ia  $\bar{3}d$  p.g.

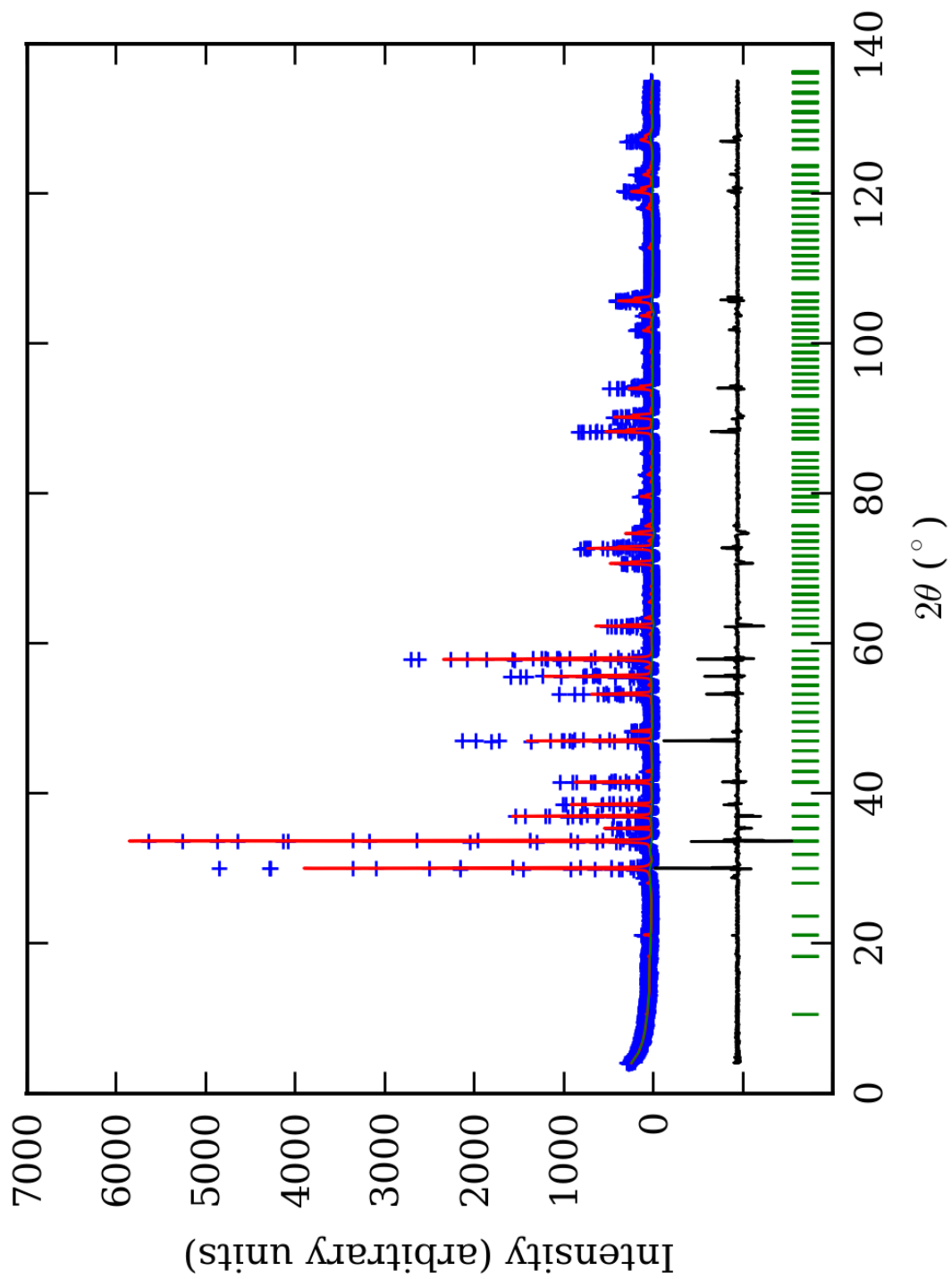
Uglovi		Gr <sup>1</sup>	An <sup>1</sup>	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
O(1)-Si-O(2)	2 <sup>3</sup>	102,53(8)*	102,64(7)	102,6(4)	101,7(4)	102,2(4)	102,7(3)	102,8(4)
O(1)-Si-O(3)	4	113,05(4)	112,99(8)	113,0(4)	113,5(4)	113,2(4)	113,0(3)	112,9(4)
srednje O-Si-O <sup>2</sup>		109,54(5)	109,54(8)	109,5(4)	109,6(4)	109,5(4)	109,6(3)	109,5(4)
O(1)-Y-O(4)	6	91,46(5)	91,12(7)	91,5(3)	90,7(3)	91,2(3)	91,1(3)	91,2(3)
O(1)-Y-O(5)	6	88,54(5)	88,88(7)	88,5(3)	89,3(3)	88,8(3)	88,9(3)	88,8(3)
srednje O-Y-O <sup>2</sup>		90,00(5)	90,00(7)	90,0(3)	90,0(3)	90,0(3)	90,0(3)	90,0(3)
O(1)-X(2)-O(2)	2	67,20(6)	65,6(1)	66,7(2)	67,0(2)	66,6(2)	66,7(2)	66,6(2)
O(1)-X(2)-O(4)	4	69,84(4)	72,8(1)	70,6(2)	70,7(2)	71,0(2)	71,2(2)	71,2(2)
O(4)-X(2)-O(6)	4	76,28(6)	74,17(7)	75,8(2)	75,2(2)	75,4(2)	75,1(2)	75,2(2)
O(4)-X(2)-O(7)	2	70,27(6)	69,43(9)	70,0(2)	70,7(2)	70,2(2)	69,9(2)	69,8(2)
O(1)-X(2)-O(7)	4	91,61(4)	91,44(5)	91,5(3)	91,8(3)	91,6(3)	91,7(2)	91,7(3)
O(8)-X(2)-O(7)	2	111,66(6)	113,25(9)	112,1(3)	111,5(3)	112,1(3)	112,4(2)	112,5(3)
srednje O-X(2)-O <sup>2</sup>		80,51(5)	80,58(8)	80,5(2)	80,5(2)	80,5(2)	80,6(2)	80,6(2)

<sup>1</sup>-Novak i Gibbs (1971)

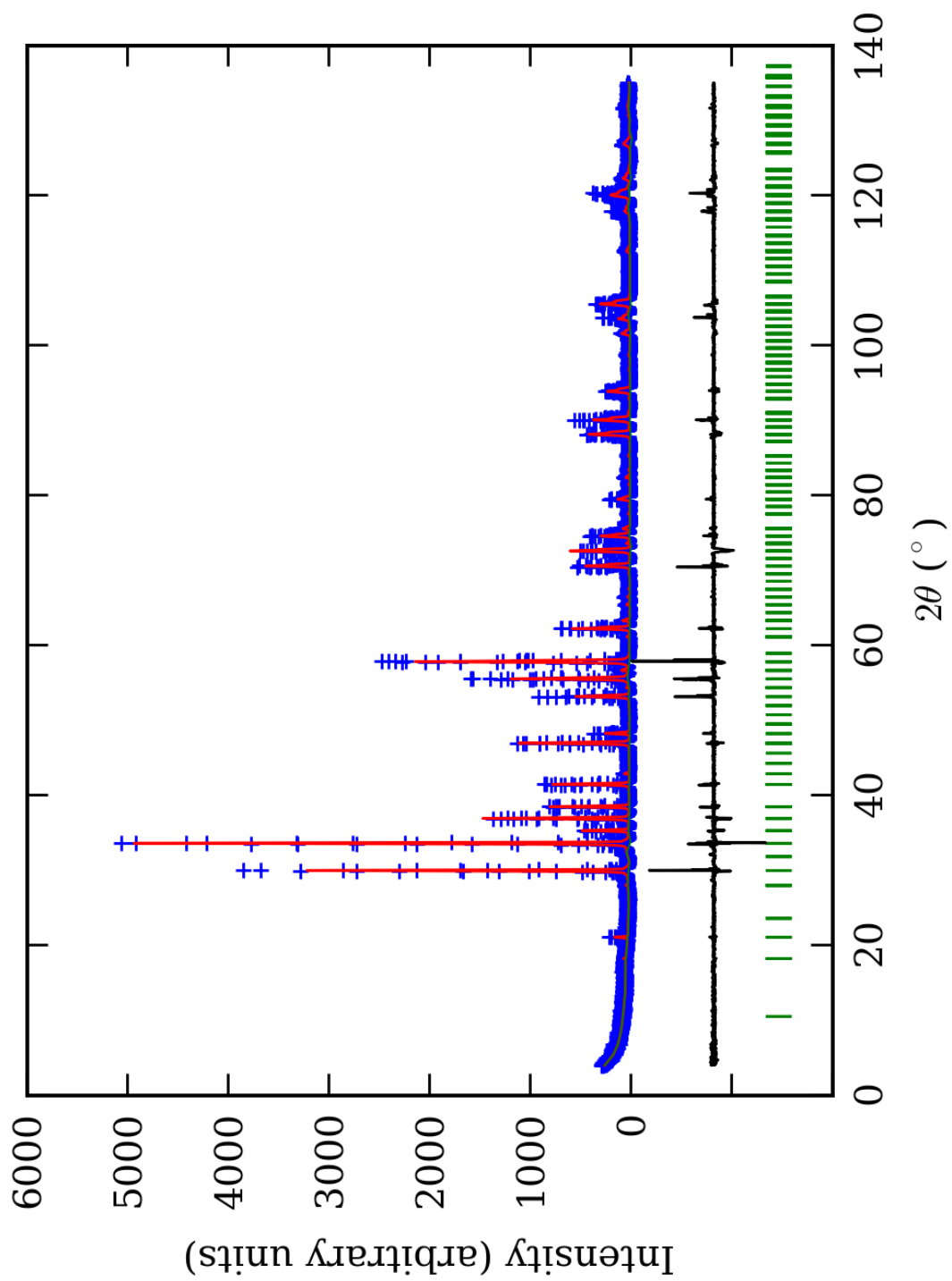
<sup>2</sup>-Ovaj rad

<sup>3</sup>-Učestalost pojavljivanja

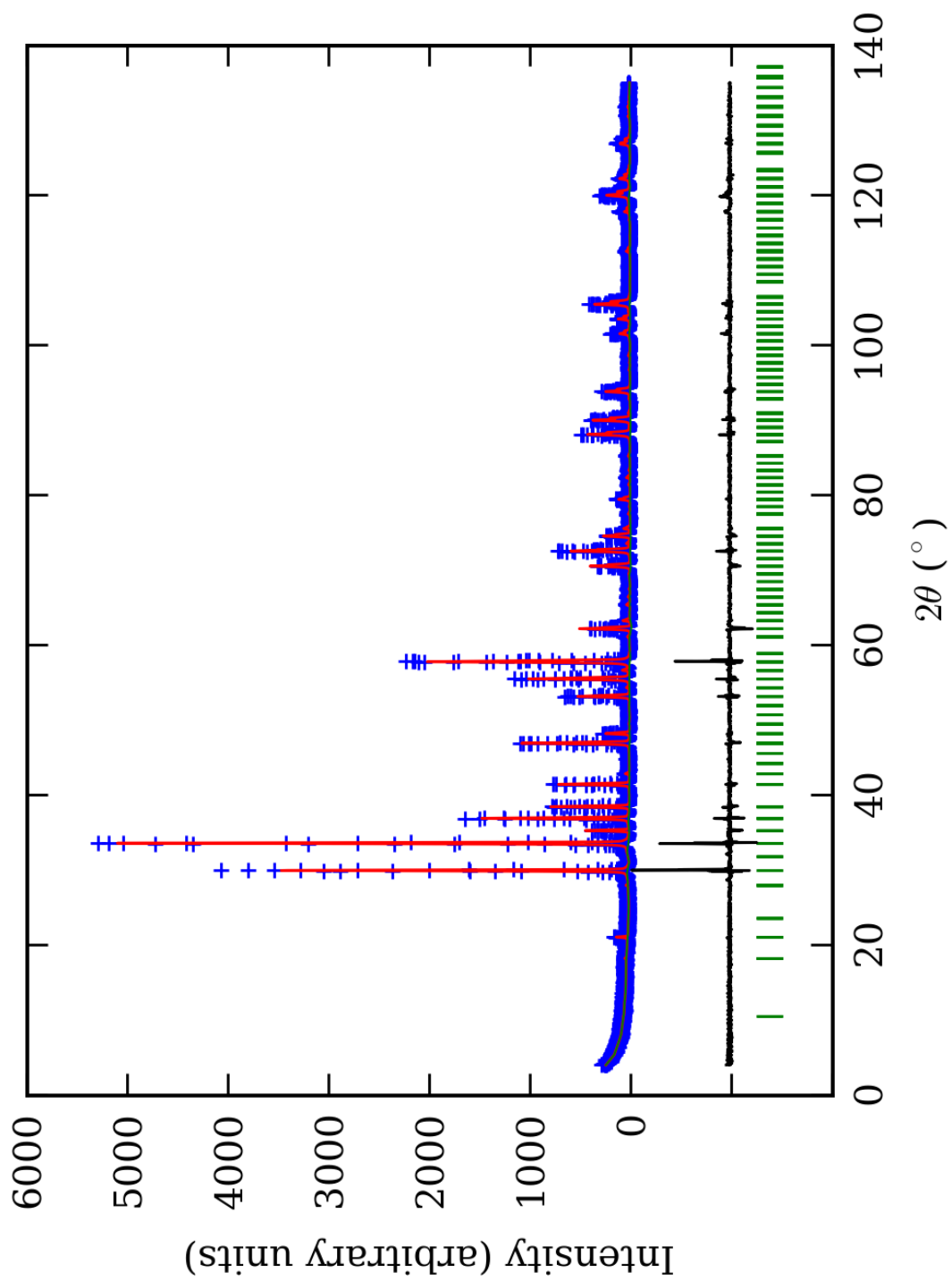
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



PRILOG 156. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $R\bar{3}c$  p.g.

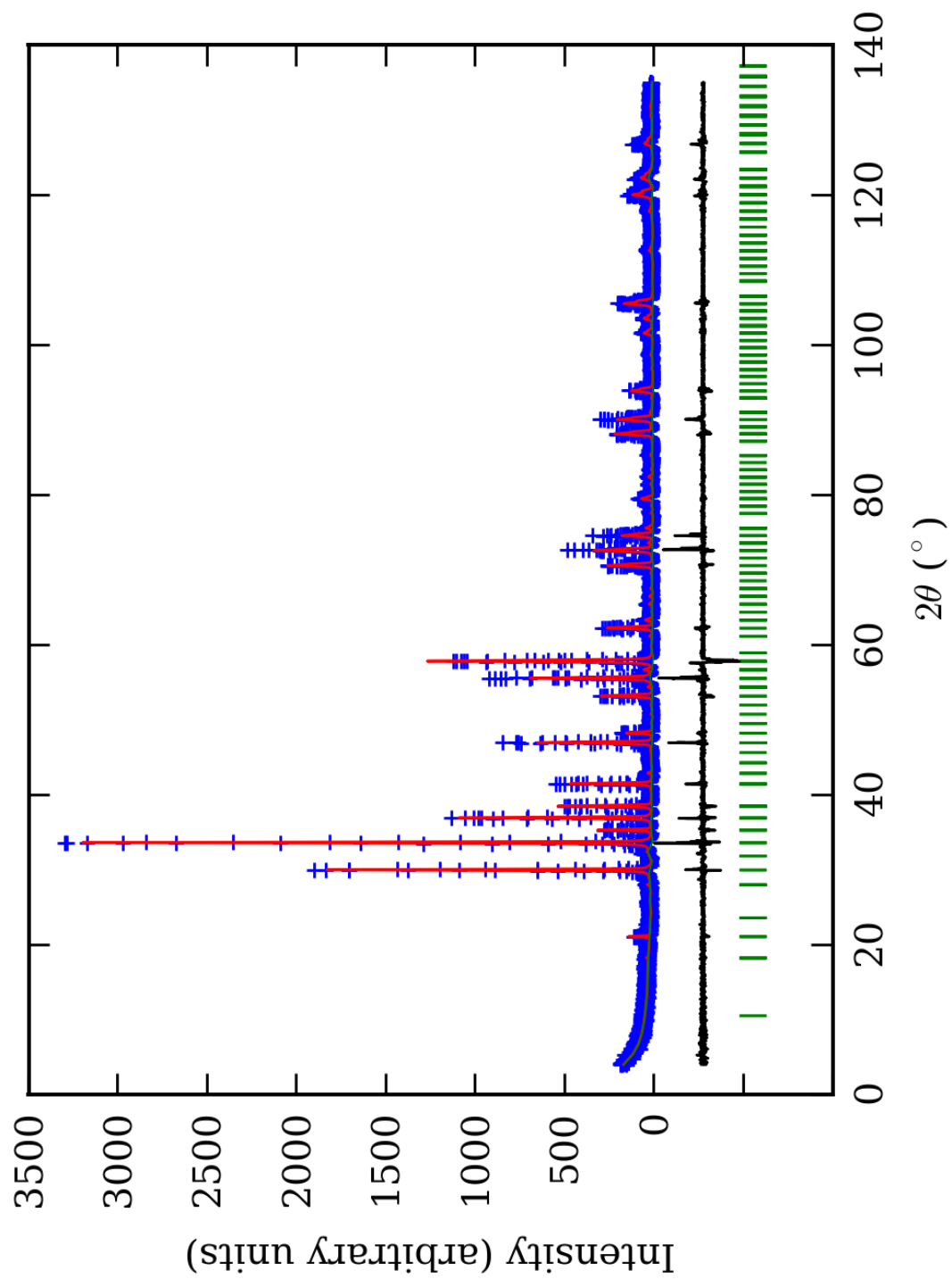


PRILOG 157. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $R\bar{3}c$  p.g.

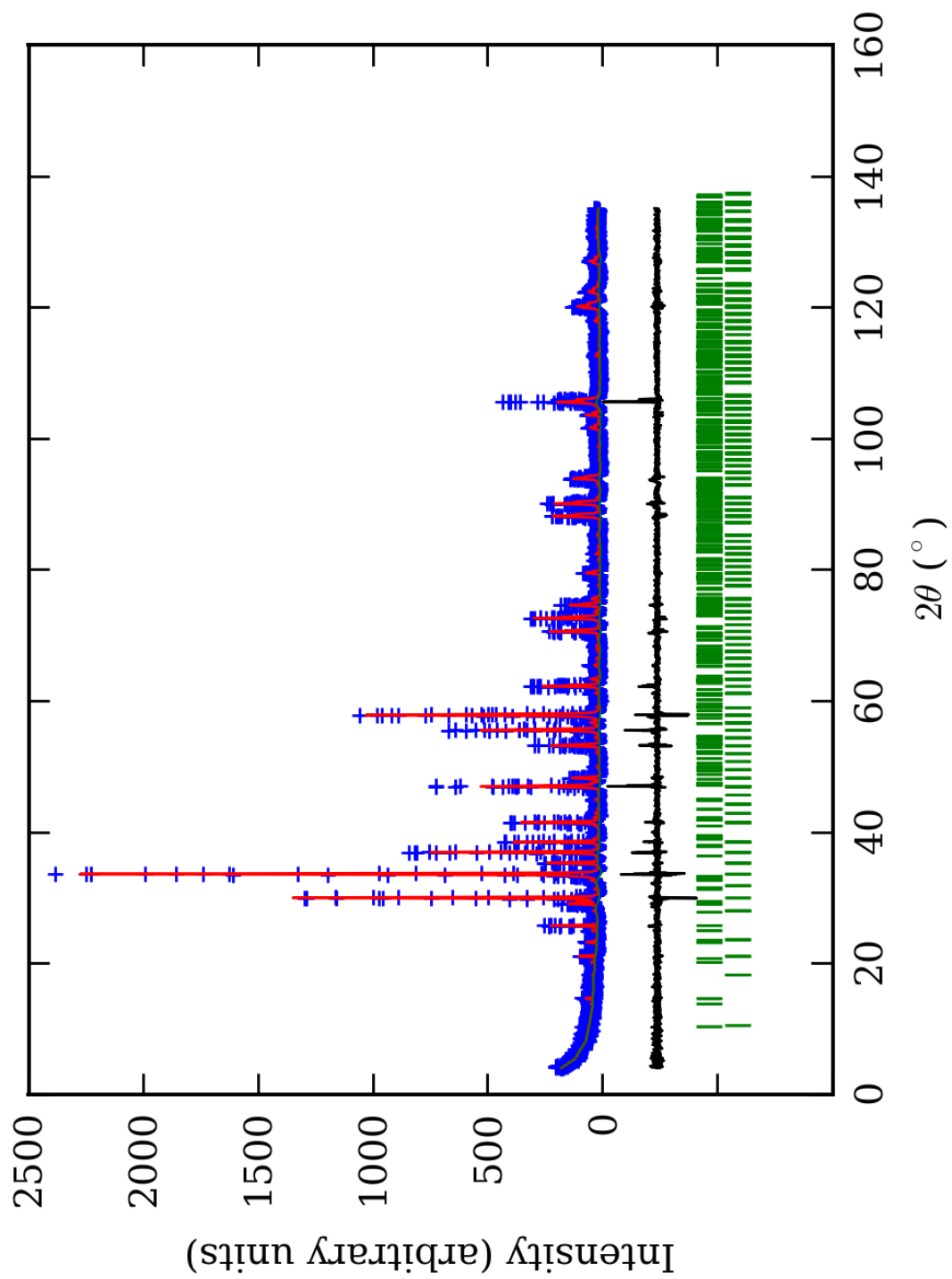


PRILOG 158. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $R\bar{3}c$  p.g.





PRILOG 159. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u  $R\bar{3}c$  p.g.



PRILOG 160. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $R\bar{3}c$  p.g.

PRILOG 161. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u  $R\bar{3}c$  p.g. Izračunata je i četverostruka vrednost odnosa  $c/a$ , kao i ugao  $\alpha$  ( $^\circ$ ).

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,4445	2,5216	2,2050	1,9755	1,7076	
Faktor skale	0,0000060(3)*	0,0000075(4)	0,0000070(3)	0,000013(2)	0,0000041(1)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,32(9)	0,32(9)	0,08(7)	0,28(8)	0,13(8)	
Ukupni temp. faktor	0,3(1)	0,4(1)	0,50(8)	0,8(1)	0,51(8)	
Parametri polu-širine	U	0,020(7)	0,06(1)	-0,009(5)	0,03(1)	0,012(5)
	V	0,004(9)	-0,03(1)	0,031(8)	0,03(1)	-0,018(8)
	W	0,010(2)	0,026(4)	0,014(2)	0,013(4)	0,031(3)
Preferentna orijent.	0,60(5)	0,36(5)	0,43(4)	-0,68(7)	0,25(3)	
Parametri asimetrije	As 1	0,03(6)	0,18(4)	0,07(5)	0,08(6)	0,04(4)
	As 2	0,048(8)	0,066(7)	0,053(7)	0,044(7)	0,038(6)
X parametar	0,004(2)	0,002(2)	0,009(1)	0,003(2)	0,008(2)	
Nulta tačka	0,011(8)	0,032(8)	-0,001(7)	0,02(1)	-0,043(6)	
a <sub>0</sub>	16,852(2)	16,867(2)	16,883(1)	16,873(2)	16,8611(9)	
c <sub>0</sub>	10,326(1)	10,341(2)	10,3304(8)	10,338(2)	10,3399(7)	
V <sub>0</sub>	2539,6(4)	2547,7(5)	2549,9(3)	2548,9(6)	2545,8(3)	
N-P+C	6420	6420	6420	6420	6397	
R <sub>p</sub>	15,2	14,5	12,8	14,0	13,1	
R <sub>wp</sub>	20,4	19,6	17,3	19,0	17,7	
R <sub>exp</sub>	11,48	11,42	11,63	14,09	14,04	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	23,7	23,0	20,2	22,8	25,1	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	26,9	26,0	22,9	25,7	26,9	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,14	15,13	15,38	19,12	21,35	
Chi2	3,17	2,95	2,22	1,81	1,59	
Chi2 (Bragg contr.)	3,65	3,30	2,49	2,03	1,67	
DW-stat.	0,8168	0,8498	1,1015	1,2918	1,3967	
DW-exp.	1,9642	1,9642	1,9642	1,9642	1,9715	
GoF	1,8	1,7	1,5	1,3	1,2	
R <sub>B</sub>	<b>10,1</b>	<b>9,84</b>	<b>7,46</b>	<b>8,07</b>	<b>6,92</b>	
R <sub>F</sub>	<b>8,17</b>	<b>8,15</b>	<b>6,38</b>	<b>7,41</b>	<b>6,94</b>	
4 × c <sub>0</sub> /a <sub>0</sub>	2,45098	2,45236	2,44753	2,45078	2,45296	
$\alpha$	59,972	59,946	60,035	59,976	59,936	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 162. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u  $R\bar{3}c$  p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,4445		2,5216		2,2050		1,9755		1,7076	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,6239(6)*	0,49 (0)	0,6248(6)	0,49 (0)	0,6258(5)	0,49 (0)	0,6237(4)	0,49 (0)	0,6239(4)	0,49 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca2	x	0,1274(6)	0,49 (0)	0,1228(6)	0,49 (0)	0,1236(6)	0,49 (0)	0,1213(5)	0,49 (0)	0,1235(5)	0,49 (0)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Al1	x	0,000	0,089 (2)	0,000	0,10 (1)	0,000	0,091 (4)	0,000	0,102 (4)	0,000	0,098 (8)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,077 (2)	0,000	0,06 (1)	0,000	0,076 (4)	0,000	0,065 (4)	0,000	0,068 (8)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,500	0,37 (1)	0,500	0,31 (3)	0,500	0,32 (2)	0,500	0,27 (1)	0,500	0,28 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe2	x	0,500	0,13 (1)	0,500	0,19 (3)	0,500	0,18 (2)	0,500	0,23 (1)	0,500	0,22 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Si	x	0,8338(7)	1,000 (0)	0,8328(7)	1,000 (0)	0,8334(6)	1,000 (0)	0,8316(6)	1,000 (0)	0,8325(5)	1,000 (0)
	y	0,0395(7)		0,0427(7)		0,0427(6)		0,0437(5)		0,0418(5)	
	z	0,4174(9)		0,418(1)		0,4183(8)		0,4185(8)		0,4180(7)	
O1	x	0,2051(8)	1,000 (0)	0,2096(8)	1,000 (0)	0,2087(7)	1,000 (0)	0,2091(6)	1,000 (0)	0,2077(5)	1,000 (0)
	y	0,4069(7)		0,4087(7)		0,4088(6)		0,4092(6)		0,4078(5)	
	z	0,493(1)		0,490(1)		0,4920(9)		0,4898(8)		0,4923(7)	
O2	x	0,7278(6)	1,000 (0)	0,7268(7)	1,000 (0)	0,7291(6)	1,000 (0)	0,7274(5)	1,000 (0)	0,7276(5)	1,000 (0)
	y	0,9642(7)		0,9633(7)		0,9643(6)		0,9643(5)		0,9646(5)	
	z	0,379(1)		0,380(1)		0,3815(9)		0,3773(8)		0,3771(7)	
O3	x	0,8230(8)	1,000 (0)	0,8226(8)	1,000 (0)	0,8227(7)	1,000 (0)	0,8236(6)	1,000 (0)	0,8239(5)	1,000 (0)
	y	0,0624(7)		0,0610(7)		0,0611(7)		0,0610(6)		0,0612(5)	
	z	0,5678(8)		0,5730(9)		0,5700(7)		0,5726(7)		0,5716(6)	
O4	x	0,9087(7)	1,000 (0)	0,9077(7)	1,000 (0)	0,9071(6)	1,000 (0)	0,9056(6)	1,000 (0)	0,9064(5)	1,000 (0)
	y	0,9015(8)		0,8998(6)		0,8985(5)		0,8977(5)		0,8996(4)	
	z	0,8906(9)		0,894(1)		0,8945(9)		0,8959(8)		0,8938(7)	
Ca1 (%)	98	98	98	98	98	98	98	98	98	98	98
Ca2 (%)	98		98		98		98		98		
Al1 (%)	53(1)	64	60(6)	61	55(2)	60	61(2)	58	59(5)	58	
Al2 (%)	74(2)	(2)	62(6)	(6)	64(4)	(3)	54(2)	(2)	56(6)	(6)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 163. Odabrana međuatomska rastojanja (u Å) u  $R\bar{3}c$  p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si-O(1)	1*	1,645(6) <sup>1</sup>	1,659(6)	1,636(6)	1,638(6)	1,643(6)
Si-O(2)	1	1,641(5)	1,657(5)	1,633(5)	1,647(5)	1,643(5)
Si-O(3)	1	1,632(6)	1,658(6)	1,625(5)	1,637(5)	1,643(6)
Si-O(4)	1	1,629(8)	1,657(8)	1,630(8)	1,653(8)	1,643(8)
sr. vr. Si-O		<b>1,637(6)</b>	<b>1,658(6)</b>	<b>1,631(6)</b>	<b>1,644(6)</b>	<b>1,643(6)</b>
O(1)-O(2)	1	2,700(5)	2,783(5)	2,743(5)	2,751(5)	2,730(5)
O(1)-O(3)	1	2,699(5)	2,813(6)	2,753(5)	2,800(5)	2,763(6)
O(1)-O(4)	1	2,554(8)	2,547(7)	2,520(7)	2,521(7)	2,546(7)
O(2)-O(3)	1	2,544(5)	2,574(6)	2,525(5)	2,593(5)	2,586(6)
O(2)-O(4)	1	2,761(7)	2,757(7)	2,713(7)	2,722(7)	2,735(7)
O(3)-O(4)	1	2,764(7)	2,754(7)	2,714(7)	2,701(7)	2,726(7)
sr. vr. O-O		<b>2,670(6)</b>	<b>2,705(6)</b>	<b>2,661(6)</b>	<b>2,681(6)</b>	<b>2,681(6)</b>
Y(1)-O(4)	6	<b>1,961(3)</b>	<b>1,963(3)</b>	<b>1,974(3)</b>	<b>1,981(3)</b>	<b>1,972(3)</b>
O(4)-O(4)	6	2,776(6)	2,819(6)	2,851(6)	2,881(6)	2,838(6)
O(4)-O(4)	6	2,770(6)	2,734(6)	2,731(6)	2,720(6)	2,740(6)
sr. vr. O-O		<b>2,773(6)</b>	<b>2,776(6)</b>	<b>2,791(6)</b>	<b>2,800(6)</b>	<b>2,789(6)</b>
Y(2)-O(1)	2	1,969(4)	1,956(4)	1,977(4)	1,962(4)	1,972(4)
Y(2)-O(2)	2	1,968(6)	1,962(6)	1,979(6)	1,969(6)	1,971(6)
Y(2)-O(3)	2	1,963(3)	1,956(4)	1,971(3)	1,964(3)	1,967(4)
sr. vr. Y(2)-O		<b>1,967(4)</b>	<b>1,958(5)</b>	<b>1,976(4)</b>	<b>1,965(4)</b>	<b>1,970(5)</b>
sr. vr. Y-O		<b>1,964(4)</b>	<b>1,960(4)</b>	<b>1,975(4)</b>	<b>1,973(4)</b>	<b>1,971(4)</b>
O(1)-O(2)	2	2,833(8)	2,782(8)	2,822(8)	2,822(8)	2,829(8)
O(1)-O(2)	2	2,733(7)	2,759(7)	2,773(7)	2,736(7)	2,747(7)
O(1)-O(3)	2	2,713(5)	2,783(5)	2,780(5)	2,796(5)	2,775(5)
O(1)-O(3)	2	2,846(5)	2,749(6)	2,804(5)	2,757(5)	2,796(6)
O(2)-O(3)	2	2,755(7)	2,757(7)	2,753(7)	2,769(7)	2,768(7)
O(2)-O(3)	2	2,804(7)	2,783(7)	2,833(7)	2,793(7)	2,802(7)
sr. vr. O-O		<b>2,781(6)</b>	<b>2,769(7)</b>	<b>2,794(6)</b>	<b>2,779(6)</b>	<b>2,786(7)</b>
sr. vr. O-O		<b>2,777(6)</b>	<b>2,772(6)</b>	<b>2,792(6)</b>	<b>2,790(6)</b>	<b>2,788(6)</b>
X(1)-O(1)	2	2,503(5)	2,495(5)	2,513(5)	2,492(5)	2,484(5)
X(1)-O(2)	2	2,500(6)	2,496(6)	2,510(6)	2,492(6)	2,487(6)
X(1)-O(2)	2	2,328(4)	2,312(4)	2,318(4)	2,340(4)	2,343(4)
X(1)-O(3)	2	2,332(4)	2,319(4)	2,321(4)	2,336(4)	2,339(4)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,416(5)</b>	<b>2,406(5)</b>	<b>2,416(4)</b>	<b>2,415(5)</b>	<b>2,413(5)</b>
O(1)-O(1)	1	2,843(6)	2,935(6)	2,904(6)	2,942(6)	2,876(6)
O(1)-O(2)	2	4,169(8)	4,105(8)	4,158(8)	4,119(8)	4,129(8)
O(1)-O(2)	2	2,833(5)	2,782(5)	2,822(5)	2,822(5)	2,829(5)
O(1)-O(2)	2	3,474(6)	3,466(6)	3,436(6)	3,503(6)	3,487(6)
O(1)-O(3)	2	2,996(8)	2,914(8)	2,930(8)	2,920(8)	2,933(8)
O(2)-O(2)	1	2,856(6)	2,904(6)	2,911(6)	2,831(6)	2,824(6)
O(2)-O(2)	2	2,936(9)	2,926(9)	2,960(9)	2,933(9)	2,930(9)
O(2)-O(3)	2	3,432(8)	3,472(8)	3,470(8)	3,464(8)	3,458(8)
O(2)-O(3)	2	2,804(5)	2,783(8)	2,833(5)	2,793(5)	2,802(5)
O(2)-O(3)	2	2,544(5)	2,574(7)	2,525(5)	2,593(5)	2,586(7)
sr. vr. O-O		<b>3,115(7)</b>	<b>3,105(7)</b>	<b>3,116(7)</b>	<b>3,115(7)</b>	<b>3,112(7)</b>
X(2)-O(1)	2	2,334(4)	2,317(5)	2,324(5)	2,330(5)	2,340(5)
X(2)-O(3)	2	2,495(5)	2,492(5)	2,506(5)	2,499(5)	2,484(5)
X(2)-O(4)	2	2,337(5)	2,317(5)	2,326(5)	2,329(5)	2,338(5)
X(2)-O(4)	2	2,499(5)	2,489(5)	2,514(5)	2,499(5)	2,487(5)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,416(5)</b>	<b>2,404(5)</b>	<b>2,418(5)</b>	<b>2,414(5)</b>	<b>2,412(5)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,416(5)</b>	<b>2,405(5)</b>	<b>2,417(5)</b>	<b>2,414(5)</b>	<b>2,412(5)</b>
O(1)-O(1)	1	4,062(6)	3,919(6)	3,963(6)	3,933(6)	3,989(6)
O(1)-O(3)	2	2,846(5)	2,749(6)	2,804(5)	2,757(5)	2,796(6)
O(1)-O(3)	2	2,996(6)	2,914(6)	2,930(6)	2,920(6)	2,933(6)
O(1)-O(4)	2	2,554(7)	2,547(7)	2,520(7)	2,521(7)	2,546(7)

<b>O(1)-O(4)</b>	<b>2</b>	3,451(7)	3,445(7)	3,461(7)	3,438(7)	3,451(7)
<b>O(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	4,180(5)	4,071(6)	4,126(5)	4,078(5)	4,099(6)
<b>O(3)-O(4)</b>	<b>2</b>	2,881(8)	2,873(8)	2,883(8)	2,845(8)	2,835(8)
<b>O(3)-O(4)</b>	<b>2</b>	3,474(6)	3,445(6)	3,444(6)	3,438(5)	3,450(6)
<b>O(4)-O(4)</b>	<b>2</b>	2,776(4)	2,819(4)	2,851(4)	2,881(4)	2,838(4)
<b>O(4)-O(4)</b>	<b>2</b>	2,911(6)	2,983(6)	2,996(6)	3,026(6)	2,980(6)
<b>sr. vr. O-O</b>		<b>3,112(6)</b>	<b>3,086(6)</b>	<b>3,104(6)</b>	<b>3,092(6)</b>	<b>3,097(6)</b>
<b>sr. vr. O-O</b>		<b>3,114(6)</b>	<b>3,096(6)</b>	<b>3,110(6)</b>	<b>3,104(6)</b>	<b>3,104(6)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja

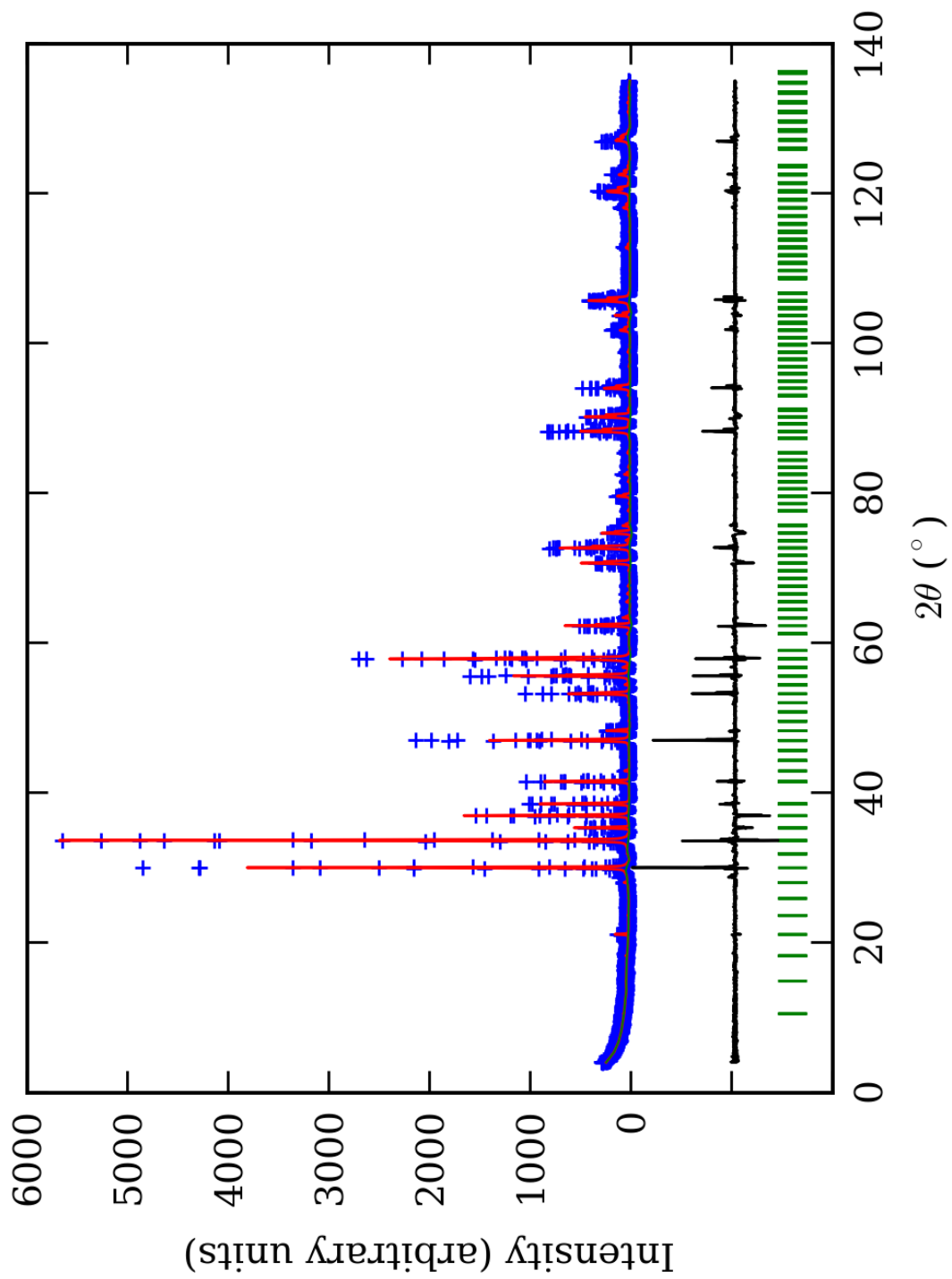
<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

*PRILOG 164. Odabrani međuatomski uglovi ( $u^\circ$ ) u  $R\bar{3}c$  p.g.*

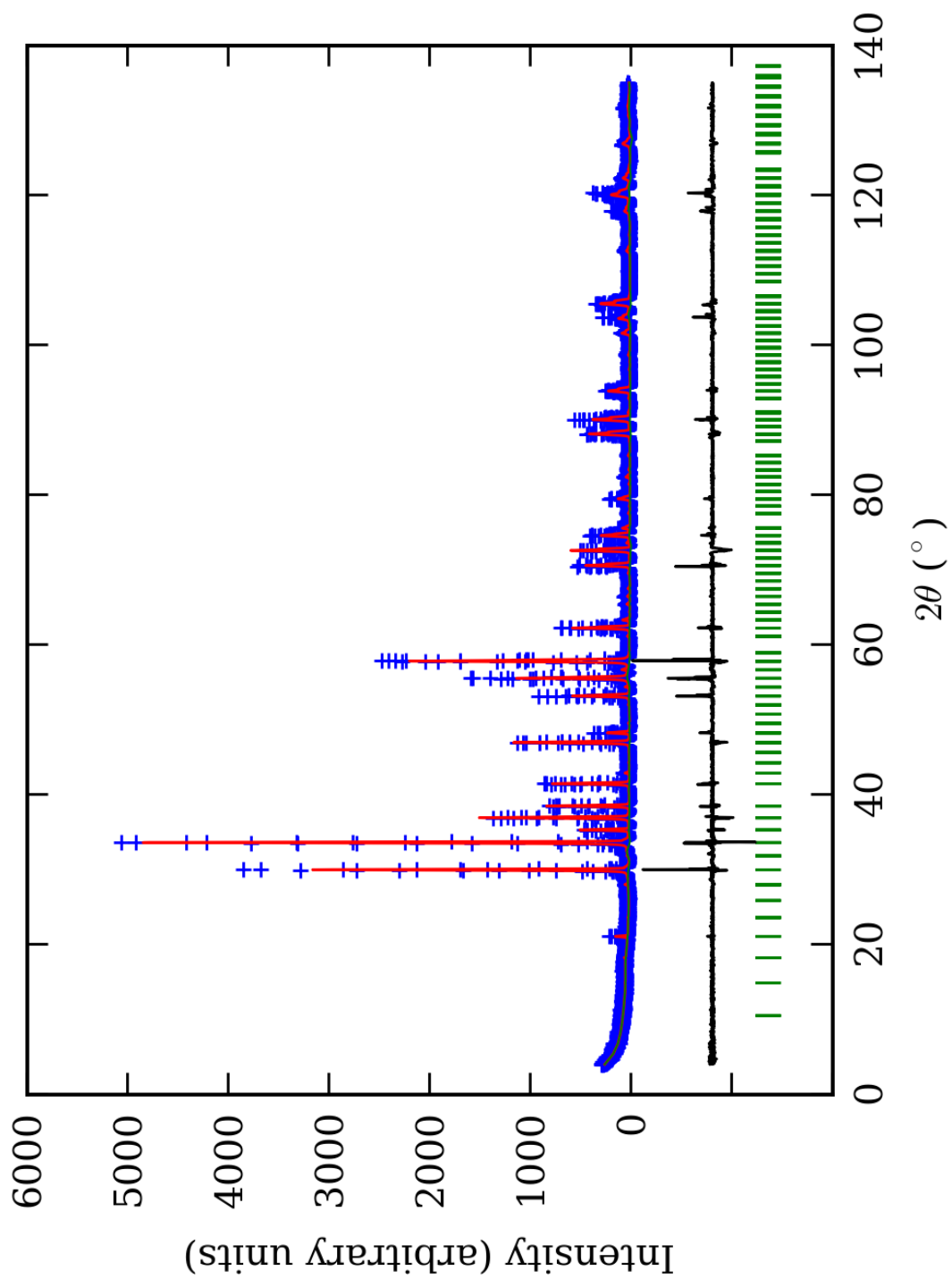
Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>O(1)-Si-O(2)</b>	<b>1*</b>	110,5(4) <sup>1</sup>	114,2(4)	114,1(4)	113,8(4)	112,4(4)
<b>O(1)-Si-O(3)</b>	<b>1</b>	110,9(4)	116,0(5)	115,2(4)	117,5(4)	114,5(5)
<b>O(1)-Si-O(4)</b>	<b>1</b>	102,5(5)	100,4(5)	101,0(5)	100,0(5)	101,6(5)
<b>O(2)-Si-O(3)</b>	<b>1</b>	102,0(4)	101,9(4)	101,6(4)	104,3(4)	103,9(4)
<b>O(2)-Si-O(4)</b>	<b>1</b>	115,2(5)	112,6(5)	112,5(5)	111,1(5)	112,7(3)
<b>O(3)-Si-O(4)</b>	<b>1</b>	115,9(5)	112,3(5)	113,0(5)	110,3(5)	112,2(5)
<b>sr. vr. O-Si-O</b>		<b>109,5(4)</b>	<b>109,6(5)</b>	<b>109,6(4)</b>	<b>109,5(4)</b>	<b>109,6(4)</b>
<b>O(4)-Y(1)-O(4)</b>	<b>6</b>	90,1(3)	91,8(3)	92,4(3)	93,3(3)	92,0(3)
<b>O(4)-Y(1)-O(4)</b>	<b>6</b>	89,9(3)	88,2(3)	87,6(3)	86,7(3)	88,0(3)
<b>sr. vr. O-Y(1)-O</b>		<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>
<b>O(1)-Y(2)-O(2)</b>	<b>2</b>	92,0(4)	90,5(4)	91,0(4)	91,4(2)	91,7(4)
<b>O(1)-Y(2)-O(2)</b>	<b>2</b>	88,0(3)	89,5(3)	89,0(3)	88,6(2)	88,3(3)
<b>O(1)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	87,3(3)	90,7(3)	89,5(3)	88,2(1)	89,6(3)
<b>O(1)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	92,7(3)	89,3(3)	90,5(3)	91,8(1)	90,4(3)
<b>O(2)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	89,0(4)	89,5(4)	88,4(4)	89,5(4)	89,3(4)
<b>O(2)-Y(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	91,0(3)	90,5(4)	91,6(3)	90,5(3)	90,7(4)
<b>sr. vr. O-Y(2)-O</b>		<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(4)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(2)</b>	<b>90,0(4)</b>
<b>sr. vr. O-Y-O</b>		<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(4)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(2)</b>	<b>90,0(4)</b>
<b>O(1)-X(1)-O(1)</b>	<b>1</b>	69,2(2)	72,0(3)	70,6(2)	72,4(3)	70,8(3)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	112,8(3)	110,7(3)	111,8(3)	111,5(3)	112,3(3)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	71,7(2)	70,6(2)	71,4(2)	71,4(2)	71,7(2)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	91,9(3)	92,2(3)	90,6(3)	92,9(3)	92,5(3)
<b>O(1)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	76,5(3)	74,4(3)	74,5(3)	74,4(3)	74,9(3)
<b>O(2)-X(1)-O(2)</b>	<b>1</b>	69,7(2)	71,2(2)	70,9(2)	69,2(2)	69,2(2)
<b>O(2)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	74,8(3)	74,9(3)	75,5(3)	74,7(3)	74,6(3)
<b>O(2)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	90,4(3)	92,2(3)	91,7(3)	91,7(3)	91,5(3)
<b>O(2)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	70,8(2)	70,5(3)	71,7(2)	70,6(2)	70,9(2)
<b>O(2)-X(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	66,2(2)	67,5(2)	66,0(2)	67,4(2)	67,1(2)
<b>sr. vr. O-X(1)-O</b>		<b>80,5(3)</b>	<b>80,5(3)</b>	<b>80,4(3)</b>	<b>80,6(3)</b>	<b>80,6(3)</b>
<b>O(1)-X(2)-O(1)</b>	<b>1</b>	121,0(3)	115,5(3)	117,0(3)	115,1(3)	117,0(3)
<b>O(1)-X(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	72,1(2)	69,6(2)	70,9(2)	69,5(2)	70,8(2)
<b>O(1)-X(2)-O(3)</b>	<b>2</b>	76,6(2)	74,5(3)	74,6(2)	74,3(2)	74,8(3)
<b>O(1)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	66,3(3)	66,7(3)	65,6(3)	65,5(3)	66,0(3)
<b>O(1)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	91,1(3)	91,5(3)	91,3(3)	90,7(3)	91,2(3)
<b>O(3)-X(2)-O(3)</b>	<b>1</b>	113,8(2)	109,6(3)	110,8(2)	109,4(2)	111,2(3)
<b>O(3)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	70,5(3)	70,5(3)	70,1(3)	69,4(3)	69,5(3)
<b>O(3)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	91,9(2)	91,4(2)	90,8(2)	90,8(2)	91,3(2)
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	70,0(2)	71,7(2)	72,0(2)	73,2(2)	72,0(2)
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	73,9(2)	76,6(2)	76,4(2)	77,5(2)	76,2(2)
<b>sr. vr. O-X(2)-O</b>		<b>81,1(2)</b>	<b>80,6(3)</b>	<b>80,6(2)</b>	<b>80,4(2)</b>	<b>80,7(3)</b>
<b>sr. vr. O-X-O</b>		<b>80,8(2)</b>	<b>80,6(3)</b>	<b>80,5(2)</b>	<b>80,5(2)</b>	<b>80,6(3)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

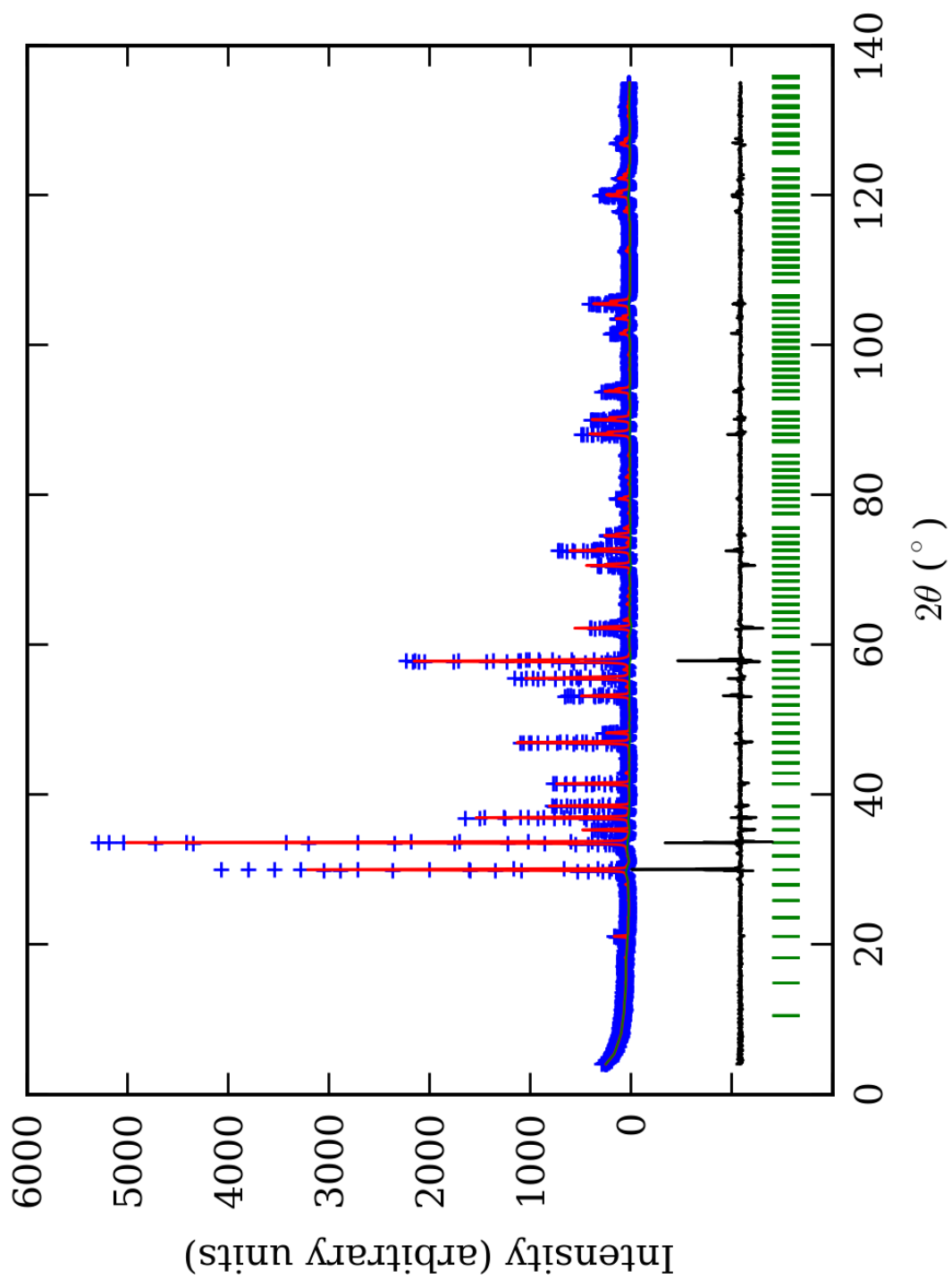


PRILOG 165. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $R\bar{3}$  p.g.

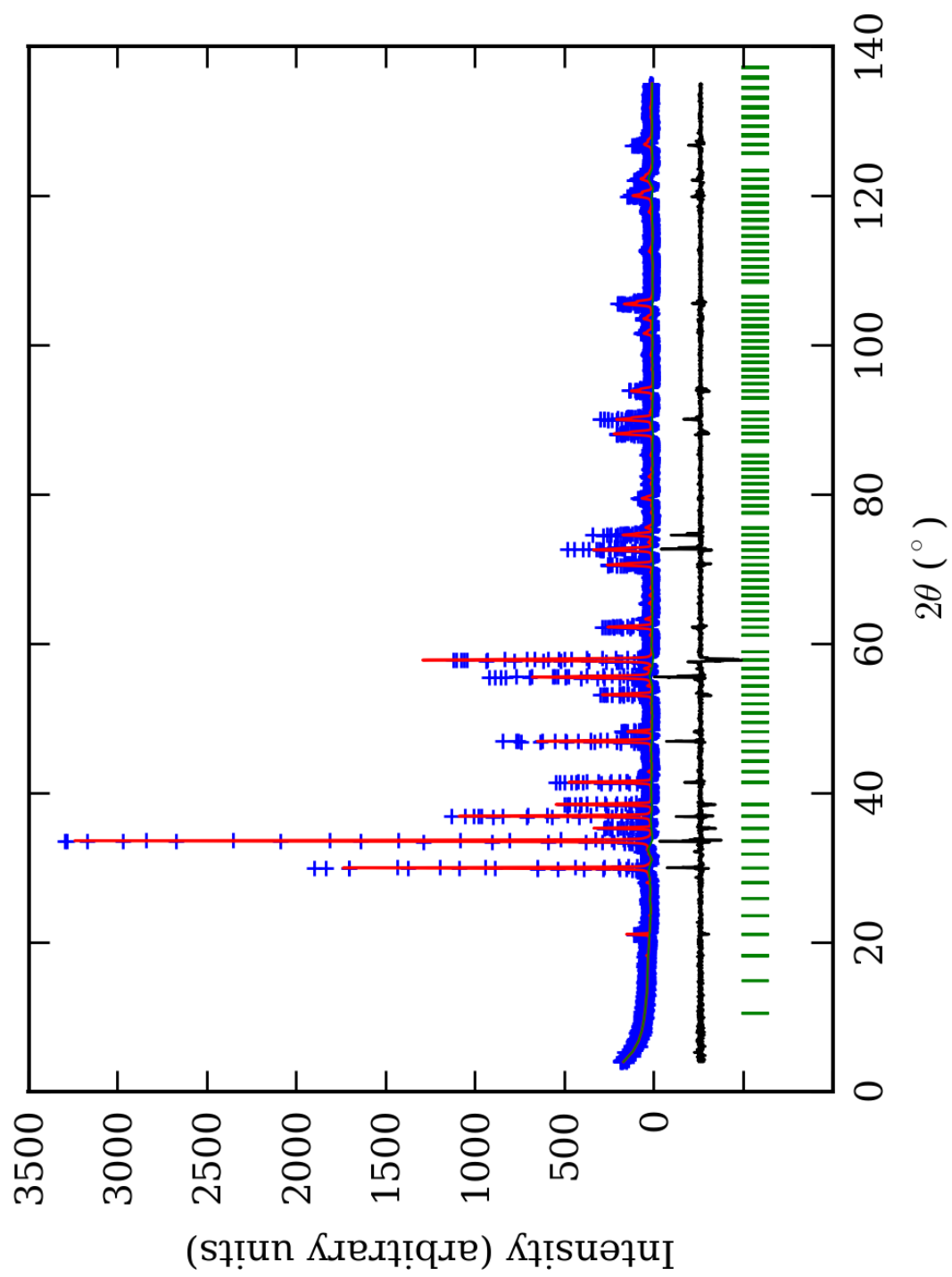


PRILOG 166. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $R\bar{3}$  p.g.

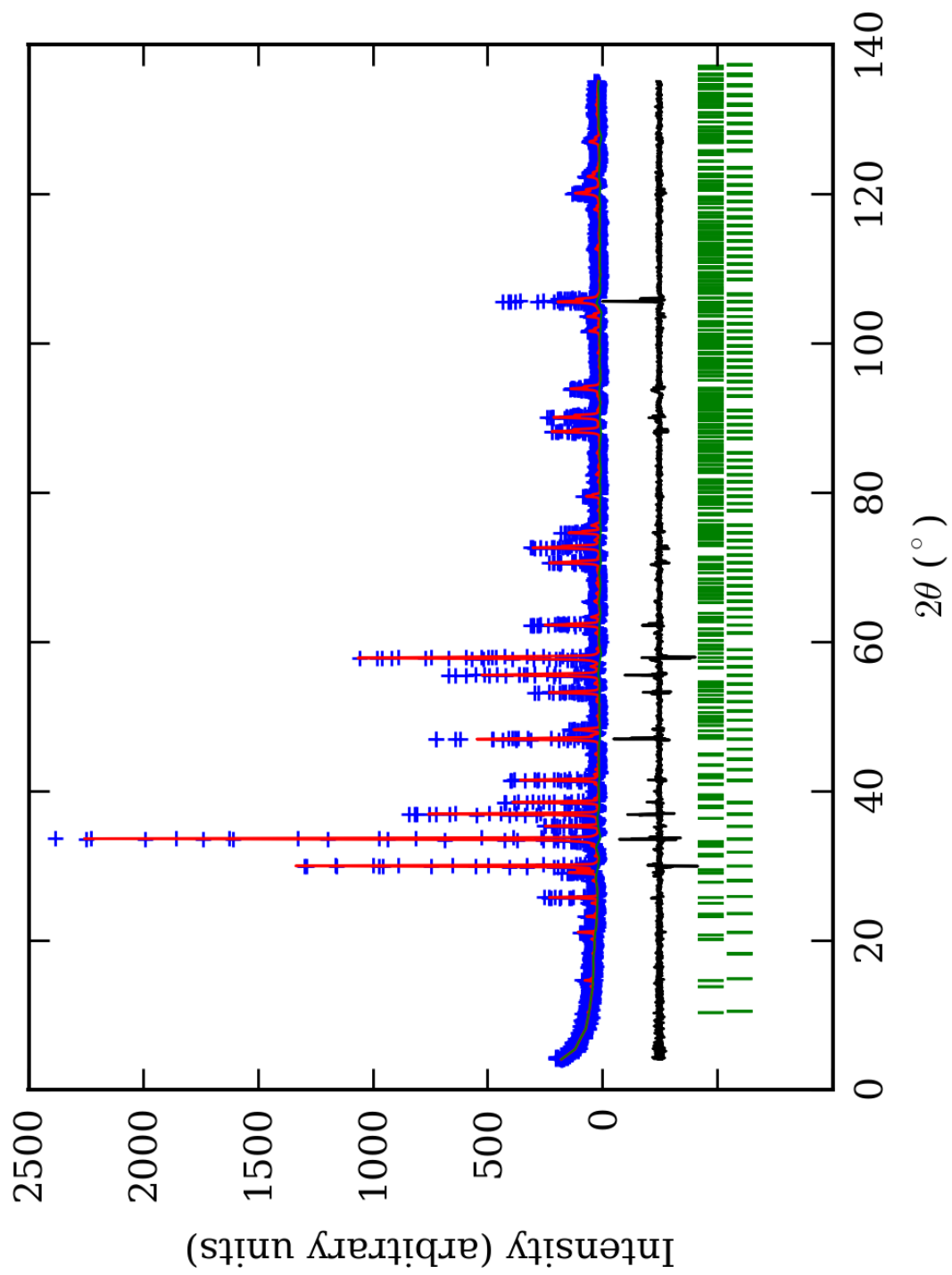




PRILOG 167. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u  $R\bar{3}$  p.g.



PRILOG 168. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u  $R\bar{3}$  p.g.



PRILOG 169. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $R\bar{3}$  p.g.

PRILOG 170. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u  $R\bar{3}$  p.g. Izračunata je i četverostruka vrednost odnosa  $c/a$ , kao i ugao  $\alpha$  (°).

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,3527	2,5659	2,1938	2,0228	1,7115	
Faktor skale	0,0000058(3)*	0,0000063(4)	0,0000070(2)	0,000012(2)	0,0000036(1)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,06(9)	0,3(1)	-0,44(6)	0,28(8)	0,10(8)	
Ukupni temp. faktor	0,26(9)	0,3(1)	0,60(6)	0,8(1)	0,32(9)	
Parametri polu-širine	U	-0,001(4)	0,06(1)	0,008(2)	0,03(1)	0,017(8)
	V	0,013(7)	-0,04(2)	-0,029(4)	0,03(1)	-0,004(9)
	W	0,010(2)	0,026(4)	0,032(2)	0,013(4)	0,027(3)
Preferentna orijent.	0,62(4)	0,54(5)	0,44(4)	-0,6(2)	0,37(3)	
Parametri asimetrije	As 1	0,04(6)	0,18(4)	0,12(4)	0,08(6)	0,05(4)
	As 2	0,050(9)	0,066(7)	0,060(7)	0,044(7)	0,044(6)
X parametar	0,010(2)	0,002(2)	0,021(1)	0,003(2)	0,008(2)	
Nulta tačka	0,011(7)	0,031(8)	0,002(5)	0,02(1)	-0,043(7)	
a <sub>0</sub>	16,850(1)	16,868(2)	16,8696(7)	16,872(2)	16,874(1)	
c <sub>0</sub>	10,3276(7)	10,338(2)	10,3417(4)	10,339(2)	10,327(1)	
V <sub>0</sub>	2539,2(3)	2547,6(6)	2548,8(2)	2548,9(7)	2546,2(5)	
N-P+C	6400	6400	6400	6400	6377	
R <sub>p</sub>	15,7	14,8	13,4	14,3	13,2	
R <sub>wp</sub>	20,9	19,8	18,0	19,3	17,8	
R <sub>exp</sub>	11,46	11,40	11,61	14,06	14,02	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	24,4	23,3	21,5	23,3	24,9	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	27,5	26,2	24,0	26,2	26,9	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,08	15,06	15,48	19,12	21,16	
Chi2	3,33	3,03	2,40	1,88	1,61	
Chi2 (Bragg contr.)	3,71	3,26	2,57	2,04	1,70	
DW-stat.	0,7852	0,8301	1,0443	1,2514	1,3857	
DW-exp.	1,9705	1,9705	1,9705	1,9705	1,9779	
GoF	1,8	1,7	1,5	1,4	1,3	
R <sub>B</sub>	<b>11,1</b>	<b>10,3</b>	<b>8,87</b>	<b>8,55</b>	<b>7,00</b>	
R <sub>F</sub>	<b>8,50</b>	<b>8,29</b>	<b>8,32</b>	<b>7,72</b>	<b>6,59</b>	
4 × c <sub>0</sub> /a <sub>0</sub>	2,45166	2,45151	2,45215	2,45116	2,44803	
α	59,960	59,963	59,950	59,968	60,026	

\*Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 171. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u  $R\bar{3}$  p.g.

Zona	A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor	2,3527		2,5659		2,1938		2,0228		1,7115	
	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,6253(5)*	0,6274(5)	0,98	0,6252(4)	0,98	0,6245(4)	0,98	0,6244(3)	0,98
	y	0,0014(5)	0,0030(5)	0,98	0,0000(4)	0,98	0,0005(4)	0,98	0,0004(3)	0,98
	z	0,2501(7)	0,2517(8)	(0)	0,2485(7)	(0)	0,2498(6)	(0)	0,2482(5)	(0)
Ca2	x	0,1269(5)	0,1260(5)	0,98	0,1258(5)	0,98	0,1231(4)	0,98	0,1269(5)	0,98
	y	-0,0006(5)	0,0039(5)	(0)	0,0025(4)	(0)	0,0028(4)	(0)	0,0034(3)	(0)
	z	0,2491(7)	0,2520(7)	(0)	0,2489(6)	(0)	0,2495(6)	(0)	0,2487(5)	(0)

Al1	x	0,000	0,104 (4)	0,000	0,10 (4)	0,000	0,09 (1)	0,000	0,10 (4)	0,000	0,11 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,063 (4)	0,000	0,06 (4)	0,000	0,08 (1)	0,000	0,06 (4)	0,000	0,06 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,000	0,110 (4)	0,000	0,10 (4)	0,000	0,11 (1)	0,000	0,10 (4)	0,000	0,09 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe2	x	0,000	0,057 (4)	0,000	0,06 (4)	0,000	0,06 (1)	0,000	0,06 (4)	0,000	0,08 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al3	x	0,500	0,32 (1)	0,500	0,30 (5)	0,500	0,32 (2)	0,500	0,27 (8)	0,500	0,25 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe3	x	0,500	0,18 (1)	0,500	0,20 (5)	0,500	0,18 (2)	0,500	0,23 (8)	0,500	0,25 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al4	x	0,500	0,32 (1)	0,500	0,32 (5)	0,500	0,27 (2)	0,500	0,28 (8)	0,500	0,32 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe4	x	0,500	0,18 (1)	0,500	0,18 (5)	0,500	0,23 (2)	0,500	0,22 (8)	0,500	0,18 (3)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Si1	x	0,8342(7)	1,000 (0)	0,8331(7)	1,000 (0)	0,8339(6)	1,000 (0)	0,8325(6)	1,000 (0)	0,8336(5)	1,000 (0)
	y	0,0406(7)		0,0424(8)		0,0422(7)		0,0433(6)		0,0412(5)	
	z	0,417(1)		0,418(1)		0,4185(9)		0,4192(8)		0,4178(7)	
Si2	x	0,0395(7)	1,000 (0)	0,0420(7)	1,000 (0)	0,0415(6)	1,000 (0)	0,0428(6)	1,000 (0)	0,0402(5)	1,000 (0)
	y	0,8362(7)		0,8360(7)		0,8351(6)		0,8342(6)		0,8344(5)	
	z	0,084(1)		0,085(1)		0,0842(9)		0,0835(8)		0,0858(7)	
O1	x	0,2049(8)	1,000 (0)	0,2113(8)	1,000 (0)	0,2093(7)	1,000 (0)	0,2106(6)	1,000 (0)	0,2086(5)	1,000 (0)
	y	0,4066(7)		0,4104(7)		0,4099(6)		0,4106(6)		0,4092(5)	
	z	0,493(1)		0,488(1)		0,4901(9)		0,4889(8)		0,4909(7)	
O2	x	0,4072(7)	1,000 (0)	0,4050(7)	1,000 (0)	0,4071(6)	1,000 (0)	0,4074(6)	1,000 (0)	0,4053(5)	1,000 (0)
	y	0,2067(8)		0,2066(8)		0,2068(7)		0,2074(6)		0,2054(6)	
	z	0,008(1)		0,007(1)		0,0075(9)		0,0084(8)		0,0056(7)	
O3	x	0,7278(6)	1,000 (0)	0,7266(7)	1,000 (0)	0,7289(6)	1,000 (0)	0,7278(5)	1,000 (0)	0,7282(5)	1,000 (0)
	y	0,9641(7)		0,9629(7)		0,9645(6)		0,9643(6)		0,9648(5)	
	z	0,380(1)		0,384(1)		0,3793(9)		0,3785(9)		0,3762(8)	
O4	x	0,9645(7)	1,000 (0)	0,9640(7)	1,000 (0)	0,9642(6)	1,000 (0)	0,9645(6)	1,000 (0)	0,9640(5)	1,000 (0)
	y	0,7291(6)		0,7295(7)		0,7288(6)		0,7284(5)		0,7278(5)	
	z	0,121(1)		0,121(1)		0,1178(9)		0,1214(9)		0,1207(8)	
O5	x	0,8217(8)	1,000 (0)	0,8203(8)	1,000 (0)	0,8229(7)	1,000 (0)	0,8233(6)	1,000 (0)	0,8236(6)	1,000 (0)
	y	0,0616(7)		0,0599(8)		0,0610(7)		0,0602(6)		0,0609(5)	
	z	0,5682(8)		0,5726(9)		0,5706(8)		0,5736(7)		0,5714(6)	
O6	x	0,0633(7)	1,000 (0)	0,0634(8)	1,000 (0)	0,0620(7)	1,000 (0)	0,0617(6)	1,000 (0)	0,0626(5)	1,000 (0)
	y	0,8243(8)		0,8260(8)		0,8223(7)		0,8238(6)		0,8236(5)	
	z	0,9338(8)		0,9311(9)		0,9333(8)		0,9302(7)		0,9336(6)	
O7	x	0,9010(7)	1,000 (0)	0,9026(7)	1,000 (0)	0,9011(7)	1,000 (0)	0,8997(6)	1,000 (0)	0,9010(5)	1,000 (0)
	y	0,9076(6)		0,9057(6)		0,9045(5)		0,9034(5)		0,9053(4)	
	z	0,892(1)		0,892(1)		0,894(1)		0,8961(9)		0,8932(8)	
O8	x	0,9014(6)	1,000 (0)	0,9007(6)	1,000 (0)	0,9004(5)	1,000 (0)	0,8992(5)	1,000 (0)	0,9017(4)	1,000 (0)
	y	0,9094(7)		0,9056(8)		0,9070(7)		0,9050(6)		0,9061(5)	
	z	0,610(1)		0,605(1)		0,608(1)		0,6046(9)		0,6088(8)	
Ca1 (%)	98	98	98	98	98	98	98	98	98	98	98
Ca2 (%)	98		98		98		98		98		98
Al1 (%)	62(2)		60(24)		54(6)		60(24)		58		66(18)
Al2 (%)	66(2)	64	60(24)	61	66(6)	60	60(24)	58	54(18)		58
Al3 (%)	64(2)	(2)	60(10)	(17)	64(4)	(5)	54(16)	(20)	50(6)		(12)
Al4 (%)	64(2)		64(10)		54(4)		56(16)		64(6)		

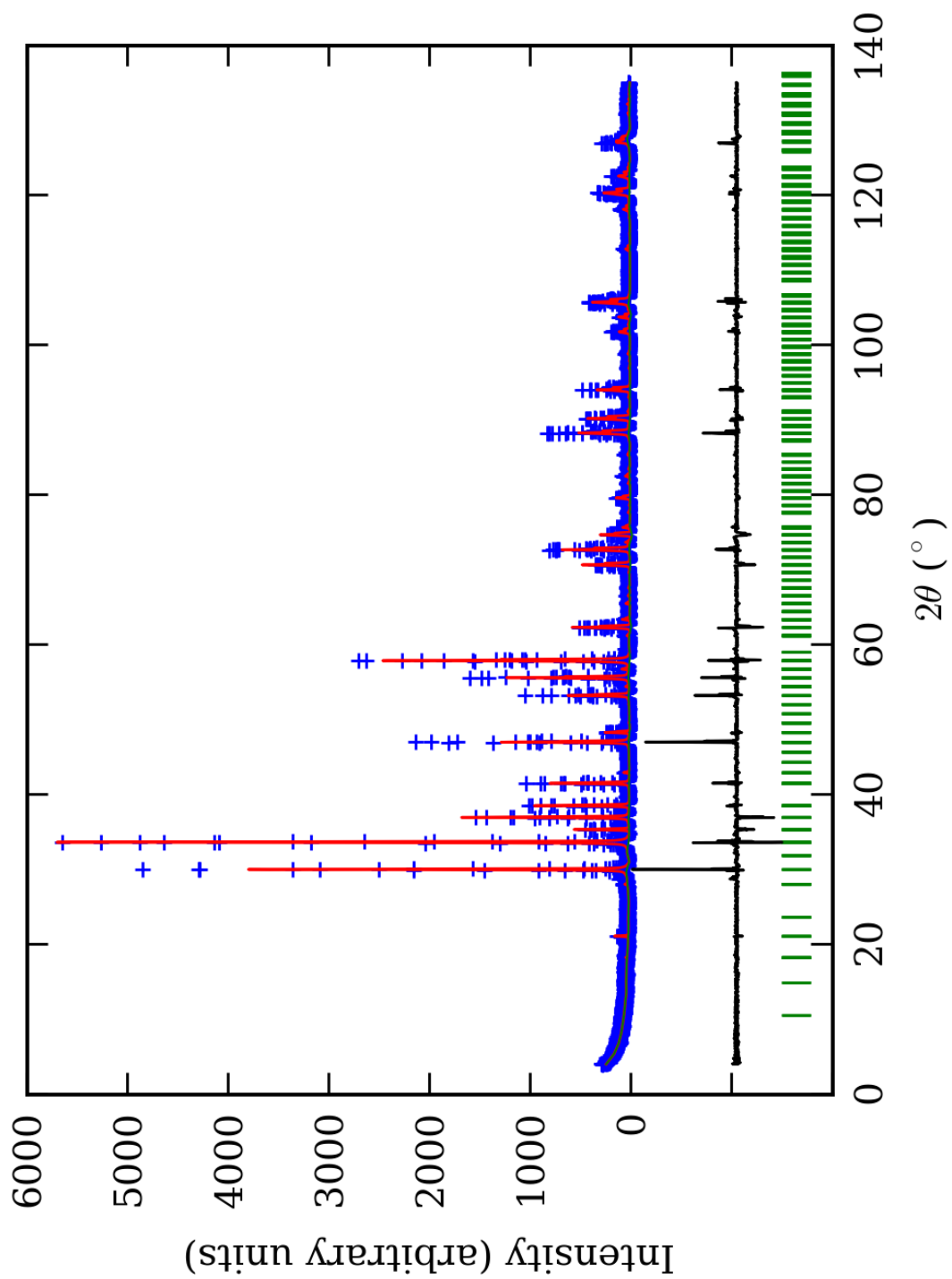
\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 172. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja (u Å) u  $R\bar{3}$  p.g.

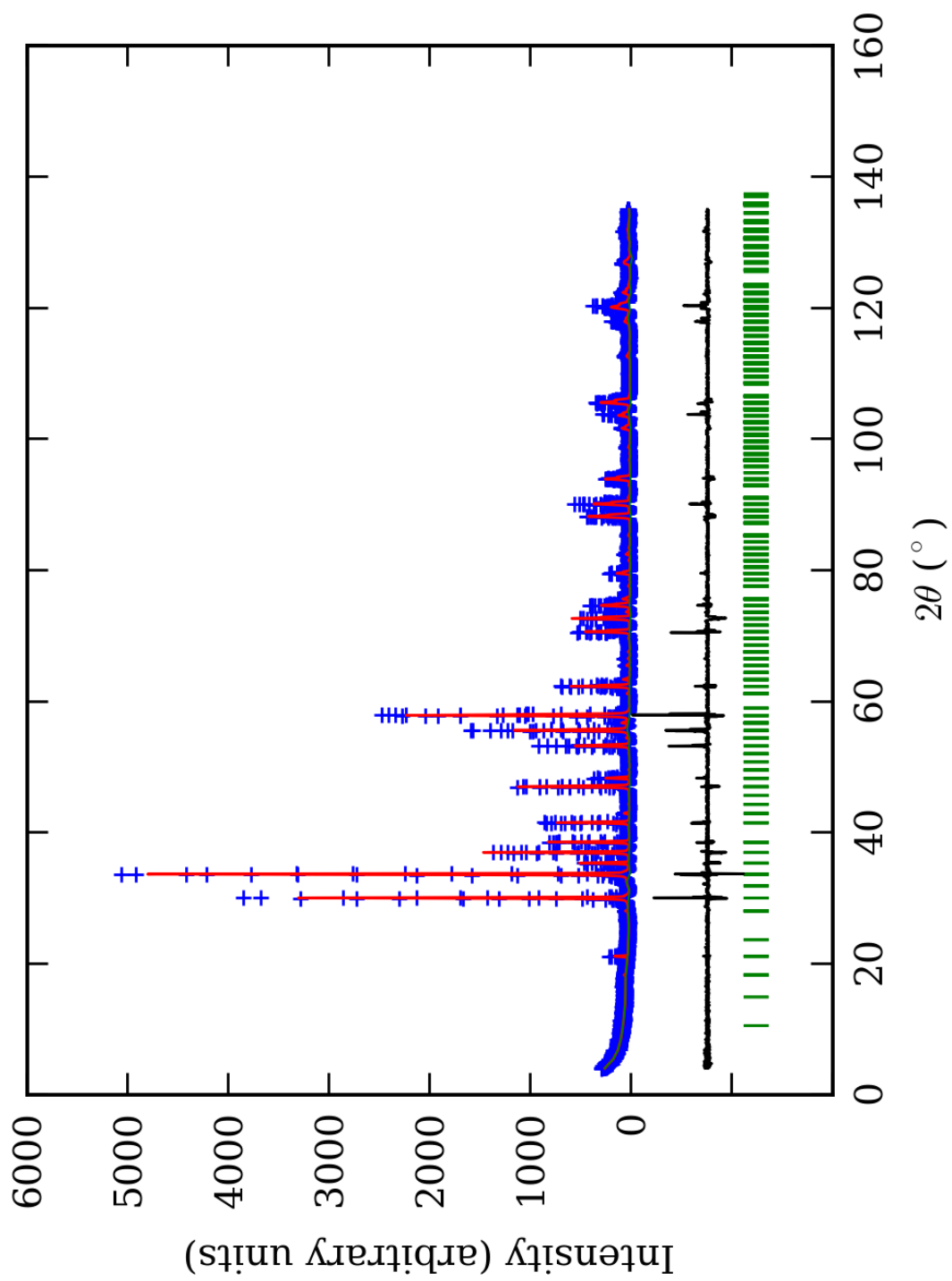
Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si(1)-O(2)	1*	1,647(6) <sup>1</sup>	1,655(6)	1,640(6)	1,638(6)	1,643(6)
Si(1)-O(3)	1	1,646(5)	1,657(5)	1,643(5)	1,649(5)	1,648(5)
Si(1)-O(5)	1	1,639(6)	1,655(6)	1,633(6)	1,643(6)	1,646(6)
Si(1)-O(8)	1	1,637(9)	1,652(8)	1,643(8)	1,653(8)	1,648(8)
sr. vr. Si(1)-O		<b>1,640(6)</b>	<b>1,655(6)</b>	<b>1,640(6)</b>	<b>1,646(6)</b>	<b>1,646(6)</b>
Si(2)-O(1)	1	1,642(6)	1,661(6)	1,642(6)	1,644(6)	1,642(6)
Si(2)-O(4)	1	1,649(5)	1,655(5)	1,644(5)	1,651(5)	1,645(5)
Si(2)-O(6)	1	1,640(6)	1,655(6)	1,636(6)	1,643(6)	1,647(6)
Si(2)-O(7)	1	1,645(9)	1,660(9)	1,646(8)	1,658(8)	1,650(9)
sr. vr. Si(2)-O		<b>1,644(6)</b>	<b>1,658(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,649(6)</b>	<b>1,646(6)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,642(6)</b>	<b>1,656(6)</b>	<b>1,641(6)</b>	<b>1,648(6)</b>	<b>1,646(6)</b>
Y(1)-O(7)	6	<b>1,963(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,974(4)</b>	<b>1,979(3)</b>	<b>1,973(4)</b>
Y(2)-O(8)	6	<b>1,961(4)</b>	<b>1,966(4)</b>	<b>1,975(3)</b>	<b>1,976(3)</b>	<b>1,974(4)</b>
Y(3)-O(2)	2	1,966(4)	1,958(4)	1,968(4)	1,963(4)	1,968(4)
Y(3)-O(4)	2	1,972(4)	1,966(4)	1,978(4)	1,974(4)	1,969(4)
Y(3)-O(6)	2	1,967(5)	1,964(5)	1,973(5)	1,970(5)	1,973(5)
sr. vr. Y(3)-O		<b>1,968(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,973(4)</b>	<b>1,969(4)</b>	<b>1,970(4)</b>
Y(4)-O(1)	2	1,965(4)	1,962(4)	1,971(4)	1,967(4)	1,970(4)
Y(4)-O(3)	2	1,969(6)	1,965(6)	1,975(6)	1,971(6)	1,973(6)
Y(4)-O(5)	2	1,965(4)	1,960(4)	1,970(4)	1,969(4)	1,971(4)
sr. vr. Y(4)-O		<b>1,966(5)</b>	<b>1,962(5)</b>	<b>1,972(5)</b>	<b>1,969(5)</b>	<b>1,971(5)</b>
sr. vr. Y-O		<b>1,964(4)</b>	<b>1,964(4)</b>	<b>1,974(4)</b>	<b>1,973(4)</b>	<b>1,972(4)</b>
X(1)-O(1)	1	2,504(7)	2,501(7)	2,511(7)	2,497(7)	2,491(7)
X(1)-O(2)	1	2,505(5)	2,499(5)	2,511(5)	2,496(5)	2,489(5)
X(1)-O(3)	1	2,503(7)	2,500(7)	2,509(7)	2,499(7)	2,496(7)
X(1)-O(3)	1	2,327(5)	2,319(5)	2,322(5)	2,334(5)	2,339(5)
X(1)-O(4)	1	2,504(6)	2,501(6)	2,508(6)	2,501(6)	2,493(6)
X(1)-O(4)	1	2,327(5)	2,318(5)	2,324(5)	2,335(5)	2,339(5)
X(1)-O(5)	1	2,330(6)	2,327(6)	2,322(6)	2,334(6)	2,340(6)
X(1)-O(5)	1	2,330(5)	2,325(5)	2,322(5)	2,333(5)	2,339(5)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,416(6)</b>	<b>2,411(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,416(6)</b>
X(2)-O(1)	1	2,329(7)	2,325(7)	2,319(7)	2,331(7)	2,338(7)
X(2)-O(2)	1	2,329(4)	2,320(4)	2,320(4)	2,330(4)	2,337(4)
X(2)-O(5)	1	2,501(6)	2,498(6)	2,512(6)	2,501(6)	2,496(6)
X(2)-O(6)	1	2,502(5)	2,497(5)	2,514(5)	2,503(5)	2,496(5)
X(2)-O(7)	1	2,353(7)	2,346(6)	2,357(6)	2,351(6)	2,338(7)
X(2)-O(7)	1	2,491(5)	2,479(5)	2,475(5)	2,479(5)	2,492(5)
X(2)-O(8)	1	2,334(7)	2,322(6)	2,321(6)	2,329(6)	2,338(6)
X(2)-O(8)	1	2,501(5)	2,496(5)	2,508(4)	2,502(4)	2,493(5)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,418(6)</b>	<b>2,410(6)</b>	<b>2,416(5)</b>	<b>2,416(5)</b>	<b>2,416(6)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,417(6)</b>	<b>2,410(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,416(6)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenju standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

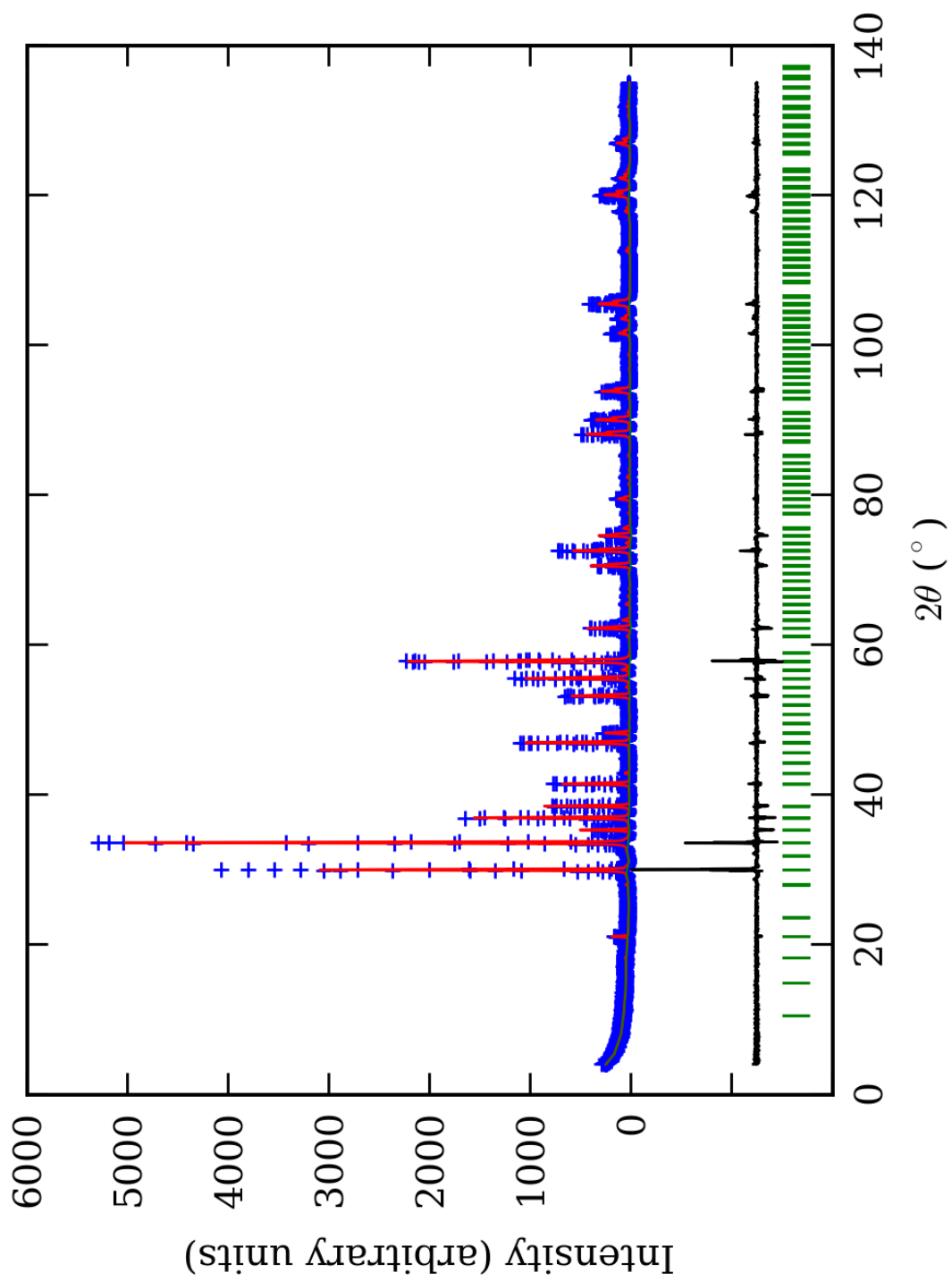


PRILOG 173. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u Fddd p.g.

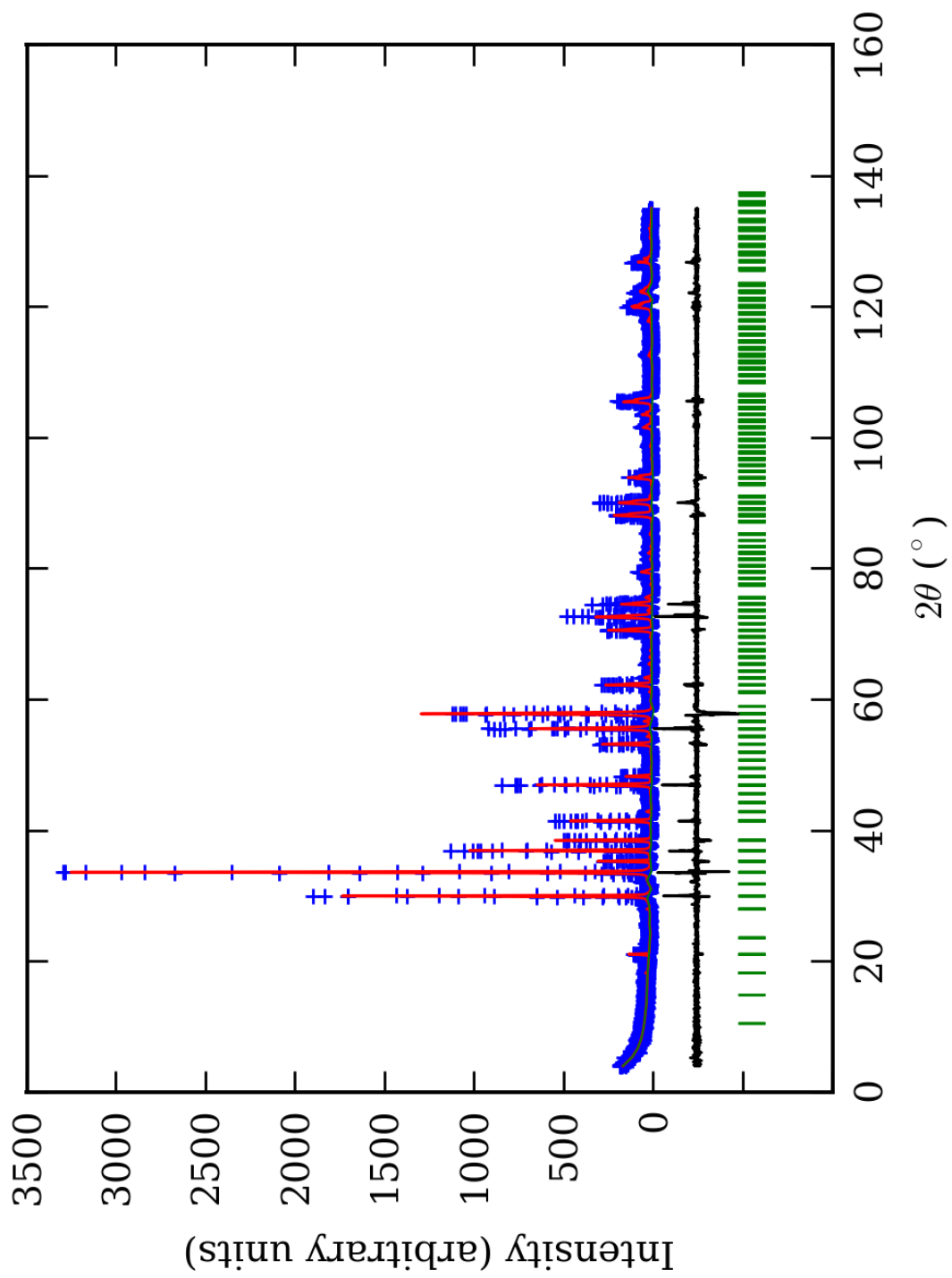


PRILOG 174. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u Fddd p.g.

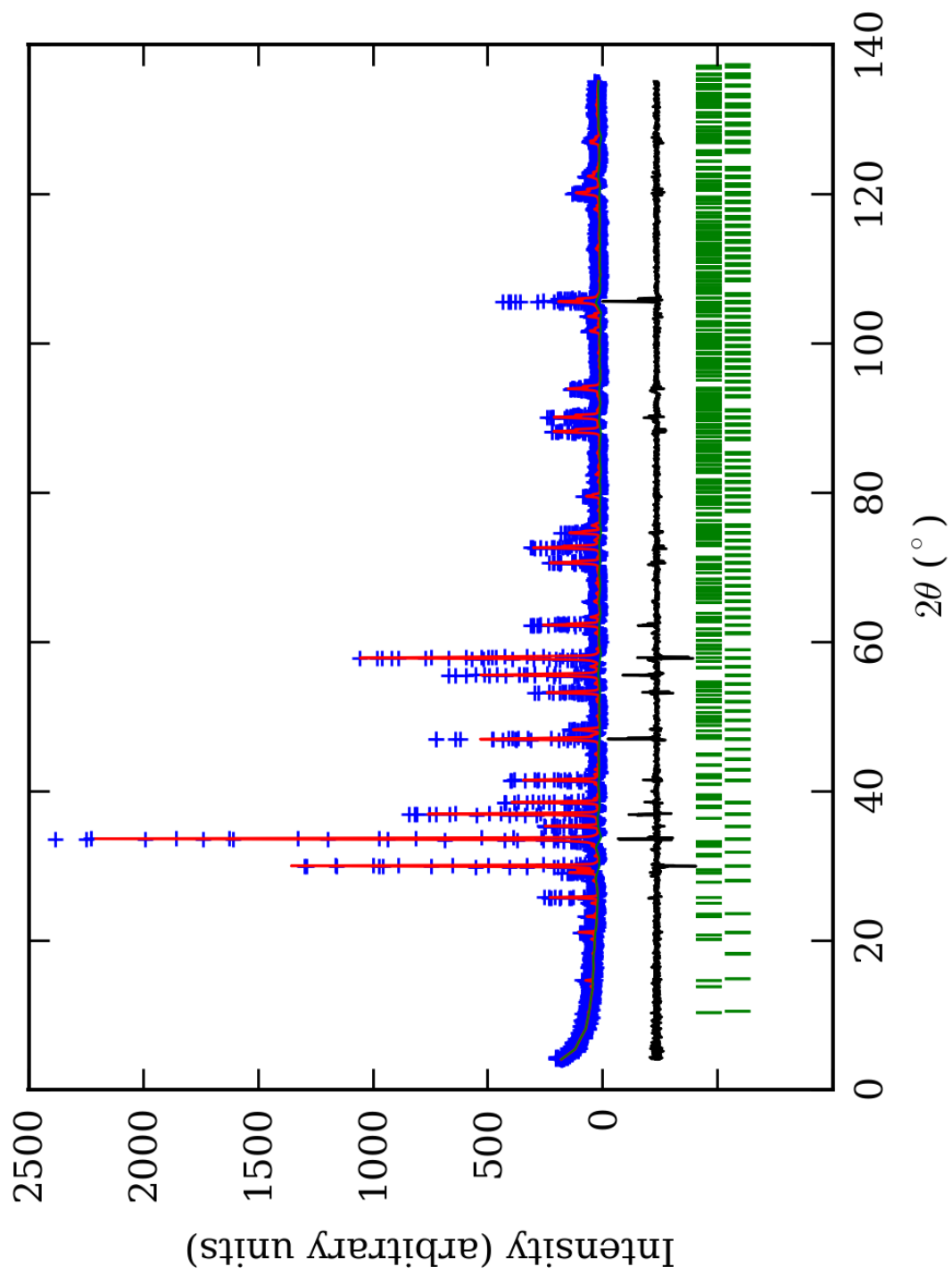




PRILOG 175. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u Fddd p.g.



PRILOG 176. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u Fddd p.g.



PRILOG 177. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u Fddd p.g.

PRILOG 178. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u Fddd p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,4584	2,4706	2,3603	2,1174	1,6859	
Faktor skale	0,000040(1)*	0,000040(2)	0,000035(2)	0,000078(6)	0,0000219(6)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,2(1)	0,3(1)	-0,02(8)	-0,10(8)	0,12(8)	
Ukupni temp. faktor	0,42(9)	0,4(1)	0,63(8)	0,73(9)	0,51(8)	
Parametri polu-širine	U	0,001(4)	0,05(1)	-0,007(4)	-0,006(5)	0,013(5)
	V	0,005(7)	-0,04(1)	0,018(9)	0,01(1)	-0,022(8)
	W	0,010(2)	0,026(4)	0,017(3)	0,021(4)	0,032(3)
Preferentna orijent.	0,47(4)	0,48(3)	0,40(5)	-0,73(9)	0,38(3)	
Parametri asimetrije	As 1	0,03(6)	0,19(4)	0,08(5)	0,10(6)	0,05(3)
	As 2	0,05(1)	0,065(7)	0,053(8)	0,049(8)	0,037(6)
X parametar	0,006(2)	0,003(2)	0,010(2)	0,013(2)	0,009(2)	
Nulta tačka	0,011(7)	0,034(8)	-0,000(8)	0,019(9)	-0,040(6)	
a <sub>0</sub>	16,874(1)	16,895(2)	16,894(2)	16,863(2)	16,889(1)	
b <sub>0</sub>	16,850(1)	16,864(2)	16,873(1)	16,893(1)	16,860(1)	
c <sub>0</sub>	11,9133(8)	11,928(1)	11,929(1)	11,924(1)	11,9249(9)	
V <sub>0</sub>	3387,2(5)	3398,3(7)	3400,5(6)	3396,5(6)	3395,7(5)	
N-P+C	6411	6411	6411	6411	6389	
R <sub>p</sub>	15,5	14,4	13,4	14,3	13,2	
R <sub>wp</sub>	20,9	19,4	17,9	19,2	17,8	
R <sub>exp</sub>	11,47	11,41	11,62	14,08	14,03	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	24,6	22,8	21,3	23,4	25,1	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	27,7	25,7	23,7	26,0	27,0	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,26	15,10	15,42	19,07	21,29	
Chi2	3,31	2,90	2,36	1,85	1,61	
Chi2 (Bragg contr.)	3,76	3,18	2,59	2,02	1,68	
DW-stat.	0,7809	0,8626	1,0359	1,2644	1,3887	
DW-exp.	1,9670	1,9670	1,9670	1,9670	1,9741	
GoF	1,8	1,7	1,5	1,3	1,3	
R <sub>B</sub>	<b>11,5</b>	<b>9,75</b>	<b>8,72</b>	<b>9,28</b>	<b>7,47</b>	
R <sub>F</sub>	<b>9,01</b>	<b>8,20</b>	<b>6,94</b>	<b>8,02</b>	<b>6,95</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 179. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u Fddd p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,4584		2,4706		2,3603		2,1174		1,6859	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,375	0,245 (0)	0,375	0,245 (0)	0,375	0,245 (0)	0,375	0,245 (0)	0,375	0,245 (0)
	y	0,875		0,875		0,875		0,875		0,875	
	z	0,375		0,375		0,375		0,375		0,375	
Ca2	x	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)	0,125	0,245 (0)
	y	0,625		0,625		0,625		0,625			
	z	0,125		0,125		0,125		0,125		0,125	
Ca3	x	0,4359(4)*	0,980 (0)	0,4349(4)	0,980 (0)	0,4363(4)	0,980 (0)	0,4406(4)	0,980 (0)	0,4399(3)	0,980 (0)
	y	0,5624(4)		0,5649(4)		0,5636(4)		0,5633(3)		0,5624(3)	
	z	0,2512(6)		0,2505(6)		0,2496(6)		0,2510(6)		0,2490(4)	
Al1	x	0,250	0,31 (5)	0,250	0,30 (6)	0,250	0,28 (4)	0,250	0,30 (2)	0,250	0,308 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Fe1	x	0,250	0,19 (5)	0,250	0,20 (6)	0,250	0,22 (4)	0,250	0,20 (2)	0,250	0,192 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Al2	x	0,250	0,33 (5)	0,250	0,32 (6)	0,250	0,31 (4)	0,250	0,28 (2)	0,250	0,272 (5)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Fe2	x	0,250	0,17 (5)	0,250	0,18 (6)	0,250	0,19 (4)	0,250	0,22 (2)	0,250	0,228 (5)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500			
	z	0,250		0,250		0,250		0,250			
Si1	x	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)	0,375	0,500 (0)
	y	0,875		0,875		0,875		0,875			
	z	0,128(1)		0,125(1)		0,124(1)		0,121(1)		0,1231(8)	
Si2	x	0,3131(6)	1,000 (0)	0,3118(6)	1,000 (0)	0,3120(6)	1,000 (0)	0,3126(5)	1,000 (0)	0,3119(4)	1,000 (0)
	y	0,6881(6)		0,6888(6)		0,6873(6)		0,6863(5)		0,6865(4)	
	z	0,2499(9)		0,2500(9)		0,2513(9)		0,2499(8)		0,2496(6)	
O1	x	0,2909(7)	1,000 (0)	0,2894(7)	1,000 (0)	0,2907(6)	1,000 (0)	0,2936(6)	1,000 (0)	0,2949(5)	1,000 (0)
	y	0,7545(6)		0,7561(6)		0,7542(6)		0,7529(5)		0,7527(4)	
	z	0,3452(8)		0,3458(8)		0,348(8)		0,3469(7)		0,3477(6)	
O2	x	0,3026(6)	1,000 (0)	0,3031(6)	1,000 (0)	0,3043(5)	1,000 (0)	0,3060(5)	1,000 (0)	0,3043(4)	1,000 (0)
	y	0,8999(6)		0,9000(7)		0,9003(6)		0,9018(5)		0,9008(4)	
	z	0,2120(9)		0,2128(9)		0,2122(9)		0,2103(8)		0,2101(6)	
O3	x	0,4044(6)	1,000 (0)	0,4036(6)	1,000 (0)	0,4032(5)	1,000 (0)	0,4043(5)	1,000 (0)	0,4037(4)	1,000 (0)
	y	0,6928(7)		0,6948(7)		0,6935(6)		0,6920(6)		0,6925(4)	
	z	0,2038(9)		0,2030(9)		0,2064(9)		0,2015(8)		0,2034(4)	
O4	x	0,1511(6)	1,000 (0)	0,1501(6)	1,000 (0)	0,1504(6)	1,000 (0)	0,1487(6)	1,000 (0)	0,1492(4)	1,000 (0)
	y	0,5547(6)		0,5531(6)		0,5543(5)		0,5513(5)		0,5522(4)	
	z	0,2897(9)		0,2872(9)		0,2874(9)		0,2876(8)		0,2885(4)	
O5	x	0,3055(7)	1,000 (0)	0,3050(7)	1,000 (0)	0,3066(6)	1,000 (0)	0,3098(6)	1,000 (0)	0,3094(4)	1,000 (0)
	y	0,5967(6)		0,5968(6)		0,5961(5)		0,5947(5)		0,5950(4)	
	z	0,2951(9)		0,2962(9)		0,2946(8)		0,2947(8)		0,2973(4)	
O6	x	0,2464(6)	1,000 (0)	0,2442(6)	1,000 (0)	0,2457(6)	1,000 (0)	0,2464(6)	1,000 (0)	0,2461(4)	1,000 (0)
	y	0,7078(7)		0,7101(7)		0,7094(6)		0,7069(6)		0,7064(5)	
	z	0,1541(8)		0,1541(8)		0,1559(8)		0,1529(7)		0,1527(5)	
Ca1 (%)		98		98		98		98		98	
Ca2 (%)		98	98	98	98	98	98	98	98	98	98
Ca3 (%)		98		98		98		98		98	
Al1 (%)		62(10)	64	60(12)	62	56(8)	59	60(4)	58	62(1)	58
Al2 (%)		66(10)	(10)	64(12)	(12)	62(8)	(8)	56(4)	(4)	54(1)	(1)

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 180. Odabrana međuatomska rastojanja (u Å) u Fddd p.g.

Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si(1)-O(2)	2*	1,635(5) <sup>1</sup>	1,659(6)	1,646(6)	1,644(6)	1,641(6)
Si(1)-O(4)	2	1,644(6)	1,657(6)	1,637(6)	1,640(5)	1,641(5)
sr. vr. Si(1)-O		<b>1,640(6)</b>	<b>1,658(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,641(6)</b>
O(2)-O(2)	1	2,583(5)	2,572(5)	2,537(5)	2,497(5)	2,542(5)
O(2)-O(4)	2	2,720(6)	2,772(6)	2,749(6)	2,776(6)	2,751(6)
O(2)-O(4)	2	2,750(6)	2,775(6)	2,752(6)	2,704(6)	2,717(6)
O(4)-O(4)	1	2,528(5)	2,569(5)	2,536(5)	2,615(5)	2,587(5)
sr. vr. O-O		<b>2,675(6)</b>	<b>2,706(6)</b>	<b>2,679(6)</b>	<b>2,679(6)</b>	<b>2,678(6)</b>
Si(2)-O(1)	1	1,637(7)	1,654(6)	1,627(6)	1,645(6)	1,642(7)
Si(2)-O(3)	1	1,637(5)	1,652(5)	1,635(5)	1,653(5)	1,649(5)
Si(2)-O(5)	1	1,637(6)	1,650(5)	1,626(5)	1,638(5)	1,645(6)
Si(2)-O(6)	1	1,637(6)	1,656(6)	1,640(6)	1,645(6)	1,638(6)
sr. vr. Si(2)-O		<b>1,637(6)</b>	<b>1,653(5)</b>	<b>1,632(6)</b>	<b>1,645(6)</b>	<b>1,644(6)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,638(6)</b>	<b>1,656(6)</b>	<b>1,637(6)</b>	<b>1,644(6)</b>	<b>1,642(6)</b>
O(1)-O(3)	1	2,754(6)	2,774(6)	2,718(6)	2,747(6)	2,715(6)
O(1)-O(5)	1	2,736(6)	2,763(6)	2,747(6)	2,758(6)	2,737(6)
O(1)-O(6)	1	2,523(6)	2,532(6)	2,495(6)	2,567(6)	2,588(6)
O(3)-O(5)	1	2,567(6)	2,597(6)	2,544(6)	2,545(6)	2,549(6)
O(3)-O(6)	1	2,743(6)	2,786(6)	2,741(6)	2,737(6)	2,739(6)
O(5)-O(6)	1	2,706(6)	2,753(6)	2,730(6)	2,756(6)	2,765(6)
sr. vr. O-O		<b>2,672(6)</b>	<b>2,701(6)</b>	<b>2,662(6)</b>	<b>2,685(6)</b>	<b>2,682(6)</b>
sr. vr. O-O		<b>2,674(6)</b>	<b>2,704(6)</b>	<b>2,670(6)</b>	<b>2,682(6)</b>	<b>2,680(6)</b>
Y(1)-O(1)	2	1,971(4)	1,959(4)	1,976(4)	1,969(4)	1,969(4)
Y(1)-O(2)	2	1,959(5)	1,961(5)	1,968(5)	1,967(5)	1,966(5)
Y(1)-O(3)	2	1,958(4)	1,958(4)	1,963(4)	1,974(4)	1,974(4)
sr. vr. Y(1)-O		<b>1,963(4)</b>	<b>1,959(4)</b>	<b>1,969(4)</b>	<b>1,970(4)</b>	<b>1,970(4)</b>
O(1)-O(2)	2	2,744(7)	2,755(7)	2,759(7)	2,751(6)	2,749(6)
O(1)-O(2)	2	2,812(6)	2,788(6)	2,820(6)	2,814(6)	2,815(6)
O(1)-O(3)	2	2,787(6)	2,754(6)	2,819(6)	2,818(6)	2,851(6)
O(1)-O(3)	2	2,769(6)	2,785(6)	2,752(6)	2,758(6)	2,723(6)
O(2)-O(3)	2	2,750(7)	2,720(7)	2,733(7)	2,724(7)	2,737(7)
O(2)-O(3)	2	2,790(5)	2,821(5)	2,827(5)	2,848(5)	2,834(5)
sr. vr. O-O		<b>2,775(6)</b>	<b>2,770(6)</b>	<b>2,785(6)</b>	<b>2,786(6)</b>	<b>2,785(6)</b>
Y(2)-O(4)	2	1,964(5)	1,961(5)	1,967(5)	1,967(5)	1,971(5)
Y(2)-O(5)	2	1,955(4)	1,958(4)	1,956(4)	1,965(4)	1,972(4)
Y(2)-O(6)	2	1,970(4)	1,960(4)	1,983(4)	1,964(4)	1,965(4)
sr. vr. Y(2)-O		<b>1,963(4)</b>	<b>1,960(4)</b>	<b>1,969(4)</b>	<b>1,965(4)</b>	<b>1,969(4)</b>
sr. vr. Y-O		<b>1,963(4)</b>	<b>1,960(4)</b>	<b>1,969(4)</b>	<b>1,968(4)</b>	<b>1,970(4)</b>
O(4)-O(5)	2	2,701(7)	2,721(7)	2,733(7)	2,815(7)	2,802(7)
O(4)-O(5)	2	2,840(5)	2,820(5)	2,815(5)	2,745(5)	2,774(5)
O(4)-O(6)	2	2,822(6)	2,790(6)	2,822(6)	2,809(6)	2,810(6)
O(4)-O(6)	2	2,741(7)	2,756(7)	2,765(7)	2,750(7)	2,755(7)
O(5)-O(6)	2	2,733(6)	2,772(6)	2,767(6)	2,730(6)	2,754(6)
O(5)-O(6)	2	2,816(6)	2,768(6)	2,804(6)	2,825(6)	2,814(6)
sr. vr. O-O		<b>2,776(6)</b>	<b>2,771(6)</b>	<b>2,784(6)</b>	<b>2,779(6)</b>	<b>2,785(6)</b>
sr. vr. O-O		<b>2,776(6)</b>	<b>2,770(6)</b>	<b>2,784(6)</b>	<b>2,782(6)</b>	<b>2,785(6)</b>
X(1)-O(1)	4	2,502(5)	2,497(5)	2,513(5)	2,500(5)	2,488(5)
X(1)-O(2)	4	2,332(4)	2,323(4)	2,320(4)	2,327(4)	2,341(4)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,417(4)</b>	<b>2,410(4)</b>	<b>2,416(4)</b>	<b>2,414(4)</b>	<b>2,414(4)</b>
O(1)-O(1)	2	2,926(7)	2,975(7)	2,938(7)	2,826(7)	2,783(7)
O(1)-O(1)	2	4,122(7)	4,070(7)	4,140(7)	4,179(7)	4,175(7)
O(1)-O(2)	4	2,726(7)	2,908(7)	2,938(7)	3,004(7)	2,992(7)
O(1)-O(2)	4	3,477(6)	3,479(6)	3,458(6)	3,417(6)	3,439(6)
O(1)-O(2)	4	2,812(6)	2,788(6)	2,820(6)	2,814(6)	2,815(6)
O(2)-O(2)	2	2,583(5)	2,572(5)	2,537(5)	2,497(5)	2,542(5)
sr. vr. O-O		<b>3,073(6)</b>	<b>3,107(6)</b>	<b>3,116(6)</b>	<b>3,108(6)</b>	<b>3,110(6)</b>

X(2)-O(4)	4	2,334(4)	2,322(4)	2,315(4)	2,338(4)	2,340(4)
X(2)-O(6)	4	2,503(5)	2,497(5)	2,514(5)	2,493(5)	2,485(5)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,418(4)</b>	<b>2,410(4)</b>	<b>2,414(4)</b>	<b>2,416(4)</b>	<b>2,412(4)</b>
O(4)-O(4)	2	4,022(7)	3,961(7)	3,968(7)	3,959(7)	3,984(7)
O(4)-O(4)	2	2,528(5)	2,569(5)	2,536(5)	2,615(5)	2,587(5)
O(4)-O(6)	4	3,442(6)	3,472(6)	3,450(6)	3,493(6)	3,473(6)
O(4)-O(6)	4	2,822(6)	2,790(6)	2,822(6)	2,809(6)	2,810(6)
O(4)-O(6)	4	2,975(7)	2,918(7)	2,934(7)	2,930(7)	2,944(7)
O(6)-O(6)	2	2,875(7)	2,953(7)	2,942(7)	2,846(7)	2,823(7)
sr. vr. O-O		<b>3,100(6)</b>	<b>3,094(6)</b>	<b>3,095(6)</b>	<b>3,098(6)</b>	<b>3,094(6)</b>
X(3)-O(1)	1	2,326(6)	2,328(6)	2,320(6)	2,328(6)	2,342(6)
X(3)-O(2)	1	2,499(5)	2,497(5)	2,514(5)	2,497(5)	2,488(5)
X(3)-O(3)	1	2,329(6)	2,324(6)	2,319(6)	2,334(6)	2,341(6)
X(3)-O(3)	1	2,500(6)	2,490(6)	2,523(6)	2,493(6)	2,490(6)
X(3)-O(4)	1	2,507(5)	2,495(5)	2,510(5)	2,496(5)	2,490(5)
X(3)-O(5)	1	2,334(6)	2,325(6)	2,322(6)	2,328(6)	2,344(6)
X(3)-O(5)	1	2,500(6)	2,490(6)	2,518(6)	2,493(6)	2,491(6)
X(3)-O(6)	1	2,329(6)	2,328(6)	2,318(6)	2,330(6)	2,338(6)
sr. vr. X(3)-O		<b>2,416(6)</b>	<b>2,410(6)</b>	<b>2,418(6)</b>	<b>2,412(6)</b>	<b>2,416(6)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,417(5)</b>	<b>2,410(5)</b>	<b>2,416(5)</b>	<b>2,414(5)</b>	<b>2,414(5)</b>
O(1)-O(2)	1	2,926(7)	2,908(7)	2,938(7)	3,004(7)	2,992(7)
O(1)-O(3)	1	2,787(6)	2,754(6)	2,819(6)	2,818(6)	2,851(6)
O(1)-O(4)	1	3,454(7)	3,426(7)	3,445(7)	3,443(7)	3,479(7)
O(1)-O(5)	1	4,224(6)	4,202(6)	4,235(6)	4,293(6)	4,285(6)
O(1)-O(6)	1	2,523(6)	2,532(6)	2,495(6)	2,567(6)	2,588(6)
O(2)-O(3)	1	2,790(5)	2,821(5)	2,827(5)	2,848(5)	2,834(5)
O(2)-O(3)	1	4,122(6)	4,140(6)	4,184(6)	4,162(6)	4,166(6)
O(2)-O(5)	1	2,843(6)	2,844(6)	2,889(6)	2,940(6)	2,888(6)
O(2)-O(6)	1	3,443(7)	3,426(7)	3,436(7)	3,510(7)	3,490(7)
O(3)-O(3)	1	2,957(5)	3,001(7)	3,019(7)	2,907(7)	2,944(7)
O(3)-O(5)	1	2,567(6)	2,597(6)	2,544(6)	2,545(6)	2,549(6)
O(3)-O(5)	1	3,468(7)	3,488(7)	3,462(7)	3,497(7)	3,455(7)
O(3)-O(4)	1	2,873(6)	2,841(6)	2,895(6)	2,833(6)	2,843(6)
O(3)-O(5)	1	3,467(7)	3,479(7)	3,475(7)	3,397(7)	3,445(7)
O(4)-O(5)	1	2,840(5)	2,820(5)	2,815(5)	2,745(5)	2,774(5)
O(4)-O(6)	1	2,975(7)	2,918(7)	2,934(7)	2,930(7)	2,944(7)
O(5)-O(5)	1	3,021(7)	3,021(7)	3,003(7)	2,916(7)	2,889(7)
O(5)-O(6)	1	2,816(6)	2,768(6)	2,804(6)	2,825(6)	2,814(6)
sr. vr. O-O		<b>3,116(6)</b>	<b>3,110(6)</b>	<b>3,123(6)</b>	<b>3,121(6)</b>	<b>3,124(6)</b>
sr. vr. O-O		<b>3,096(6)</b>	<b>3,104(6)</b>	<b>3,111(6)</b>	<b>3,109(6)</b>	<b>3,109(6)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja/Frequency of occurrences

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj/The numbers in parentheses are the estimated standard deviations multiplied with SCOR and refer to the last significant number

*PRILOG 181. Odabrani međuatomski uglovi ( $u^\circ$ ) u Fddd p.g.*

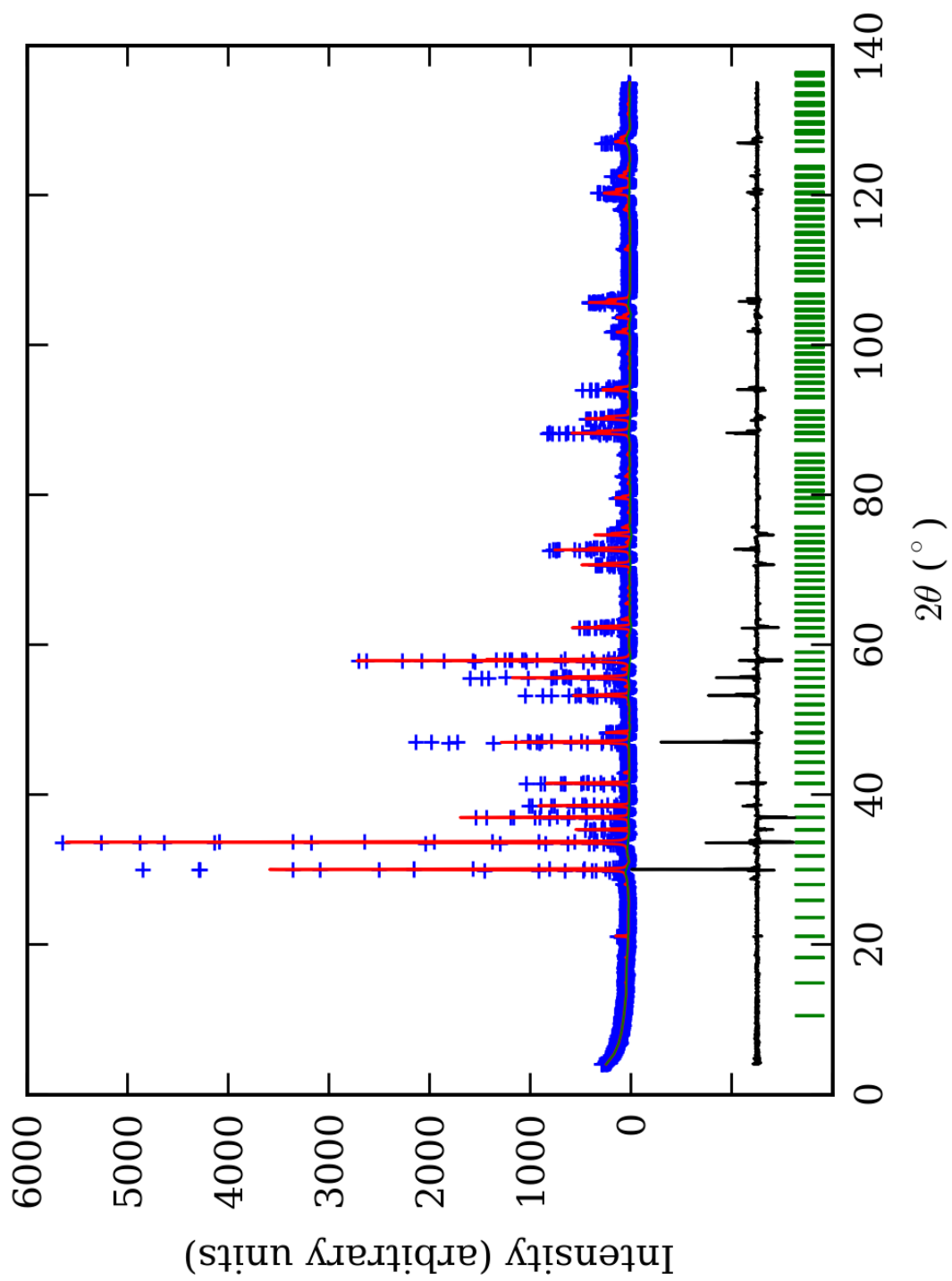
Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
O(2)-Si(1)-O(2)	1*	104,4(4) <sup>1</sup>	101,6(4)	100,8(4)	98,8(4)	101,5(4)
O(2)-Si(1)-O(4)	2	112,1(5)	113,4(3)	113,7(5)	115,4(5)	113,9(5)
O(2)-Si(1)-O(4)	2	114,0(5)	113,6(5)	113,9(5)	110,9(5)	111,8(5)
O(4)-Si(1)-O(4)	1	100,5(4)	101,7(4)	101,5(4)	105,8(4)	104,1(4)
sr. vr. O-Si(1)-O		<b>109,5(5)</b>	<b>109,6(4)</b>	<b>109,6(5)</b>	<b>109,5(5)</b>	<b>109,5(5)</b>
O(1)-Si(2)-O(3)	1	114,5(5)	114,0(5)	112,9(5)	112,8(5)	111,2(5)
O(1)-Si(2)-O(5)	1	113,4(5)	113,5(4)	115,2(5)	114,3(5)	112,7(5)
O(1)-Si(2)-O(6)	1	100,8(4)	99,8(4)	99,6(4)	102,6(4)	104,2(4)
O(3)-Si(2)-O(5)	1	103,3(4)	103,7(4)	102,6(4)	101,3(4)	101,4(4)
O(3)-Si(2)-O(6)	1	113,8(5)	113,6(4)	113,7(5)	112,1(4)	112,9(4)
O(5)-Si(2)-O(6)	1	111,5(5)	112,7(4)	113,4(5)	114,2(5)	114,8(5)

<b>sr. vr. O-Si(2)-O</b>		<b>109,6(5)</b>	<b>109,6(4)</b>	<b>109,6(5)</b>	<b>109,6(4)</b>	<b>109,5(4)</b>
<b>sr. vr. O-Si-O</b>		<b>109,6(5)</b>	<b>109,6(4)</b>	<b>109,6(5)</b>	<b>109,6(4)</b>	<b>109,5(4)</b>
<b>O(1)-Y(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	88,6(3)	89,3(3)	88,8(3)	88,7(3)	88,6(3)
<b>O(1)-Y(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	91,4(3)	90,7(3)	91,2(3)	91,7(3)	91,4(3)
<b>O(1)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	90,4(3)	89,4(3)	91,4(3)	91,2(3)	92,6(3)
<b>O(1)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	89,6(3)	90,6(3)	88,6(3)	88,8(3)	87,4(3)
<b>O(2)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	89,2(3)	87,9(3)	88,1(3)	87,5(3)	88,0(3)
<b>O(2)-Y(1)-O(3)</b>	<b>2</b>	90,8(3)	92,1(3)	91,9(3)	92,5(3)	92,0(3)
<b>sr. vr. O-Y(1)-O</b>		<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>
<b>O(4)-Y(2)-O(5)</b>	<b>2</b>	87,1(3)	87,9(3)	88,3(3)	91,4(3)	90,6(3)
<b>O(4)-Y(2)-O(5)</b>	<b>2</b>	92,9(3)	92,1(3)	91,7(3)	88,6(3)	89,4(3)
<b>O(4)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	91,7(3)	90,7(3)	91,2(3)	91,2(3)	91,1(3)
<b>O(4)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	88,3(3)	89,3(3)	88,8(3)	88,8(3)	88,9(3)
<b>O(5)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	88,3(3)	90,1(3)	89,2(3)	88,0(3)	88,8(3)
<b>O(5)-Y(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	91,7(3)	89,9(3)	90,8(3)	92,0(3)	91,2(3)
<b>sr. vr. O-Y(2)-O</b>		<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>
<b>sr. vr. O-Y-O</b>		<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>	<b>90,0(3)</b>
<b>O(1)-X(1)-O(1)</b>	<b>2</b>	71,5(2)	73,1(3)	71,6(2)	68,8(2)	68,0(2)
<b>O(1)-X(1)-O(1)</b>	<b>2</b>	110,9(3)	109,2(3)	110,9(3)	113,4(3)	114,1(3)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>4</b>	74,4(3)	74,1(3)	74,8(3)	76,9(3)	76,5(3)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>4</b>	91,9(3)	92,3(3)	91,3(3)	90,1(3)	90,8(3)
<b>O(1)-X(1)-O(2)</b>	<b>4</b>	71,0(2)	70,6(2)	71,3(2)	71,2(2)	71,2(2)
<b>O(2)-X(1)-O(2)</b>	<b>2</b>	67,3(2)	67,2(2)	66,3(2)	64,9(2)	65,7(2)
<b>sr. vr. O-X(1)-O</b>		<b>80,5(3)</b>	<b>80,4(3)</b>	<b>80,4(3)</b>	<b>80,4(3)</b>	<b>80,5(3)</b>
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	119,0(3)	117,1(3)	118,0(3)	115,7(3)	116,7(3)
<b>O(4)-X(2)-O(4)</b>	<b>2</b>	65,6(2)	67,2(2)	66,4(2)	68,0(2)	67,1(2)
<b>O(4)-X(2)-O(6)</b>	<b>4</b>	90,7(3)	92,1(3)	91,1(3)	92,6(3)	92,0(3)
<b>O(4)-X(2)-O(6)</b>	<b>4</b>	71,3(2)	70,6(2)	71,4(2)	71,0(2)	71,2(2)
<b>O(4)-X(2)-O(6)</b>	<b>4</b>	75,8(3)	74,4(3)	74,7(3)	74,6(3)	75,1(3)
<b>O(6)-X(2)-O(6)</b>	<b>2</b>	70,1(2)	72,5(3)	71,6(2)	69,6(2)	69,2(2)
<b>sr. vr. O-X(2)-O</b>		<b>81,1(3)</b>	<b>81,2(3)</b>	<b>81,2(3)</b>	<b>81,1(3)</b>	<b>81,1(3)</b>
<b>O(1)-X(3)-O(2)</b>	<b>1</b>	74,5(3)	74,0(3)	74,7(3)	76,9(3)	76,5(3)
<b>O(1)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	70,5(3)	69,6(3)	71,0(3)	71,4(3)	72,2(3)
<b>O(1)-X(3)-O(4)</b>	<b>1</b>	91,2(3)	90,5(3)	90,9(3)	91,0(3)	92,0(3)
<b>O(1)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	122,1(3)	121,4(3)	122,1(3)	125,8(3)	124,9(3)
<b>O(1)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	65,6(2)	65,9(2)	65,1(2)	66,9(2)	67,1(2)
<b>O(2)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	70,5(2)	71,5(2)	71,5(2)	72,2(2)	71,8(2)
<b>O(2)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	111,1(3)	112,3(3)	112,3(3)	113,1(3)	113,6(3)
<b>O(2)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	69,3(2)	69,5(2)	70,1(2)	72,2(2)	70,9(2)
<b>O(2)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	90,9(3)	90,4(3)	90,6(3)	93,2(3)	92,6(3)
<b>O(3)-X(3)-O(3)</b>	<b>1</b>	75,4(3)	77,0(3)	77,0(3)	74,0(3)	75,0(3)
<b>O(3)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	66,8(3)	67,9(3)	66,5(3)	66,2(3)	65,9(3)
<b>O(3)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	91,7(3)	92,8(3)	91,3(3)	92,8(3)	91,2(3)
<b>O(3)-X(3)-O(4)</b>	<b>1</b>	70,0(2)	69,5(2)	70,2(2)	69,2(2)	69,6(2)
<b>O(3)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	91,6(3)	92,5(2)	91,6(3)	89,6(3)	90,8(3)
<b>O(4)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	71,7(2)	71,5(2)	71,1(2)	69,3(2)	70,0(2)
<b>O(4)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	75,8(3)	74,3(3)	74,7(3)	74,7(3)	75,1(3)
<b>O(5)-X(3)-O(5)</b>	<b>1</b>	77,3(3)	77,7(3)	76,6(3)	74,3(3)	73,3(3)
<b>O(5)-X(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	71,2(3)	70,0(2)	70,7(3)	71,6(3)	71,2(3)
<b>sr. vr. O-X(3)-O</b>		<b>81,0(3)</b>	<b>81,0(3)</b>	<b>81,0(3)</b>	<b>81,4(3)</b>	<b>81,3(3)</b>
<b>sr. vr. O-X-O</b>		<b>80,9(3)</b>	<b>80,9(3)</b>	<b>80,9(3)</b>	<b>81,0(3)</b>	<b>81,0(3)</b>

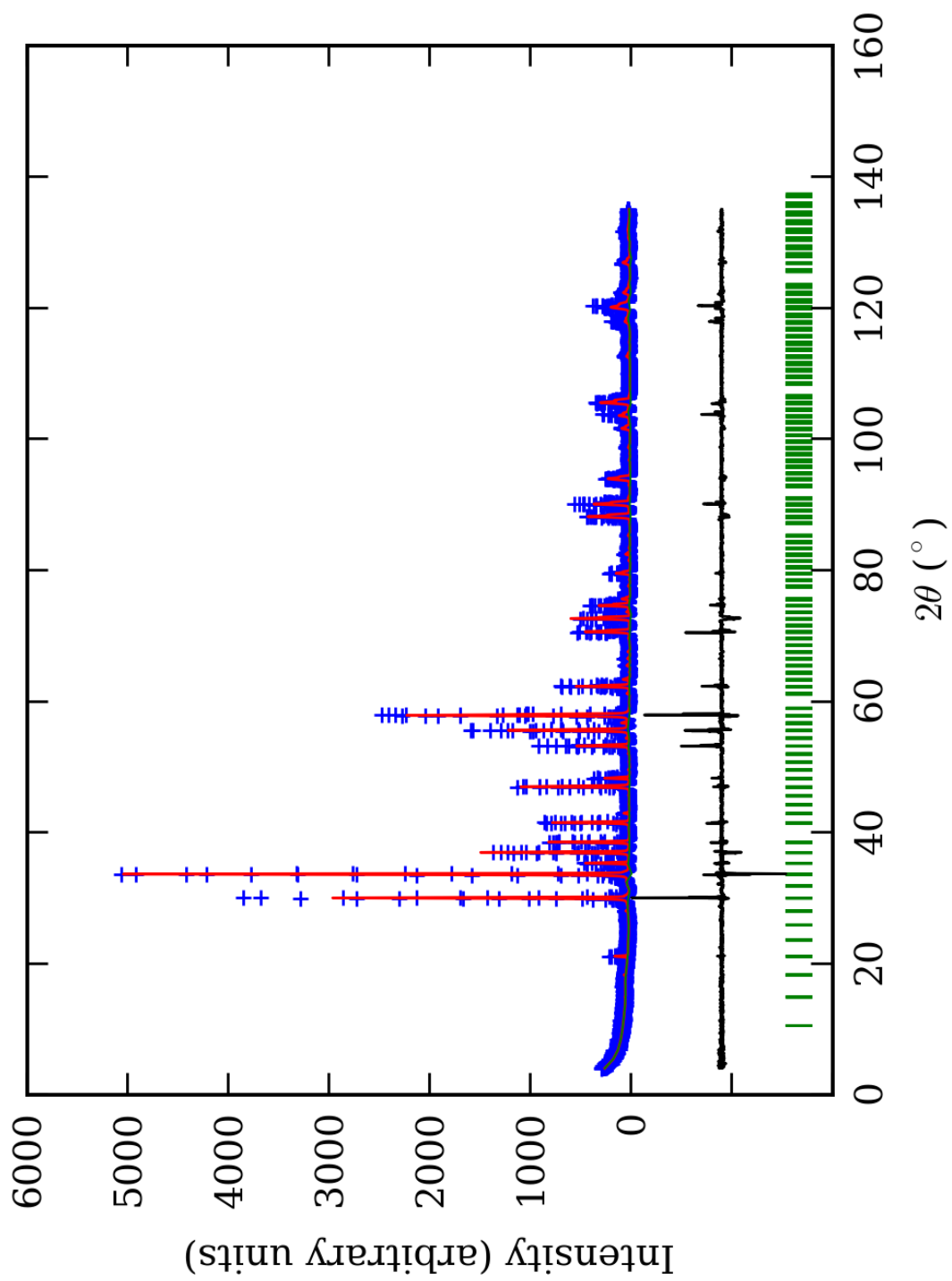
\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenju standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

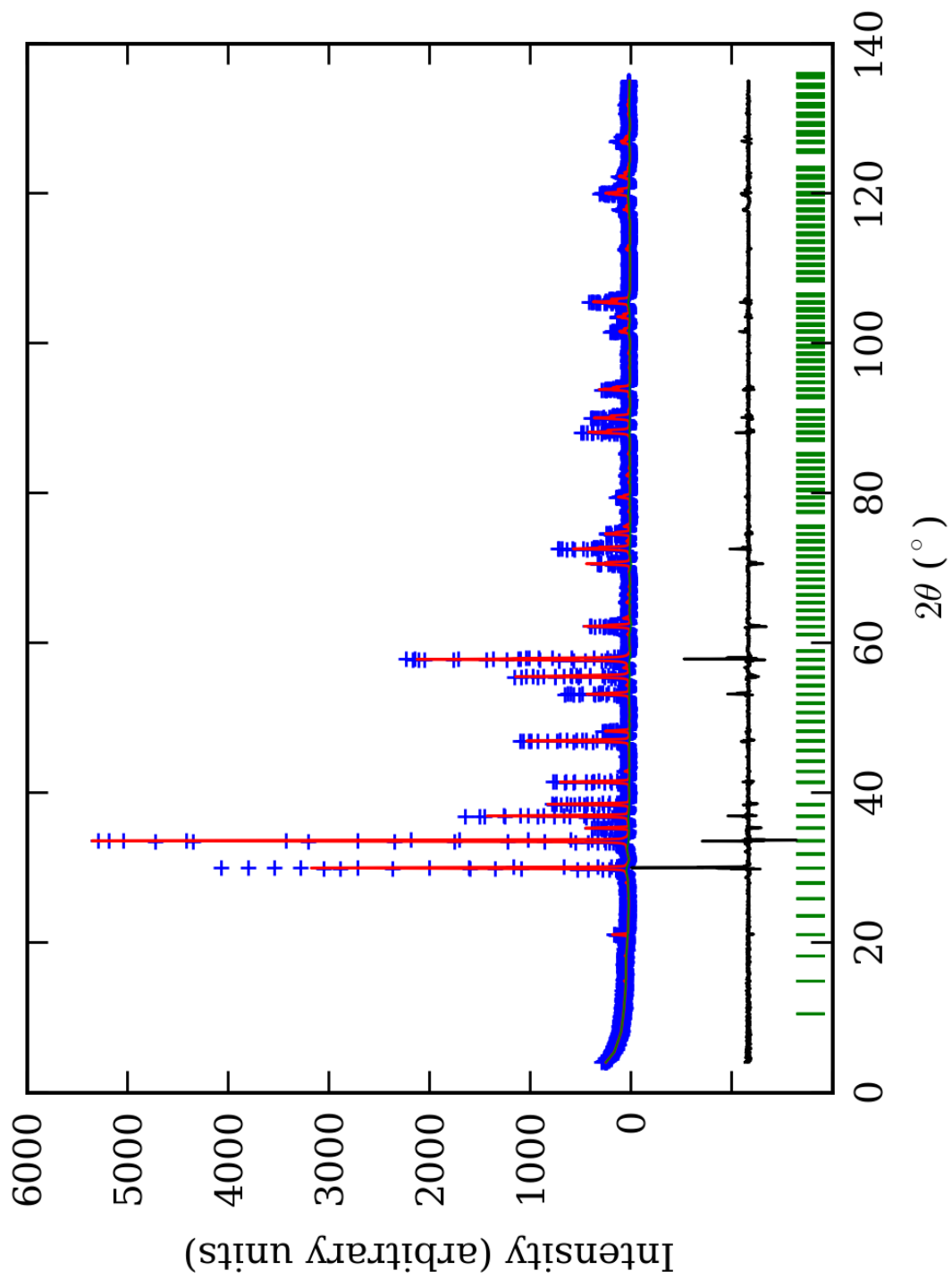




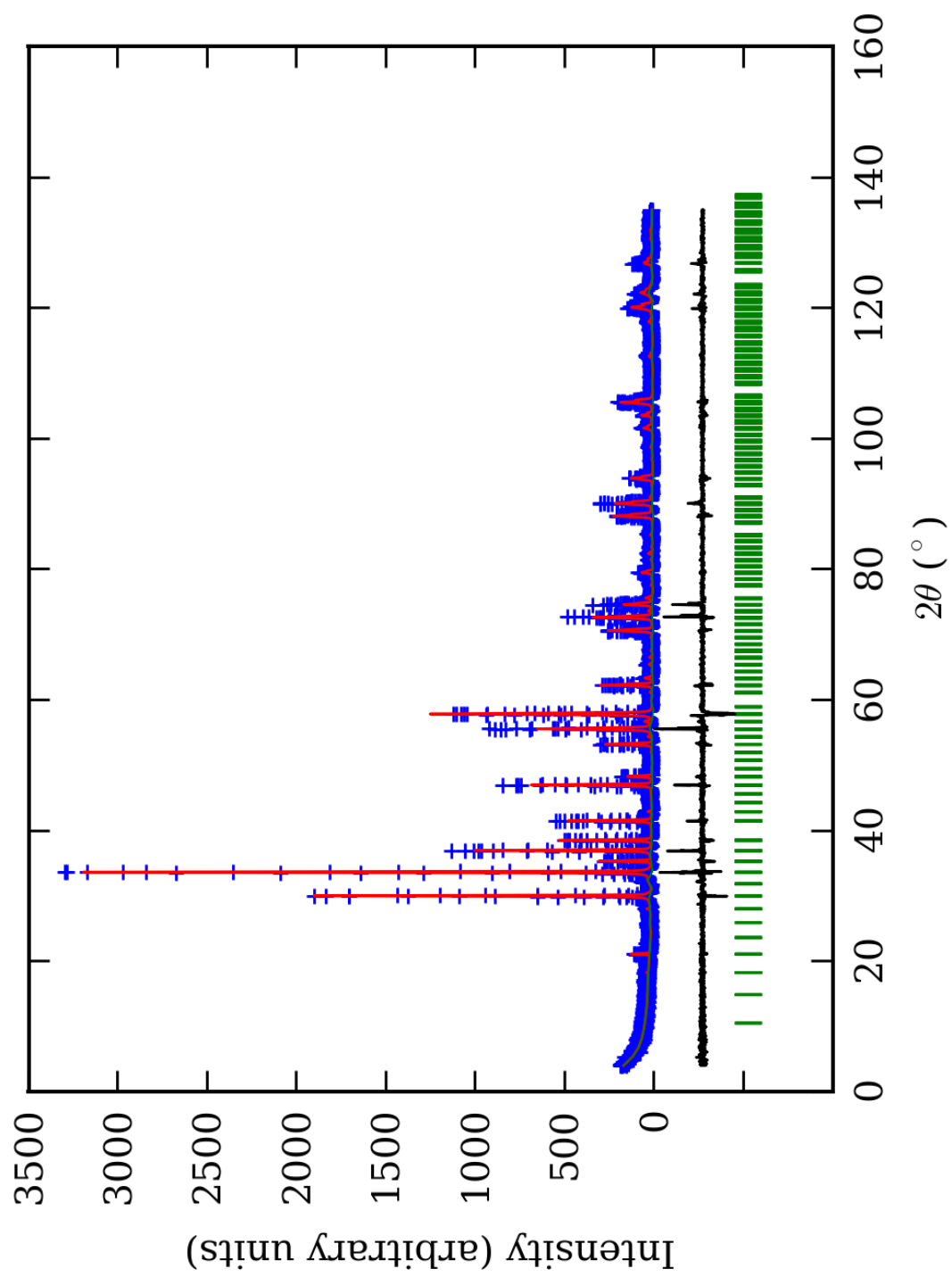
PRILOG 182. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u C2/c p.g.



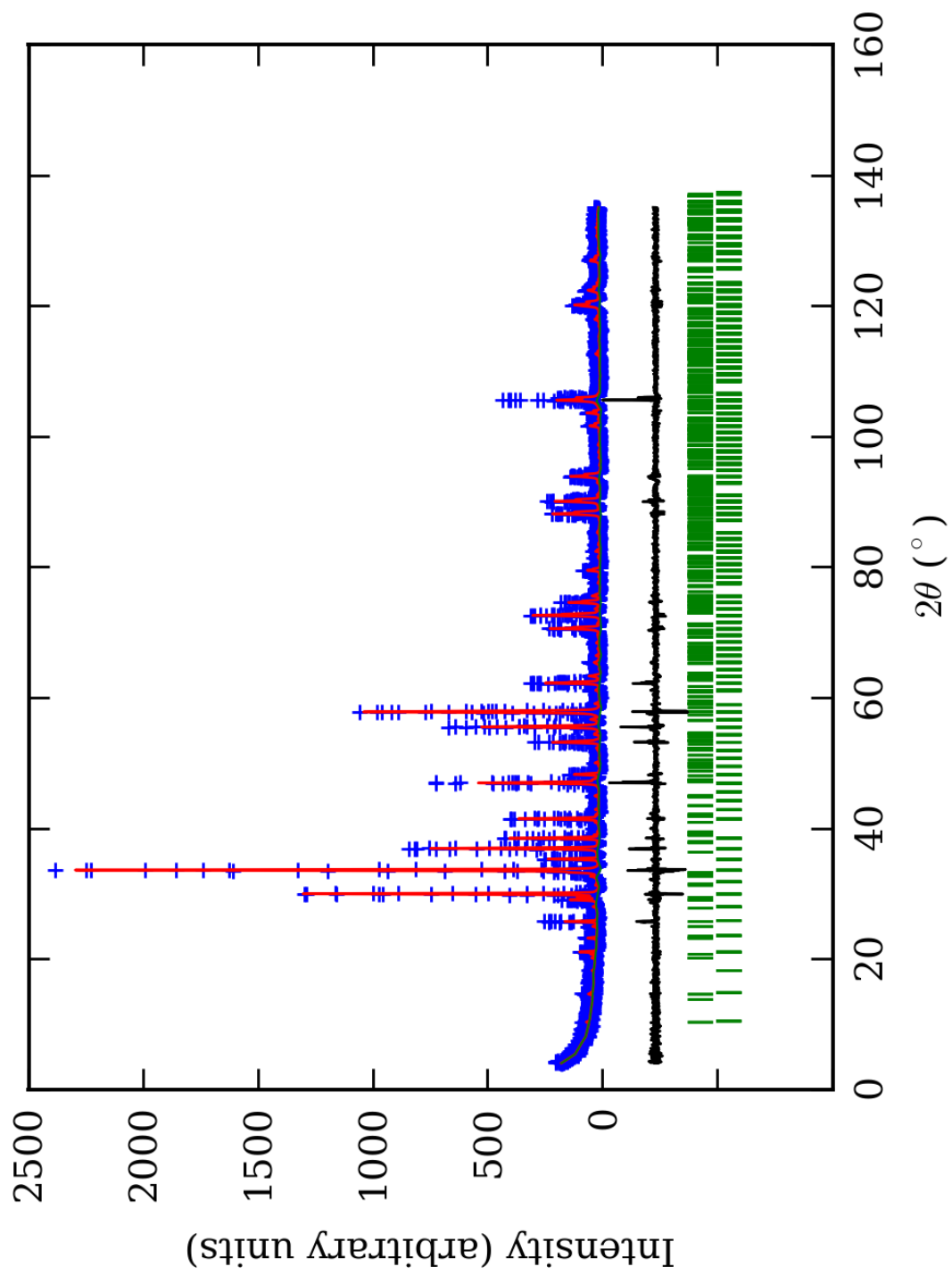
PRILOG 183. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u C2/c p.g.



PRILOG 184. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone C u C2/c p.g.



PRILOG 185. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u C2/c p.g.



PRILOG 186. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u C2/c p.g.

PRILOG 187. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u C2/c p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	2,4806	2,5033	2,2118	2,0119	1,7297	
Faktor skale	0,0000073(8)*	0,000108(8)	0,0000155(7)	0,000048(1)	0,000034(1)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	-0,32(9)	0,4(1)	-0,42(6)	0,16(9)	-0,02(8)	
Ukupni temp. faktor	0,31(9)	0,4(1)	0,64(6)	0,7(1)	0,40(8)	
Parametri polu-širine	U	0,008(3)	0,06(1)	0,011(1)	-0,001(8)	0,006(4)
	V	-0,022(5)	-0,04(1)	-0,037(3)	0,02(1)	-0,010(8)
	W	0,021(2)	0,028(4)	0,032(1)	0,015(3)	0,030(3)
Preferentna orijent.	0,81(7)	-2,2(2)	0,30(3)	-1,36(4)	-1,29(4)	
Parametri asimetrije	As 1	-0,00(5)	0,19(4)	0,10(4)	0,08(6)	0,06(4)
	As 2	0,05(1)	0,062(7)	0,053(7)	0,044(7)	0,040(7)
X parametar	0,019(2)	0,002(2)	0,021(7)	0,006(2)	0,011(2)	
Nulta tačka	0,003(6)	0,035(8)	0,004(5)	0,02(1)	-0,042(7)	
a <sub>0</sub>	16,860(1)	16,89(1)	16,8936(7)	16,899(2)	16,885(2)	
b <sub>0</sub>	11,9201(7)	11,950(3)	11,9303(6)	11,922(3)	11,925(2)	
c <sub>0</sub>	11,9074(9)	11,937(9)	11,9434(6)	11,951(3)	11,938(2)	
β <sub>0</sub>	134,981(6)	135,05(4)	135,077(2)	135,08(6)	135,062(5)	
V <sub>0</sub>	1692,7(2)	1702(2)	1699,8(1)	1700,2(5)	1697,9(5)	
N-P+C	6382	6382	6382	6382	6359	
R <sub>p</sub>	16,0	14,8	13,0	13,9	13,5	
R <sub>wp</sub>	21,1	19,8	17,6	18,9	18,1	
R <sub>exp</sub>	11,45	11,38	11,59	14,04	14,00	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	25,6	23,5	21,1	22,8	25,4	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	28,2	26,3	23,7	25,7	27,5	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	15,26	15,07	15,55	19,10	21,20	
Chi2	3,41	3,04	2,32	1,80	1,68	
Chi2 (Bragg contr.)	3,74	3,26	2,50	1,95	1,76	
DW-stat.	0,7742	0,8290	1,0710	1,3012	1,3402	
DW-exp.	1,9763	1,9763	1,9763	1,9763	1,9837	
GoF	1,8	1,7	1,5	1,3	1,3	
R <sub>B</sub>	<b>12,6</b>	<b>10,6</b>	<b>8,89</b>	<b>8,49</b>	<b>6,96</b>	
R <sub>F</sub>	<b>9,89</b>	<b>8,35</b>	<b>8,67</b>	<b>7,76</b>	<b>6,60</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenju standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 188. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u C2/c p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		2,4806		2,5033		2,2118		2,0119		1,7297	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)
	y	0,1305(8)*		0,1198(8)		0,1284(8)		0,1310(7)		0,1323(6)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca2	x	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)	0,000	0,49 (0)
	y	0,6211(8)		0,6266(8)		0,6241(8)		0,6275(7)		0,6268(6)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Ca3	x	0,2525(6)	0,98 (0)	0,2482(6)	0,98 (0)	0,2529(6)	0,98 (0)	0,2490(5)	0,98 (0)	0,2497(4)	0,98 (0)
	y	0,5044(6)		0,5034(6)		0,5013(6)		0,5018(5)		0,4995(4)	
	z	0,3766(9)		0,3741(8)		0,3774(8)		0,3731(7)		0,3730(6)	
Ca4	x	0,1247(6)	0,98 (0)	0,1206(6)	0,98 (0)	0,1249(5)	0,98 (0)	0,1256(5)	0,98 (0)	0,1251(4)	0,98 (0)
	y	0,7487(6)		0,7481(6)		0,7500(6)		0,7479(5)		0,7573(4)	
	z	0,1271(9)		0,1206(8)		0,1240(8)		0,1278(7)		0,1254(6)	
Al1	x	0,000	0,34 (8)	0,000	0,30 (5)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,22 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,16 (8)	0,000	0,20 (5)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,28 (5)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,250	0,30 (8)	0,250	0,32 (5)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,36 (5)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe2	x	0,250	0,20 (8)	0,250	0,18 (5)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,14 (5)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al3	x	0,000	0,35 (8)	0,000	0,27 (5)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,3 (1)	0,000	0,27 (5)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe3	x	0,000	0,15 (8)	0,000	0,23 (5)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,2 (1)	0,000	0,23 (5)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al4	x	0,250	0,29 (8)	0,250	0,35 (5)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,3 (1)	0,250	0,31 (5)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe4	x	0,250	0,21 (8)	0,250	0,15 (5)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,2 (1)	0,250	0,19 (5)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Si1	x	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)
	y	0,875(1)		0,875(1)		0,874(1)		0,8766(9)		0,8766(8)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si2	x	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)	0,000	0,500 (0)
	y	0,376(1)		0,375(1)		0,378(1)		0,3739(9)		0,3747(8)	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Si3	x	0,2510(9)	1,000 (0)	0,2519(9)	1,000 (0)	0,2493(8)	1,000 (0)	0,2523(7)	1,000 (0)	0,2452(6)	1,000 (0)
	y	0,5004(9)		0,4990(9)		0,5002(8)		0,4999(8)		0,5032(6)	
	z	0,126(1)		0,128(1)		0,124(1)		0,128(1)		0,1205(9)	
Si4	x	0,3748(8)	1,000 (0)	0,3731(8)	1,000 (0)	0,3748(7)	1,000 (0)	0,3754(7)	1,000 (0)	0,3748(6)	1,000 (0)
	y	0,7507(9)		0,7506(9)		0,7509(8)		0,7503(6)		0,7508(6)	
	z	0,370(1)		0,370(1)		0,374(1)		0,373(1)		0,3770(9)	
O1	x	0,2958(9)	1,000 (0)	0,2972(9)	1,000 (0)	0,2959(8)	1,000 (0)	0,2968(8)	1,000 (0)	0,2964(7)	1,000 (0)
	y	0,0966(8)		0,0980(8)		0,0958(7)		0,0964(7)		0,0957(6)	
	z	0,006(1)		0,007(1)		0,008(1)		0,007(1)		0,0085(9)	
O2	x	0,5401(9)	1,000 (0)	0,5417(9)	1,000 (0)	0,5381(8)	1,000 (0)	0,5396(8)	1,000 (0)	0,5351(7)	1,000 (0)
	y	0,1530(8)		0,1520(8)		0,1540(7)		0,1530(7)		0,1545(6)	
	z	0,494(1)		0,495(1)		0,492(1)		0,493(1)		0,4891(9)	

<b>O3</b>	x	0,0376(9)	1,000 (0)	0,0388(9)	1,000 (0)	0,0389(9)	1,000 (0)	0,0368(8)	1,000 (0)	0,0421(7)	1,000 (0)
	y	0,8467(8)		0,8474(8)		0,8460(7)		0,8462(7)		0,8476(6)	
	z	0,583(1)		0,586(1)		0,585(1)		0,583(1)		0,589(1)	
<b>O4</b>	x	0,7036(9)	1,000 (0)	0,7048(9)	1,000 (0)	0,7035(9)	1,000 (0)	0,7028(8)	1,000 (0)	0,7026(7)	1,000 (0)
	y	0,4041(8)		0,4037(8)		0,4043(7)		0,4040(7)		0,4037(6)	
	z	0,917(1)		0,918(1)		0,916(1)		0,916(1)		0,915(1)	
<b>O5</b>	x	0,2915(9)	1,000 (0)	0,2846(9)	1,000 (0)	0,2886(9)	1,000 (0)	0,2916(9)	1,000 (0)	0,2866(7)	1,000 (0)
	y	0,7985(9)		0,7072(9)		0,7062(9)		0,7048(9)		0,7033(7)	
	z	0,388(1)		0,379(1)		0,384(1)		0,389(1)		0,383(1)	
<b>O6</b>	x	0,1527(8)	1,000 (0)	0,1538(8)	1,000 (0)	0,1538(7)	1,000 (0)	0,1531(7)	1,000 (0)	0,1515(6)	1,000 (0)
	y	0,5453(9)		0,5454(9)		0,5456(9)		0,5454(9)		0,5536(7)	
	z	0,113(1)		0,115(1)		0,116(1)		0,112(1)		0,114(1)	
<b>O7</b>	x	0,6524(8)	1,000 (0)	0,6535(8)	1,000 (0)	0,6533(7)	1,000 (0)	0,6529(7)	1,000 (0)	0,6540(6)	1,000 (0)
	y	0,4531(9)		0,4516(9)		0,4538(9)		0,4518(8)		0,4596(7)	
	z	0,191(1)		0,188(1)		0,193(1)		0,1903(9)		0,1962(8)	
<b>O8</b>	x	0,7148(9)	1,000 (0)	0,7179(9)	1,000 (0)	0,7120(9)	1,000 (0)	0,7128(8)	1,000 (0)	0,7096(7)	1,000 (0)
	y	0,7999(9)		0,7988(9)		0,7976(9)		0,7975(8)		0,7961(7)	
	z	0,312(1)		0,314(1)		0,309(1)		0,3098(9)		0,3066(8)	
<b>O9</b>	x	0,9012(8)	1,000 (0)	0,9050(8)	1,000 (0)	0,9031(7)	1,000 (0)	0,9010(7)	1,000 (0)	0,9008(6)	1,000 (0)
	y	0,7075(9)		0,7154(9)		0,7086(9)		0,7075(8)		0,7063(7)	
	z	0,603(1)		0,610(1)		0,608(1)		0,6013(9)		0,6009(8)	
<b>O10</b>	x	0,5427(9)	1,000 (0)	0,5482(9)	1,000 (0)	0,5428(9)	1,000 (0)	0,5464(8)	1,000 (0)	0,5461(7)	1,000 (0)
	y	0,5349(9)		0,5418(9)		0,5363(9)		0,5343(8)		0,5335(7)	
	z	0,888(1)		0,897(1)		0,888(1)		0,8918(9)		0,8909(8)	
<b>O11</b>	x	0,0498(9)	1,000 (0)	0,0446(9)	1,000 (0)	0,0491(9)	1,000 (0)	0,0460(8)	1,000 (0)	0,0463(7)	1,000 (0)
	y	0,4597(9)		0,4628(9)		0,4623(9)		0,4624(8)		0,4622(7)	
	z	0,202(1)		0,198(1)		0,202(1)		0,200(1)		0,2002(9)	
<b>O12</b>	x	0,0955(8)	1,000 (0)	0,0975(8)	1,000 (0)	0,0962(7)	1,000 (0)	0,0971(7)	1,000 (0)	0,0969(6)	1,000 (0)
	y	0,7862(9)		0,7894(9)		0,7873(9)		0,7910(8)		0,7906(7)	
	z	0,302(1)		0,301(1)		0,299(1)		0,301(1)		0,3010(9)	
<b>Ca1 (%)</b>		98		98		98		98		98	
<b>Ca2 (%)</b>		98		98		98		98		98	
<b>Ca3 (%)</b>		98		98		98		98		98	
<b>Ca4 (%)</b>		98		98		98		98		98	
<b>Al1 (%)</b>		68(16)		60(10)		60(20)		60(20)		44(10)	
<b>Al2 (%)</b>		60(16)	64	64(10)	62	60(20)	60	60(20)	60	72(10)	58
<b>Al3 (%)</b>		70(16)	(16)	54(10)	(10)	60(20)	(20)	60(20)	(20)	54(10)	(10)
<b>Al4 (%)</b>		60(16)		70(10)		60(20)		60(20)		64(10)	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj/The numbers in parentheses are the estimated standard deviations multiplied with SCOR and refer to the last significant number

*PRILOG 189. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja (u Å) u C2/c p.g.*

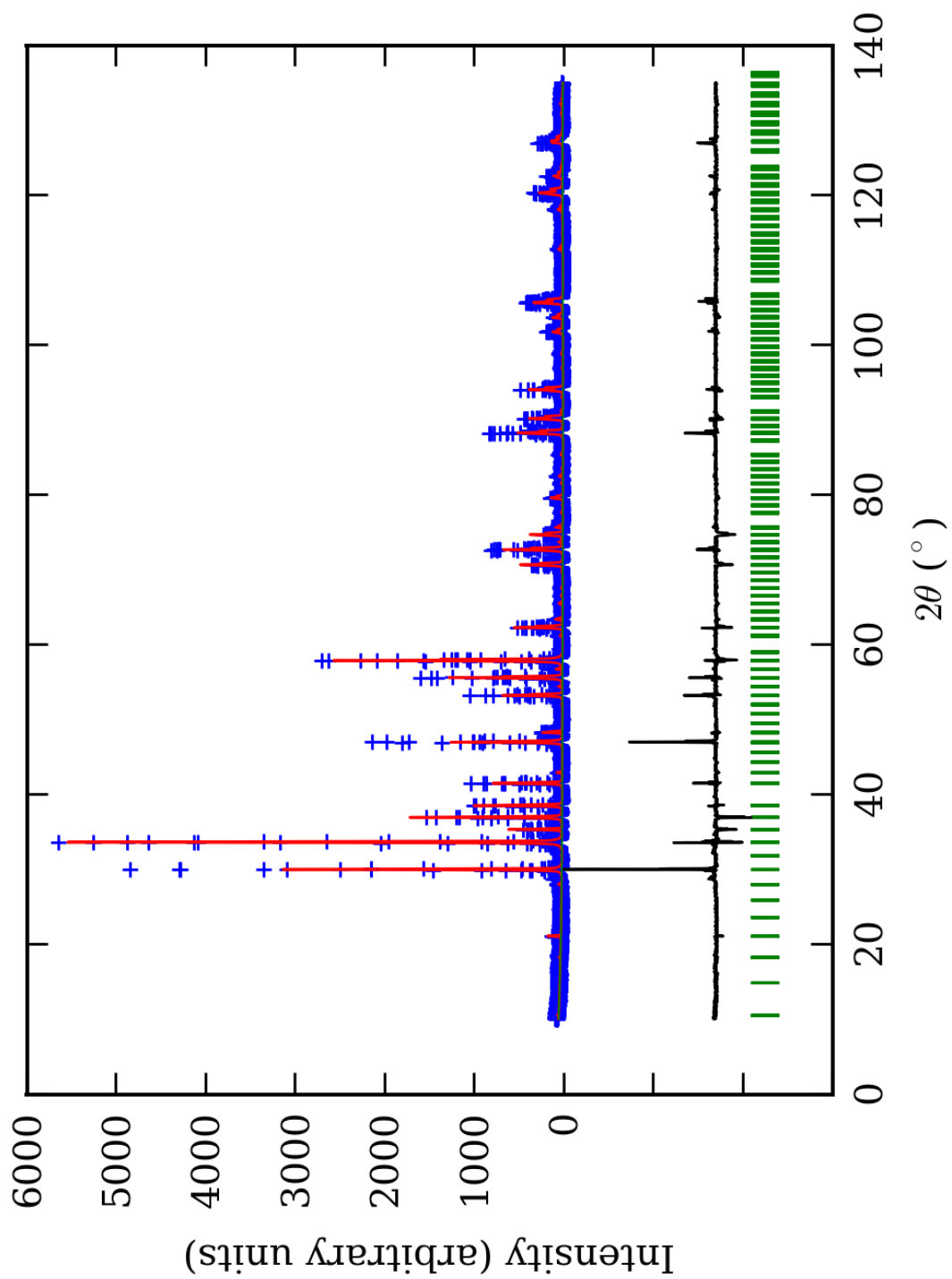
Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
<b>Si(1)-O(10)</b>	<b>2*</b>	1,640(7) <sup>1</sup>	1,644(7)	1,640(7)	1,653(7)	1,653(7)
<b>Si(1)-O(12)</b>	<b>2</b>	1,640(7)	1,647(6)	1,642(6)	1,640(6)	1,640(6)
<b>sr. vr. Si(1)-O</b>		<b>1,640(7)</b>	<b>1,646(6)</b>	<b>1,641(6)</b>	<b>1,646(6)</b>	<b>1,646(6)</b>
<b>Si(2)-O(9)</b>	<b>2</b>	1,645(5)	1,652(5)	1,643(5)	1,640(5)	1,639(5)
<b>Si(2)-O(11)</b>	<b>2</b>	1,647(8)	1,649(8)	1,641(8)	1,652(8)	1,647(8)
<b>sr. vr. Si(2)-O</b>		<b>1,646(6)</b>	<b>1,650(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,646(6)</b>	<b>1,643(6)</b>
<b>Si(3)-O(1)</b>	<b>1</b>	1,641(7)	1,651(7)	1,637(7)	1,651(7)	1,651(7)
<b>Si(3)-O(4)</b>	<b>1</b>	1,64(1)	1,66(1)	1,64(1)	1,65(1)	1,65(1)
<b>Si(3)-O(6)</b>	<b>1</b>	1,64(1)	1,65(1)	1,64(1)	1,64(1)	1,64(1)
<b>Si(3)-O(7)</b>	<b>1</b>	1,641(6)	1,651(6)	1,641(6)	1,638(6)	1,638(6)
<b>sr. vr. Si(3)-O</b>		<b>1,640(8)</b>	<b>1,653(8)</b>	<b>1,640(8)</b>	<b>1,645(8)</b>	<b>1,645(8)</b>
<b>Si(4)-O(2)</b>	<b>1</b>	1,647(5)	1,657(5)	1,638(5)	1,643(5)	1,645(5)
<b>Si(4)-O(3)</b>	<b>1</b>	1,636(8)	1,658(8)	1,638(8)	1,642(8)	1,642(8)



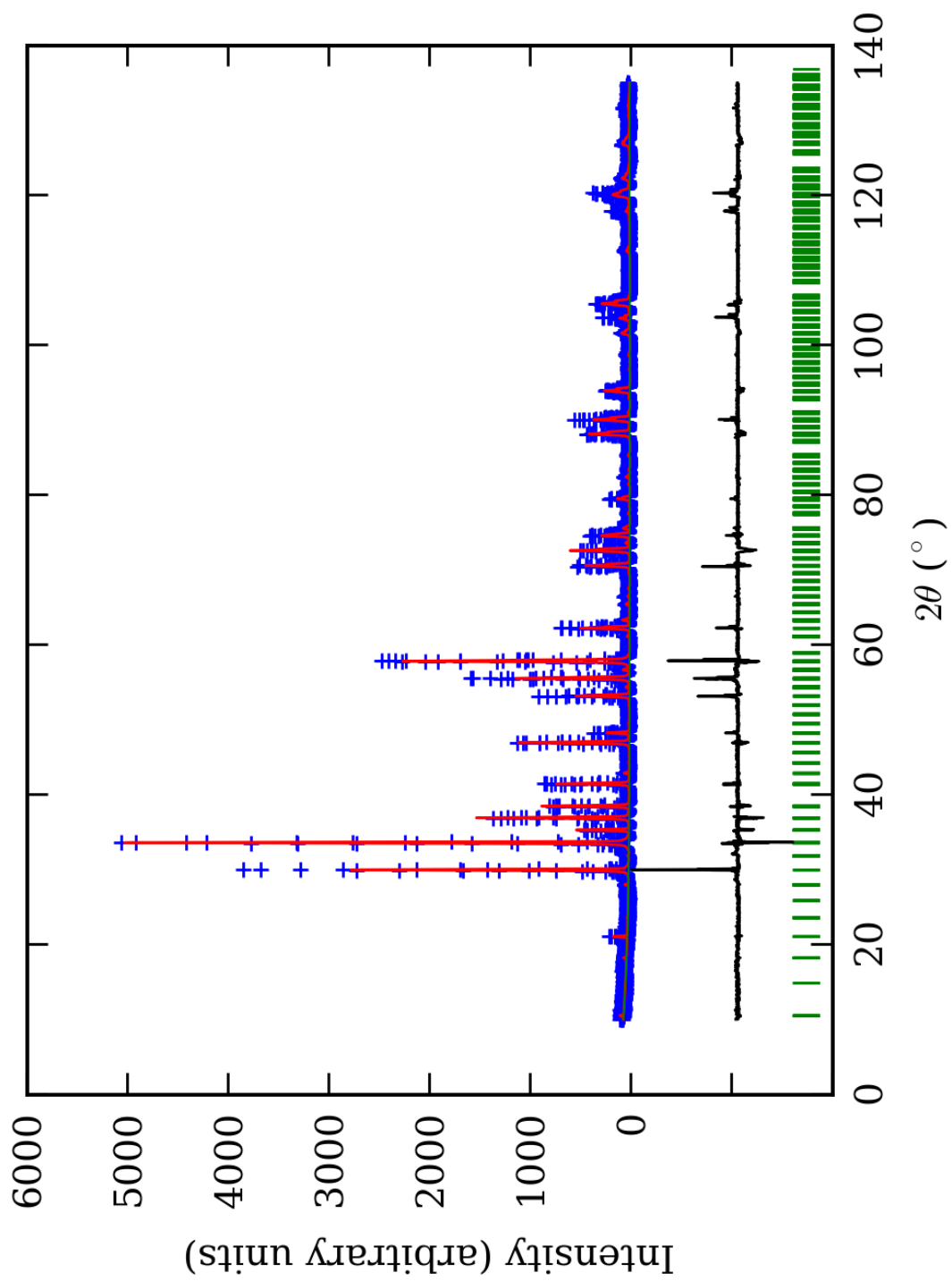
Si(4)-O(5)	1	1,64(1)	1,66(1)	1,64(1)	1,65(1)	1,64(1)
Si(4)-O(8)	1	1,642(6)	1,654(6)	1,637(6)	1,645(6)	1,644(6)
sr. vr. Si(4)-O		<b>1,641(7)</b>	<b>1,657(7)</b>	<b>1,638(7)</b>	<b>1,645(7)</b>	<b>1,643(7)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,642(7)</b>	<b>1,652(7)</b>	<b>1,640(7)</b>	<b>1,646(7)</b>	<b>1,644(7)</b>
Y(1)-O(3)	2	1,958(4)	1,963(4)	1,972(4)	1,964(4)	1,966(4)
Y(1)-O(7)	2	1,956(3)	1,965(3)	1,968(3)	1,964(3)	1,964(3)
Y(1)-O(10)	2	1,957(8)	1,959(8)	1,973(8)	1,972(8)	1,974(8)
sr. vr. Y(1)-O		<b>1,957(5)</b>	<b>1,962(5)</b>	<b>1,971(5)</b>	<b>1,967(5)</b>	<b>1,968(5)</b>
Y(2)-O(4)	2	1,967(4)	1,965(4)	1,975(4)	1,971(4)	1,970(4)
Y(2)-O(8)	2	1,960(7)	1,962(7)	1,970(7)	1,965(7)	1,968(7)
Y(2)-O(9)	2	1,959(5)	1,971(5)	1,969(5)	1,963(5)	1,966(5)
sr. vr. Y(2)-O		<b>1,962(5)</b>	<b>1,966(5)</b>	<b>1,971(5)</b>	<b>1,966(5)</b>	<b>1,968(5)</b>
Y(3)-O(2)	2	1,965(4)	1,965(5)	1,971(4)	1,964(4)	1,968(4)
Y(3)-O(6)	2	1,957(5)	1,970(5)	1,966(5)	1,967(5)	1,968(5)
Y(3)-O(11)	2	1,963(6)	1,960(7)	1,971(6)	1,973(6)	1,970(6)
sr. vr. Y(3)-O		<b>1,962(5)</b>	<b>1,965(6)</b>	<b>1,969(5)</b>	<b>1,968(5)</b>	<b>1,969(5)</b>
Y(4)-O(1)	2	1,966(4)	1,963(4)	1,972(4)	1,972(4)	1,974(4)
Y(4)-O(5)	2	1,958(9)	1,970(8)	1,969(9)	1,968(9)	1,965(9)
Y(4)-O(12)	2	1,961(3)	1,958(3)	1,968(3)	1,967(3)	1,966(3)
sr. vr. Y(4)-O		<b>1,962(5)</b>	<b>1,964(5)</b>	<b>1,970(5)</b>	<b>1,969(5)</b>	<b>1,968(5)</b>
sr. vr. Y-O		<b>1,961(5)</b>	<b>1,964(5)</b>	<b>1,970(5)</b>	<b>1,968(5)</b>	<b>1,968(5)</b>
X(1)-O(3)	2	2,492(9)	2,500(8)	2,503(9)	2,493(9)	2,492(9)
X(1)-O(4)	2	2,502(6)	2,500(6)	2,501(6)	2,496(6)	2,496(6)
X(1)-O(9)	2	2,333(5)	2,335(5)	2,326(5)	2,336(5)	2,336(5)
X(1)-O(10)	2	2,330(6)	2,335(6)	2,324(6)	2,343(6)	2,343(6)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,414(6)</b>	<b>2,418(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,417(6)</b>	<b>2,417(6)</b>
X(2)-O(1)	2	2,497(4)	2,491(4)	2,499(4)	2,497(4)	2,497(4)
X(2)-O(2)	2	2,501(7)	2,493(7)	2,502(7)	2,493(7)	2,493(7)
X(2)-O(11)	2	2,328(7)	2,332(7)	2,326(7)	2,343(7)	2,340(7)
X(2)-O(12)	2	2,331(6)	2,333(6)	2,329(6)	2,334(6)	2,335(6)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,414(6)</b>	<b>2,412(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,417(6)</b>	<b>2,416(6)</b>
X(3)-O(1)	1	2,328(9)	2,332(9)	2,328(9)	2,341(9)	2,341(9)
X(3)-O(4)	1	2,335(8)	2,332(8)	2,327(8)	2,341(8)	2,341(8)
X(3)-O(5)	1	2,499(6)	2,502(6)	2,505(6)	2,495(6)	2,491(6)
X(3)-O(6)	1	2,333(7)	2,321(6)	2,328(7)	2,335(8)	2,336(7)
X(3)-O(7)	1	2,327(9)	2,334(8)	2,330(9)	2,336(9)	2,336(9)
X(3)-O(8)	1	2,499(6)	2,498(6)	2,501(6)	2,493(6)	2,492(6)
X(3)-O(10)	1	2,496(5)	2,490(5)	2,499(5)	2,498(5)	2,498(5)
X(3)-O(11)	1	2,498(7)	2,500(6)	2,499(7)	2,494(7)	2,494(7)
sr. vr. X(3)-O		<b>2,414(7)</b>	<b>2,414(7)</b>	<b>2,415(7)</b>	<b>2,417(7)</b>	<b>2,416(7)</b>
X(4)-O(2)	1	2,332(6)	2,321(6)	2,326(7)	2,335(6)	2,335(6)
X(4)-O(3)	1	2,331(5)	2,310(4)	2,327(5)	2,336(5)	2,334(5)
X(4)-O(5)	1	2,332(5)	2,310(4)	2,327(5)	2,338(5)	2,332(5)
X(4)-O(6)	1	2,498(6)	2,498(6)	2,502(6)	2,490(6)	2,490(6)
X(4)-O(7)	1	2,496(6)	2,498(6)	2,502(6)	2,488(6)	2,488(6)
X(4)-O(8)	1	2,333(8)	2,325(8)	2,328(8)	2,340(8)	2,335(8)
X(4)-O(9)	1	2,501(8)	2,495(8)	2,503(8)	2,490(8)	2,487(8)
X(4)-O(12)	1	2,50(1)	2,498(8)	2,502(9)	2,487(9)	2,488(9)
sr. vr. X(4)-O		<b>2,415(7)</b>	<b>2,407(6)</b>	<b>2,415(7)</b>	<b>2,413(7)</b>	<b>2,411(7)</b>
sr. vr. X-O		<b>2,414(6)</b>	<b>2,413(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,415(6)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja

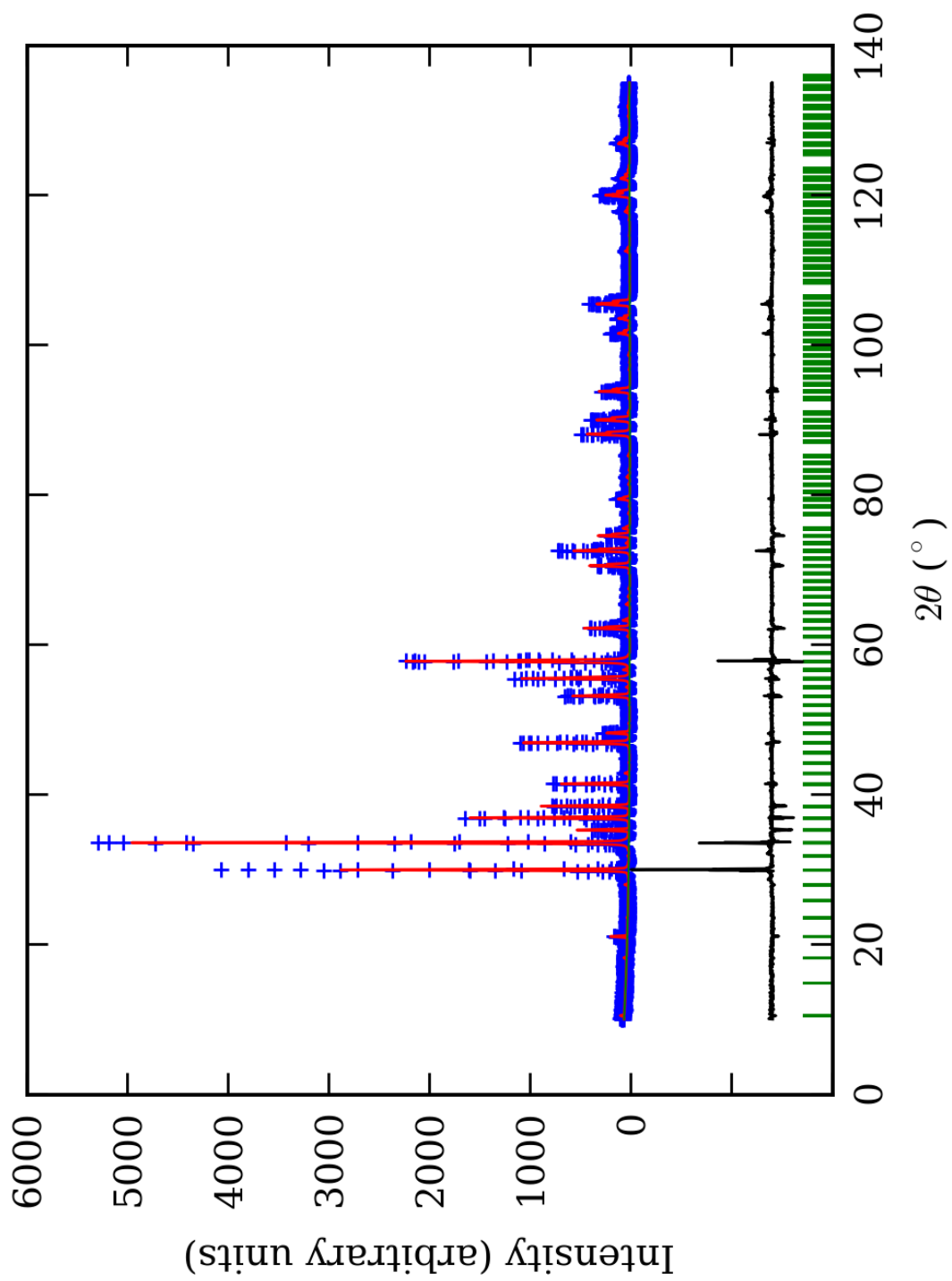
<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj



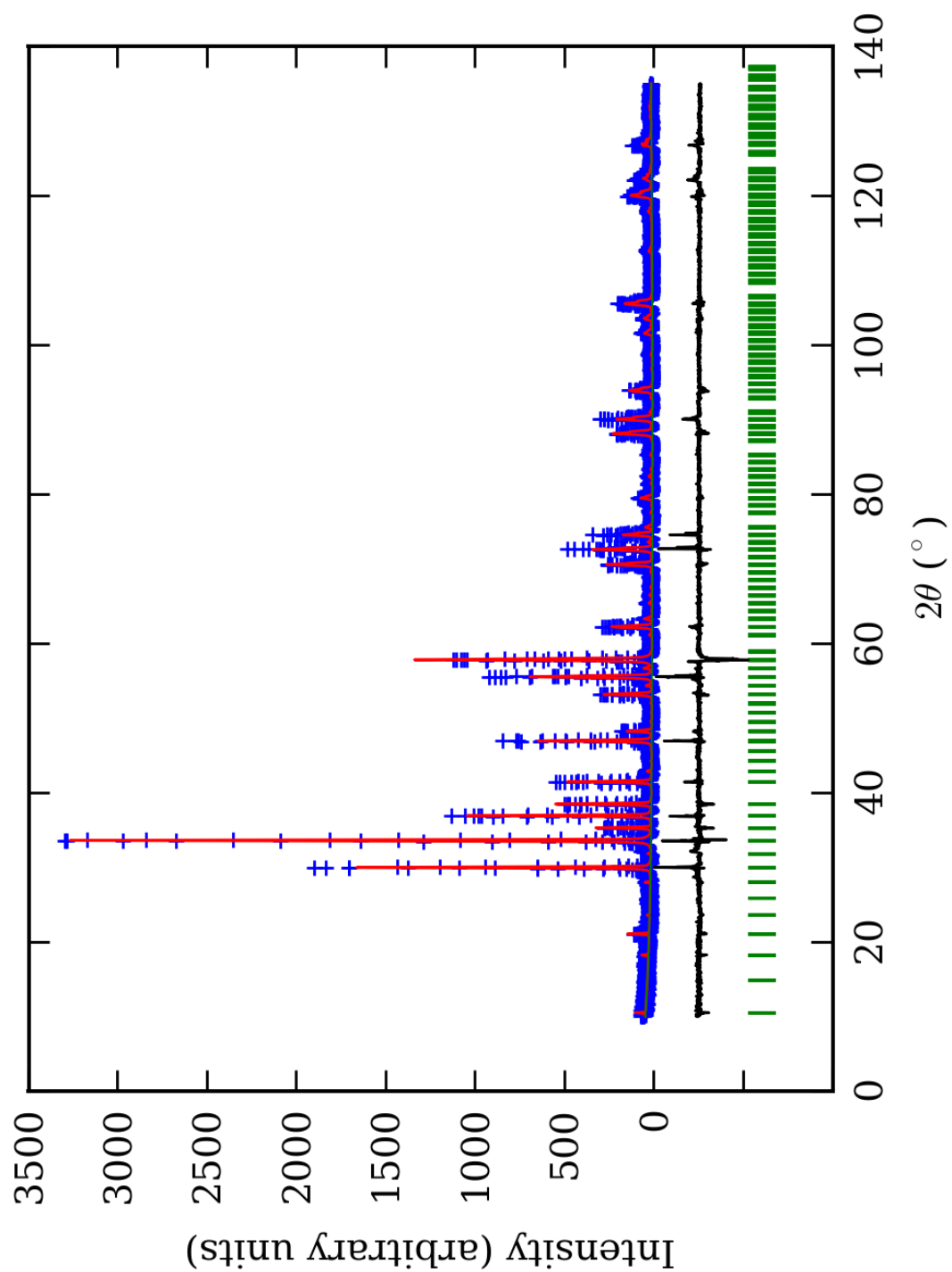
PRILOG 190. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone A u  $I\bar{1}$  p.g.



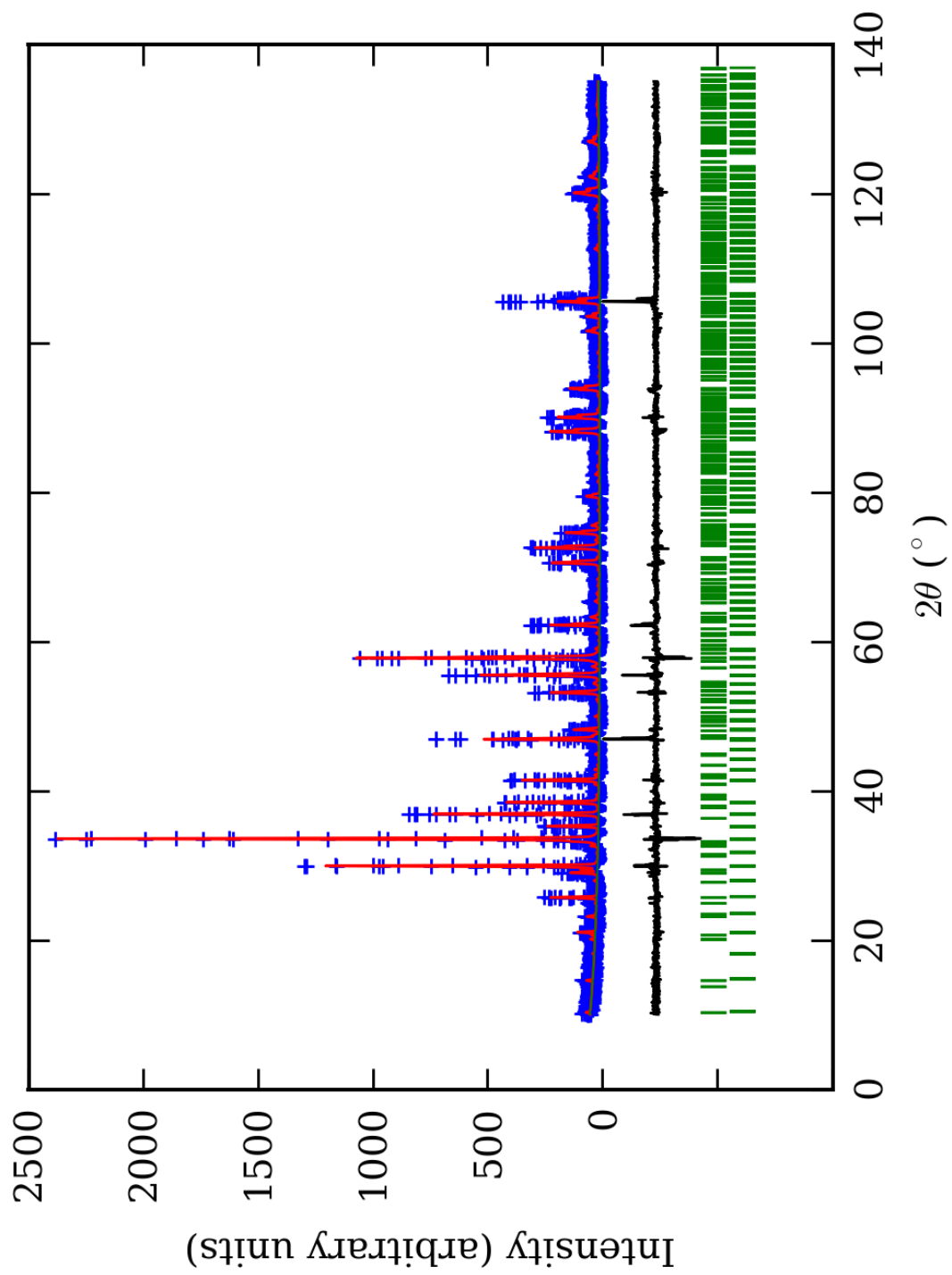
PRILOG 191. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone B u  $\bar{1}1$  p.g.



PRILOG 192. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone  $CuI\bar{1}$  p.g.



PRILOG 193. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone D u  $1\bar{1}$  p.g.



PRILOG 194. Finalni Rietveld-ov plot ispitivane zone E u  $I\bar{1}$  p.g.

PRILOG 195. Profilni i strukturni parametri, dimenzije jediničnih ćelija i faktori slaganja u I $\bar{1}$  p.g.

Zona	A (jezgro)	B	C	D	E (obod)	
Scor	3,2658	3,3496	3,0018	2,7916	2,0809	
Faktor skale	0,000013(1)*	0,000016(2)	0,000014(1)	0,000031(5)	0,000015(1)	
Eta (p-v) ili m(p-vii)	0,0(1)	0,1(1)	-0,28(7)	0,0(1)	-0,31(7)	
Ukupni temp. faktor	0,4(1)	0,6(1)	0,71(8)	0,77(8)	0,50(6)	
Parametri polu-širine	U	0,005(3)	0,02(1)	0,011(2)	-0,003(7)	0,017(2)
	V	-0,015(8)	-0,03(2)	-0,035(4)	0,00(2)	-0,050(5)
	W	0,016(3)	0,026(5)	0,030(2)	0,022(5)	0,040(2)
Preferentna orijent.	0,43(8)	0,30(9)	0,39(6)	-0,7(2)	-0,28(9)	
Parametri asimetrije	As 1	0,02(8)	0,16(7)	0,10(6)	0,06(8)	0,06(5)
	As 2	0,05(1)	0,07(1)	0,05(1)	0,05(1)	0,041(9)
X parametar	0,013(3)	0,007(3)	0,019(2)	0,011(3)	0,018(2)	
Nulta tačka	0,010(9)	0,03(1)	0,003(8)	0,01(1)	-0,037(7)	
a <sub>0</sub>	11,926(2)	11,927(3)	11,945(1)	11,942(2)	11,927(1)	
b <sub>0</sub>	11,909(1)	11,944(2)	11,934(1)	11,925(2)	11,927(1)	
c <sub>0</sub>	11,921(1)	11,929(2)	11,9287(9)	11,930(2)	11,940(1)	
$\alpha_0$	89,99(1)	89,95(2)	90,067(5)	89,98(1)	89,95(8)	
$\beta_0$	90,076(8)	90,03(2)	90,005(6)	90,11(1)	90,10(6)	
$\gamma_0$	90,03(1)	89,89(1)	89,921(5)	89,94(1)	90,04(9)	
V <sub>0</sub>	1693,0(4)	1699,4(7)	1700,5(3)	1698,9(5)	1698,4(3)	
N-P+C	6115	6115	6115	6115	6092	
R <sub>p</sub>	18,4	17,7	15,8	16,0	15,0	
R <sub>wp</sub>	24,3	23,1	20,7	21,3	19,9	
R <sub>exp</sub>	11,71	11,68	11,89	14,41	14,41	
Konvencionalni R <sub>p</sub>	26,3	25,6	22,9	23,7	26,2	
Konvencionalni R <sub>wp</sub>	30,6	29,3	26,2	27,6	28,9	
Konvencionalni R <sub>exp</sub>	14,76	14,81	15,06	18,64	20,97	
Chi2	4,30	3,92	3,04	2,19	1,91	
Chi2 (Bragg contr.)	4,58	4,05	3,15	2,26	1,92	
DW-stat.	0,6106	0,6493	0,8200	1,0793	1,1856	
DW-exp.	1,9657	1,9657	1,9657	1,9657	1,9734	
GoF	2,1	2,0	1,7	1,5	1,4	
R <sub>B</sub>	<b>16,9</b>	<b>15,8</b>	<b>12,7</b>	<b>12,1</b>	<b>11,8</b>	
R <sub>F</sub>	<b>14,3</b>	<b>12,5</b>	<b>13,0</b>	<b>10,7</b>	<b>11,0</b>	

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj. Sve R vrednosti su izražene kao procenti

PRILOG 196. Atomske koordinate i izračunati sadržaji Ca i Al (at. %) u I $\bar{1}$  p.g.

Zona		A (jezgro)		B		C		D		E (obod)	
Scor		3,2658		3,3496		3,0018		2,7916		2,0809	
		Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.	Koord.	Zast.
Ca1	x	0,1221(8)*	0,980 (0)	0,1240(8)	0,980 (0)	0,1274(7)	0,980 (0)	0,1258(7)	0,980 (0)	0,1271(5)	0,980 (0)
	y	-0,0010(8)		-0,0001(9)		0,0009(8)		0,0037(7)		0,0030(5)	
	z	0,2489(8)		0,2474(9)		0,2507(8)		0,2478(7)		0,2502(5)	
Ca2	x	0,2509(8)	0,980 (0)	0,2484(9)	0,980 (0)	0,2504(8)	0,980 (0)	0,2461(7)	0,980 (0)	0,2466(5)	0,980 (0)
	y	0,1253(8)		0,1239(8)		0,1246(7)		0,1289(7)		0,1224(5)	
	z	0,0038(8)		0,0017(9)		-0,0020(8)		0,0001(7)		0,0020(5)	
Ca3	x	0,0024(8)	0,980 (0)	0,0012(9)	0,980 (0)	0,0005(8)	0,980 (0)	0,0012(7)	0,980 (0)	-0,0019(5)	0,980 (0)
	y	0,2518(8)		0,2485(9)		0,2507(8)		0,2457(7)		0,2470(5)	
	z	0,1249(8)		0,1207(8)		0,1263(7)		0,1256(7)		0,1248(5)	
Ca4	x	0,6299(8)	0,980 (0)	0,6244(8)	0,980 (0)	0,6307(7)	0,980 (0)	0,6258(7)	0,980 (0)	0,6257(5)	0,980 (0)
	y	0,0023(8)		0,0039(9)		0,0008(8)		0,0043(7)		-0,0004(5)	
	z	0,2512(8)		0,2493(9)		0,2509(8)		0,2491(7)		0,2500(5)	
Ca5	x	0,2498(8)	0,980 (0)	0,2505(9)	0,980 (0)	0,2489(8)	0,980 (0)	0,2451(7)	0,980 (0)	0,2502(5)	0,980 (0)
	y	0,6234(8)		0,6232(8)		0,6238(7)		0,6250(7)		0,6274(5)	
	z	-0,0021(8)		-0,0006(9)		0,0016(8)		0,0016(7)		0,0050(5)	
Ca6	x	-0,0035(8)	0,980 (0)	0,0026(9)	0,980 (0)	-0,0027(8)	0,980 (0)	0,0000(7)	0,980 (0)	0,0062(5)	0,980 (0)
	y	0,2516(8)		0,2514(9)		0,2523(8)		0,2522(7)		0,2472(5)	
	z	0,6275(8)		0,6241(8)		0,6262(7)		0,6237(7)		0,6240(5)	
Al1	x	0,000	0,4 (2)	0,000	0,3 (3)	0,000	0,3 (4)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,3 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe1	x	0,000	0,1 (2)	0,000	0,2 (3)	0,000	0,2 (4)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,2 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al2	x	0,000	0,3 (2)	0,000	0,3 (3)	0,000	0,3 (4)	0,000	0,2 (2)	0,000	0,3 (2)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe2	x	0,000	0,2 (2)	0,000	0,2 (3)	0,000	0,2 (4)	0,000	0,3 (2)	0,000	0,2 (2)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al3	x	0,500	0,4 (2)	0,500	0,3 (3)	0,500	0,3 (2)	0,500	0,3 (2)	0,500	0,3 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Fe3	x	0,500	0,1 (2)	0,500	0,2 (3)	0,500	0,2 (2)	0,500	0,2 (2)	0,500	0,2 (2)
	y	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
	z	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
Al4	x	0,500	0,3 (2)	0,500	0,3 (3)	0,500	0,2 (2)	0,500	0,3 (2)	0,500	0,3 (2)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Fe4	x	0,500	0,2 (2)	0,500	0,2 (3)	0,500	0,3 (2)	0,500	0,2 (2)	0,500	0,2 (2)
	y	0,500		0,500		0,500		0,500		0,500	
	z	0,000		0,000		0,000		0,000		0,000	
Al5	x	0,250	0,3 (4)	0,250	0,3 (4)	0,250	0,3 (5)	0,250	0,3 (2)	0,250	0,2 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Fe5	x	0,250	0,2 (4)	0,250	0,2 (4)	0,250	0,2 (5)	0,250	0,2 (2)	0,250	0,3 (1)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	z	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
Al6	x	0,250	0,3 (4)	0,250	0,3 (4)	0,250	0,3 (5)	0,250	0,3 (2)	0,250	0,3 (1)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Fe6	x	0,250	0,2 (4)	0,250	0,2 (4)	0,250	0,2 (5)	0,250	0,2 (2)	0,250	0,2 (1)
	y	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	z	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
Al7	x	0,750	0,3 (3)	0,750	0,3 (4)	0,750	0,3 (3)	0,750	0,3 (4)	0,750	0,3 (2)
	y	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	



	<b>z</b>	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
<b>Fe7</b>	<b>x</b>	0,750	0,2 (3)	0,750	0,2 (4)	0,750	0,2 (3)	0,750	0,2 (4)	0,750	0,2 (2)
	<b>y</b>	0,250		0,250		0,250		0,250		0,250	
	<b>z</b>	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
	<b>x</b>	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
<b>Al8</b>	<b>y</b>	0,750	0,3 (3)	0,750	0,3 (4)	0,750	0,3 (3)	0,750	0,3 (4)	0,750	0,3 (2)
	<b>z</b>	0,250		0,250		0,250		0,250			
	<b>x</b>	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
<b>Fe8</b>	<b>y</b>	0,750	0,2 (3)	0,750	0,2 (4)	0,750	0,2 (3)	0,750	0,2 (4)	0,750	0,2 (2)
	<b>z</b>	0,250		0,250		0,250		0,250			
	<b>x</b>	0,750		0,750		0,750		0,750		0,750	
<b>Si1</b>	<b>x</b>	0,375(1)	1,000 (0)	0,375(1)	1,000 (0)	0,376(1)	1,000 (0)	0,3760(9)	1,000 (0)	0,3794(7)	1,000 (0)
	<b>y</b>	-0,002(1)		-0,001(1)		0,002(1)		0,001(1)		0,0001(8)	
	<b>z</b>	0,250(1)		0,251(1)		0,249(1)		0,252(1)		0,2493(8)	
<b>Si2</b>	<b>x</b>	0,253(1)	1,000 (0)	0,250(1)	1,000 (0)	0,251(1)	1,000 (0)	0,252(1)	1,000 (0)	0,2483(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,374(1)		0,377(1)		0,373(1)		0,3767(9)		0,3757(7)	
	<b>z</b>	-0,003(1)		-0,000(1)		-0,001(1)		0,000(1)		0,0018(8)	
<b>Si3</b>	<b>x</b>	0,000(1)	1,000 (0)	0,001(1)	1,000 (0)	-0,001(1)	1,000 (0)	-0,001(1)	1,000 (0)	-0,0004(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,249(1)		0,250(1)		0,249(1)		0,249(1)		0,2514(8)	
	<b>z</b>	0,375(1)		0,375(1)		0,376(1)		0,3792(9)		0,3763(7)	
<b>Si4</b>	<b>x</b>	0,876(1)	1,000 (0)	0,875(1)	1,000 (0)	0,878(1)	1,000 (0)	0,8741(9)	1,000 (0)	0,8719(7)	1,000 (0)
	<b>y</b>	-0,003(1)		-0,002(1)		0,001(1)		-0,002(1)		0,0016(8)	
	<b>z</b>	0,249(1)		0,250(1)		0,252(1)		0,253(1)		0,2509(8)	
<b>Si5</b>	<b>x</b>	0,250(1)	1,000 (0)	0,251(1)	1,000 (0)	0,249(1)	1,000 (0)	0,252(1)	1,000 (0)	0,2518(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,87(51)		0,873(1)		0,876(1)		0,8754(9)		0,8740(7)	
	<b>z</b>	-0,002(1)		0,000(1)		-0,001(1)		-0,001(1)		0,0022(8)	
<b>Si6</b>	<b>x</b>	0,002(1)	1,000 (0)	0,000(1)	1,000 (0)	0,001(1)	1,000 (0)	-0,000(1)	1,000 (0)	-0,0032(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,251(1)		0,252(1)		0,249(1)		0,251(1)		0,2502(8)	
	<b>z</b>	0,876(1)		0,873(1)		0,874(1)		0,8703(9)		0,8731(7)	
<b>O1</b>	<b>x</b>	0,040(1)	1,000 (0)	0,037(1)	1,000 (0)	0,036(1)	1,000 (0)	0,035(1)	1,000 (0)	0,0378(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,048(1)		0,047(1)		0,048(1)		0,048(1)		0,0428(8)	
	<b>z</b>	0,652(1)		0,653(1)		0,654(1)		0,6537(9)		0,6547(7)	
<b>O2</b>	<b>x</b>	0,541(1)	1,000 (0)	0,541(1)	1,000 (0)	0,536(1)	1,000 (0)	0,541(1)	1,000 (0)	0,5390(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,452(1)		0,454(1)		0,454(1)		0,457(1)		0,4568(8)	
	<b>z</b>	0,348(1)		0,347(1)		0,346(1)		0,3461(9)		0,3457(7)	
<b>O3</b>	<b>x</b>	0,964(1)	1,000 (0)	0,961(1)	1,000 (0)	0,965(1)	1,000 (0)	0,963(1)	1,000 (0)	0,9633(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,543(1)		0,548(1)		0,545(1)		0,550(1)		0,5494(8)	
	<b>z</b>	0,845(1)		0,848(1)		0,845(1)		0,8472(9)		0,8470(7)	
<b>O4</b>	<b>x</b>	0,465(1)	1,000 (0)	0,462(1)	1,000 (0)	0,466(1)	1,000 (0)	0,462(1)	1,000 (0)	0,4633(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,957(1)		0,954(1)		0,957(1)		0,956(1)		0,9498(8)	
	<b>z</b>	0,155(1)		0,153(1)		0,156(1)		0,1541(9)		0,1525(7)	
<b>O5</b>	<b>x</b>	0,653(1)	1,000 (0)	0,653(1)	1,000 (0)	0,653(1)	1,000 (0)	0,6549(9)	1,000 (0)	0,6535(7)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,038(1)		0,038(1)		0,040(1)		0,034(1)		0,0386(8)	
	<b>z</b>	0,046(1)		0,045(1)		0,046(1)		0,044(1)		0,0468(8)	
<b>O6</b>	<b>x</b>	0,152(1)	1,000 (0)	0,152(1)	1,000 (0)	0,153(1)	1,000 (0)	0,1525(9)	1,000 (0)	0,1543(7)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,459(1)		0,461(1)		0,460(1)		0,460(1)		0,4645(8)	
	<b>z</b>	0,955(1)		0,952(1)		0,955(1)		0,952(1)		0,9538(8)	
<b>O7</b>	<b>x</b>	0,347(1)	1,000 (0)	0,347(1)	1,000 (0)	0,347(1)	1,000 (0)	0,3457(9)	1,000 (0)	0,3480(7)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,539(1)		0,541(1)		0,538(1)		0,538(1)		0,5428(8)	
	<b>z</b>	0,455(1)		0,456(1)		0,454(1)		0,455(1)		0,4520(8)	
<b>O8</b>	<b>x</b>	0,848(1)	1,000 (0)	0,848(1)	1,000 (0)	0,847(1)	1,000 (0)	0,8468(9)	1,000 (0)	0,8464(7)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,961(1)		0,961(1)		0,960(1)		0,964(1)		0,9618(8)	
	<b>z</b>	0,548(1)		0,549(1)		0,545(1)		0,548(1)		0,5458(8)	
<b>O9</b>	<b>x</b>	0,047(1)	1,000 (0)	0,047(1)	1,000 (0)	0,045(1)	1,000 (0)	0,042(1)	1,000 (0)	0,0456(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,653(1)		0,652(1)		0,654(1)		0,6551(9)		0,6538(7)	
	<b>z</b>	0,039(1)		0,040(1)		0,038(1)		0,038(1)		0,0381(8)	
<b>O10</b>	<b>x</b>	0,544(1)	1,000 (0)	0,548(1)	1,000 (0)	0,546(1)	1,000 (0)	0,550(1)	1,000 (0)	0,5497(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,846(1)		0,848(1)		0,846(1)		0,8480(9)		0,8478(7)	
	<b>z</b>	0,963(1)		0,960(1)		0,962(1)		0,960(1)		0,9615(8)	
<b>O11</b>	<b>x</b>	0,954(1)	1,000 (0)	0,954(1)	1,000 (0)	0,952(1)	1,000 (0)	0,948(1)	1,000 (0)	0,9528(8)	1,000 (0)
	<b>y</b>	0,154(1)		0,153(1)		0,154(1)		0,1524(9)		0,1531(7)	
	<b>z</b>	0,463(1)		0,462(1)		0,463(1)		0,463(1)		0,4608(8)	

<b>O12</b>	x	0,452(1)	1,000 (0)	0,454(1)	1,000 (0)	0,454(1)	1,000 (0)	0,457(1)	1,000 (0)	0,4557(8)	1,000 (0)
	y	0,347(1)		0,348(1)		0,346(1)		0,3464(9)		0,3463(7)	
	z	0,538(1)		0,543(1)		0,537(1)		0,542(1)		0,5407(8)	
<b>O13</b>	x	0,286(1)	1,000 (0)	0,287(1)	1,000 (0)	0,291(1)	1,000 (0)	0,288(1)	1,000 (0)	0,2906(8)	1,000 (0)
	y	0,903(1)		0,903(1)		0,903(1)		0,904(9)		0,9041(7)	
	z	0,297(1)		0,296(1)		0,294(1)		0,294(1)		0,2927(8)	
<b>O14</b>	x	0,787(1)	1,000 (0)	0,788(1)	1,000 (0)	0,790(1)	1,000 (0)	0,791(1)	1,000 (0)	0,7924(8)	1,000 (0)
	y	0,595(1)		0,597(1)		0,598(1)		0,5974(9)		0,5973(7)	
	z	0,708(1)		0,705(1)		0,702(1)		0,702(1)		0,7043(8)	
<b>O15</b>	x	0,705(1)	1,000 (0)	0,710(1)	1,000 (0)	0,707(1)	1,000 (0)	0,710(1)	1,000 (0)	0,7129(8)	1,000 (0)
	y	0,402(1)		0,403(1)		0,401(1)		0,4024(9)		0,4023(7)	
	z	0,205(1)		0,205(1)		0,202(1)		0,201(1)		0,1983(8)	
<b>O16</b>	x	0,210(1)	1,000 (0)	0,214(1)	1,000 (0)	0,207(1)	1,000 (0)	0,213(1)	1,000 (0)	0,2110(8)	1,000 (0)
	y	0,098(1)		0,097(1)		0,098(1)		0,0964(9)		0,0970(7)	
	z	0,800(1)		0,797(1)		0,794(1)		0,796(1)		0,7979(8)	
<b>O17</b>	x	0,300(1)	1,000 (0)	0,294(1)	1,000 (0)	0,299(1)	1,000 (0)	0,297(1)	1,000 (0)	0,2899(8)	1,000 (0)
	y	0,286(1)		0,287(1)		0,288(1)		0,291(1)		0,2870(8)	
	z	0,903(1)		0,904(1)		0,903(1)		0,902(9)		0,9054(7)	
<b>O18</b>	x	0,798(1)	1,000 (0)	0,796(1)	1,000 (0)	0,797(1)	1,000 (0)	0,797(1)	1,000 (0)	0,7941(8)	1,000 (0)
	y	0,212(1)		0,213(1)		0,213(1)		0,211(1)		0,2110(8)	
	z	0,097(1)		0,097(1)		0,096(1)		0,0969(9)		0,0962(7)	
<b>O19</b>	x	0,706(1)	1,000 (0)	0,705(1)	1,000 (0)	0,704(1)	1,000 (0)	0,703(1)	1,000 (0)	0,7013(8)	1,000 (0)
	y	0,792(1)		0,789(1)		0,787(1)		0,793(1)		0,7874(8)	
	z	0,597(1)		0,596(1)		0,596(1)		0,5978(9)		0,5968(7)	
<b>O20</b>	x	0,207(1)	1,000 (0)	0,202(1)	1,000 (0)	0,207(1)	1,000 (0)	0,204(1)	1,000 (0)	0,1969(8)	1,000 (0)
	y	0,712(1)		0,714(1)		0,711(1)		0,712(1)		0,7094(8)	
	z	0,404(1)		0,403(1)		0,404(1)		0,4034(9)		0,4006(7)	
<b>O21</b>	x	0,904(1)	1,000 (0)	0,905(1)	1,000 (0)	0,903(1)	1,000 (0)	0,9044(9)	1,000 (0)	0,9035(7)	1,000 (0)
	y	0,295(1)		0,292(1)		0,296(1)		0,292(1)		0,2970(8)	
	z	0,288(1)		0,285(1)		0,289(1)		0,289(1)		0,2885(8)	
<b>O22</b>	x	0,402(1)	1,000 (0)	0,402(1)	1,000 (0)	0,403(1)	1,000 (0)	0,4025(9)	1,000 (0)	0,4030(7)	1,000 (0)
	y	0,202(1)		0,200(1)		0,202(1)		0,200(1)		0,2036(8)	
	z	0,712(1)		0,712(1)		0,712(1)		0,713(1)		0,7096(8)	
<b>O23</b>	x	0,098(1)	1,000 (0)	0,096(1)	1,000 (0)	0,097(1)	1,000 (0)	0,0968(9)	1,000 (0)	0,0963(7)	1,000 (0)
	y	0,795(1)		0,795(1)		0,798(1)		0,799(1)		0,7991(8)	
	z	0,207(1)		0,214(1)		0,210(1)		0,214(1)		0,2159(8)	
<b>O24</b>	x	0,597(1)	1,000 (0)	0,596(1)	1,000 (0)	0,597(1)	1,000 (0)	0,5969(9)	1,000 (0)	0,5961(7)	1,000 (0)
	y	0,703(1)		0,704(1)		0,704(1)		0,706(1)		0,7059(8)	
	z	0,789(1)		0,786(1)		0,790(1)		0,792(1)		0,7894(8)	
<b>Ca1 (%)</b>	98	98	98	98	98	98	98	98	98	98	
<b>Ca2 (%)</b>	98		98		98		98				
<b>Ca3 (%)</b>	98		98		98		98				
<b>Ca4 (%)</b>	98		98		98		98				
<b>Ca5 (%)</b>	98		98		98		98				
<b>Ca6 (%)</b>	98		98		98		98				
<b>Al1 (%)</b>	80(40)	65 (55)	60(60)	60 (70)	60(80)	58 (70)	60(40)	58 (50)	60(40)	58 (35)	
<b>Al2 (%)</b>	60(40)		60(60)		60(80)		40(40)		60(40)		
<b>Al3 (%)</b>	80(40)		60(60)		60(40)		60(40)		60(40)		
<b>Al4 (%)</b>	60(40)		60(60)		40(40)		60(40)		60(40)		
<b>Al5 (%)</b>	60(80)		60(80)		60(100)		60(40)		40(20)		
<b>Al6 (%)</b>	60(80)		60(80)		60(100)		60(40)		60(20)		
<b>Al7 (%)</b>	60(60)		60(80)		60(60)		60(80)		60(40)		
<b>Al8 (%)</b>	60(60)		60(80)		60(60)		60(80)		60(40)		

\*-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

PRILOG 197. Odabrana međuatomska Si-O, Y-O i X-O rastojanja (u Å) u  $\bar{1}\bar{1}$  p.g.

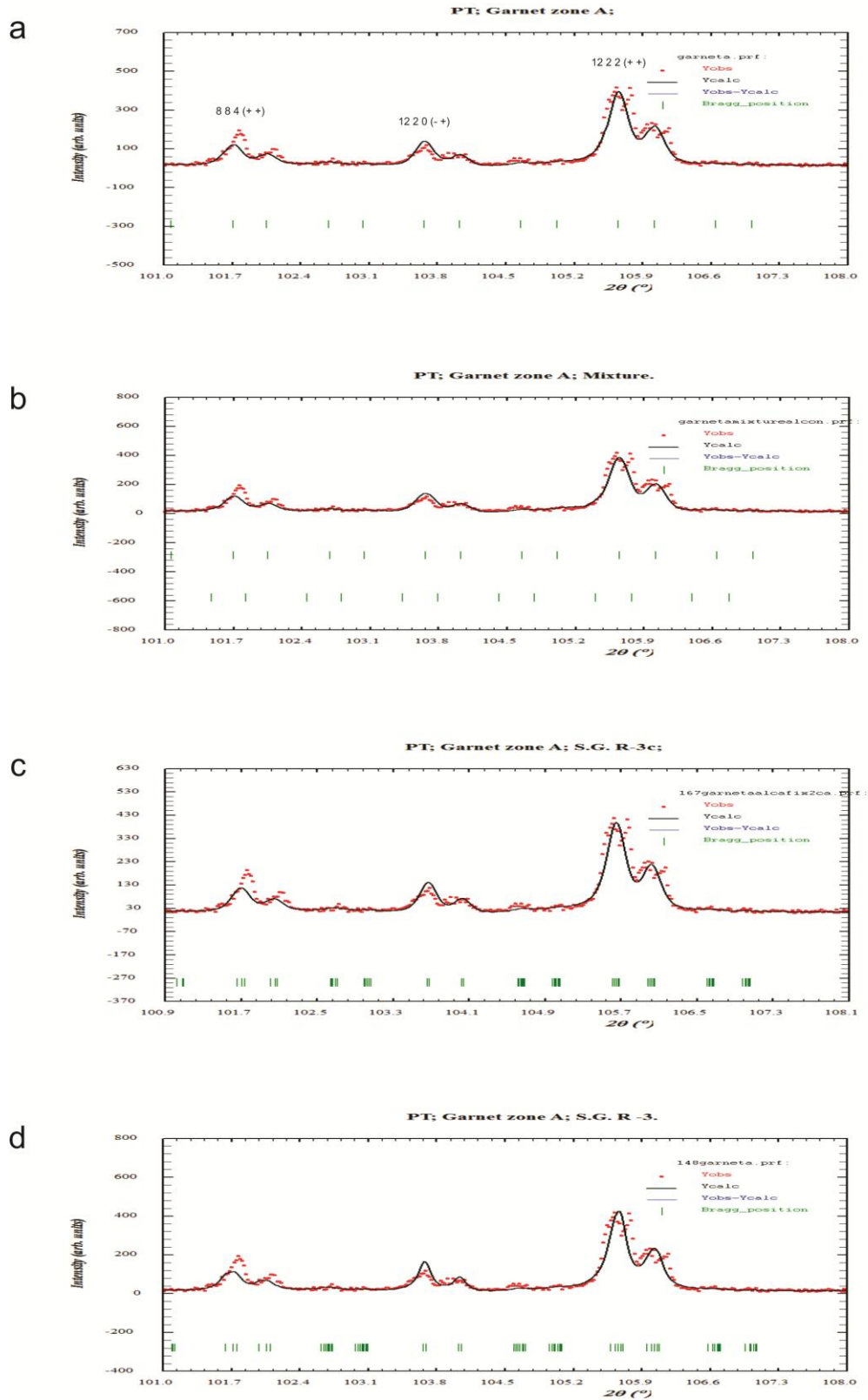
Zona		A (jezgro)	B	C	D	E (obod)
Si(1)-O(3)	1*	1,643(6) <sup>1</sup>	1,649(6)	1,645(6)	1,646(6)	1,645(6)
Si(1)-O(4)	1	1,643(6)	1,648(6)	1,639(6)	1,646(6)	1,645(6)
Si(1)-O(13)	1	1,642(6)	1,649(6)	1,642(6)	1,640(6)	1,642(6)
Si(1)-O(14)	1	1,642(6)	1,648(6)	1,640(6)	1,648(6)	1,645(6)
sr. vr. Si(1)-O		<b>1,642(6)</b>	<b>1,648(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,645(6)</b>	<b>1,644(6)</b>
Si(2)-O(6)	1	1,641(6)	1,645(6)	1,641(6)	1,648(6)	1,645(6)
Si(2)-O(8)	1	1,644(6)	1,648(6)	1,642(6)	1,642(6)	1,642(6)
Si(2)-O(17)	1	1,642(6)	1,648(6)	1,640(6)	1,645(6)	1,642(6)
Si(2)-O(19)	1	1,644(6)	1,649(6)	1,643(6)	1,645(6)	1,646(6)
sr. vr. Si(2)-O		<b>1,643(6)</b>	<b>1,648(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,645(6)</b>	<b>1,644(6)</b>
Si(3)-O(10)	1	1,643(6)	1,650(6)	1,647(6)	1,644(6)	1,645(6)
Si(3)-O(11)	1	1,643(6)	1,650(6)	1,647(6)	1,643(6)	1,644(6)
Si(3)-O(21)	1	1,643(6)	1,649(6)	1,643(6)	1,645(6)	1,644(6)
Si(3)-O(24)	1	1,644(6)	1,651(6)	1,643(6)	1,645(6)	1,644(6)
sr. vr. Si(3)-O		<b>1,643(6)</b>	<b>1,650(6)</b>	<b>1,645(6)</b>	<b>1,644(6)</b>	<b>1,644(6)</b>
Si(4)-O(1)	1	1,640(6)	1,647(6)	1,641(6)	1,646(6)	1,645(6)
Si(4)-O(2)	1	1,643(6)	1,651(6)	1,645(6)	1,646(6)	1,646(6)
Si(4)-O(15)	1	1,640(6)	1,648(6)	1,640(6)	1,648(6)	1,646(6)
Si(4)-O(16)	1	1,642(6)	1,650(6)	1,641(6)	1,642(6)	1,644(6)
sr. vr. Si(4)-O		<b>1,641(6)</b>	<b>1,649(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,646(6)</b>	<b>1,645(6)</b>
Si(5)-O(5)	1	1,643(6)	1,647(6)	1,643(6)	1,641(6)	1,644(6)
Si(5)-O(7)	1	1,642(6)	1,646(6)	1,640(6)	1,649(6)	1,645(6)
Si(5)-O(18)	1	1,644(6)	1,648(6)	1,644(6)	1,645(6)	1,645(6)
Si(5)-O(20)	1	1,640(6)	1,647(6)	1,639(6)	1,646(6)	1,645(6)
sr. vr. Si(5)-O		<b>1,642(6)</b>	<b>1,647(6)</b>	<b>1,642(6)</b>	<b>1,645(6)</b>	<b>1,645(6)</b>
Si(6)-O(9)	1	1,642(6)	1,649(6)	1,646(6)	1,644(6)	1,642(6)
Si(6)-O(12)	1	1,642(6)	1,647(6)	1,644(6)	1,645(6)	1,644(6)
Si(6)-O(22)	1	1,646(6)	1,651(6)	1,647(6)	1,645(6)	1,646(6)
Si(6)-O(23)	1	1,644(6)	1,651(6)	1,645(6)	1,644(6)	1,644(6)
sr. vr. Si(6)-O		<b>1,644(6)</b>	<b>1,650(6)</b>	<b>1,646(6)</b>	<b>1,644(6)</b>	<b>1,644(6)</b>
sr. vr. Si-O		<b>1,642(6)</b>	<b>1,649(6)</b>	<b>1,643(6)</b>	<b>1,645(6)</b>	<b>1,644(6)</b>
Y(1)-O(2)	2	1,962(4)	1,963(4)	1,971(4)	1,969(4)	1,970(4)
Y(1)-O(7)	2	1,959(4)	1,961(4)	1,962(4)	1,970(4)	1,968(4)
Y(1)-O(12)	2	1,960(4)	1,964(4)	1,968(4)	1,967(4)	1,968(4)
sr. vr. Y(1)-O		<b>1,960(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,969(4)</b>	<b>1,969(4)</b>
Y(2)-O(4)	2	1,961(4)	1,964(4)	1,968(4)	1,967(4)	1,967(4)
Y(2)-O(5)	2	1,960(4)	1,963(4)	1,966(4)	1,965(4)	1,968(4)
Y(2)-O(10)	2	1,960(4)	1,962(4)	1,968(4)	1,966(4)	1,967(4)
sr. vr. Y(2)-O		<b>1,960(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,966(4)</b>	<b>1,967(4)</b>
Y(3)-O(3)	2	1,964(4)	1,963(4)	1,971(4)	1,967(4)	1,968(4)
Y(3)-O(6)	2	1,959(4)	1,958(4)	1,965(4)	1,969(4)	1,969(4)
Y(3)-O(9)	2	1,959(4)	1,962(4)	1,970(4)	1,968(4)	1,967(4)
sr. vr. Y(3)-O		<b>1,961(4)</b>	<b>1,961(4)</b>	<b>1,969(4)</b>	<b>1,968(4)</b>	<b>1,968(4)</b>
Y(4)-O(1)	2	1,959(4)	1,964(4)	1,968(4)	1,966(4)	1,968(4)
Y(4)-O(8)	2	1,958(4)	1,962(4)	1,964(4)	1,964(4)	1,966(4)
Y(4)-O(11)	2	1,960(4)	1,962(4)	1,968(4)	1,968(4)	1,967(4)
sr. vr. Y(4)-O		<b>1,959(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,966(4)</b>	<b>1,967(4)</b>
Y(5)-O(14)	2	1,960(4)	1,961(4)	1,962(4)	1,970(4)	1,968(4)
Y(5)-O(19)	2	1,963(4)	1,963(4)	1,970(4)	1,967(4)	1,969(4)
Y(5)-O(24)	2	1,960(4)	1,964(4)	1,965(4)	1,967(4)	1,967(4)
sr. vr. Y(5)-O		<b>1,961(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,966(4)</b>	<b>1,968(4)</b>	<b>1,968(4)</b>
Y(6)-O(15)	2	1,959(4)	1,963(4)	1,964(4)	1,969(4)	1,968(4)
Y(6)-O(18)	2	1,964(4)	1,962(4)	1,970(4)	1,968(4)	1,967(4)
Y(6)-O(21)	2	1,960(4)	1,964(4)	1,967(4)	1,967(4)	1,968(4)
sr. vr. Y(6)-O		<b>1,961(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,968(4)</b>	<b>1,968(4)</b>

Y(7)-O(13)	2	1,960(4)	1,964(4)	1,965(4)	1,964(4)	1,968(4)
Y(7)-O(20)	2	1,959(4)	1,962(4)	1,967(4)	1,966(4)	1,967(4)
Y(7)-O(23)	2	1,960(4)	1,961(4)	1,968(4)	1,967(4)	1,967(4)
sr. vr. Y(7)-O		<b>1,960(4)</b>	<b>1,962(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,966(4)</b>	<b>1,967(4)</b>
Y(8)-O(16)	2	1,958(4)	1,963(4)	1,964(4)	1,965(4)	1,966(4)
Y(8)-O(17)	2	1,958(4)	1,963(4)	1,968(4)	1,965(4)	1,964(4)
Y(8)-O(22)	2	1,961(4)	1,962(4)	1,967(4)	1,967(4)	1,968(4)
sr. vr. Y(8)-O		<b>1,959(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,966(4)</b>	<b>1,966(4)</b>	<b>1,966(4)</b>
sr. vr. Y-O		<b>1,960(4)</b>	<b>1,963(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,967(4)</b>	<b>1,968(4)</b>
X(1)-O(1)	1	2,335(5)	2,331(5)	2,332(5)	2,337(5)	2,337(5)
X(1)-O(2)	1	2,334(5)	2,331(5)	2,332(5)	2,334(5)	2,336(5)
X(1)-O(7)	1	2,499(6)	2,499(6)	2,501(6)	2,494(6)	2,494(6)
X(1)-O(8)	1	2,499(6)	2,496(6)	2,503(6)	2,493(6)	2,491(6)
X(1)-O(13)	1	2,331(5)	2,332(5)	2,330(5)	2,334(5)	2,335(5)
X(1)-O(14)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,333(5)	2,335(5)	2,335(5)
X(1)-O(23)	1	2,498(6)	2,497(6)	2,500(6)	2,496(6)	2,493(6)
X(1)-O(24)	1	2,496(6)	2,496(6)	2,499(6)	2,495(6)	2,493(6)
sr. vr. X(1)-O		<b>2,416(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,415(6)</b>	<b>2,414(6)</b>
X(2)-O(5)	1	2,332(5)	2,329(5)	2,331(5)	2,333(5)	2,335(5)
X(2)-O(7)	1	2,334(5)	2,331(5)	2,332(5)	2,335(5)	2,335(5)
X(2)-O(10)	1	2,496(6)	2,496(6)	2,501(6)	2,494(6)	2,493(6)
X(2)-O(12)	1	2,497(6)	2,495(6)	2,501(6)	2,495(6)	2,494(6)
X(2)-O(14)	1	2,498(6)	2,497(6)	2,501(6)	2,494(6)	2,493(6)
X(2)-O(16)	1	2,497(6)	2,497(6)	2,503(6)	2,492(6)	2,491(6)
X(2)-O(17)	1	2,333(5)	2,332(5)	2,332(5)	2,334(5)	2,335(5)
X(2)-O(19)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,329(5)	2,334(5)	2,335(5)
sr. vr. X(2)-O		<b>2,415(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,414(6)</b>
X(3)-O(2)	1	2,498(6)	2,497(6)	2,501(6)	2,498(6)	2,495(6)
X(3)-O(3)	1	2,497(6)	2,497(6)	2,500(6)	2,495(6)	2,494(6)
X(3)-O(9)	1	2,331(5)	2,329(5)	2,330(5)	2,334(5)	2,334(5)
X(3)-O(12)	1	2,331(5)	2,330(5)	2,330(5)	2,336(5)	2,336(5)
X(3)-O(18)	1	2,498(6)	2,495(6)	2,501(6)	2,497(6)	2,493(6)
X(3)-O(19)	1	2,498(6)	2,497(6)	2,501(6)	2,495(6)	2,494(6)
X(3)-O(21)	1	2,332(5)	2,330(5)	2,331(5)	2,335(5)	2,337(5)
X(3)-O(24)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,331(5)	2,334(5)	2,336(5)
sr. vr. X(3)-O		<b>2,415(6)</b>	<b>2,413(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,415(6)</b>
X(4)-O(3)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,330(5)	2,335(5)	2,336(5)
X(4)-O(4)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,331(5)	2,335(5)	2,335(5)
X(4)-O(5)	1	2,498(6)	2,496(6)	2,502(6)	2,492(6)	2,493(6)
X(4)-O(6)	1	2,498(6)	2,496(6)	2,502(6)	2,495(6)	2,492(6)
X(4)-O(15)	1	2,334(5)	2,331(5)	2,333(5)	2,336(5)	2,334(5)
X(4)-O(16)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,331(5)	2,334(5)	2,335(5)
X(4)-O(21)	1	2,496(6)	2,496(6)	2,499(6)	2,495(6)	2,493(6)
X(4)-O(22)	1	2,498(6)	2,497(6)	2,500(6)	2,496(6)	2,494(6)
sr. vr. X(4)-O		<b>2,415(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,415(6)</b>	<b>2,414(6)</b>
X(5)-O(6)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,332(5)	2,335(5)	2,335(5)
X(5)-O(8)	1	2,332(5)	2,331(5)	2,331(5)	2,334(5)	2,336(5)
X(5)-O(9)	1	2,496(6)	2,494(6)	2,503(6)	2,494(6)	2,492(6)
X(5)-O(11)	1	2,495(6)	2,496(6)	2,501(6)	2,495(6)	2,493(6)
X(5)-O(13)	1	2,498(6)	2,497(6)	2,503(6)	2,492(6)	2,493(6)
X(5)-O(15)	1	2,497(6)	2,498(6)	2,502(6)	2,494(6)	2,493(6)
X(5)-O(18)	1	2,333(5)	2,330(5)	2,332(5)	2,335(5)	2,334(5)
X(5)-O(20)	1	2,333(5)	2,331(5)	2,333(5)	2,336(5)	2,336(5)
sr. vr. X(5)-O		<b>2,415(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,417(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,414(6)</b>
X(6)-O(1)	1	2,496(6)	2,494(6)	2,500(6)	2,495(6)	2,494(6)
X(6)-O(4)	1	2,497(6)	2,496(6)	2,499(6)	2,496(6)	2,493(6)
X(6)-O(10)	1	2,332(5)	2,330(5)	2,333(5)	2,337(5)	2,337(5)

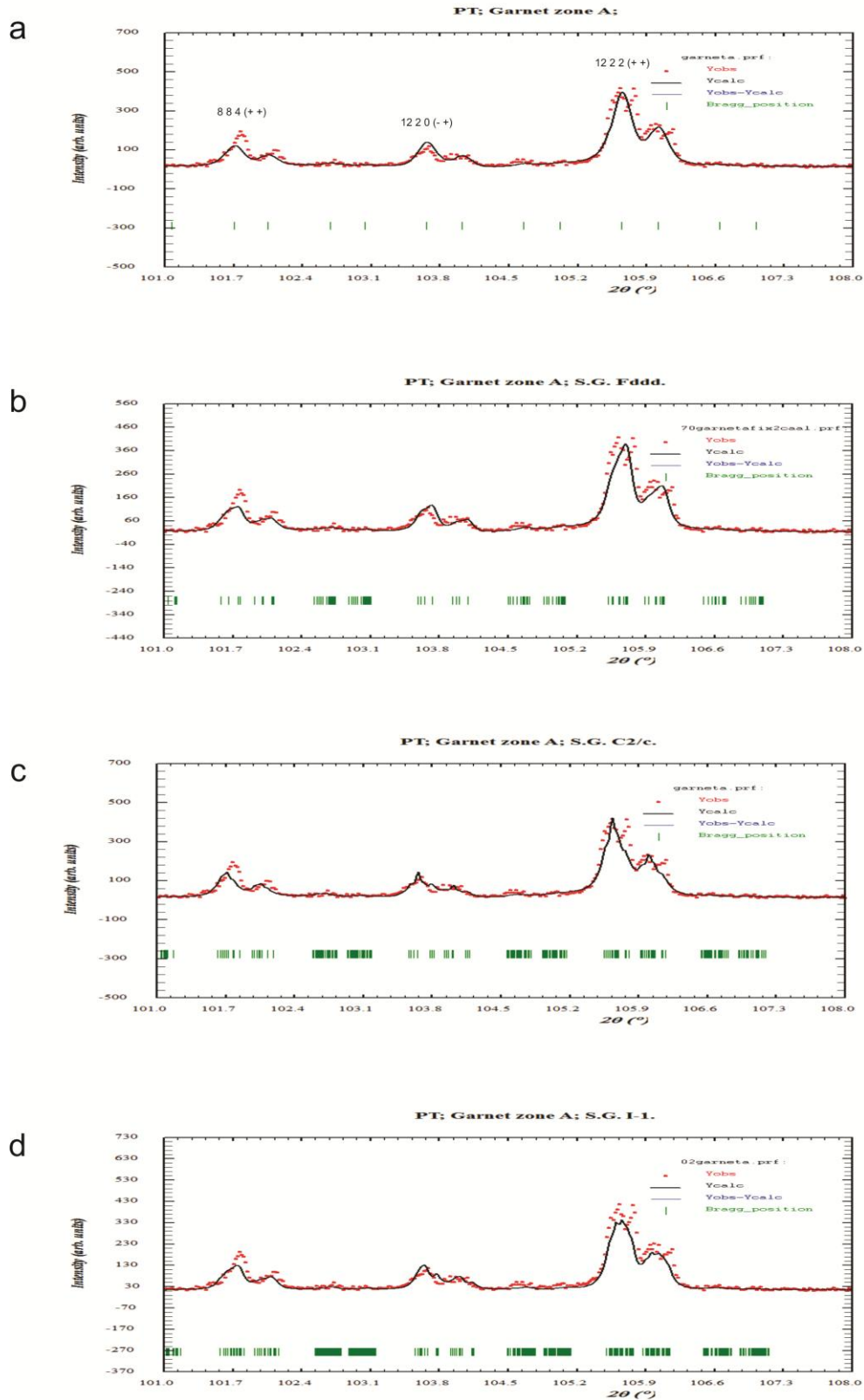
<b>X(6)-O(11)</b>	<b>1</b>	2,333(5)	2,329(5)	2,333(5)	2,338(5)	2,336(5)
<b>X(6)-O(17)</b>	<b>1</b>	2,496(6)	2,498(6)	2,500(6)	2,495(6)	2,491(6)
<b>X(6)-O(20)</b>	<b>1</b>	2,497(6)	2,494(6)	2,501(6)	2,494(6)	2,494(6)
<b>X(6)-O(22)</b>	<b>1</b>	2,333(5)	2,330(5)	2,331(5)	2,337(5)	2,337(5)
<b>X(6)-O(23)</b>	<b>1</b>	2,335(5)	2,329(5)	2,332(5)	2,338(5)	2,337(5)
<b>sr. vr. X(6)-O</b>		<b>2,415(6)</b>	<b>2,412(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,415(6)</b>
<b>sr. vr. X-O</b>		<b>2,415(6)</b>	<b>2,414(6)</b>	<b>2,416(6)</b>	<b>2,415(6)</b>	<b>2,414(6)</b>

\*-Učestalost pojavljivanja

<sup>1</sup>-Brojevi u zagradama predstavljaju procenjenu standardnu devijaciju pomnoženu sa SCOR i odnose se na poslednji značajni broj

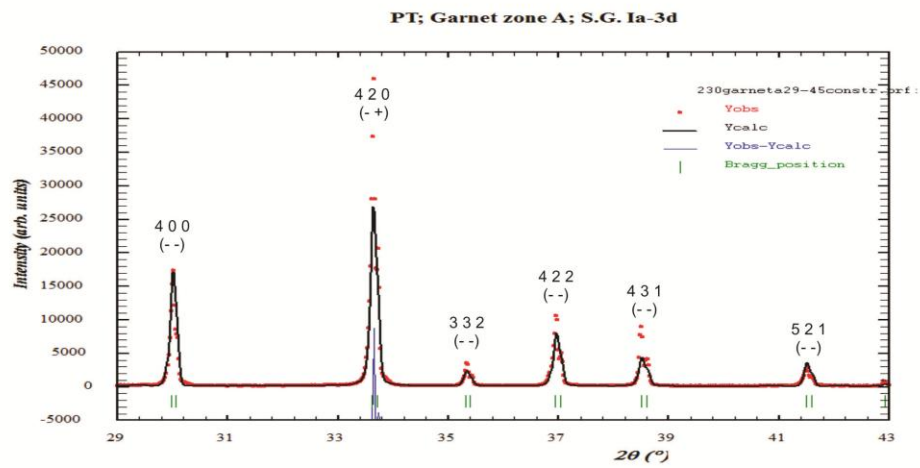


PRILOG 198. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone A od  $101^\circ$  do  $108^\circ$ . a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b). mešavina dve faze u  $Ia\bar{3}d$  p.g.; c).  $R\bar{3}c$  p.g.; i d).  $R\bar{3}$  p.g.

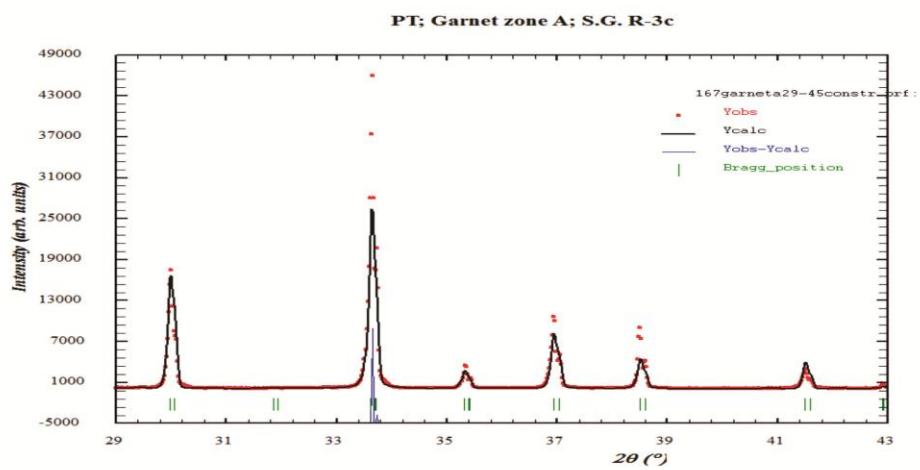


PRILOG 199. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone A od  $101^\circ$  do  $108^\circ$ . a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $Fddd$  p.g.; c).  $C2/c$  p.g.; i d).  $I\bar{1}$  p.g.

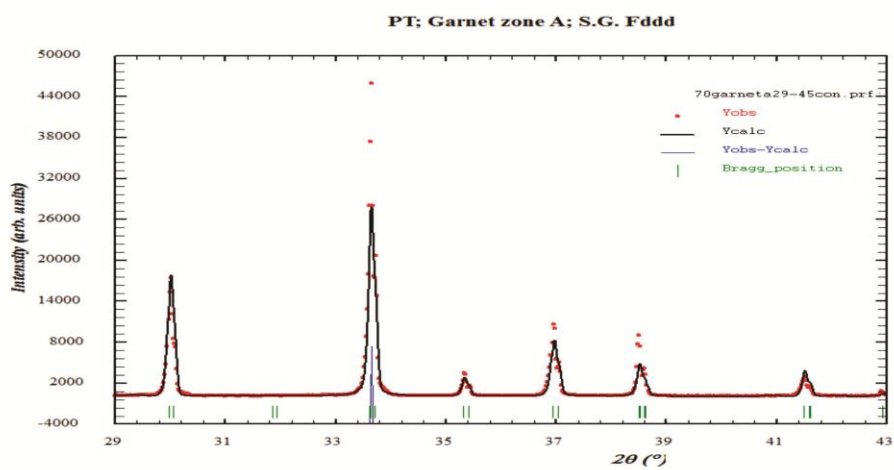
a



b



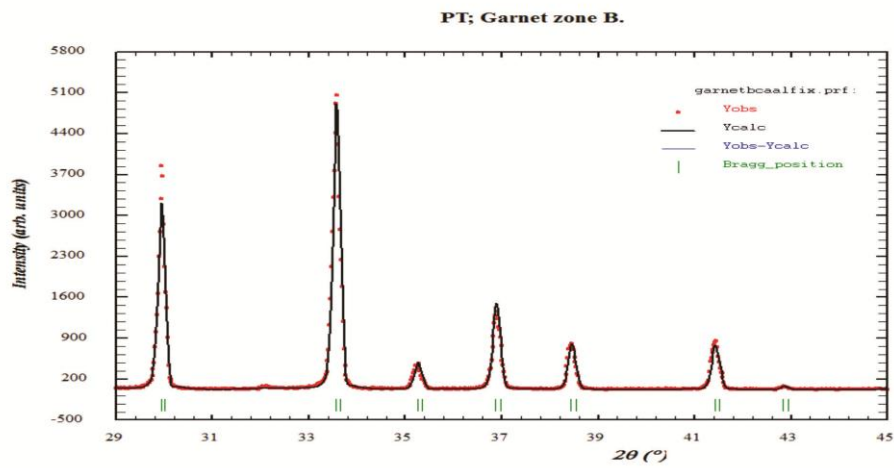
c



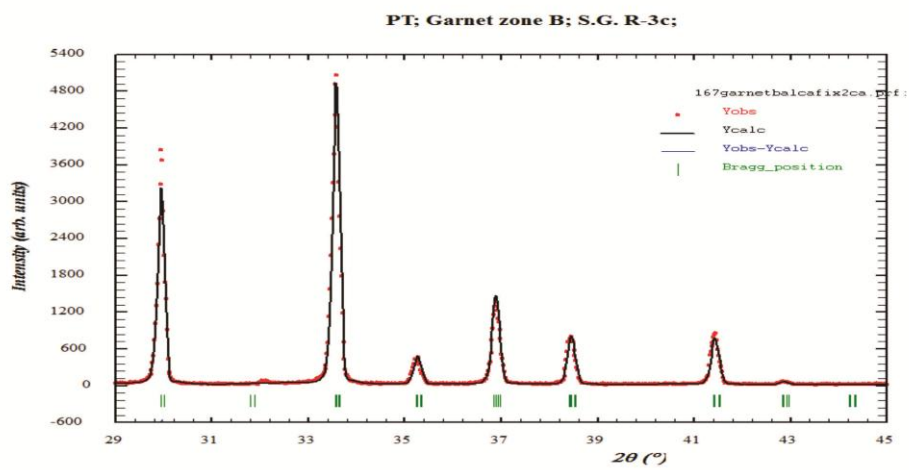
PRILOG 200. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone A od  $29^{\circ}$  do  $45^{\circ}$ . a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.



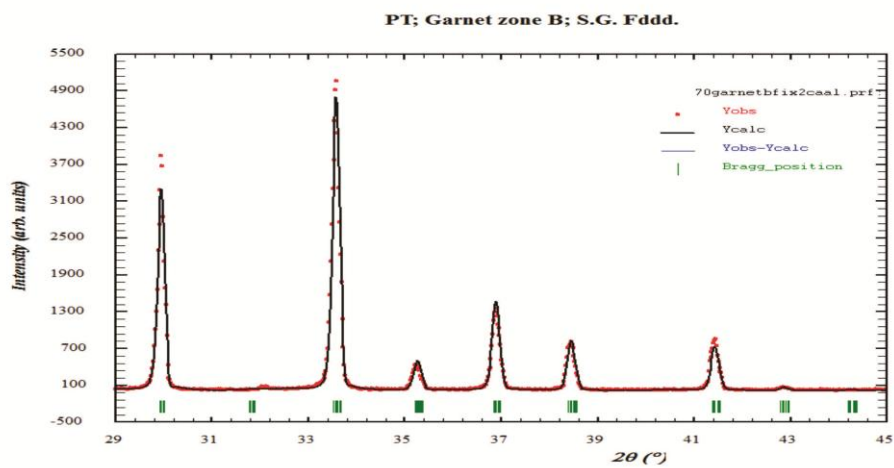
a



b

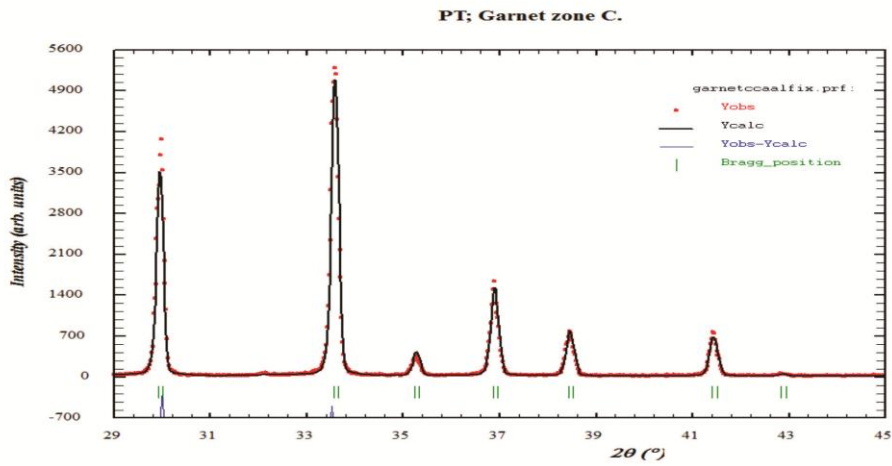


c

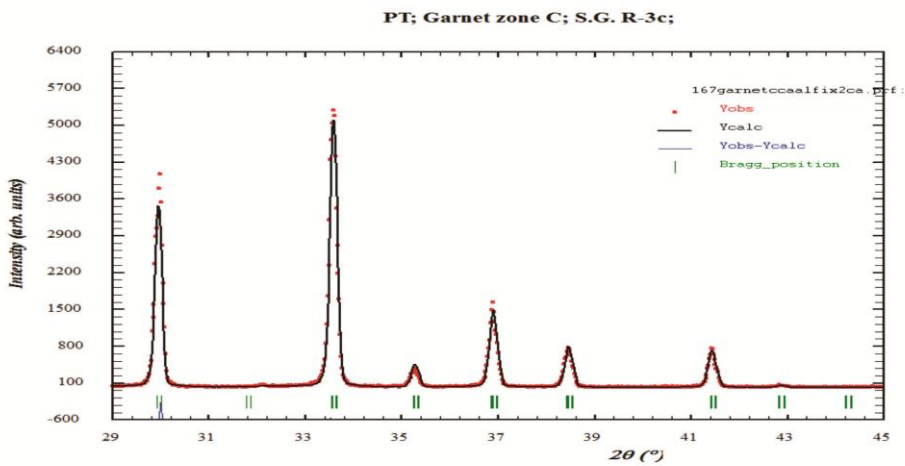


PRILOG 201. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone B od 29° do 45°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

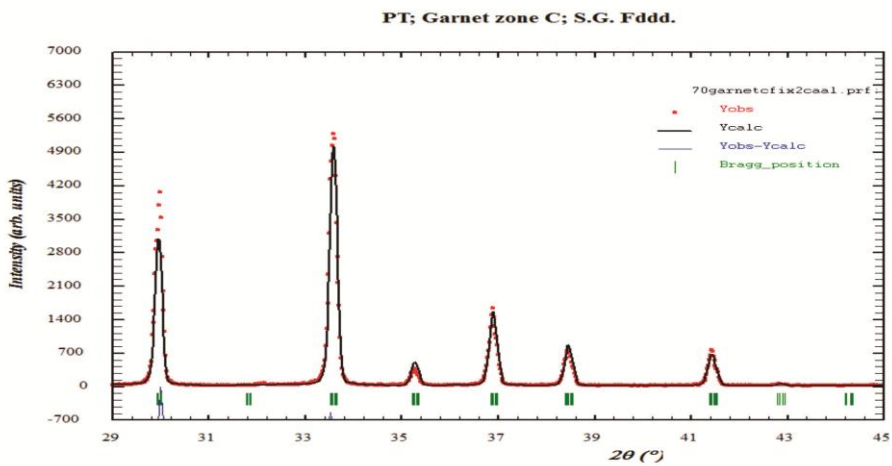
a



b

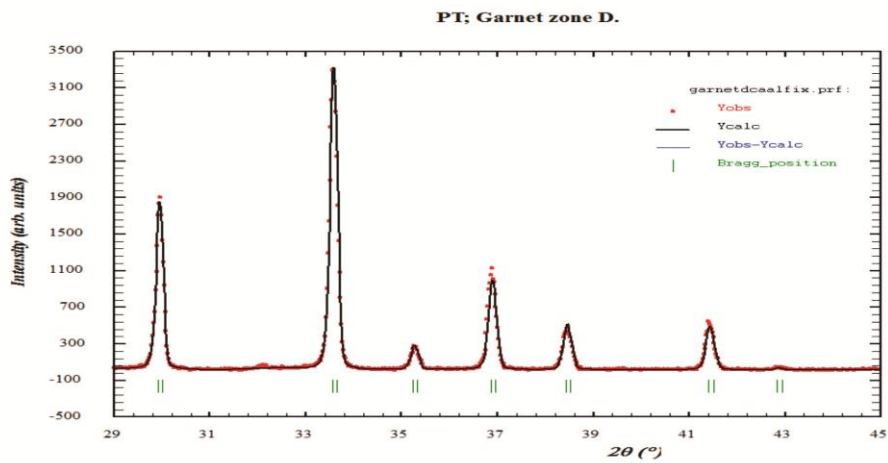


c

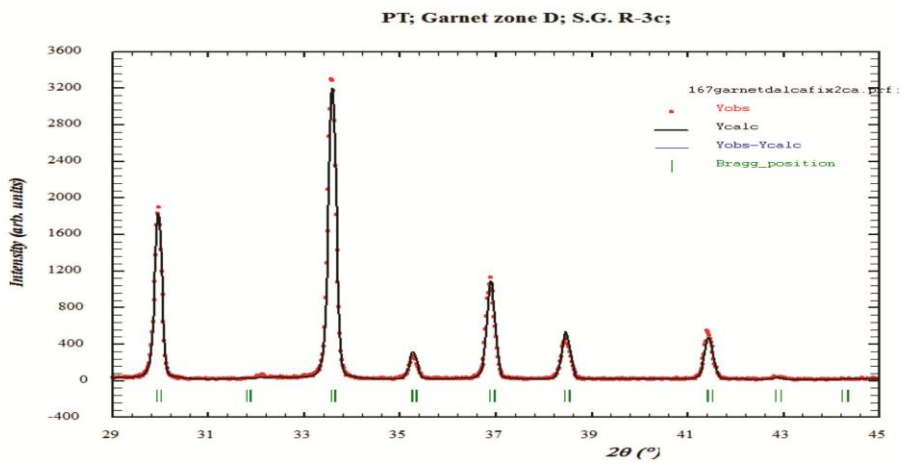


PRILOG 202. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone C od 29° do 45°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

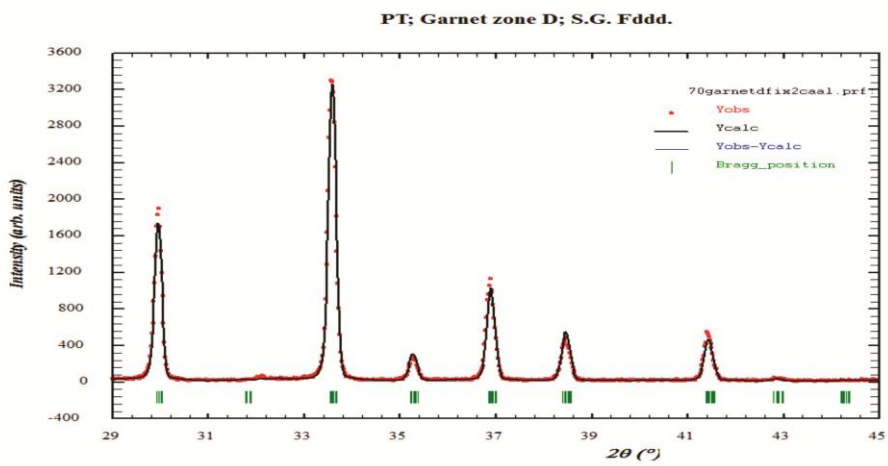
a



b

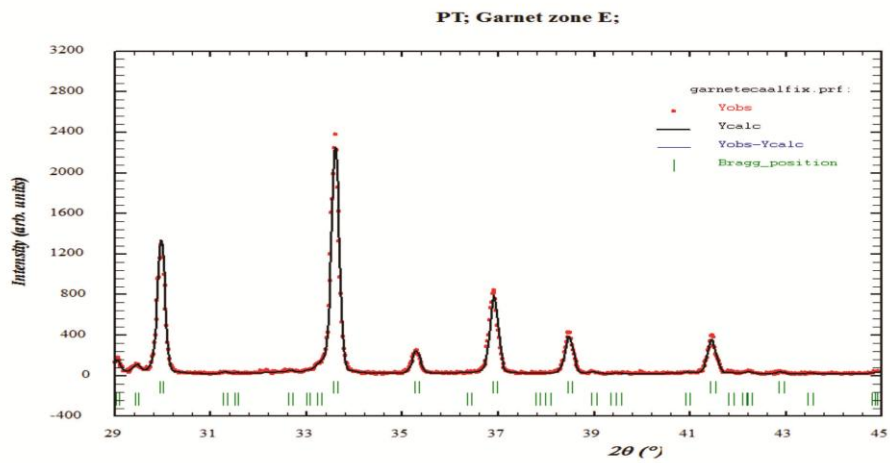


c

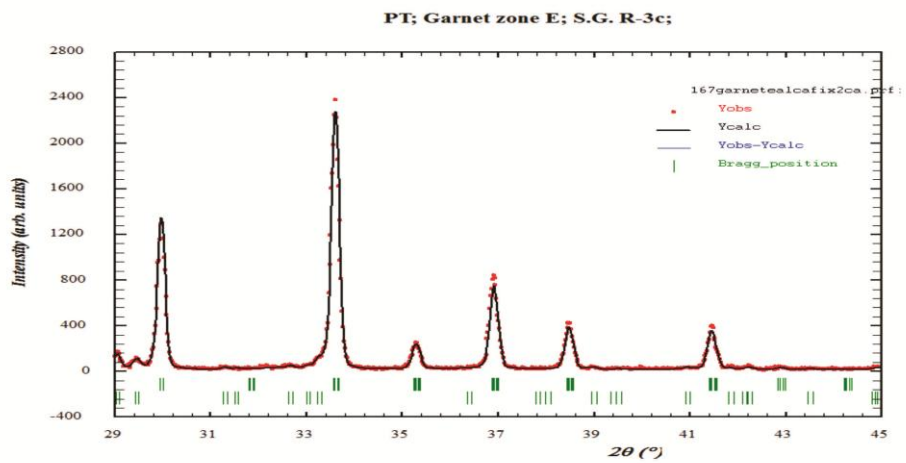


PRILOG 203. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone D od 29° do 45°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

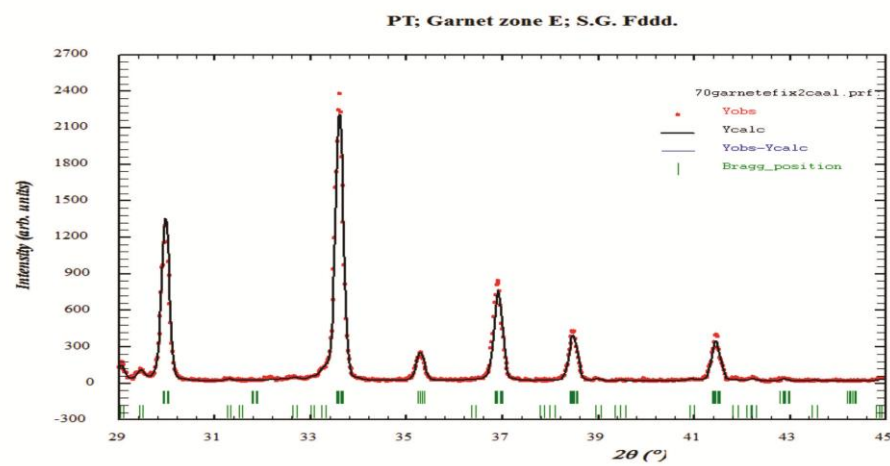
a



b



c



PRILOG 204. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone E od  $29^\circ$  do  $45^\circ$ . a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

PRILOG 205. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u °) za  $R\bar{3}c$  p.g. u svim proučavanim zonama od 29° do 45°.

$Ia\bar{3}d$	$R\bar{3}c$	A	B	C	D	E
<b>4 0 0</b> (--)	<b>0 4 2</b>	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.	n.c.
<b>4 2 0</b> (++)	<b>2 2 3</b>	0,004	0,021	0,015	0,011	0,026
	<b>2 4 1</b>					
<b>3 3 2</b> (--)	<b>1 0 4</b>	0,007	0,038	0,026	0,018	0,047
	<b>5 0 2</b>					
	<b>5 1 1</b>					
<b>4 2 2</b> (--)	<b>0 2 4</b>	0,007	0,039	0,026	0,019	0,048
	<b>4 2 2</b>					
	<b>6 0 0</b>					
<b>4 3 1</b> (--)	<b>2 1 4</b>	0,007	0,038	0,026	0,019	0,047
	<b>1 4 3</b>					
	<b>4 1 3</b>					
	<b>1 5 2</b>					
	<b>4 3 1</b>					
	<b>5 2 0</b>					
<b>5 2 1</b> (--)	<b>1 3 4</b>	0,006	0,033	0,022	0,017	0,041
	<b>3 3 3</b>					
	<b>3 4 2</b>					
	<b>1 6 1</b>					

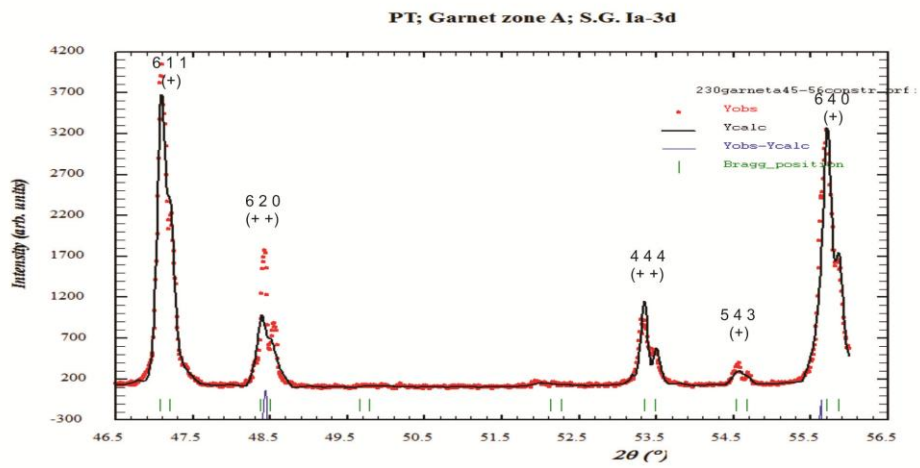
n.c.-nije izračunato

PRILOG 206. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u °) za Fddd p.g. u svim proučavanim zonama od 29° do 45°.

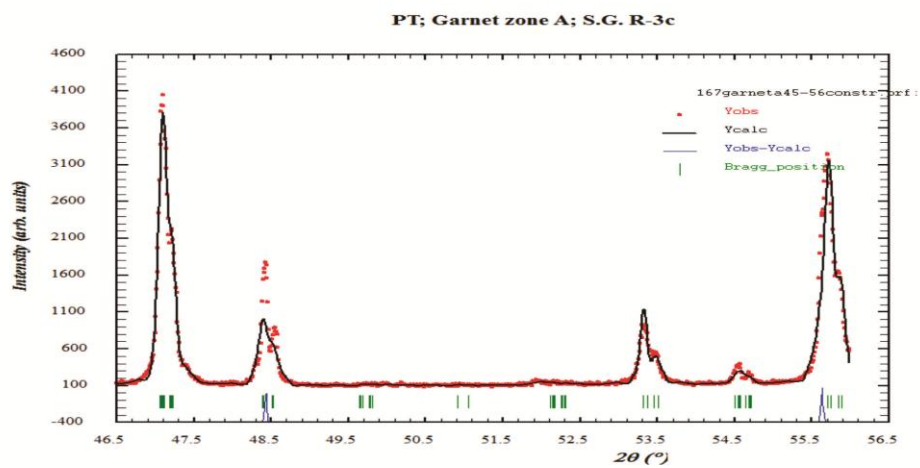
<i>la 3d</i>	<i>Fddd</i>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>	<b>E</b>
<b>4 0 0</b> (--)	<b>4 4 0*</b>	0,001	0,020	0,023	0,028	0,019
	<b>0 0 4*</b>	0,001*	0,020*	0,023*	0,028*	0,019*
<b>4 2 0</b> (+)	<b>6 2 0</b>					
	<b>4 4 2*</b>	0,003	0,051	0,040	0,050	0,048
	<b>2 2 4*</b>	0,001*	0,014*	0,017*	0,019*	0,012*
	<b>2 6 0</b>					
<b>3 3 2</b> (--)	<b>6 0 2</b>					
	<b>5 1 3*</b>	0,003	0,055	0,037	0,054	0,052
	<b>1 5 3*</b>	0,002*	0,037*	0,025*	0,035*	0,034*
	<b>0 6 2</b>					
<b>4 2 2</b> (--)	<b>6 2 2*</b>					
	<b>4 0 4</b>	0,003	0,048	0,039	0,052	0,045
	<b>2 6 2*</b>	0,003*	0,047*	0,032*	0,046*	0,044*
	<b>0 4 4</b>					
<b>4 3 1</b> (--)	<b>7 1 1*</b>					
	<b>5 3 3*</b>					
	<b>5 5 1</b>					
	<b>4 2 4</b>	0,004	0,068	0,053	0,067	0,063
	<b>3 5 3</b>	0,002*	0,031*	0,025*	0,011*	0,028*
	<b>1 1 5</b>					
	<b>2 4 4</b>					
<b>5 2 1</b> (--)	<b>7 3 1*</b>					
	<b>6 4 2</b>					
	<b>4 6 2</b>	0,003	0,056	0,049	0,063	0,051
	<b>3 1 5*</b>	0,002*	0,045*	0,042*	0,010*	0,041*
	<b>3 7 1</b>					
	<b>1 3 5</b>					

\*-izračunati hkl-ovi u Fddd p.g. (ICDD-PDF 85-1369, Gr<sub>867</sub>Adr<sub>33</sub>, Munam, Severna Koreja, Takéuchi i dr., 1982)

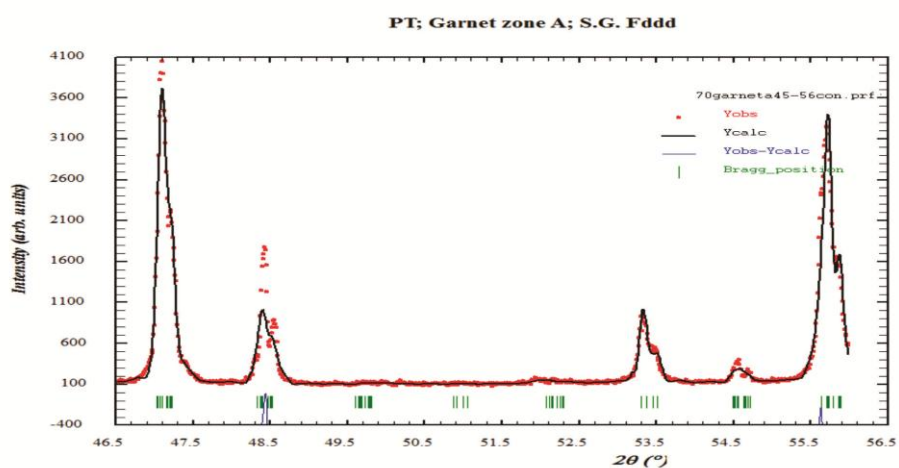
a



b

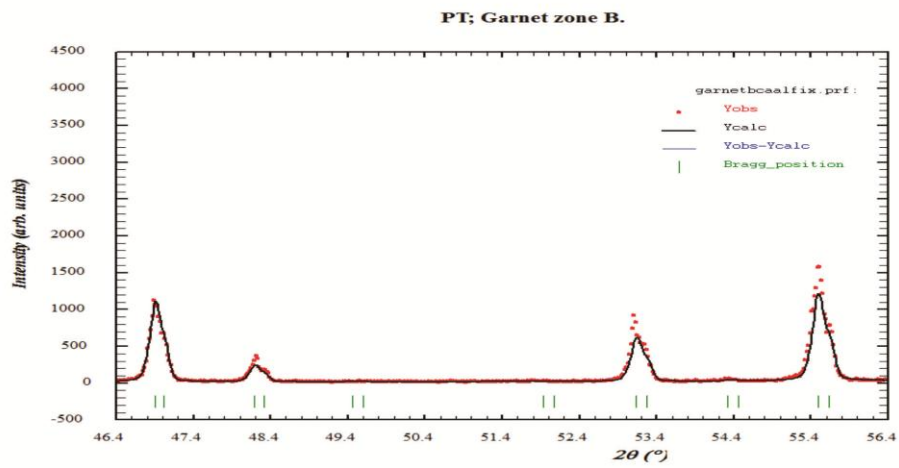


c

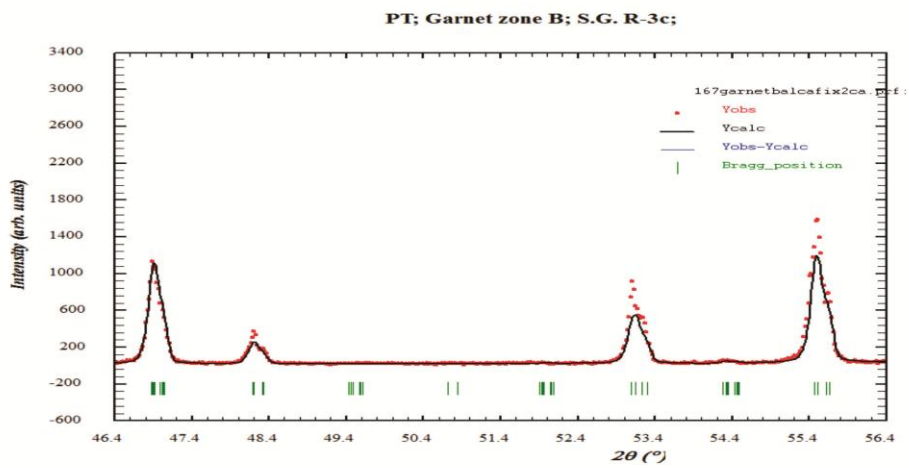


PRILOG 207. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone A od 45° do 56°. a). Ia $\bar{3}d$  p.g.; b). R $\bar{3}c$  p.g.; i c). Fddd p.g.

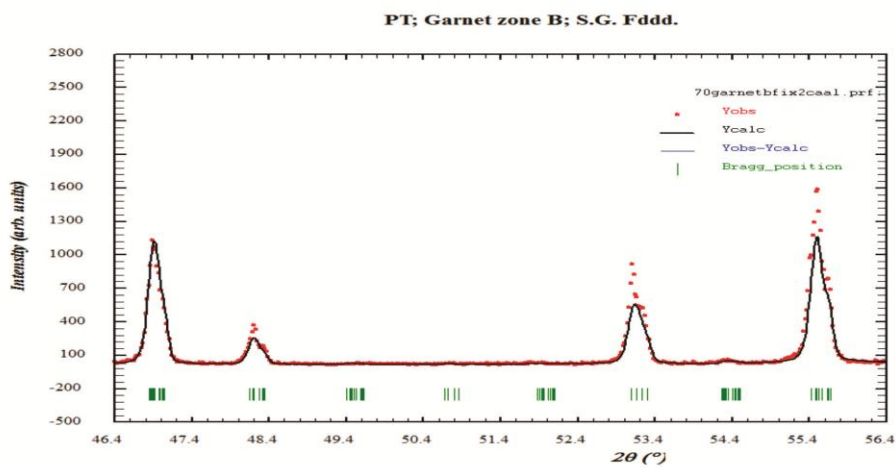
a



b



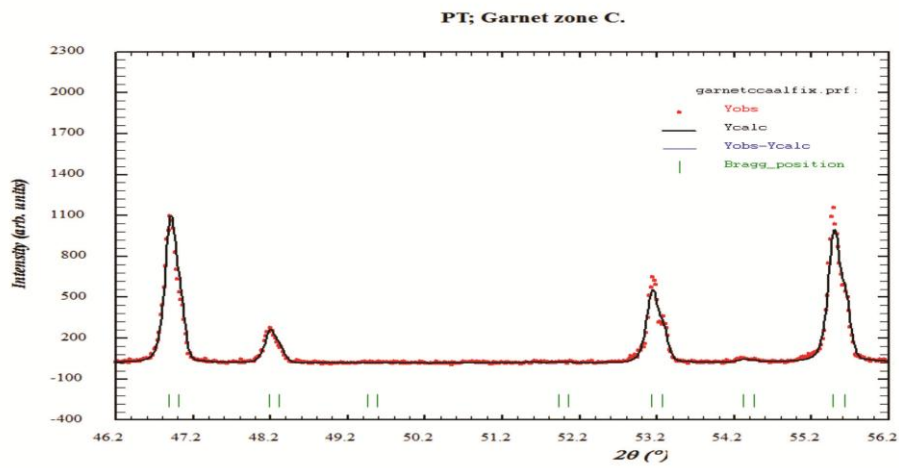
c



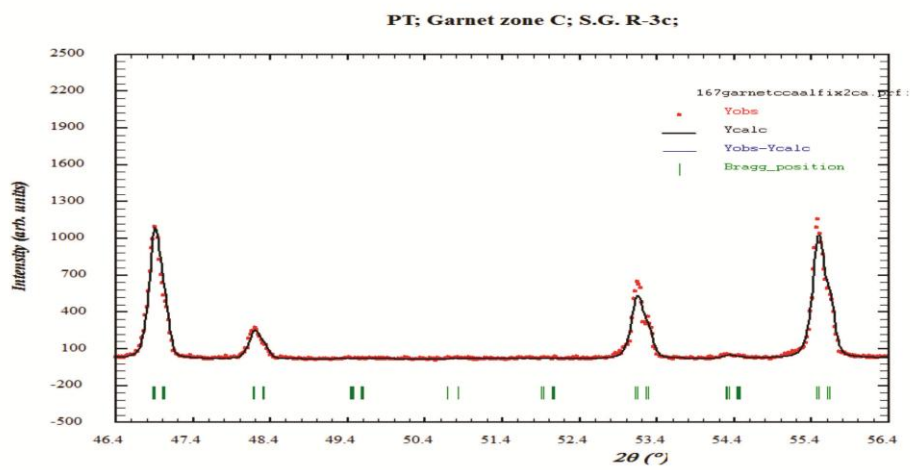
PRILOG 208. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone B od 45° do 56°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.



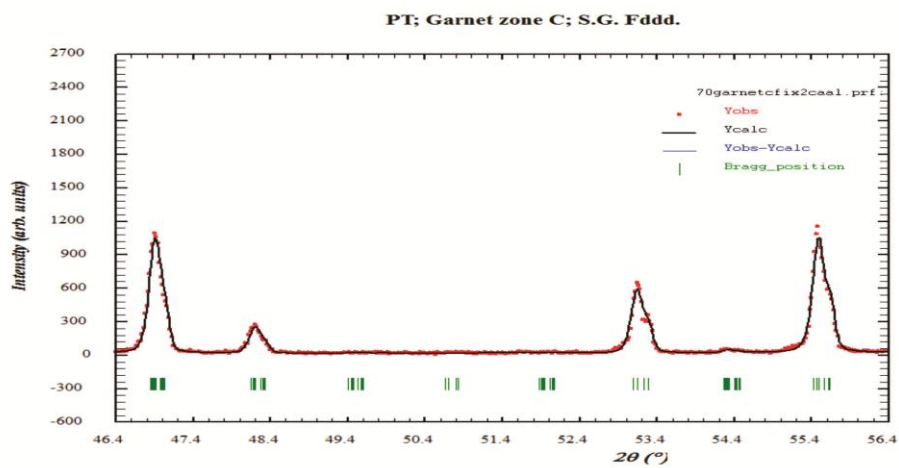
a



b

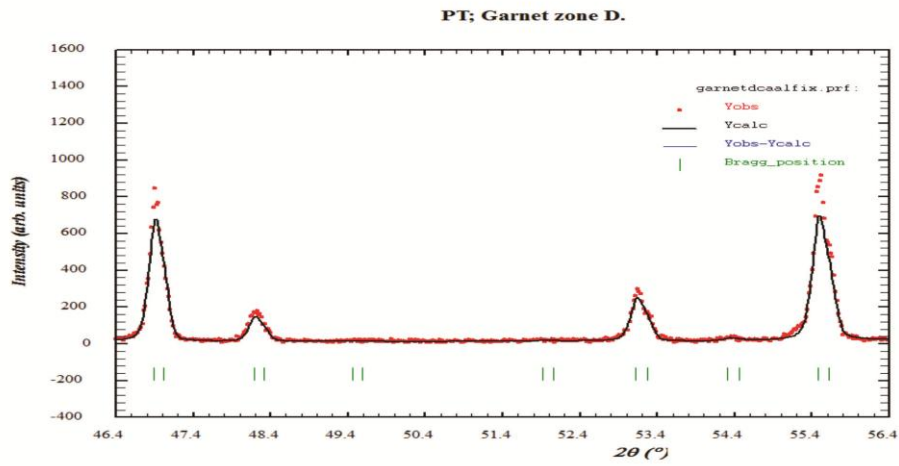


c

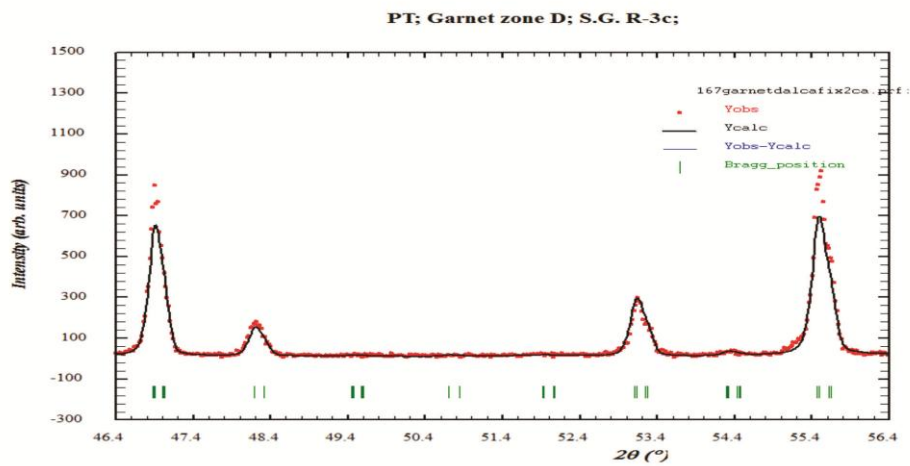


PRILOG 209. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone C od 45° do 56°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

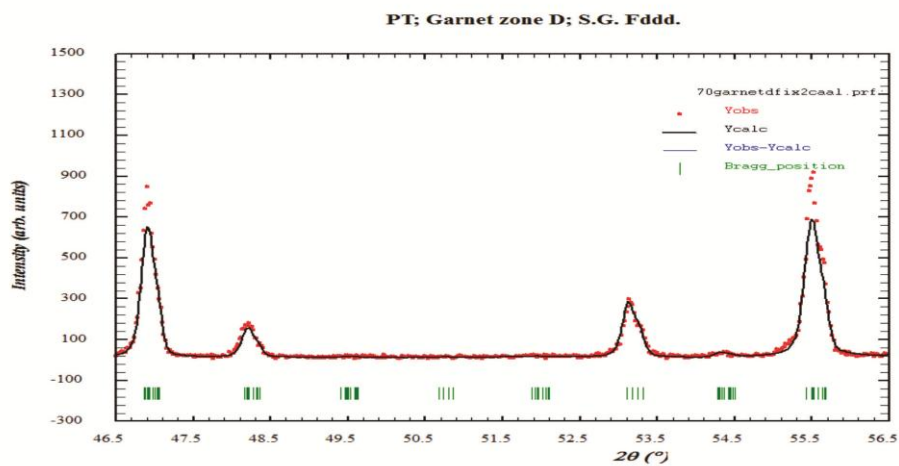
a



b

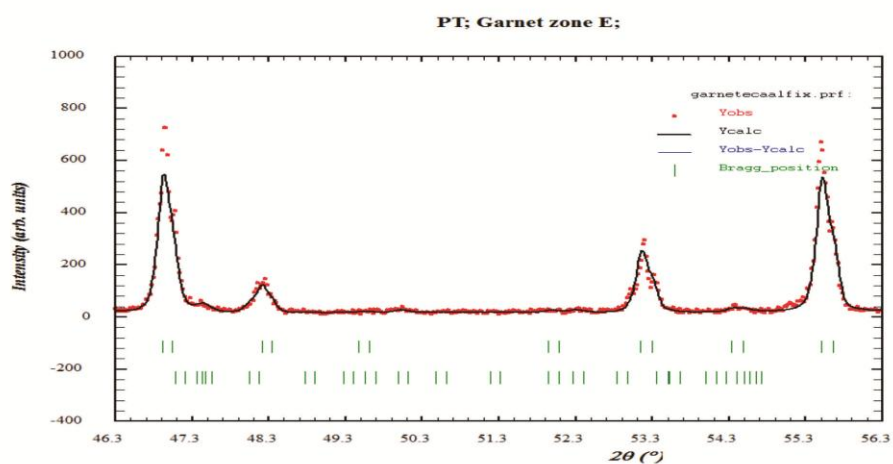


c

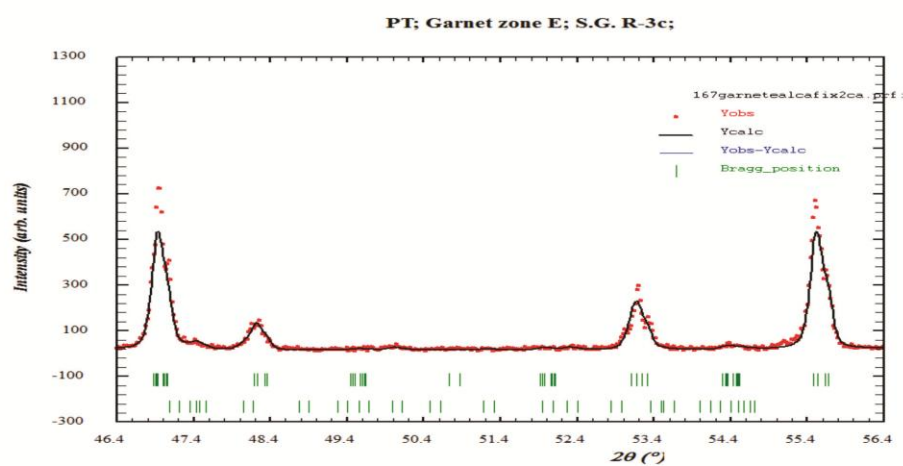


PRILOG 210. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone D od 45° do 56°. a). Ia $\bar{3}d$  p.g.; b). R $\bar{3}c$  p.g.; i c). Fddd p.g.

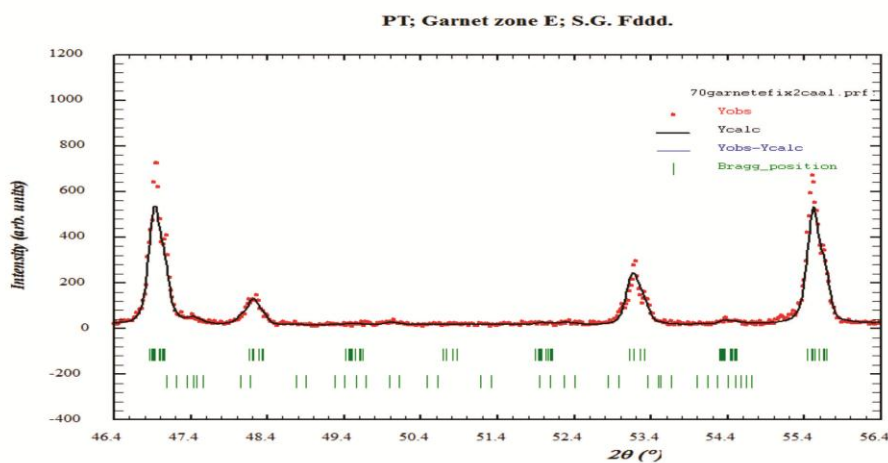
a



b



c



PRILOG 211. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone E od 45° do 56°. a). Ia  $\bar{3}d$  p.g.; b). R  $\bar{3}c$  p.g.; i c). Fddd p.g.

PRILOG 212. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u °) za  $R\bar{3}c$  p.g. u svim proučavanim zonama od  $45^\circ$  do  $56^\circ$ .

$Ia\bar{3}d$	$R\bar{3}c$	A	B	C	D	E
<b>6 1 1</b> (+)	<b>1 2 5</b>	0,049	0,050	0,034	0,025	0,062
	<b>0 5 4</b>					
	<b>2 5 3</b>					
	<b>5 2 3</b>					
	<b>0 7 2</b>					
	<b>5 3 2</b>					
	<b>7 1 0</b>					
<b>6 2 0</b> (++)	<b>2 4 4</b>	0,023	0,023	0,016	0,011	0,029
	<b>2 6 2</b>					
<b>4 4 4</b> (++)	<b>0 0 6</b>	0,057	0,058	0,040	0,029	0,072
	<b>8 0 2</b>					
<b>5 4 3</b> (+)	<b>1 1 6</b>	0,064	0,065	0,044	0,032	0,080
	<b>1 6 4</b>					
	<b>1 7 3</b>					
	<b>7 1 3</b>					
	<b>7 2 2</b>					
	<b>8 1 1</b>					
	<b>5 5 0</b>					
<b>6 4 0</b> (+)	<b>4 2 5</b>	0,041	0,042	0,029	0,021	0,061
	<b>4 6 1</b>					

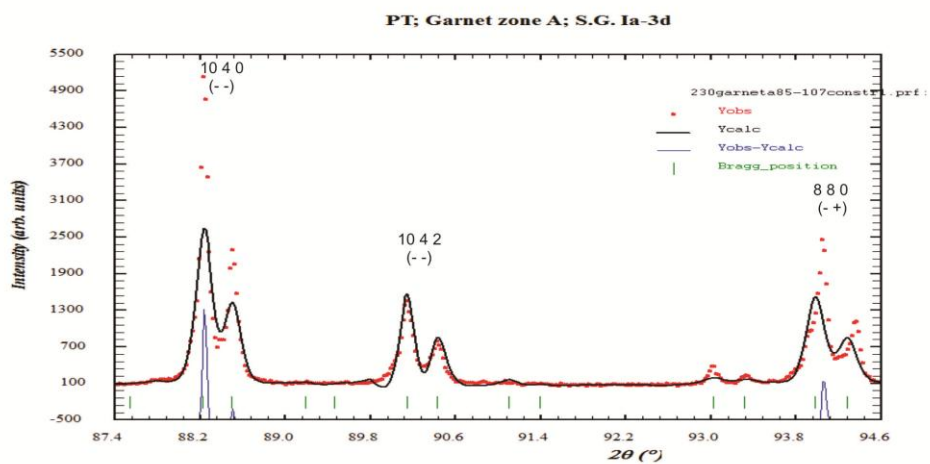
PRILOG 213. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u  $^{\circ}$ ) za Fddd p.g. u svim proučavanim zonama od  $45^{\circ}$  do  $56^{\circ}$ .

<i>la 3d</i>	<i>Fddd</i>	A	B	C	D	E
<b>6 1 1</b> (+)	<b>8 2 2</b>	0,072 0,027*	0,072 0,029*	0,060 0,019*	0,076 0,028*	0,067 0,027*
	<b>7 3 3</b>					
	<b>7 5 1*</b>					
	<b>5 1 5</b>					
	<b>5 7 1*</b>					
	<b>3 7 3</b>					
	<b>2 0 6</b>					
	<b>2 8 2</b>					
	<b>1 5 5</b>					
	<b>0 2 6</b>					
<b>6 2 0</b> (++)	<b>8 4 0</b>	0,066 0,035*	0,059 0,027*	0,056 0,033*	0,069 0,037*	0,055 0,025*
	<b>6 6 2*</b>					
	<b>4 8 0</b>					
	<b>2 2 6*</b>					
<b>4 4 4</b> (++)	<b>8 0 4*</b>	0,066 0,066*	0,071 0,071*	0,048 0,048*	0,069 0,069*	0,066 0,066*
	<b>0 8 4*</b>					
<b>5 4 3</b> (+)	<b>9 1 3</b>	0,082 n.c.	0,087 n.c.	0,067 n.c.	0,085 n.c.	0,081 n.c.
	<b>8 2 4</b>					
	<b>7 1 5</b>					
	<b>7 7 1</b>					
	<b>5 5 5</b>					
	<b>2 8 4</b>					
	<b>1 1 7</b>					
	<b>1 7 5</b>					
	<b>1 9 3</b>					
<b>6 4 0</b> (+)	<b>10 2 0</b>	0,096 0,020*	0,103 0,016*	0,070 0,018*	0,100 0,021*	0,097 0,014*
	<b>6 6 4*</b>					
	<b>4 4 6*</b>					
	<b>2 1 0 0</b>					

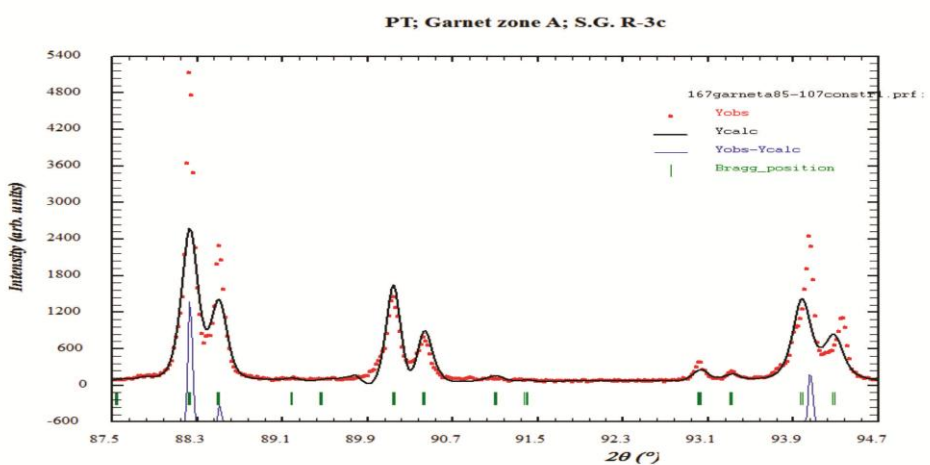
\*-izračunati hkl-ovi u Fddd p.g. (ICDD-PDF 85-1369, Gr<sub>867</sub>Adr<sub>33</sub>, Munam, Severna Koreja, Takéuchi i dr., 1982)

n.c.-nije izračunato

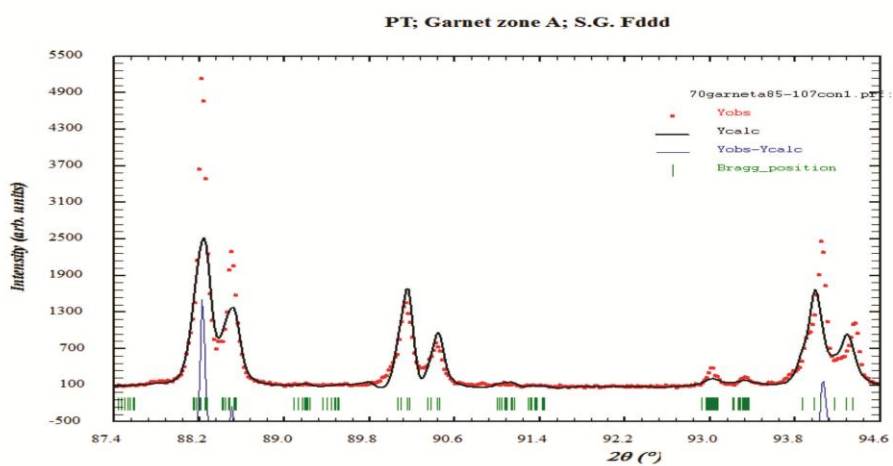
a



b

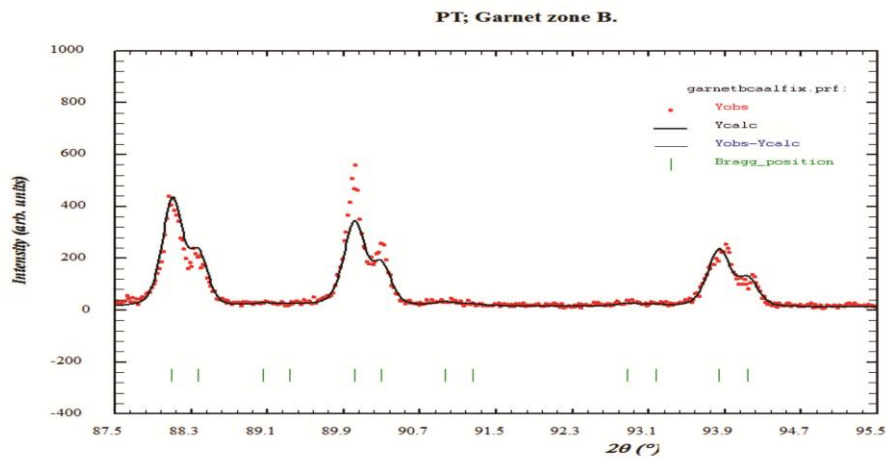


c

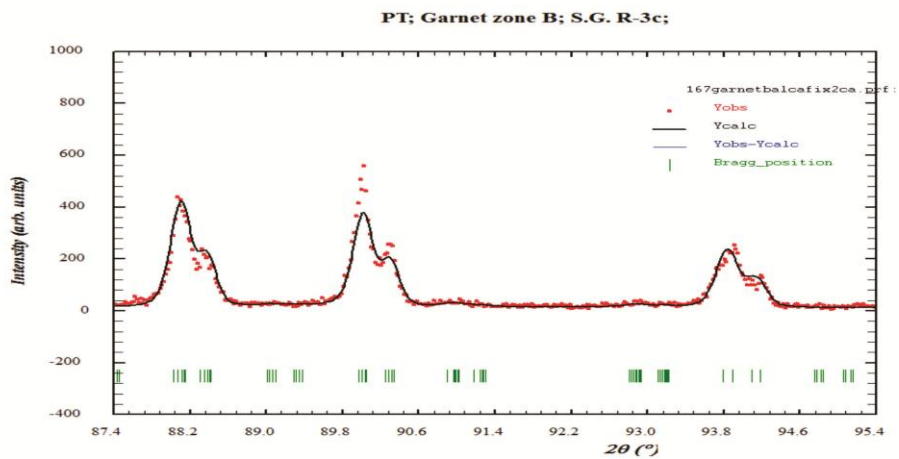


PRILOG 214. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone A od 87,5° do 94,5°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

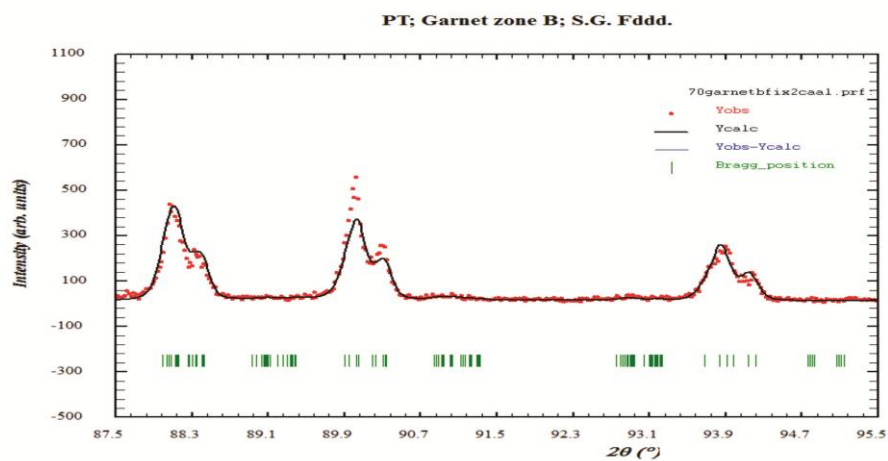
a



b

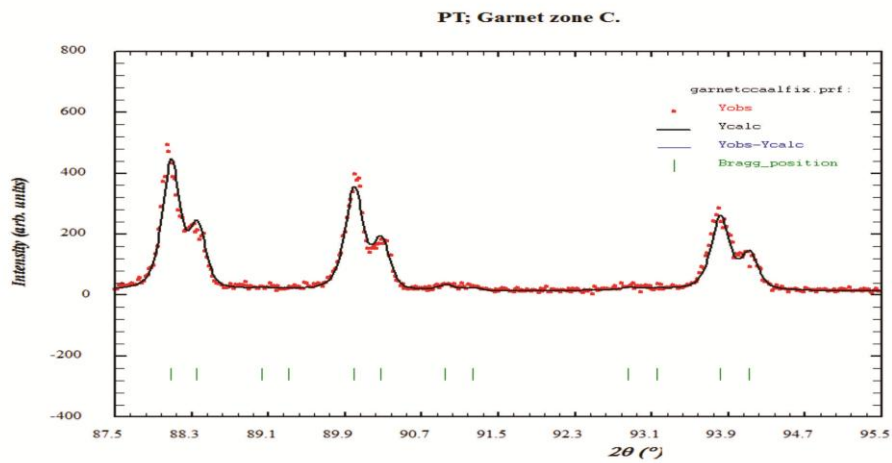


c

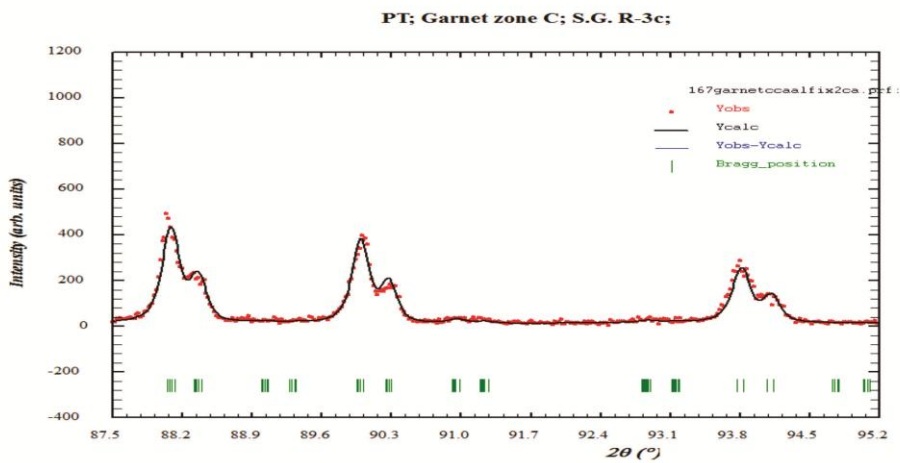


PRILOG 215. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone B od 87,5° do 94,5°. a). Ia  $\bar{3}d$  p.g.; b). R  $\bar{3}c$  p.g.; i c). Fddd p.g.

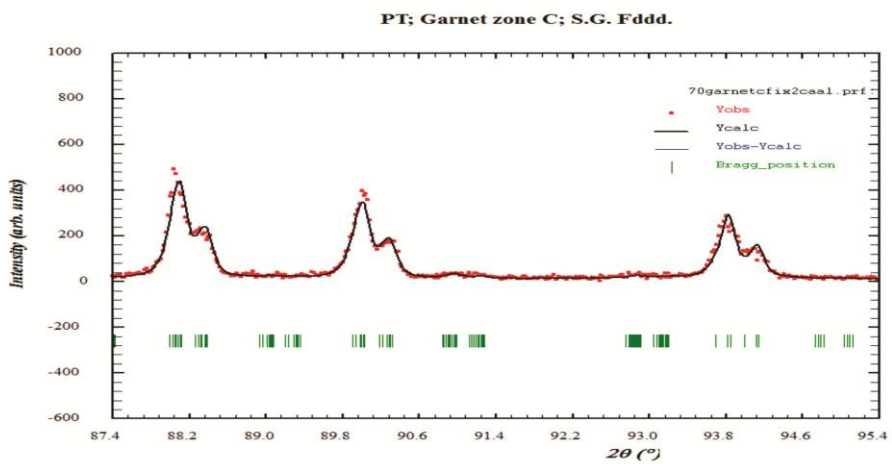
a



b



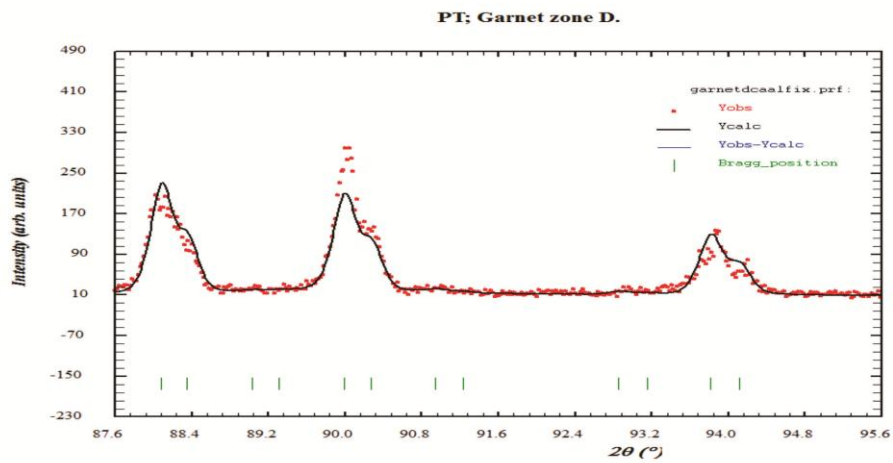
c



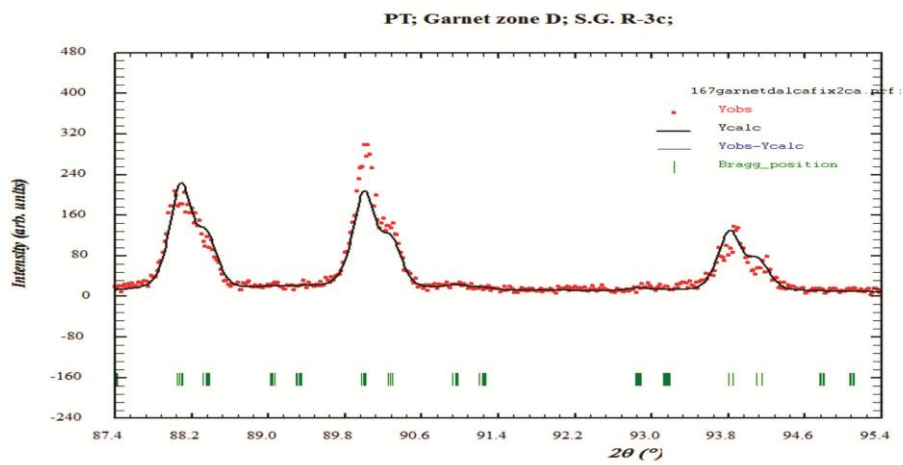
PRILOG 216. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone C od 87,5° do 94,5°. a). Ia  $\bar{3}d$  p.g.; b). R  $\bar{3}c$  p.g.; i c). Fddd p.g.



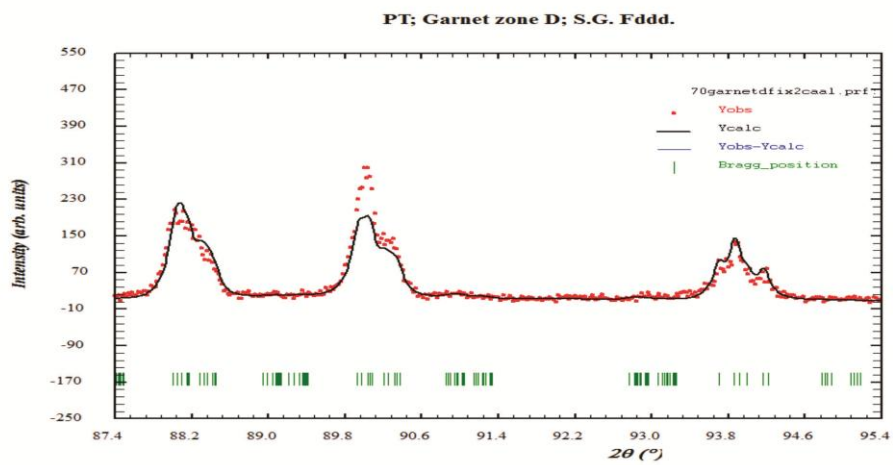
a



b

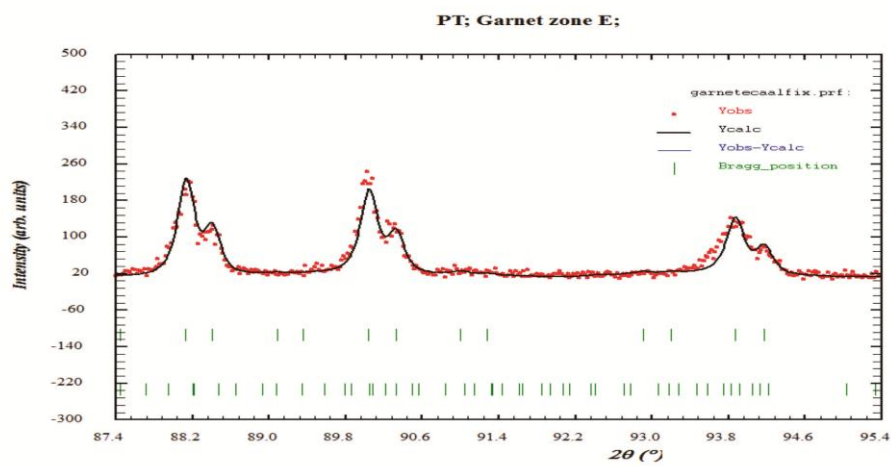


c

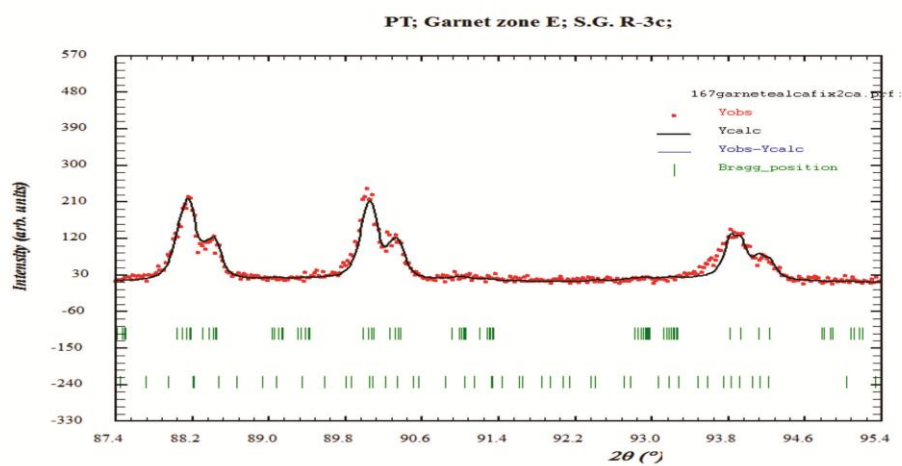


PRILOG 217. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone D od 87,5° do 94,5°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

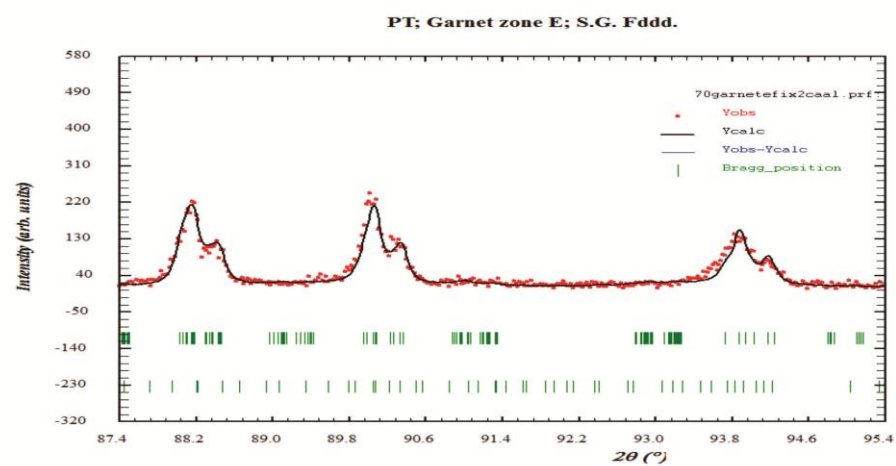
a



b



c



PRILOG 218. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone E od 87,5° do 94,5°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

PRILOG 219. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u  $^{\circ}$ ) za  $R\bar{3}c$  p.g. u svim proučavanim zonama od  $87,5^{\circ}$  do  $94,5^{\circ}$ .

$Ia\bar{3}d$	$R\bar{3}c$	A	B	C	D	E
<b>10 4 0</b> (--)	<b>2 2 9</b>	0,022	0,118	0,080	0,058	0,145
	<b>4 6 7</b>					
	<b>10 2 5</b>					
	<b>4 10 3</b>					
	<b>10 4 3</b>					
<b>10 4 2</b> (--)	<b>2 6 8</b>	0,017	0,088	0,060	0,043	0,109
	<b>6 6 6</b>					
	<b>6 8 4</b>					
	<b>2 12 2</b>					
<b>8 8 0</b> (++)	<b>8 0 8</b>	0,018	0,094	0,064	0,046	0,116
	<b>8 8 0</b>					

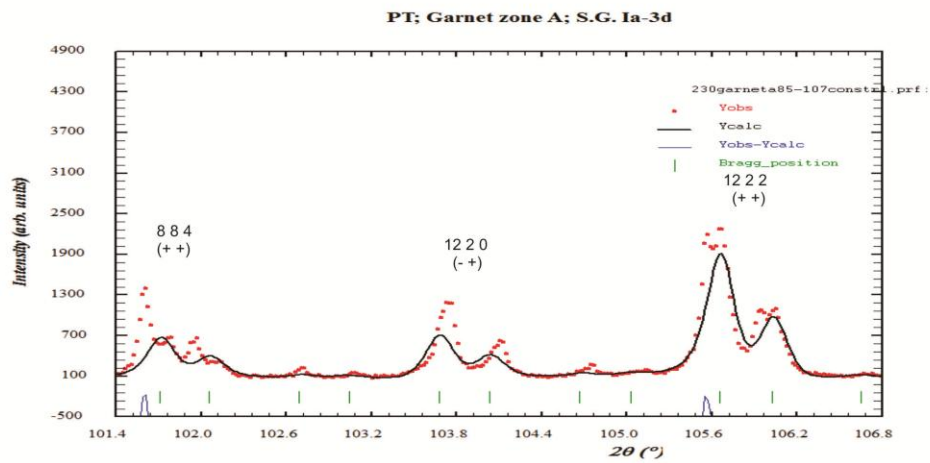
PRILOG 220. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u  $^{\circ}$ ) za  $Fddd$  p.g. u svim proučavanim zonama od  $87,5^{\circ}$  do  $94,5^{\circ}$ .

$Ia\bar{3}d$	$Fddd$	A	B	C	D	E
<b>10 4 0</b> (--)	<b>14 2 4</b>	0,132	0,169	0,126	0,166	0,159
	<b>14 6 0</b>					
	<b>12 4 6</b>					
	<b>10 2 8</b>					
	<b>10 10 4*</b>					
	<b>4 4 10*</b>					
	<b>6 14 0</b>					
	<b>4 12 6</b>					
	<b>2 10 8</b>					
	<b>2 14 4</b>					
<b>10 4 2</b> (--)	<b>14 6 2</b>	0,111	0,146	0,131	0,167	0,135
	<b>12 8 4</b>					
	<b>8 12 4</b>					
	<b>6 2 10</b>					
	<b>6 14 2</b>					
<b>8 8 0</b> (++)	<b>16 0 0</b>	0,177	0,227	0,155	0,221	0,212
	<b>8 8 8</b>					
	<b>0 16 0</b>					

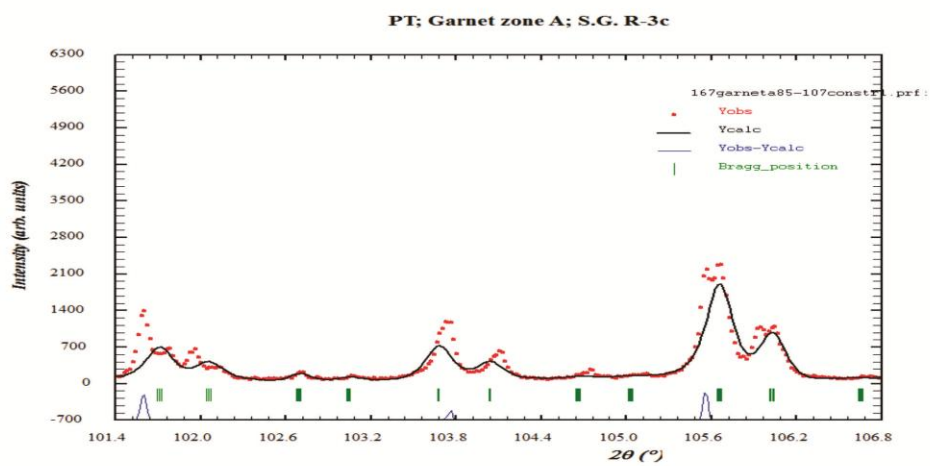
\*-izračunati hkl-ovi u  $Fddd$  p.g. (ICDD-PDF 85-1369, Gr<sub>867</sub>Adr<sub>33</sub>, Munam, Severna Koreja, Takéuchi i dr., 1982)

n.c.-nije izračunato

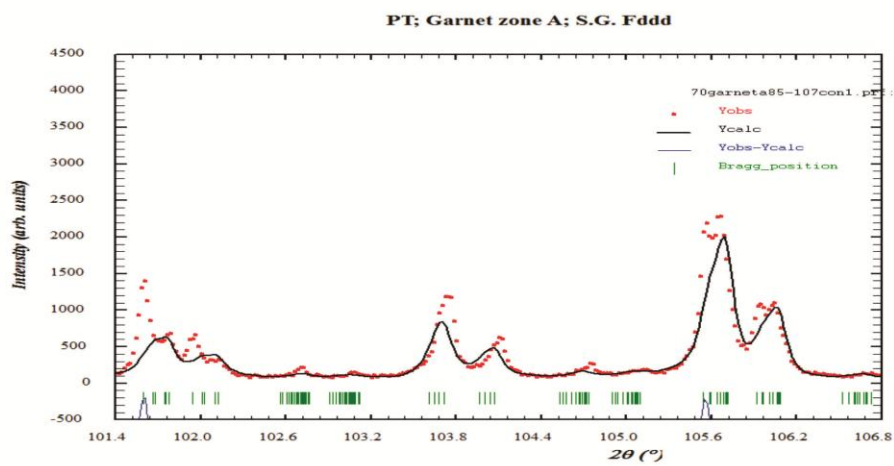
a



b

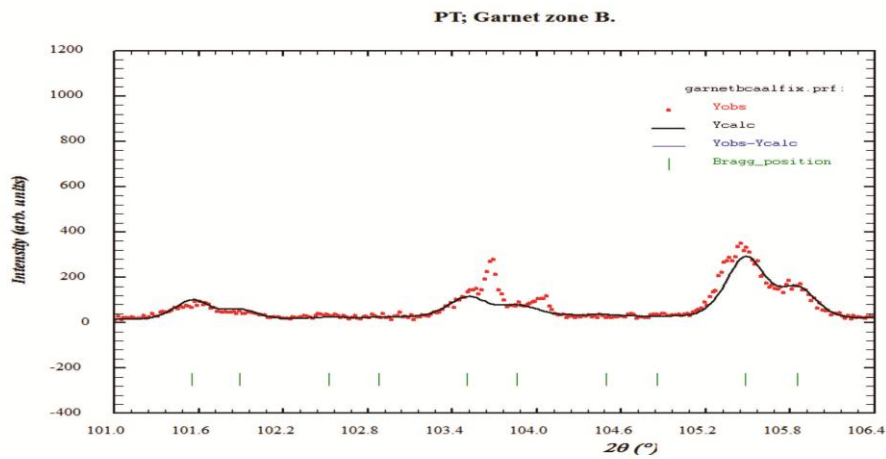


c

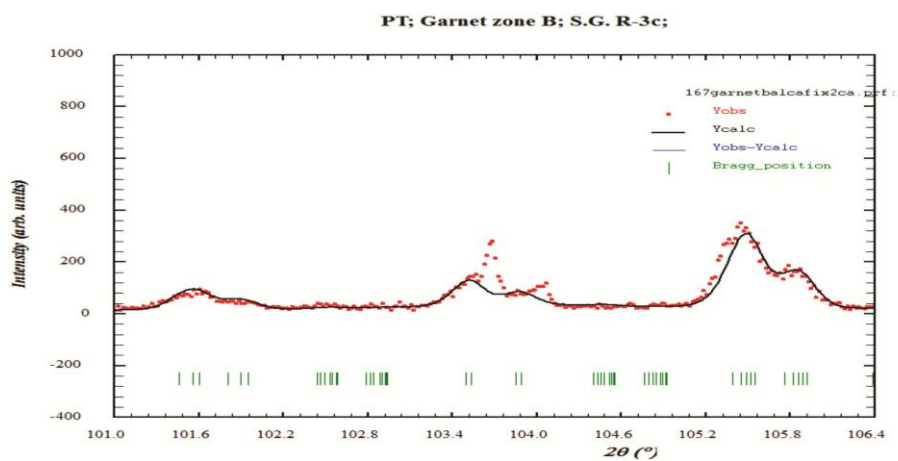


PRILOG 221. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone A od  $101^\circ$  do  $106^\circ$ . a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

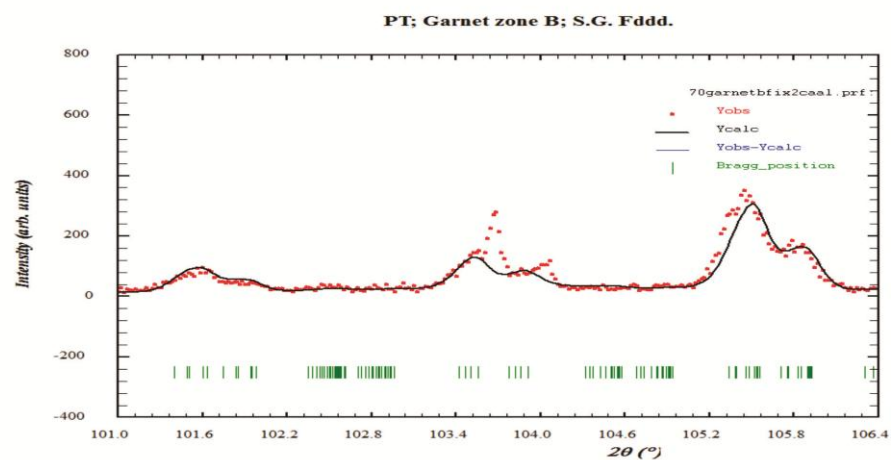
a



b

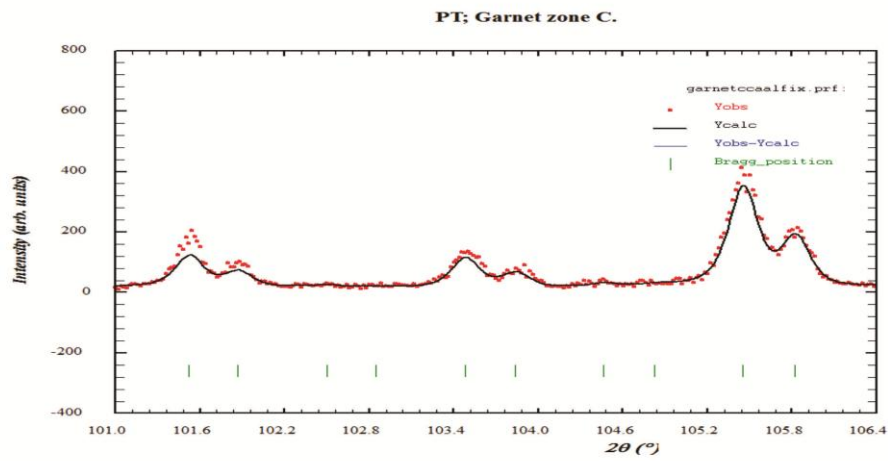


c

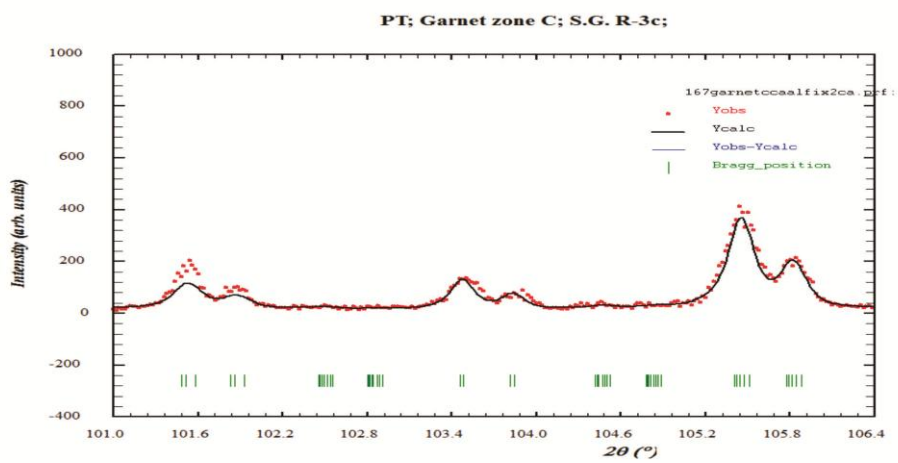


PRILOG 222. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone B od  $101^{\circ}$  do  $106^{\circ}$ . a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

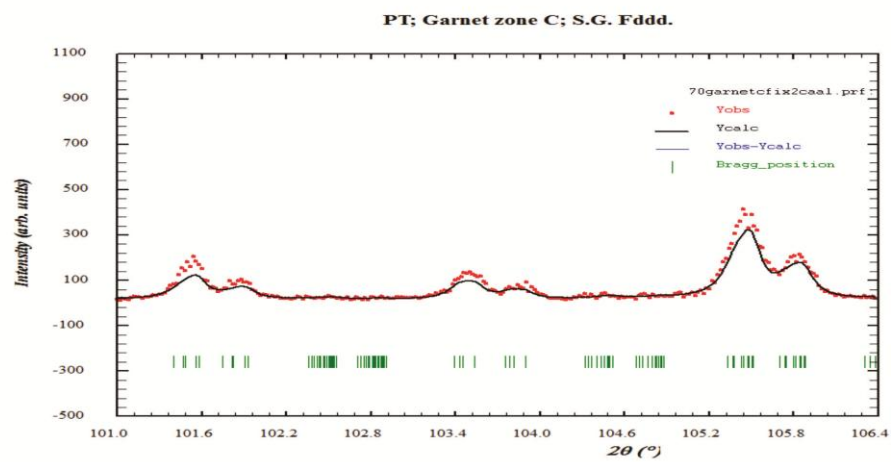
a



b

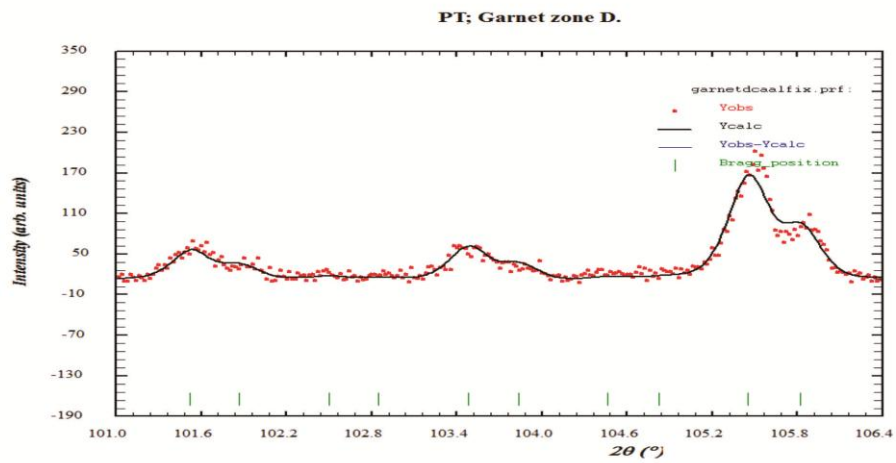


c

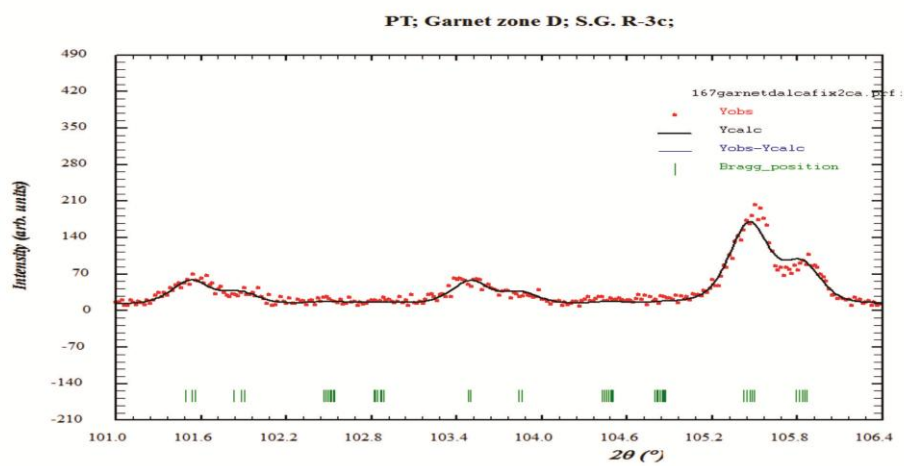


PRILOG 223. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone C od 101° do 106°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

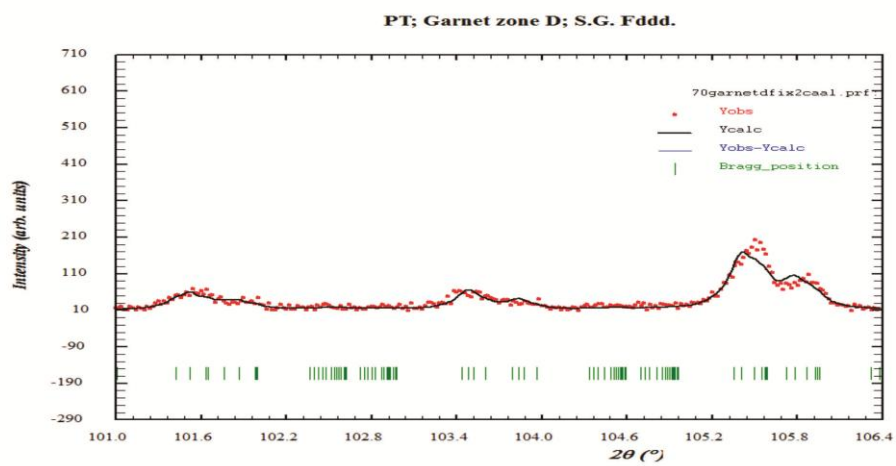
a



b

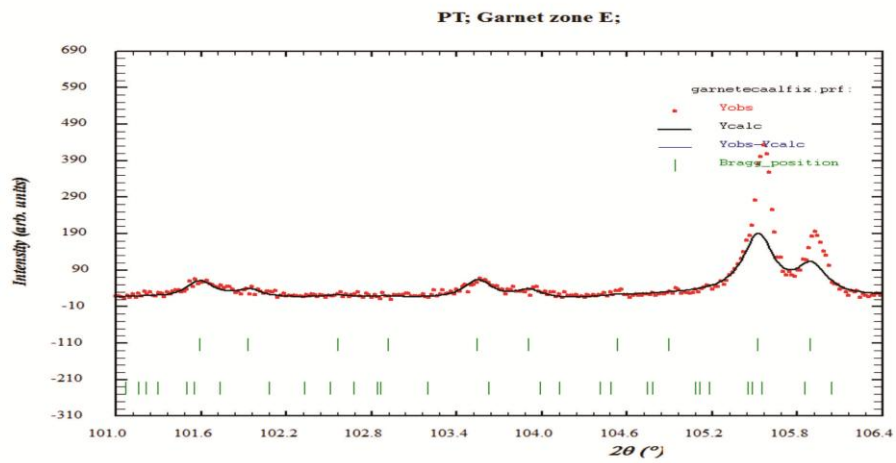


c

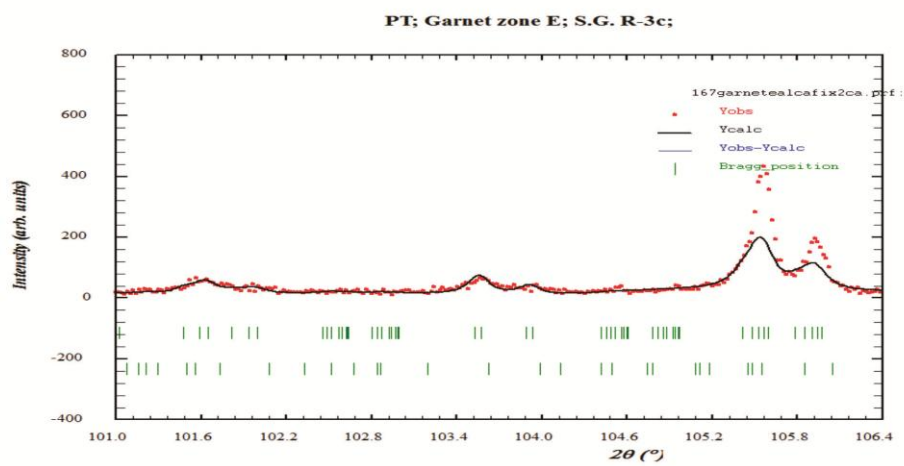


PRILOG 224. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone D od 101° do 106°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

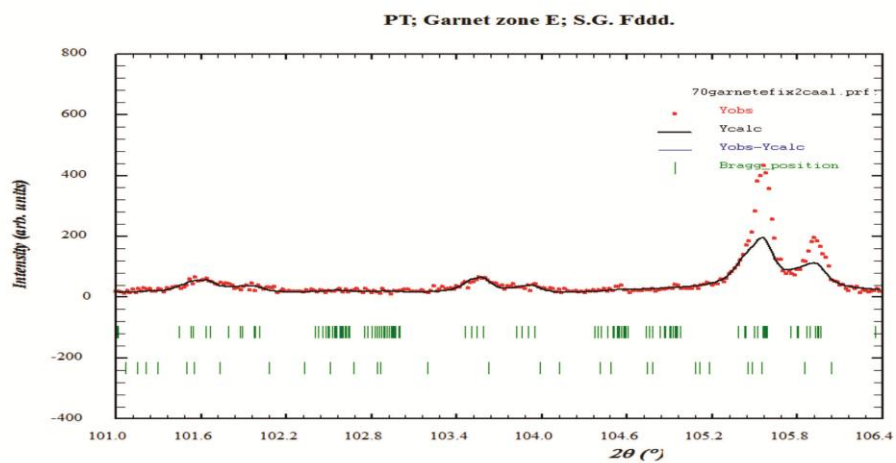
a



b



c



PRILOG 225. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone E od 101° do 106°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.



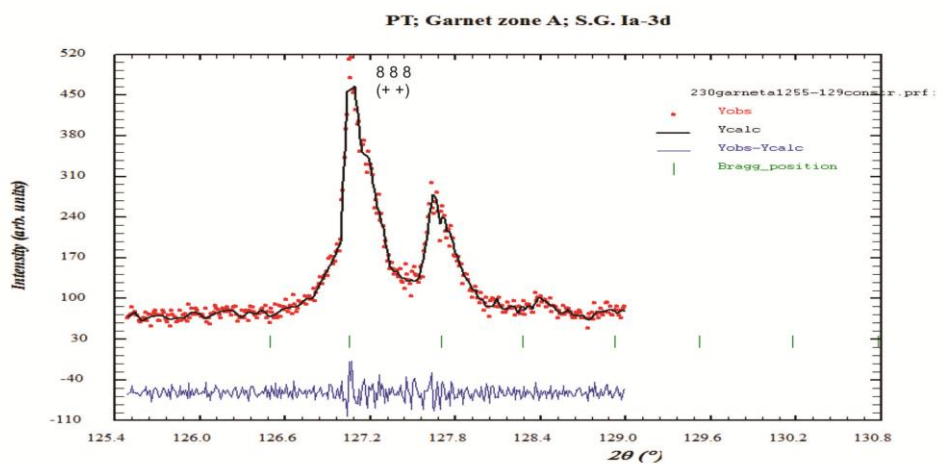
PRILOG 226. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u °) za  $R\bar{3}c$  p.g. u svim proučavanim zonama od  $101^\circ$  do  $106^\circ$ .

$Ia\bar{3}d$	$R\bar{3}c$	A	B	C	D	E
8 8 4 (++)	4 0 10	0,027	0,143	0,097	0,070	0,177
	0 12 6					
	12 0 6					
12 2 0 (-+)	2 10 7	0,007	0,036	0,025	0,018	0,044
	2 12 5					
12 2 2 (++)	2 4 10	0,029	0,152	0,104	0,075	0,187
	0 10 8					
	4 10 6					
	10 4 6					
	0 14 4					
	10 6 4					
14 2 0						

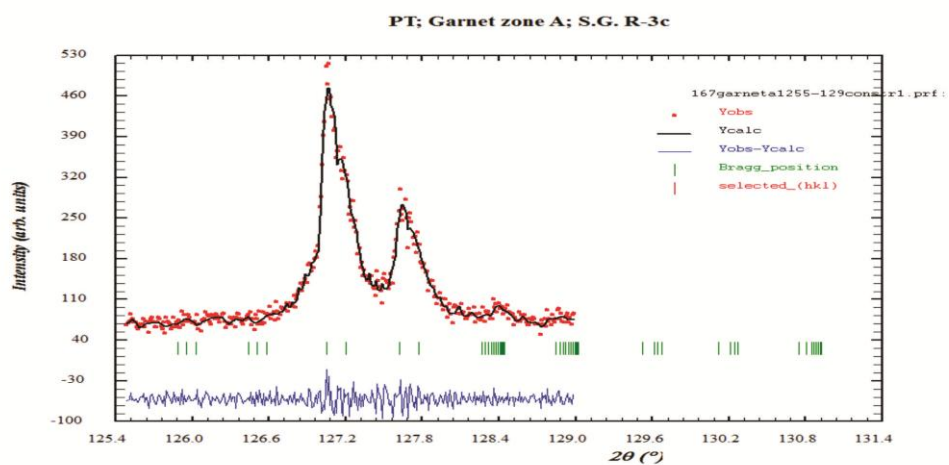
PRILOG 227. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u °) za  $Fddd$  p.g. u svim proučavanim zonama od  $101^\circ$  do  $106^\circ$ .

$Ia\bar{3}d$	$Fddd$	A	B	C	D	E
8 8 4 (++)	16 0 4	0,180	0,231	0,178	0,226	0,216
	12 14 8					
	12 12 0					
	0 0 12					
	4 12 8					
	0 16 4					
12 2 0 (-+)	14 10 0	0,104	0,138	0,142	0,171	0,126
	12 12 2					
	10 14 0					
	2 2 12					
12 2 2 (++)	16 4 4	0,171	0,219	0,181	0,231	0,206
	14 6 6					
	14 10 2					
	10 2 10					
	10 14 2					
	4 0 12					
	6 14 6					
	0 4 12					
	2 10 10					
	4 16 4					

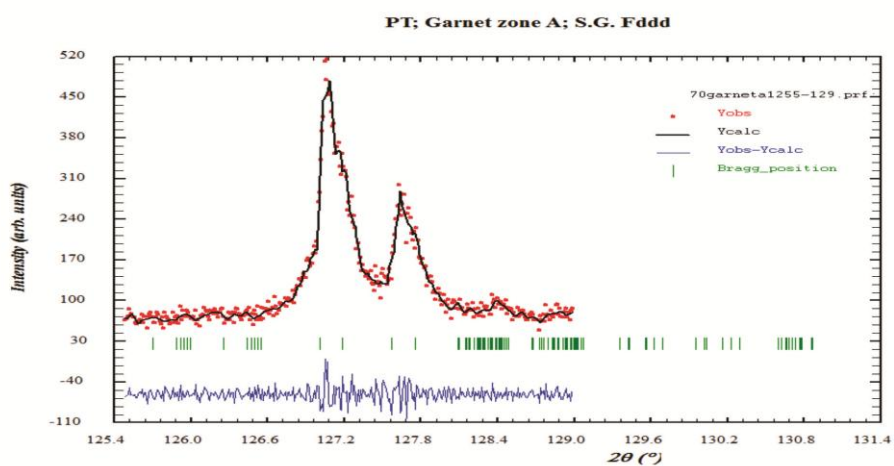
a



b

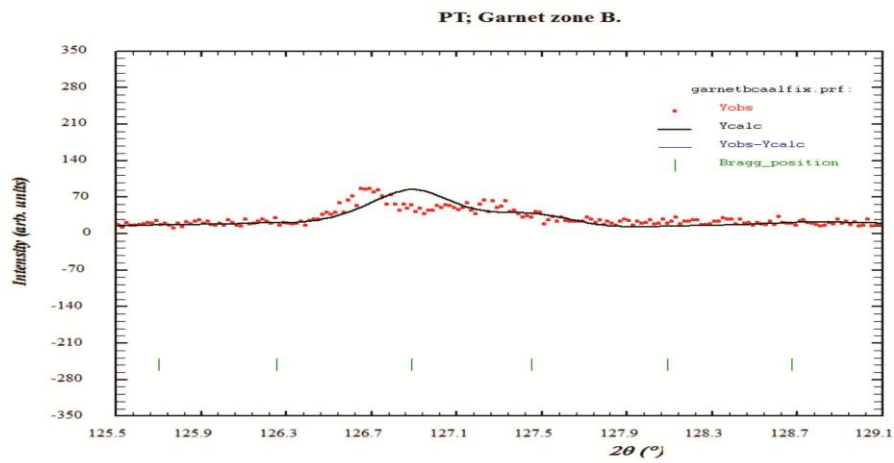


c

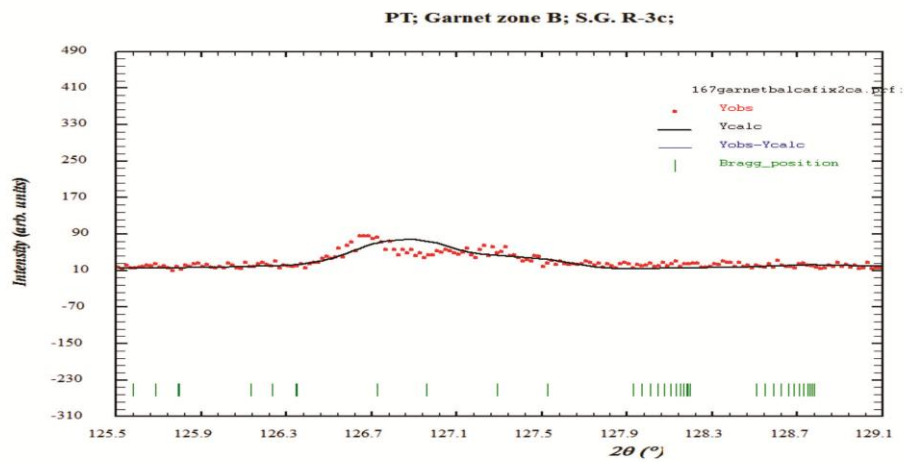


PRILOG 228. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone A od 125,5° do 129°. a). Ia $\bar{3}d$  p.g.; b). R $\bar{3}c$  p.g.; i c). Fddd p.g.

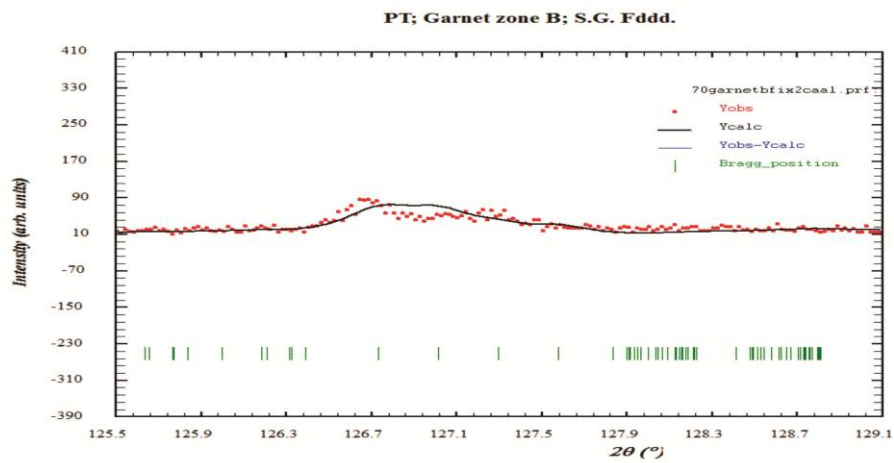
a



b

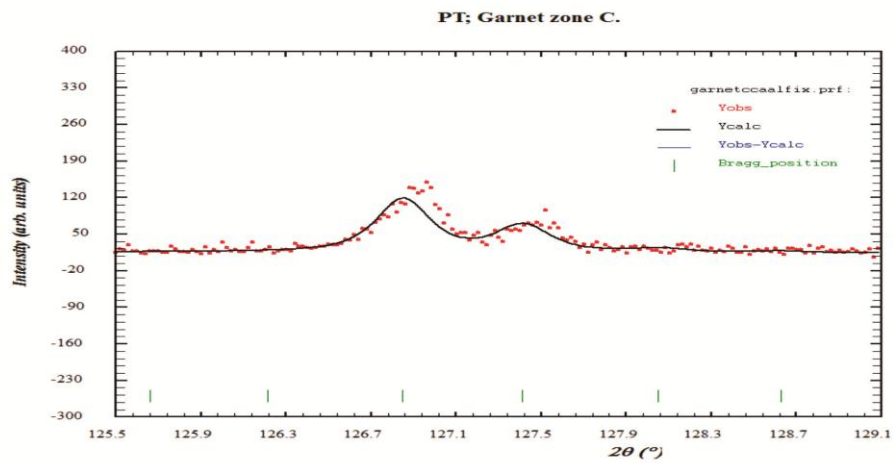


c

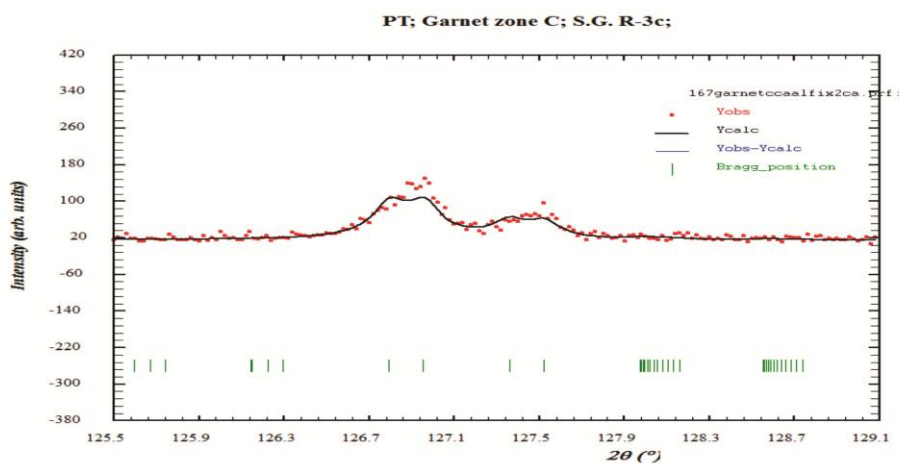


PRILOG 229. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone B od 125,5° do 129°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

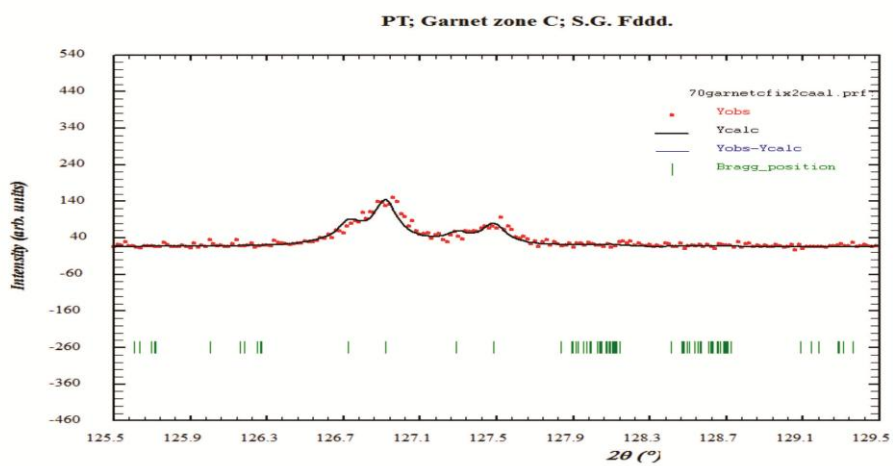
a



b

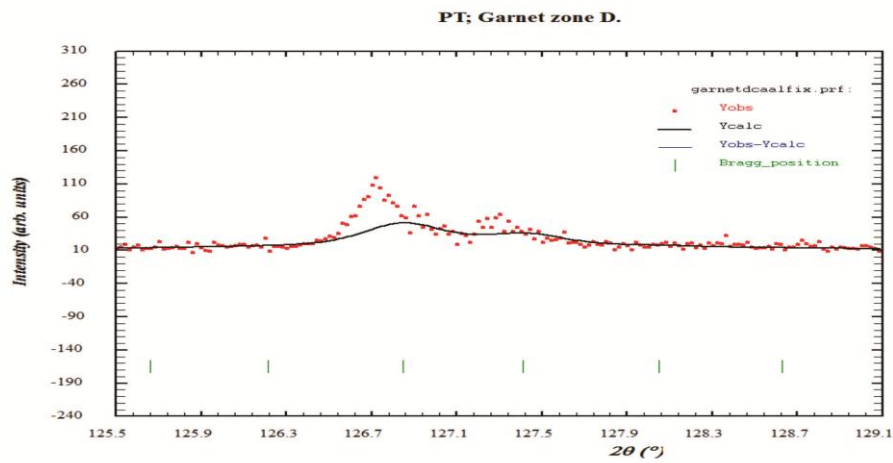


c

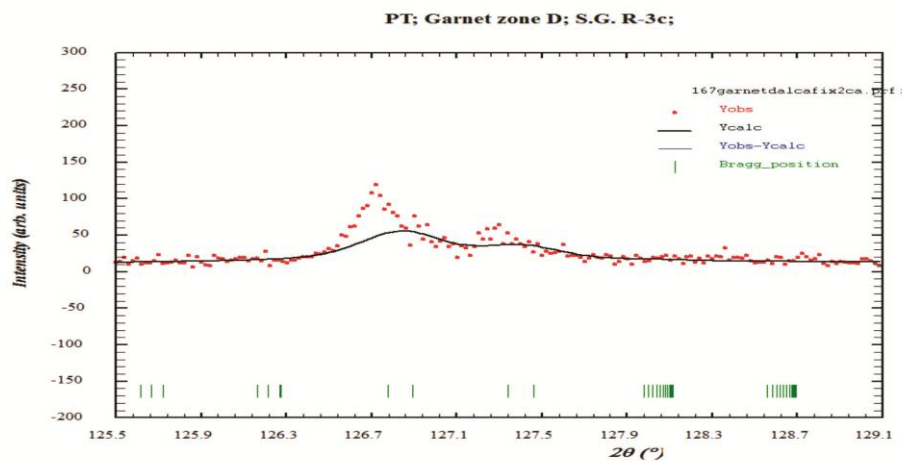


PRILOG 230. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone C od 125,5° do 129°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

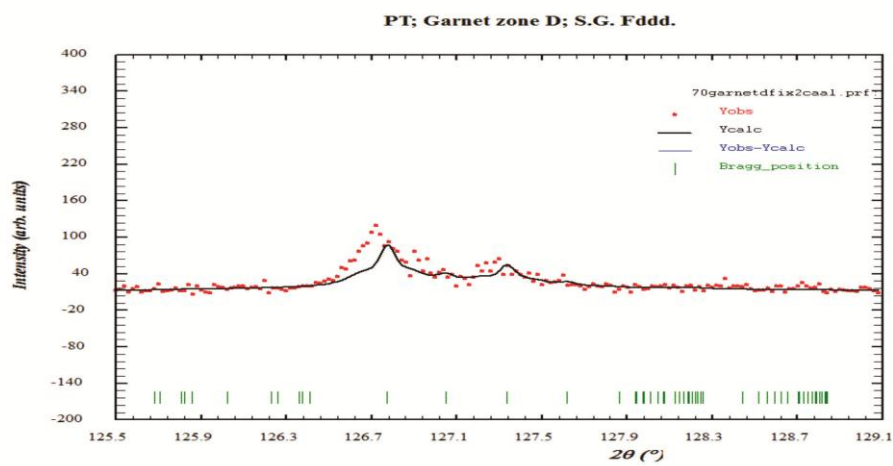
a



b

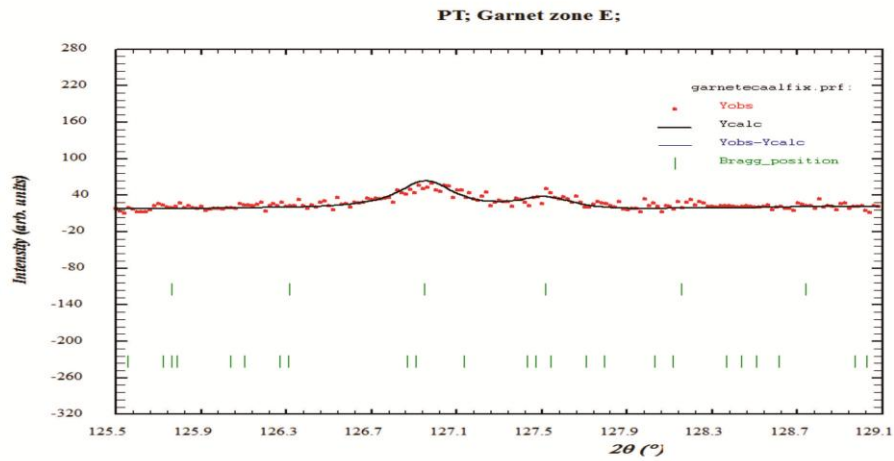


c

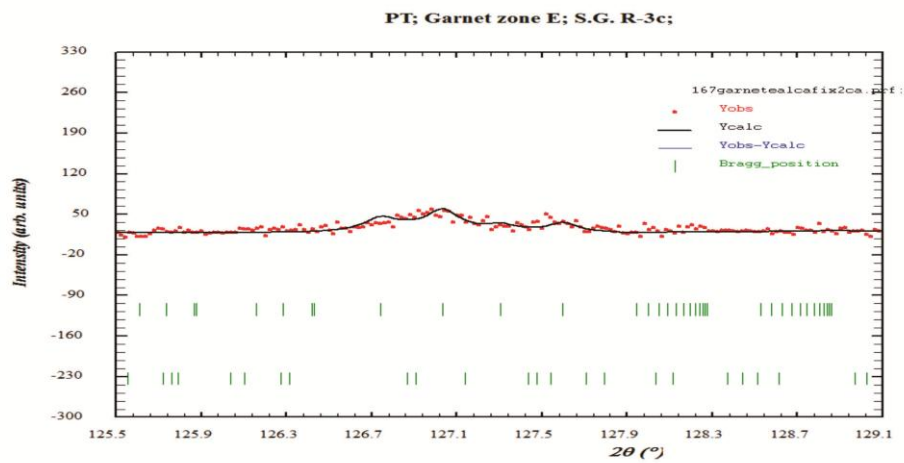


PRILOG 231. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone D od 125,5° do 129°. a).  $Ia\bar{3}d$  p.g.; b).  $R\bar{3}c$  p.g.; i c).  $Fddd$  p.g.

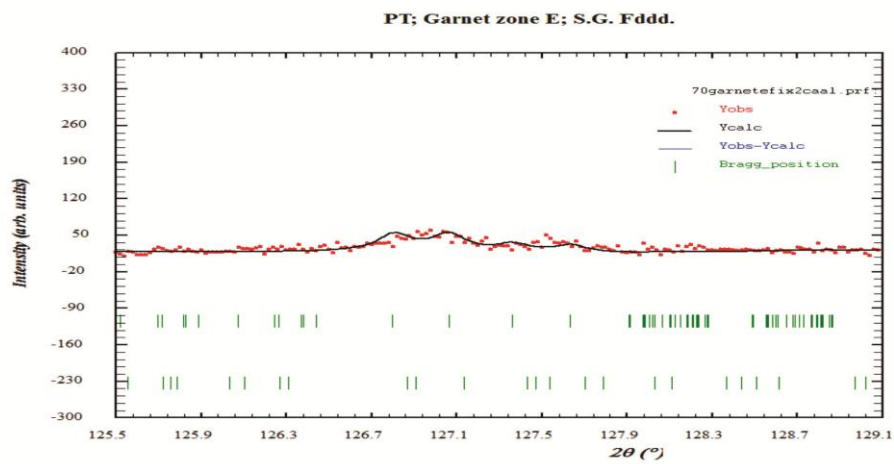
a



b



c



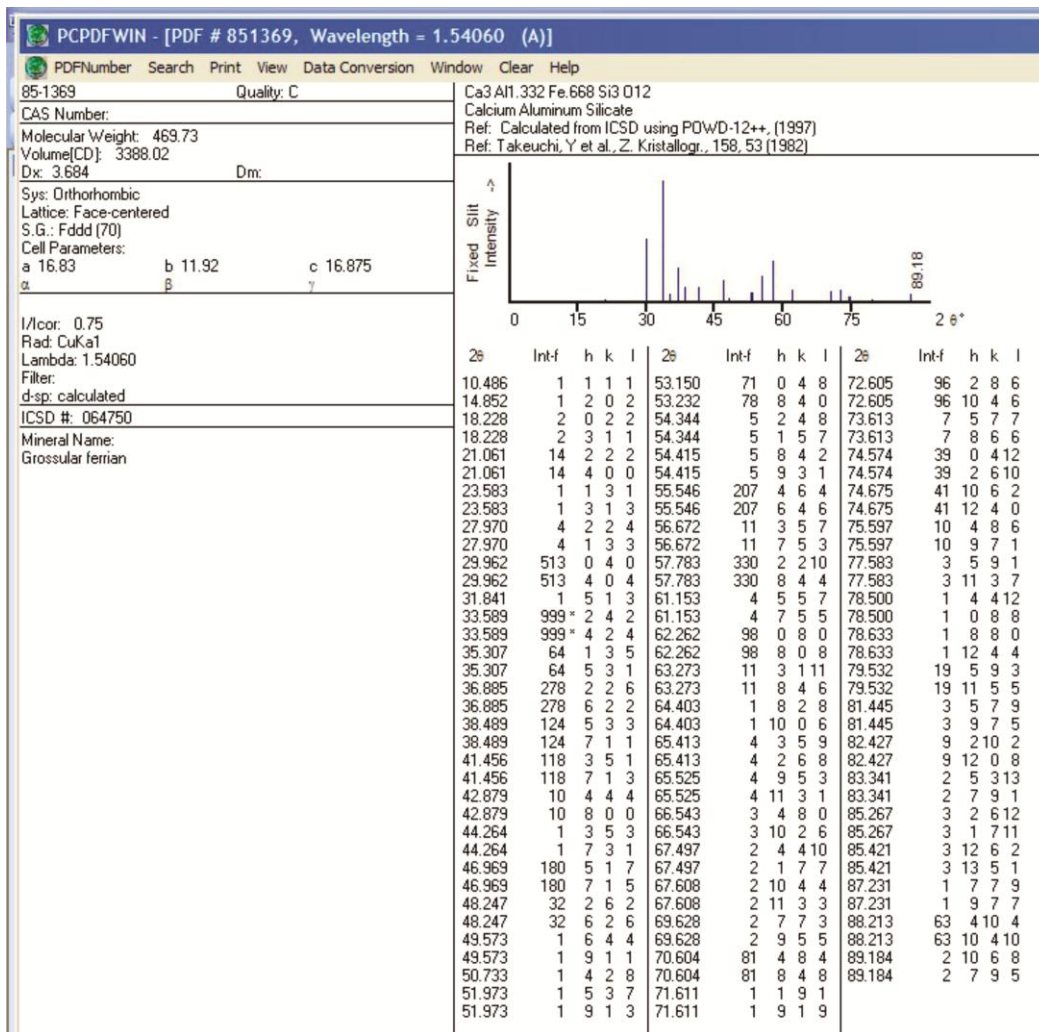
PRILOG 232. Finalni Rietveld-ovi plotovi ispitivane zone E od 125,5° do 129°. a). Ia  $\bar{3}d$  p.g.; b). R  $\bar{3}c$  p.g.; i c). Fddd p.g.

PRILOG 233. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u  $^\circ$ ) za  $R\bar{3}c$  p.g. u svim proučavanim zonama od  $125,5^\circ$  do  $129^\circ$ .

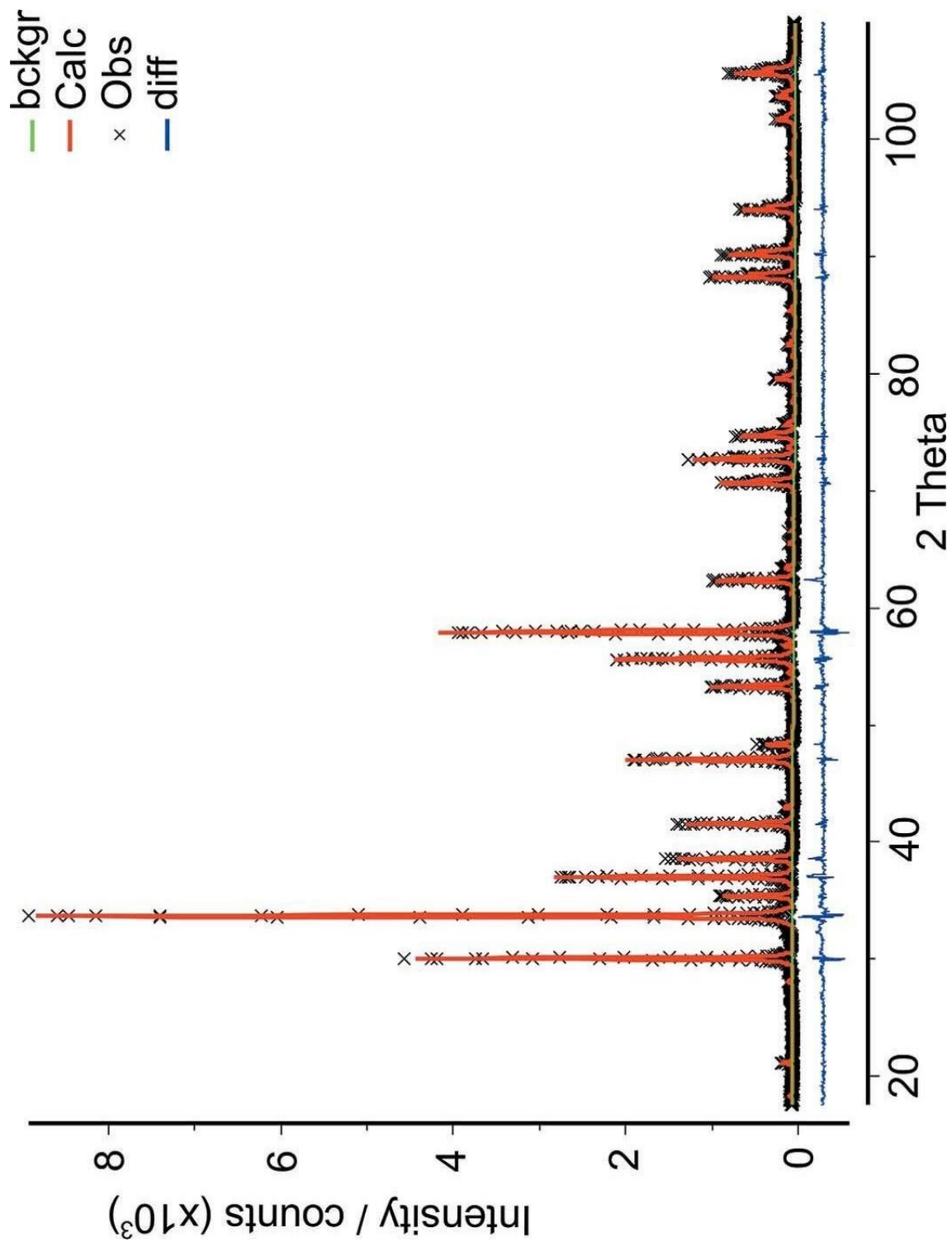
$Ia\bar{3}d$	$R\bar{3}c$	A	B	C	D	E
<b>888</b>	<b>0012</b>	0,151	0,234	0,160	0,116	0,289
(++)	<b>1604</b>					

PRILOG 234. Refleksije hkl odabranih pikova i ugaone razlike između krajnjih izračunatih Bragg-ovih položaja ( $\Delta 2\theta$ , u  $^\circ$ ) za  $Fddd$  p.g. u svim proučavanim zonama od  $125,5^\circ$  do  $129^\circ$ .

$Ia\bar{3}d$	$Fddd$	A	B	C	D	E
<b>888</b>	<b>1608</b>	0,178	0,282	0,193	0,276	0,265
(++)	<b>0168</b>					

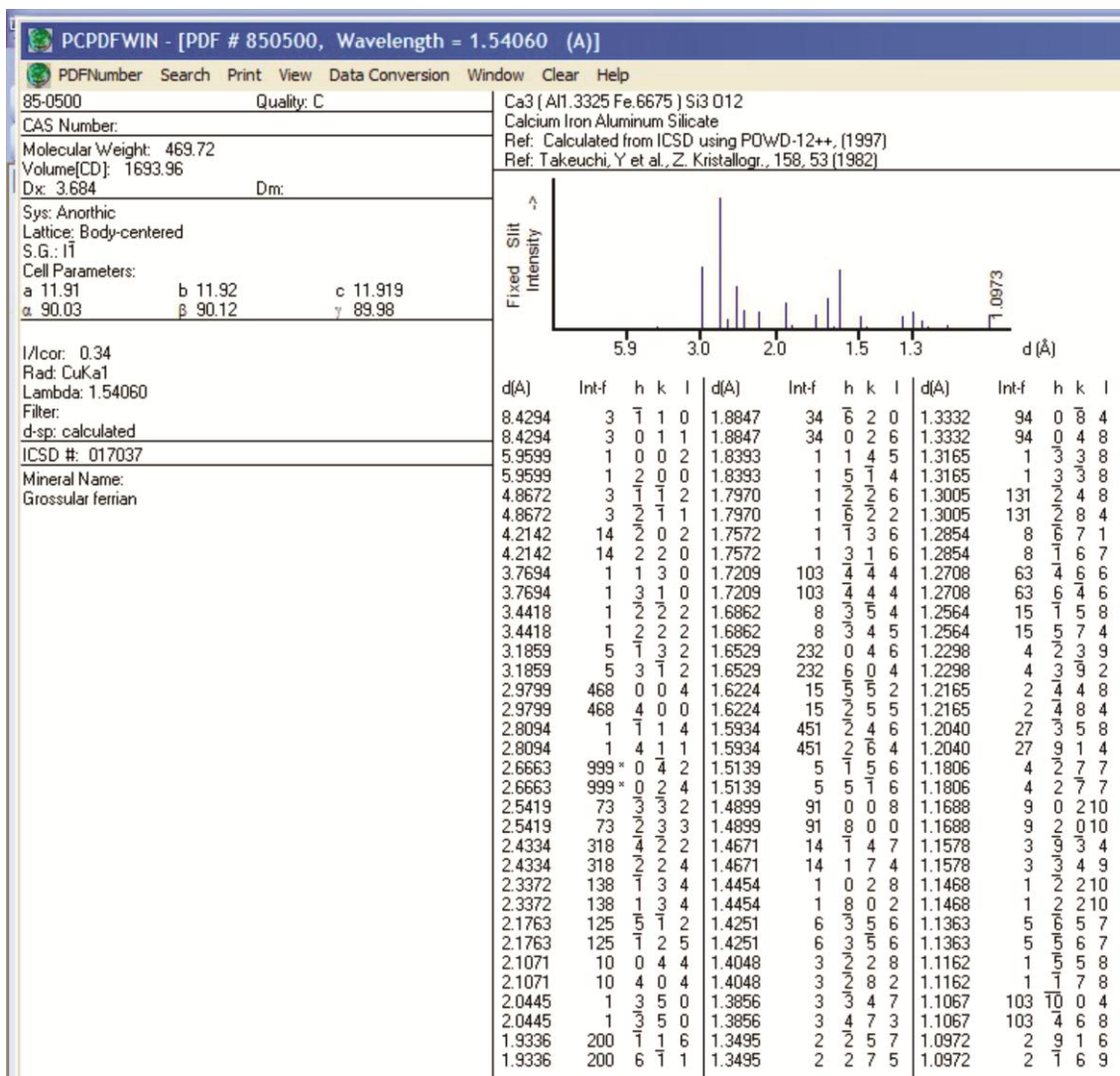


PRILOG 235. ICDD-PDF 85-1369, Grandit, Fddd p.g., Munam, Severna Koreja, Takéuchi i dr. (1982).



PRILOG 236. Finalni Rietveld-ov plot u  $Ia\bar{3}d$  p.g. grandita iz Diamantine, Minas Gerais, Brazil (Resende i Fernandes, 2005).





PRILOG 237. ICDD-PDF 85-0500, Grandit, I $\bar{1}$  p.g., Munam, Severna Koreja (Takeuchi i dr., 1982).

## BIOGRAFIJA AUTORA

Tančić (Ivan) Pavle, Beograd, Admirala Geprata 8a/3.

Rođen je u Beogradu 02. 10. 1965. god., gde je završio osnovnu i srednju (VIII Beogradsku i Matematičku gimnaziju) školu sa odličnim uspehom, a dobitnik je Vukove i Alasove nagrade.

Rudarsko-geološki fakultet upisuje 1984. god. na kome je na smeru mineralogija i kristalografija diplomirao 1990. god. na temu: „Kristalografsko-mineraloške karakteristike kontaktno-metamorfni silikata iz skarnova Meke Presedle na planini Kopaonik“ sa ocenom 10, i sa srednjim prosekom u toku studiranja 8,09.

Upisuje 1991. god. postdiplomske studije, smer kristalografija, na kojima je položio sve ispite sa srednjom ocenom 9,71. Magistarsku tezu pod nazivom: „Kristalografska i mineraloška karakterizacija makroskopski zonarnog granata iz lokalnosti Meka Presedla na Kopaoniku“ odbranio je 2008. god.

Zapošljava se u „Geoinstitutu“ 1991. god. (kasnije „Geološki institut Srbije“, a sadašnji „Geološki zavod Srbije“), gde je kao Analitičar saradnik, Istraživač i Samostalni istraživač na više stotina projekata uradio više hiljada rendgenskih i IR analiza. Trenutni status mu je: „Savetnik“.

Kao istraživač-pripravnik učestvuje na sledećim projektima:

1. „Geo-ekološka istraživanja voda u Republici Srbiji“ (2002-2005).

Stručni ispit je položio 2006. god., a državni ispit 2015. god.

Ima 68 publikovana rada i saopštenja u Srbiji i inostranstvu, kao i još nekoliko u pripremi.

Član je sledećih udruženja:

1. Srpsko kristalografsko društvo (od 1992.god.);
2. International Union of Crystallography (od 1992.god.);
3. Jugoslovensko gemološko društvo (od 2003.god.).

Vlada Engleskim jezikom, kao i brojnim kompjuterskim programima (DOS, Windows, Word, Corel, Explorer, Photoshop, kristalografski programi-Rietveld, Pcpdfwin, Treor, LSUCRIPC, Jana, itd.).

Прилог 1.

## Изјава о ауторству

Потписани-а Павле Тинчић  
број уписа 12/90

### Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Кристалографско проучавање структуре десиметри-  
заумбе гранах просуларско-индрантске хомогрне серије

- резултат сопственог истраживачког рада,
- да предложена дисертација у целини ни у деловима није била предложена за добијање било које дипломе према студијским програмима других високошколских установа,
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио интелектуалну својину других лица.

У Београду, 14.1.2016.

Потпис докторанда

Павле Тинчић

Прилог 2.

## Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Павле Танчић  
Број уписа 12/90  
Студијски програм Кристалологија  
Наслов рада Кристалогрaфско проучавање структурне дискретизације  
граната грoулатице-андрадице изоморфне серије  
Ментор Проф. др Александар Кремићковић

Потписани Павле Танчић

изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла за објављивање на порталу **Дигиталног репозиторијума Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис докторанда

У Београду, 14. 1. 2016.

Павле Танчић

Прилог 3.

## Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Кристалографско проучавање СТРУКТУРНЕ АСИМЕТРИЗАЦИЈЕ  
ГРЊНАХ ГРОУПНИШО-АНДРАДИТСКЕ ИЗОМОРФНЕ СЕРИЈЕ

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство

2. Ауторство - некомерцијално

3. Ауторство – некомерцијално – без прераде

4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима

5. Ауторство – без прераде

6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

У Београду, 14. 1. 2016.

Потпис докторанда

Marko Kubice