

Fig. 2. Perspective drawing of Er<sub>2</sub>Pd<sub>2</sub>Si with the two kinds of mixed sites for Pd and Si indicated by small circles (full and barred). Medium circles: Pd, large circles: Er.

where every other prism centre is occupied by a Pd atom only, is a segment of the MnP type, as shown on the right of Fig. 1. No rare-earth compounds with the MnP type are known.\*

\* DyPd, HoPd and ErPd have high-temperature modifications with the CsCl type (Loebich & Raub, 1973; Palenzona & Cirafici, 1975). The low-temperature modifications give very diffuse diffraction lines. In the case of DyPd the lines have been indexed by assuming an FeB-type structure (Klepp & Parthé, 1982).

*Acta Cryst.* (1983). C39, 664–667

## Structure de l'Orthophosphate Double NaCuPO<sub>4</sub>-α

PAR M. QUARTON

Laboratoire de Chimie Minérale, ER n°9 du CNRS, Tour 54, 2<sup>e</sup> étage, Université Pierre et Marie Curie, 4 place Jussieu, 75230 Paris CEDEX 05, France

ET A. W. KOLSI

Département de Chimie, Faculté des Sciences et Techniques, Sfax, Tunisie

(Reçu le 4 juin 1982, accepté le 3 février 1983)

**Abstract.** α-NaCuPO<sub>4</sub> (low-temperature form),  $M_r = 181.5$ , orthorhombic,  $P2_12_12_1$ ,  $a = 9.708$  (5),  $b = 4.805$  (2),  $c = 7.166$  (4) Å,  $Z = 4$ ,  $D_m = 3.55$ ,  $D_x = 3.606$  Mgm<sup>-3</sup>,  $V = 334.3$  Å<sup>3</sup>,  $T = 293$  K,  $F(000) =$

The two mixed sites in the corrugated layer in the CeCu<sub>2</sub>-type slab have different coordinations. If one considers only the close (Pd/Si)–Pd and (Pd/Si)–(Pd/Si) distances, (Pd/Si)(1) (open small circles in Fig. 2) has three neighbours and (Pd/Si)(2) (filled small circles in Fig. 2) has four neighbours, one being a Pd atom from a neighbouring MnP-type slab. The weak preferential site occupation noted during the study of powder photographs of stoichiometric Er<sub>2</sub>Pd<sub>2</sub>Si corresponds to the filled circles being occupied by Si atoms and the open circles by Pd atoms.

This study has been supported by the Swiss National Science Foundation under contract No. 2.416-0.82.

### References

- CROMER, D. T. & MANN, J. B. (1968). *Acta Cryst.* A24, 321–324.  
 HOVESTREYDT, E., ENGEL, N., KLEPP, K., CHABOT, B. & PARTHÉ, E. (1982). *J. Less-Common Met.* 86, 247–274.  
*International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.  
 KLEPP, K. & PARTHÉ, E. (1982). *J. Less-Common Met.* 85, 181–184.  
 LOEBICH, O. & RAUB, E. (1973). *J. Less-Common Met.* 30, 47–62.  
 MOREAU, J.-M., LE ROY, J. & PACCARD, D. (1982). *Acta Cryst.* B38, 2446–2448.  
 PACCARD, D., LE ROY, J. & MOREAU, J.-M. (1982). *Acta Cryst.* B38, 2448–2449.  
 PALENZONA, A. & CIRAFICI, S. (1975). *Thermochim. Acta*, 12, 267–275.  
 STEWART, J. M., MACHIN, P. A., DICKINSON, C. W., AMMON, H. L., HECK, H. & FLACK, H. (1976). The XRAY76 system. Tech. Rep. TR-446. Computer Science Center, Univ. of Maryland, College Park, Maryland.  
 YVON, K., JEITSCHKO, W. & PARTHÉ, E. (1977). *J. Appl. Cryst.* 10, 73–74.

( $R_w = 0.039$ ) for 890 independent reflexions. The framework is built with isolated  $\text{PO}_4$  tetrahedra,  $\text{NaO}_7$  polyhedra and  $\text{CuO}_5$  pyramids. The comparison with  $\beta\text{-K}_2\text{SO}_4$  type orthophosphates and the distorting role of  $\text{Cu}^{2+}$  are discussed.

**Introduction.** Cette étude s'inscrit dans le cadre de la recherche d'une filiation structurale des orthophosphates doubles  $\text{NaM}^{\text{II}}\text{PO}_4$  dont les structures s'apparentent pour la plupart à celles de  $\text{Na}_2\text{SO}_4\text{-III}$  ou de  $\text{K}_2\text{SO}_4\text{-}\beta$ . Nous avons déjà démontré l'influence de la taille de l'ion  $M^{2+}$  dans  $\text{NaBaPO}_4$  (Kolsi, Quarton & Freundlich, 1981a) et dans  $\text{NaPbPO}_4$  (Kolsi, Quarton & Freundlich, 1981b). Il était intéressant d'analyser dans  $\text{NaCuPO}_4$  l'influence de la structure électronique  $d^9$  de l'ion  $\text{Cu}^{2+}$ .

**Partie expérimentale.** Le composé  $\text{NaCuPO}_4$  est obtenu pur après chauffage à 1023 K pendant 48 h du mélange stoechiométrique  $\text{Na}_3\text{PO}_4\text{-Cu}_3(\text{PO}_4)_2$ . L'orthophosphate de cuivre a été préparé au laboratoire par réaction entre  $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$  et  $\text{CuO}$  en opérant par des broyages et des recuits alternés de 773 à 1173 K.

$\text{NaCuPO}_4$  présente une transformation allotropique réversible à 957 K et une fusion congruente à 1097 K. Après fusion suivie d'un refroidissement lent ( $3\text{K h}^{-1}$ ) nous isolons des monocristaux parallélépipédiques de couleur bleue de la forme basse température  $\text{NaCuPO}_4\text{-}\alpha$ .

L'étude préliminaire par diffraction X sur monocristal selon les méthodes photographiques classiques; les paramètres de la maille cristalline affinés selon la méthode des moindres carrés (Williams, 1964) à partir des données angulaires du spectre de poudre; la densité picométrique mesurée par immersion dans le xylène à 298 K; le cristal choisi, allongé selon l'axe  $a$ ,  $\sim 100 \times 60 \times 50 \mu\text{m}$ ; diffractomètre automatique quatre cercles Philips PW1100 à monochromateur de graphite: rayonnement  $\text{Mo K}\alpha$  ( $\lambda = 0,71069 \text{ \AA}$ ), domaine de mesure  $2^\circ \leq \theta \leq 35^\circ$  correspondant à  $0 \leq h \leq 15$ ,  $0 \leq k \leq 7$ ,  $0 \leq l \leq 11$ , balayage en  $\omega$ , exploration de chaque réflexion à la vitesse de  $0,01^\circ\text{s}^{-1}$  avec une amplitude de  $0,9^\circ + 2,0^\circ\text{tg}\theta$ . L'enregistrement toutes les deux heures de trois taches de référence (510, 433 et 204) n'a révélé aucune altération du cristal. La participation du fond continu a été déterminée de part et d'autre de chaque tache de diffraction. Les intensités des 890 réflexions indépendantes mesurées [ $I > 3\sigma(I)$ ] ont été corrigées des effets de Lorentz et de polarisation mais pas de l'absorption ( $\mu_{\text{MoK}\alpha} = 68,9 \text{ cm}^{-1}$ ;  $\mu\bar{R} = 0,48$ ).

Les facteurs de diffusion utilisés sont ceux des ions  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{P}^{5+}$  et  $\text{O}^{2-}$  (*International Tables for X-ray Crystallography*, 1974) corrigés des effets de la dispersion anormale (Cromer & Liberman, 1970). La fonction de Patterson permet de localiser les sites atomiques du cuivre et du phosphore; à ce stade un

premier affinement (Busing, Martin & Levy, 1971) conduit à un indice résiduel  $R = 0,26$ . La méthode de l'atome lourd révèle la position des autres sites. Tous les atomes étant agités de façon isotrope, la valeur de  $R$  s'abaisse à 0,045 après trois cycles d'affinement. L'introduction de coefficients d'agitation thermique anisotrope sous la forme  $\exp[-(\beta_{11}h^2 + \beta_{22}k^2 + \beta_{33}l^2 + \beta_{12}hk + \beta_{13}hl + \beta_{23}kl)]$  permet de minimiser les indices résiduels  $R$  et  $R_w$  à 0,034 et 0,039 respectivement pour 890 réflexions. La fonction  $\sum w(\Delta F)^2$  était minimisée. La pondération utilisée est  $w = 1/\sigma^2(F) = 4I/\sigma^2(I)$  où  $\sigma(I)$  défini par Wilson (1952) est calculé selon l'expression établie par Corfield, Doedens & Ibers (1967) et Stout & Jensen (1968):  $\sigma(I) = [I_m + (t_m/2t_f)^2(Fg + Fd) + (S/I)^2]^{1/2}$  où  $I_m$  est la mesure de l'intensité du pic de diffraction effectuée pendant le temps  $t_m$ ;  $Fg$  et  $Fd$  les mesures des fonds continus effectuées pendant le temps  $t_f$  de part et d'autre du pic de diffraction;  $S$  la constante de stabilité des mesures déterminées à l'aide des taches de référence:  $S = 0,02$ ;  $I$  est l'intensité nette:  $I = I_m - (t_m/2t_f)(Fg + Fd)$  avec  $t_m/2t_f = 1$  dans le présent travail.

**Discussion.** Les valeurs finales des coordonnées atomiques avec leurs écarts types sont données dans le Tableau 1.\* La projection de l'édifice atomique parallèlement à  $c$  (Fig. 1) met en évidence des tétraèdres  $\text{PO}_4$  indépendants entre lesquels s'insèrent les cations  $\text{Na}^+$  et  $\text{Cu}^{2+}$  qui assurent la cohésion structurale. Le Tableau 2 rassemble les principales distances interatomiques et les angles de liaison pour chaque polyèdre d'oxygènes.

Les tétraèdres  $\text{PO}_4$  sont presque réguliers et la moyenne des distances  $\text{P-O} = 1,535 \text{ \AA}$  est en excellent accord avec la valeur de  $1,536 \text{ \AA}$  obtenue par Corbridge (1971) après analyse de 30 structures d'orthophosphates établies avec une précision suffisante.

Le sodium est au centre d'un polyèdre à dix faces

\* Les listes des facteurs de structure et des paramètres thermiques anisotropes ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 38384: 10 pp.). On peut en obtenir des copies en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, Angleterre.

Tableau 1. *Coordonnées atomiques réduites*

Les écarts types sont donnés entre parenthèses.  $B_{\text{eq}}$  est le facteur de température isotrope équivalent.

$$B_{\text{eq}} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_j \beta_{ij} a_i a_j$$

	x	y	z	$B_{\text{eq}}$ ( $\text{\AA}^2$ )
Na	0,6876 (2)	0,0185 (5)	0,2317 (3)	1,29 (4)
Cu	0,54163 (5)	0,4975 (1)	0,94537 (7)	0,70 (1)
P	0,6349 (1)	0,5625 (2)	0,5272 (2)	0,33 (2)
O(1)	0,7794 (4)	0,6577 (8)	0,4764 (6)	1,09 (6)
O(2)	0,5335 (4)	0,7060 (7)	0,3935 (5)	0,85 (5)
O(3)	0,6021 (4)	0,6918 (7)	0,7202 (5)	0,94 (6)
O(4)	0,6228 (4)	0,2444 (8)	0,5245 (5)	0,93 (6)

Tableau 2. Distances interatomiques (Å) et angles de liaison (°)

La notation des atomes d'oxygène générés à partir d'une position initiale répond au code suivant:

O(n):  $x\ y\ z$ ; O''(n):  $\bar{x}\ \frac{1}{2} + y\ \frac{1}{2} - z$   
 O'(n):  $\frac{1}{2} - x\ y\ \frac{1}{2} + z$ ; O(n'):  $x\ 1 + y\ z$ .

Les écarts types sont donnés entre parenthèses.

(a) Tétraèdre PO<sub>4</sub>

P—O(1)	1,520 (3)	P—O(3)	1,549 (3)
P—O(2)	1,537 (3)	P—O(4)	1,533 (3)
O(1)—O(2)	2,471 (6)	O(2)—O(3)	2,435 (6)
O(1)—O(3)	2,458 (6)	O(2)—O(4)	2,560 (6)
O(1)—O(4)	2,525 (6)	O(3)—O(4)	2,575 (6)
O(1)—P—O(2)	107,87 (1)	O(2)—P—O(3)	104,18 (2)
O(1)—P—O(3)	106,43 (1)	O(2)—P—O(4)	112,97 (2)
O(1)—P—O(4)	111,58 (2)	O(3)—P—O(4)	113,29 (1)

(b) Polyèdre NaO<sub>7</sub>

Na—O(1)	2,622 (6)	Na—O'(3')	2,472 (5)
Na—O'(1')	2,423 (5)	Na—O(4')	2,445 (5)
Na—O(2)	2,416 (5)	Na—O'(4')	2,681 (6)
Na—O''(2')	2,495 (5)		
O(1)—O(2)	2,471 (6)	O'(1')—O'(4)	3,221 (8)
O(1)—O'(3')	3,803 (9)	O(2)—O''(2')	3,229 (8)
O(1)—O(4')	3,221 (8)	O(2)—O(4')	2,885 (7)
O(1)—O'(4)	3,407 (9)	O(2)—O'(4)	4,264 (11)
O'(1')—O(2)	4,645 (12)	O''(2')—O(4')	3,363 (8)
O'(1')—O''(2')	2,717 (7)	O'(3')—O(4')	3,461 (9)
O'(1')—O'(3')	2,458 (6)	O'(3')—O'(4)	3,010 (7)
O'(1')—O(4')	4,068 (11)		

(c) Pyramide CuO<sub>5</sub>

Cu—O'(1)	1,913 (3)	Cu—O''(3)	2,312 (4)
Cu—O''(2)	1,999 (3)	Cu—O''(4)	2,009 (4)
Cu—O(3)	1,896 (3)		
O'(1)—O''(2)	2,717 (7)	O''(3)—O'(1)	3,510 (9)
O'(1)—O(3)	2,741 (7)	O''(3)—O''(2)	2,435 (6)
O''(2)—O''(4)	2,885 (7)	O''(3)—O(3)	3,144 (7)
O(3)—O''(4)	2,860 (7)	O''(3)—O''(4)	3,010 (7)
O'(1)—Cu—O''(2)	87,94 (1)	O''(3)—Cu—O'(1)	111,99 (2)
O'(1)—Cu—O(3)	92,05 (1)	O''(3)—Cu—O''(2)	68,32 (2)
O''(2)—Cu—O''(4)	92,06 (2)	O''(3)—Cu—O(3)	96,17 (1)
O(3)—Cu—O''(4)	94,11 (2)	O''(3)—Cu—O''(4)	87,98 (1)

triangulaires formé par sept atomes d'oxygène à la distance moyenne  $\overline{\text{Na—O}} = 2,508$  Å. Parmi ceux-ci cinq sont à plus courte distance du cation central (2,42 à 2,50 Å) et deux à plus longue distance (2,62 et 2,68 Å). Ceci entraîne des disparités notables entre les dimensions des faces triangulaires comme le démontre l'examen des distances O—O.

L'environnement anionique du cuivre est pratiquement carré si l'on s'en tient aux plus proches voisins (1,896 à 2,009 Å). Cependant le cuivre est situé hors du plan moyen de ce carré gauche; il est donc plus correct d'idéaliser son polyèdre de coordination sous forme d'une pyramide à base carrée dont le sommet est l'oxygène O''(3) tel que  $\text{Cu—O''(3)} = 2,312$  Å.

Tous les atomes d'oxygène sont engagés dans les tétraèdres PO<sub>4</sub> qui mettent en commun leurs arêtes O(1)O(2) et O(1)O(3) avec les polyèdres NaO<sub>7</sub> et leur arête O(2)O(3) avec une pyramide CuO<sub>5</sub>. L'entité NaO<sub>7</sub> est entourée de cinq tétraèdres PO<sub>4</sub>; deux sont bidentés, trois sont monodentés. Ces polyèdres NaO<sub>7</sub> forment des chaînes parallèles à [001] par mise en commun de l'arête O(1)O(4'); ces chaînes sont reliées entre elles par le sommet O(2). Une pyramide CuO<sub>5</sub> s'entoure de quatre tétraèdres PO<sub>4</sub> dont un seul est bidenté. Ces pyramides s'enchaînent selon [010] en partageant l'oxygène O''(3). Il en résulte que chaque atome d'oxygène est lié à quatre cations: 2Na<sup>+</sup>, Cu<sup>2+</sup> et P<sup>5+</sup> pour les oxygènes O(1), O(2) et O(4); Na<sup>+</sup>, 2Cu<sup>2+</sup>, et P<sup>5+</sup> pour l'oxygène O(3).

Comme nous l'avons indiqué plus haut, la plupart des orthophosphates doubles NaM<sup>11</sup>PO<sub>4</sub> sont isotypes soit de Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-III:  $M = \text{Co, Fe, Mn}$  (Paques-Ledent, 1973) soit de K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-β:  $M = \text{Ca, Sr}$  (Klement & Kresse, 1961) et  $M = \text{Cd}$  (Averbuch-Pouchot & Durif, 1973). La simple comparaison des paramètres de la maille de NaCuPO<sub>4</sub>-α avec ceux des orthophosphates de type K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-β permet d'envisager une isotypie. Cependant tous ces composés isostructuraux de K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-β sont caractérisés par une maille orthorhombique dont le paramètre  $b$ , toujours supérieur à 5 Å, représente sensiblement le double de l'arête d'un tétraèdre PO<sub>4</sub>. Dans le cas présent la valeur de  $b = 4,805$  Å ne permet pas cette orientation et les tétraèdres ont leurs arêtes inclinées par rapport aux trois axes du réseau.

Les atomes de sodium et de cuivre ont des coordinences beaucoup plus faibles que leurs homologues dans les composés NaMPO<sub>4</sub> cités plus haut, ce qui individualise encore plus fortement la structure de NaCuPO<sub>4</sub>-α.

Ces particularités ne peuvent être dues qu'à la présence de l'ion Cu<sup>2+</sup> et plus précisément à sa structure électronique 3d<sup>9</sup> qui stabilise sa coordinence 4 par effet Jahn-Teller. Les oxygènes plus proches voisins du cuivre mettent en évidence cette stabilisation. On peut donc en conclure que la déformation structurale de NaCuPO<sub>4</sub>-α par rapport à K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-β est provoquée par l'occupation dissymétrique des orbitales e<sub>g</sub> de l'ion Cu<sup>2+</sup>.

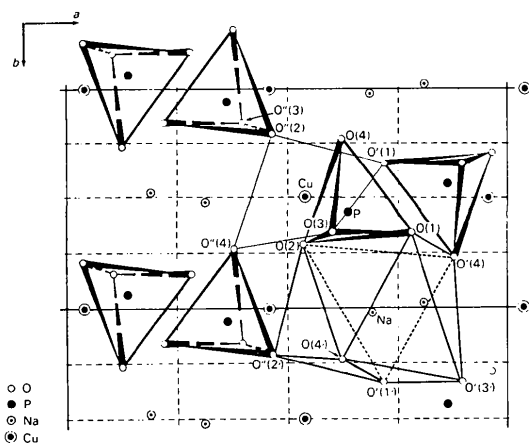


Fig. 1. Projection de la structure sur le plan (001). Pour plus de clarté, seul le plan de base de la pyramide CuO<sub>5</sub> est tracé; elle admet l'oxygène O''(3) pour sommet.

## Références

- AVERBUCH-POUCHOT, T. & DURIF, A. (1973). *Mater. Res. Bull.* **8**, 1–8.
- BUSING, W. R., MARTIN, K. O. & LEVY, H. A. (1971). *ORXFLS*. Report ORNL **59**, 4–37. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee.
- CORBRIDGE, D. E. C. (1971). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **94**, 271–299.
- CORFIELD, P. W. R., DOEDENS, R. J. & IBERS, J. A. (1967). *Inorg. Chem.* **6**, 197–204.
- CROMER, D. T. & LIBERMAN, D. (1970). *J. Chem. Phys.* **53**, 1891–1898.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Tome IV, pp. 71–98. Birmingham: Kynoch Press.
- KLEMENT, R. & KRESSE, P. (1961). *Z. Anorg. Allg. Chem.* **310**, 53–68.
- KOLSI, A. W., QUARTON, M. & FREUNDLICH, W. (1981a). *J. Solid State Chem.* **36**, 107–111.
- KOLSI, A. W., QUARTON, M. & FREUNDLICH, W. (1981b). *Ann. Chim. (Paris)*, **6**, 411–418.
- PAQUES-LEDENT, M. T. (1973). *Rev. Chim. Minér.* **10**, 785–794.
- STOUT, G. H. & JENSEN, L. H. (1968). *X-ray Structure Determination*, pp. 454–458. New York: Macmillan.
- WILLIAMS, D. E. (1964). *LCR-2. A Fortran Lattice-Constant Refinement Program*. USAEC Report IS-1052.
- WILSON, E. B. (1952). *An Introduction to Scientific Research*, pp. 191–195. New York: McGraw-Hill.

*Acta Cryst.* (1983). **C39**, 667–668

## Re-examination of the $\text{UZr}_6\text{FO}_{14}$ Crystal Structure

BY R. PAPIERNIK, D. MERCURIO AND B. FRIT\*

Laboratoire de Chimie Minérale Structurale (LA CNRS n° 320), UER des Sciences, 123 rue A. Thomas, 87060 Limoges CEDEX, France

AND H. BÄRNIGHAUSEN

Institut für Anorganische Chemie, Universität Karlsruhe (TH), Engesserstrasse, D 7500-Karlsruhe, Federal Republic of Germany

(Received 6 May 1982; accepted 3 February 1983)

**Abstract.** Orthorhombic  $\text{UZr}_6\text{FO}_{14}$ , isostructural with  $\text{Tm}_7\text{Cl}_{15}$  and previously described with the  $Pn2_1a$  space group, has been re-examined. A new description is proposed based on the same crystallographic constants [ $a = 5.328$  (1),  $b = 36.64$  (1),  $c = 5.065$  (1) Å ( $Z = 4$ ) and  $V = 988.8$  Å<sup>3</sup>,  $D_m = 6.8$  ( $\pm 0.1$ ),  $D_x = 6.91$  Mg m<sup>-3</sup>,  $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 26.43$  mm<sup>-1</sup>] but on the centrosymmetric space group  $Pnma$ .  $R = 0.061$  for 707 independent reflexions.

**Introduction.** Comparison of the results dealing with the  $\text{UZr}_6\text{FO}_{14}$  structure (Papiernik, Mercurio & Frit, 1980) with those of the isostructural  $\text{Tm}_7\text{Cl}_{15}$  compound (Bärnighausen, Beyer & Rinck, 1981) convinced us that the Vernier structure of  $\text{UZr}_6\text{FO}_{14}$ , previously described in the  $Pn2_1a$  space group, could surely be better described in the centrosymmetric  $Pnma$  group.

**Experimental.** The previously published data, i.e. 707 independent reflexions (Papiernik *et al.*, 1980), were used to refine the structure with the *SHELX* 76 program system (Sheldrick, 1976). After five cycles of calculation, for a disordered distribution of U and Zr cations over their crystallographic positions and with isotropic temperature factors for all the atoms, the residual was  $R = 0.061$ , the ratio of maximum least-squares shift to error being 0.009 for a mean value

0.001. As with the earlier refinement ( $Pn2_1a$  group) the introduction of different degrees of cation ordering did not lead to significant improvement in the  $R$  value.

**Discussion.** The atomic coordinates and isotropic temperature factors are given in Table 1.† The cation–anion distances are given in Table 2. They are actually not very different from the previously published values.

† A list of structure factors has been deposited with the British Library Lending Division as Supplementary Publication No. SUP 38381 (4 pp.). Copies may be obtained through The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 5 Abbey Square, Chester CH1 2HU, England.

Table 1. Atom positions and isotropic temperature factors in  $\text{UZr}_6\text{FO}_{14}$  (e.s.d.'s in parentheses)

Atoms							
Group	Group	x	y	z	$U_{\text{iso}}$ (Å <sup>2</sup> )		
$Pnma$	$Pn2_1a$						
$M(1)^*$	$M(4), M(5)$	0.3018 (3)	0.4625 (1)	0.0117 (5)	0.0041 (3)		
$M(2)$	$M(3), M(6)$	0.7307 (3)	0.3898 (1)	0.0149 (4)	0.0070 (4)		
$M(3)$	$M(2), M(7)$	0.2998 (3)	0.3191 (1)	0.0164 (5)	0.0100 (4)		
$M(4)$	$M(1)$	0.7289 (5)	$\frac{1}{2}$	0.0166 (7)	0.0101 (6)		
$X(1)$	$X(5), X(11)$	0.5779 (39)	0.4943 (5)	0.2339 (41)	0.0112 (36)		
$X(2)$	$X(6), X(12)$	0.6158 (33)	0.4378 (5)	0.8054 (33)	0.0072 (34)		
$X(3)$	$X(4), X(10)$	0.4885 (30)	0.4252 (5)	0.2818 (35)	0.0045 (32)		
$X(4)$	$X(7), X(13)$	0.3903 (32)	0.3711 (5)	0.8272 (33)	0.0061 (32)		
$X(5)$	$X(3), X(9)$	0.5294 (32)	0.3543 (5)	0.2989 (39)	0.0054 (34)		
$X(6)$	$X(8), X(14)$	0.6505 (32)	0.3085 (5)	0.8443 (33)	0.0060 (31)		
$X(7)$	$X(2), X(1)$	0.5092 (31)	0.2846 (6)	0.3028 (29)	0.0012 (28)		
$X(8)$	$X(15)$	0.3672 (53)	$\frac{1}{2}$	0.8569 (56)	0.0142 (54)		

\* Author to whom correspondence and reprint requests are to be addressed.

\*  $M(1)$  to  $M(4) = 0.857 \text{ Zr} + 0.143 \text{ U}$ .