

<https://doi.org/10.46861/bmp.28.276>

PŮVODNÍ PRÁCE/ORIGINAL PAPER

# Krystalová struktura phurcalitu, $\text{Ca}_2[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2]\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , z Jáchymova

Crystal structure of phurcalite,  $\text{Ca}_2[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2]\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , from Jáchymov

JAKUB PLÁŠIL

Fyzikální ústav AV ČR v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8; e-mail: [plasil@fzu.cz](mailto:plasil@fzu.cz)

PLÁŠIL J (2020) Krystalová struktura phurcalitu,  $\text{Ca}_2[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2]\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , z Jáchymova. Bull Mineral Petrolog 28(2): 276-280 ISSN: 2570-7337

## Abstract

A rare supergene uranyl phosphate mineral, phurcalite, was found on a few specimens originating from the dump material of the Eduard shaft, the Jáchymov ore district, Czech Republic. Phurcalite forms yellow to yellowish-orange perfect prismatic crystals, reaching up to 3 - 4 mm in cavities of vuggy quartz-dominated gangue. Phurcalite was found in the association with walpurgite, uranophane- $\alpha$ , and members of the metatorbernite-metazeunerite series. According to single-crystal X-ray data phurcalite is orthorhombic, space group  $Pbca$ , with  $a$  17.3785(8),  $b$  15.9864(6),  $c$  13.5477(6) Å, and  $V$  3763.8(3) Å<sup>3</sup>. Its crystal structure has been refined to  $R = 3.56$  % for 3488 unique observed reflections [ $I_{\text{obs}} > 3\sigma(I)$ ] collected on a Rigaku SuperNova X-ray diffractometer with an Atlas S2 CCD detector and focused MoK $\alpha$  radiation. The results of the structure refinement are in line with the recently published structure refinement of phurcalite from Shinkolobwe (Africa). Nevertheless, in phurcalite from Jáchymov, the substitution of As for P takes place at greater extent. The structural formula obtained for the crystal from Jáchymov is  $\text{Ca}_2[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_{1.753}(\text{AsO}_4)_{0.247}]\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ,  $Z = 8$ ,  $D_{\text{calc.}} = 4.409$  g/cm<sup>3</sup>.

**Key words:** phurcalite, uranyl phosphate, crystal structure, Jáchymov

Obdrženo 30. 9. 2020; přijato 7. 11. 2020

## Úvod

Fosfáty a arsenáty šestimocného uranu, ve formě uranylu  $(\text{UO}_2)^{2+}$ , představují velmi rozšířenou skupinu minerálů, které vznikají v průběhu oxidačně-hydratačního zvětrávání uraninitu (Finch, Murakami 1999; Krivovichev, Plášil 2013; Plášil 2014). Tyto minerály, díky nízkým produktům rozpustnosti (např. Ilton et al. 2010; Astilleros et al. 2013; Göb et al. 2013), ovlivňují migraci uranu jak v oxidačních zónách ložisek U (Murakami et al. 1997; Finch, Murakami 1999; Plášil et al. 2006, 2009; Göb et al. 2013), tak i v prostředí důlních hald a úpravárenských deponií a odkališť (Fuller et al. 2002; Catalano et al. 2006; Cantrell et al. 2011; Maher et al. 2013). Tato skupina minerálů je tak velmi důležitou pro kontrolu migrace U v životním prostředí. Do dnešních dnů čítají fosfáty a arsenáty uranylu, zahrnující několik oficiálně Mezinárodní mineralogickou asociací (IMA) uznaných skupin minerálů, s více než 50 druhy, z nichž některé byly objeveny relativně nedávno (Mills et al. 2008; Plášil et al. 2010, 2018; Pekov et al. 2012).

Většina fosfátů a arsenátů uranylu tvoří vrstevnaté struktury, založené na sdílení hran uranylových koordinačních polyedrů  $\text{U}^{6+}\text{O}_7$  a  $\text{U}^{6+}\text{O}_8$  a tetraedrů okupovaných  $\text{P}^{5+}$  či  $\text{As}^{5+}$ . Mezi dvě nejvýznamnější a nejpočetnější skupiny fosfátů a arsenátů  $\text{U}^{6+}$  patří autunitová a fosfuranylitová skupina (Krivovichev, Plášil 2013). Tyto dvě skupiny se velmi podstatně liší v uspořádání (topologii) strukturálních vrstev a tvoří tzv. *autunitovou* a *fosfuranylitovou* topologii. Zatímco poměr U:T (kde  $T$  je P/As) je v případě autunitové topologie 1:1, tak v případě topologie fosfura-

nylitové jde o poměr 3:2. Autunitová topologie zahrnuje sdílení horizontálních vrcholů dipyramid  $\text{UO}_7$  s vrcholy tetraedrů, zatímco fosfuranylitová topologie obsahuje ve vrstvě jak  $\text{UO}_7$ , tak i  $\text{UO}_8$ , které sdílejí hrany tak, že vznikají nekonečné řetězce polyedrů. Ty jsou pak navzájem vázány opět sdílením vrcholů s tetraedry P či As (Burns 2005; Lussier et al. 2016). Minerál fosfuranylit, který dal název celé skupině, obsahuje navíc ještě poslední typ koordinačního polyedru  $\text{U}^{6+}$ , objevujícího se ve strukturách pevných látek, a to  $\text{UO}_6$ , který se nalézá mezi vrstvami, a díky pevným vazbám tak tvoří trojrozměrnou síť (Demartin et al. 1991).

Phurcalit je vápník obsahující hydratovaný fosfát uranylu, který je svým vzhledem velmi podobný fosfuranylitu. Bez provedení rentgenové difrakční analýzy bývá jen stěží rozeznatelný. Možná i to je důvodem, proč je phurcalit v porovnání s fosfuranylitem považován za vzácnější.

Fosfuranylit je z Jáchymova znám již poměrně dlouhou dobu (Ondruš et al. 1997), nicméně nepatří mezi nejhojnější supergenní minerály. Jeho nálezy jsou omezeny na oxidační zóny žíly Geister (šachta Rovnost I) a přilehlých žil, jako například žíly Severní Jeroným (šachta č. 14), či systému Červených žil (šachta č. 14). Revizí sbírkového materiálu nalezeného na haldě dolu Eduard byl identifikován minerál vzhledem nerozeznatelný od fosfuranylitu. Monokrystalová rentgenová difrakční analýza jednoznačně přiřadila tento minerál k phurcalitu. Jedná se, společně s nově identifikovaným vzorkem z ložiska Medvědin v Krkonoších (Plášil, Goliáš, *nepublikovaná data*), o první spolehlivý výskyt phurcalitu v České republice.

## Metodika výzkumu

Povrchová morfologie vzorků byla sledována v dopadajícím světle pomocí optického mikroskopu Zeiss Stemi 2000-C.

Monokrystalová difrakční data phurcalitu z Jáchymova byla získána na difraktometru Rigaku SuperNova vybaveného citlivým CCD detektorem Atlas S2. Použito bylo intenzivního monochromatizovaného MoK $\alpha$  záření kolimovaného pomocí soustavy zrcadel do svazku o průměru cca 0.160 mm. Krystal phurcalitu, o velikosti 0.046 × 0.013 × 0.006 mm, byl nalepen na skleněný vlas a snímkován. Krystalová struktura phurcalitu byla zpřesněna z monokrystalových difrakčních dat programem Jana2006 (Petříček et al. 2014) na základě známé, nedávno publikované struktury tohoto minerálního druhu (Plášil et al. 2020). Krystalografická data, včetně zpřesněných pozic atomů (CIF), jsou dostupná jako supplementární materiál tohoto příspěvku.

## Popis a charakteristika vzorků s phurcalitem

Vzorky, na kterých byl phurcalit identifikován, pocházejí z nálezů jáchymovského sběratele Jana Hlouška. Ten je nalezl na haldě dolu Eduard v roce 1969. Tento údaj byl uveden na jediné etiketě, která náležela k jednomu ze vzorků, nicméně z charakteru ostatních vzorků bylo zřejmé, že jde o stejný nález. Materiál pochází dle etikety z komína, ústího na haldě dolu, který je dnes již zlikvidován.

Vzorky jsou tvořeny silně alterovanou křemennou žilovinu s naprostou absencí žilných karbonátů. Křemen vystupuje velmi pravděpodobně v několika generacích a částečně tvoří drobné krystaly do četných dutin silně kavernózního materiálu. Místy zakalený křišťál přechází až do morionu. V dutinách žiloviny tvoří phurcalit dlouze prismatické, ukončené krystaly jasně žluté barvy, které dosahují velikosti až 3 - 4 mm (obr. 1). Výjimečně dosáhly celé agregáty krystalů velikosti až 6 mm. Phurcalit je dominantním zástupcem U minerálů ve studovaném materiálu. Z dalších minerálů U byl ojedinele zjištěn walpurgin, dále uranofán- $\alpha$  a členy izomorfní série metatorbernit-metazeunerit. Z neuranových supergenních minerálů byl zastoupen blíže neurčený jílový minerál, částečně vyplňující dutiny žiloviny.

## Rentgenový difrakční výzkum phurcalitu

Základní údaje o zpřesnění krystalové struktury phurcalitu z Jáchymova jsou uvedeny v tabulce 1; frakční souřadnice atomů jsou uvedeny společně s dalšími údaji v tabulce 2 a v tabulce 3 jsou pak porovnány získané parametry základní cely s publikovanými údaji pro tuto minerální fázi z jiných lokalit.

Zpřesněná krystalová struktura phurcalitu z Jáchymova



Obr. 1 Žluté až žluto-oranžové srostlice prismatických krystalů phurcalitu z Jáchymova, narůstající na krystaly záhnědy-ametystu. Šířka obrázku 2.7 mm, foto P. Škacha.

Tabulka 1 Krystalografické údaje a detaily zpřesnění krystalové struktury pro phurcalit z Jáchymova.

|  |   |
|--|---|
| Strukturní vzorec  | $\text{Ca}_2[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_{4,1,753}(\text{AsO}_4)_{0,247}] \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ |
| Prostorová grupa   | <i>Pbca</i>   |
| <i>a</i> , <i>b</i> , <i>c</i> [Å]                                 | 17.3785(8), 15.9864(6), 13.5477(6)  |
| <i>V</i> (Å <sup>3</sup> )   | 3763.8(3)   |
| <i>Z</i>   | 8   |
| Hustota (calc.) [g/cm <sup>3</sup> ]                               | 4.409   |
| Abs. koeficient $\mu$ (mm <sup>-1</sup> ), typ korekce             | 26.99, gaussian (Jana2006)  |
| $T_{\text{min}}/T_{\text{max}}$                                    | 0.5866/0.8679   |
| Velikost krystalu [mm]   | 0.046 × 0.013 × 0.006   |
| $F_{000}$  | 4275  |
| RTG záření, $\lambda$ [Å]  | MoK $\alpha$ , 0.71073  |
| Úhlový rozsah měření [°]   | 2.94–29.06  |
| Rozsah indexů <i>h</i> , <i>k</i> , <i>l</i>                       | -23 < <i>h</i> < 22, -19 < <i>k</i> < 20, -17 < <i>l</i> < 16   |
| Typ měření, šíře snímku [°], expoziční doba [s]                    | $\omega$ , 1.0, 300   |
| Reflexí měřeno celkem  | 28862   |
| Reflexí nezávislých/pozorovaných [ $I_{\text{obs}} > 3\sigma(I)$ ] | 4913/3488   |
| Kompletnost dat do $\theta_{\text{max}}$ [%], $R_{\text{int}}$     | 0.92, 0.053   |
| Počet parametrů, restraints, constraints                           | 273, 0, 18  |
| Váhové schéma  | $\sigma_w = 1/(\sigma^2(I) + 0.004I^2)$   |
| <i>R</i> , <i>wR</i> (obs)   | 0.0356, 0.0637  |
| <i>R</i> , <i>wR</i> (all)   | 0.0679, 0.0707  |
| Goodness-of-fit ( <i>S</i> ) (obs/all)                             | 1.44/1.33   |
| Diferenční fourierské max./min. [e/Å <sup>3</sup> ]                | 3.64/ -2.68   |

mova (obr. 2) odpovídá velmi dobře krystalové struktuře phurcalitu z lokality Shinkolobwe (Demokratická republika Kongo, Afrika), která byla nedávno publikována Plášilem et al. (2020). Struktura phurcalitu je vrstevnatá (obr. 2), přičemž strukturní uranyl-fosfátové vrstvy náleží k fosfuranilitové topologii (Burns 2005; Lussier et al. 2016). Jak již bylo výše zmíněno, pro tuto topologii je typické, že hexagon je v této topologii obsazen  $U^{6+}$ . Obdobně jako i jiné členy fosfuranilitové skupiny, tak i phurcalit neobsahuje protonizované atomy kyslíku (ani jako OH, ani jako  $H_2O$ ) na vrstvě - ligandy  $UO_2^{2+}$  (Piret et al. 1988; Demartin et al. 1991; Dal Bo et al. 2017). Složení vrstev je tedy bez

vodíku; v případě studovaného phurcalitu z Jáchymova bylo zjištěno, že se výrazněji uplatňuje substituce  $AsP_{-1}$ . Chemické složení strukturních vrstev lze tedy vyjádřit jako  $[(UO_2)_3O_2(PO_4)_{1.753}(AsO_4)_{0.247}]^{4-}$ . Zajímavý je fakt, že proporce As ve studovaném phurcalitu z Jáchymova (12 mol. %), je nejvyšší dosud uváděnou, nicméně objem základní buňky je nižší než například objem zpřesněný pro phurcalit z typové lokality Bergen v Sasku (Deliens, Piret 1978), který je uváděn jako arsenu prostý (tab. 3). Mezi vrstvami jsou uloženy atomy vápníku, které jsou vázány jak ke strukturním vrstvám přes atomy kyslíku náležející uranylovým skupinám, tak jejich ligandy tvoří molekulu

**Tabulka 2** Frakční souřadnice atomů, jejich teplotních faktorů (udaných jako ekvivalentní parametr  $U_{eq}$  v  $\text{\AA}^2$ ) a sumy bond-valenčních příspěvků (BV) v dané pozici ve zpřesněné struktuře phurcalitu z Jáchymova.

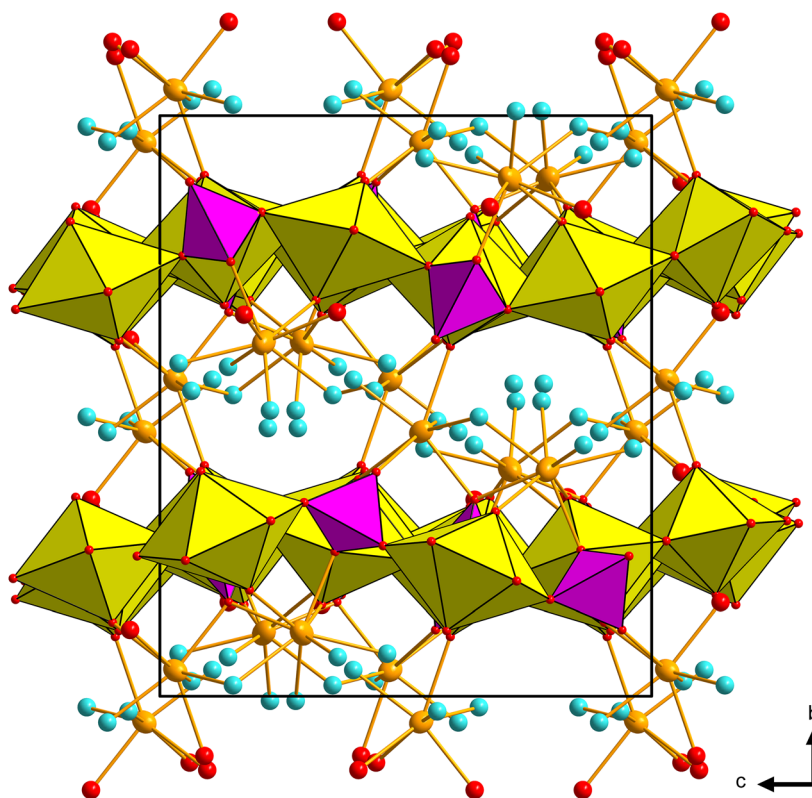
|     | x/a          | y/b         | z/c         | $U_{eq}$    | BV        |
|-----|--------------|-------------|-------------|-------------|-----------|
| U1  | 0.548921(17) | 0.21636(2)  | 0.13109(2)  | 0.01276(10) | 5.96(4)   |
| U2  | 0.762695(18) | 0.26510(2)  | 0.63474(2)  | 0.01214(9)  | 6.09(3)   |
| U3  | 0.657628(19) | 0.21424(2)  | 0.38849(2)  | 0.01468(10) | 5.85(3)   |
| Ca1 | 0.85435(11)  | 0.45568(12) | 0.46847(13) | 0.0195(6)   | 2.002(13) |
| Ca2 | 0.41097(13)  | 0.39069(13) | 0.28848(14) | 0.0268(7)   | 1.957(12) |
| P1# | 0.34339(11)  | 0.24543(12) | 0.11969(13) | 0.0107(6)   | 5.43(4)   |
| P2# | 0.96832(10)  | 0.30853(12) | 0.61319(12) | 0.0119(6)   | 5.53(5)   |
| O1  | 0.6543(3)    | 0.2336(4)   | 0.5519(4)   | 0.0183(19)  | 1.915(13) |
| O2  | 0.2949(3)    | 0.2026(4)   | 0.2017(4)   | 0.0169(19)  | 2.019(17) |
| O3  | 0.6565(3)    | 0.1981(4)   | 0.2254(4)   | 0.0184(19)  | 1.856(12) |
| O4  | 0.6587(4)    | 0.1028(4)   | 0.4094(4)   | 0.020(2)    | 1.90(2)   |
| O5  | 0.7662(4)    | 0.1574(4)   | 0.6711(4)   | 0.021(2)    | 1.85(2)   |
| O6  | 0.2890(4)    | 0.2328(4)   | 0.0295(4)   | 0.021(2)    | 2.098(19) |
| O7  | 0.7712(3)    | 0.3728(4)   | 0.5963(4)   | 0.018(2)    | 1.83(2)   |
| O8  | 1.0168(4)    | 0.3336(5)   | 0.7067(5)   | 0.035(3)    | 1.850(19) |
| O9  | 0.9013(3)    | 0.2485(3)   | 0.6440(4)   | 0.0156(19)  | 1.962(15) |
| O10 | 0.6597(4)    | 0.3255(4)   | 0.3690(4)   | 0.024(2)    | 1.68(2)   |
| O11 | 0.4166(3)    | 0.1968(4)   | 0.1056(4)   | 0.018(2)    | 1.919(19) |
| O12 | 0.5620(4)    | 0.1131(4)   | 0.0832(4)   | 0.023(2)    | 1.72(2)   |
| O13 | 0.3572(3)    | 0.3383(4)   | 0.1400(4)   | 0.0182(19)  | 1.95(2)   |
| O14 | 0.5279(4)    | 0.3174(4)   | 0.1822(4)   | 0.023(2)    | 1.81(2)   |
| O15 | 1.0283(4)    | 0.2589(4)   | 0.5462(5)   | 0.024(2)    | 1.926(18) |
| O16 | 0.5296(4)    | 0.4325(5)   | 0.3614(5)   | 0.041(3)    | 0.306(5)  |
| O17 | 0.7211(4)    | 0.4740(5)   | 0.4361(6)   | 0.041(3)    | 0.310(6)  |
| O18 | 0.9403(4)    | 0.3857(4)   | 0.5605(5)   | 0.029(2)    | 1.88(2)   |
| O19 | 0.3919(4)    | 0.4267(4)   | 0.4620(5)   | 0.034(3)    | 0.267(5)  |
| O20 | 0.9646(4)    | 0.4811(4)   | 0.3513(5)   | 0.031(2)    | 0.418(5)  |
| O21 | 0.3269(4)    | 0.5078(5)   | 0.2761(5)   | 0.040(3)    | 0.309(6)  |
| O22 | 0.8643(5)    | 0.5451(5)   | 0.6068(5)   | 0.044(3)    | 0.325(6)  |
| O23 | 0.8591(5)    | 0.4619(5)   | 0.7805(5)   | 0.051(3)    | 0.000     |

# - okupace P1 = 0.910(6)P/0.090(6)As; okupace P2 = 0.843(6)P/0.157(6)As; BV - suma bond-valencí na dané pozici (uvedena ve valenčních jednotkách, vu)

**Tabulka 3** Porovnání mřížkových parametrů phurcalitu z Jáchymova a jiných lokalit (pro ortorombickou prostorovou grupu  $Pbca$ ).

|                                      |                           | a [Å]      | b [Å]      | c [Å]      | V [Å <sup>3</sup> ] |
|--------------------------------------|---------------------------|------------|------------|------------|---------------------|
| Jáchymov (CZ)                        | tato práce                | 17.4652(5) | 16.0068(5) | 13.5710(4) | 3793.9(2)           |
| Shinkolobwe (DRC)                    | Plášil et al. (2020)      | 17.3785(8) | 15.9864(6) | 13.5477(6) | 3763.8(3)           |
| Bergen (Sasko, SRN), typová lokalita | Deliens, Piret (1978)     | 17.426(3)  | 16.062(3)  | 13.592(3)  | 3804                |
| Marrivale Quarry (Dartmoor, UK)      | Braithwaite et al. (1989) | 17.44(2)   | 15.87(2)   | 13.56(3)   | 3753                |
| Perus (Brazílie)                     | Atencio et al. (1991)     | 17.415(6)  | 16.035(3)  | 13.598(3)  | 3797(2)             |

**Obr. 2** Krystalová struktura phurcalitu z Jáchymova. Uranylové koordinační polyedry jsou zobrazeny žlutě, tetraedry dominantně okupované  $P^{5+}$  růžově,  $Ca^{2+}$  v mezivrstvi uranyl-fosfátových vrstev fosfuranylitové topologie jsou znázorněny oranžovou barvou (jako termální elipsoidy na hladině 85% pravděpodobnosti výskytu), atomy kyslíku náležející molekulární vodě jsou znázorněny azurově modře. Hrany základní buňky jsou vyznačeny silnými černými čarami.



ly  $H_2O$  (atomy O20, O21, O22, charakteristické sumou vazebně-valenčních příspěvků  $<0.5$  vu, viz tab. 2). Dále se v mezivrstvi nalézá jedna další molekula vody, která není vázána přímo k žádnému kovovému prvku a je ve struktuře držena pouze vodíkovými vazbami. Obdobně, jako v případě phurcalitu z Konga, nebylo možné z rentgenových difrakčních dat jednoznačně určit pozice všech vodíků ve struktuře tak, aby výsledná upřesněná geometrie H-vazeb dávala chemický smysl. V případě phurcalitu z Konga byly pozice atomů vodíku ve struktuře zpřesněny díky užití teoretických výpočtů. Na základě zpřesnění struktury phurcalitu z Jáchymova z monokrystalových dat byl získán strukturní vzorec  $Ca_2[(UO_2)_3O_2(PO_4)_{1.753}(AsO_4)_{0.247}] \cdot 7H_2O$ ,  $Z = 8$ ,  $D_{calc.} = 4.409$  g/cm<sup>3</sup>.

### Minerály skupiny fosfuranylitu a jejich rozšíření v jáchymovském rudním revíru

V jáchymovském rudním revíru se do dnešního dne podařilo potvrdit tři minerály ze skupiny fosfuranylitu - fosfuranylit, dewindtit a zde popsaný phurcalit. Je možné, že se některé další členy této skupiny (která čítá 13 druhů včetně problematického yingjiangitu) v Jáchymově také vyskytují, například dumontit,  $Pb_2(UO_2)_3O_2(PO_4)_2 \cdot 5H_2O$ , nebo As-dominantní analog, minerál hügelit,  $Pb_2(UO_2)_3O_2(AsO_4)_2 \cdot 5H_2O$ . Jako nejpravděpodobnější perspektivní lokalita se jeví žila Geister v oblasti dolu Rovnost I, případně i žily severně od zóny hornin označovaných německy jako *Putzenwäcke* (čedičové tufy) - žily Severní Jeroným a systém Červených žil. Je velmi pravděpodobné, že i oxidační zóna žily Schweitzer, která byla v severním úseku těžena šachtou Eduard, mohla, vzhledem k zde popisovanému nálezu, obsahovat velice zajímavé minerály. Naneštěstí neexistuje dokladový materiál, a tudíž jsou badatelé odkázáni na rudní materiál velmi řídky rozptýlený v odvalu šachty Eduard, případně na stará, přípovrchová díla na výchozech žily Schweitzer.

Minerály fosfuranylitové skupiny jsou uváděny Ondrušem et al. (1997) z materiálu pocházejícího ze šachty Eliáš (dewindtit); pro vzorky náležející fosfuranylitu není lokalita uvedena.

### Poděkování

Autor děkuje Pavlu Škáchovi (Hornické muzeum, Příbram) za pořízení mikrofotografie phurcalitu a dále recenzentům Martinu Števkovi (SAV Bratislava) a Jiřímu Čejkovi (NM Praha) za připomínky k textu. Předložená práce vznikla za podpory projektu č. LO1603 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, Národnímu programu udržitelnosti I.

### Literatura

- ASTILLEROS JM, PINTO AJ, GONÇALVES MA, SANCHEZ-PASTOR N, FERNANDEZ-DIAZ L (2013) In situ nanoscale observations of metatorbernite surfaces interacted with aqueous solutions. *Environ Sci Technol* 47: 2636-2644
- ATENCIO D, NEUMANN R, SILVA AJGC, MASCARENHAS YP (1991) Phurcalite from Perus, Sao Paulo, Brazil and redetermination of its crystal structure. *Am Mineral* 29: 95-105
- BRAITHWAITE RSW, PAAR WH, CHISHOLM JE (1989) Phurcalite from Dartmoor, southwest England, and its identity with „nisaite“ from Portugal. *Mineral Mag* 53: 583-589
- BURNS PC (2005)  $U^{6+}$  minerals and inorganic compounds: Insights into an expanded structural hierarchy of crystal structures. *Can Mineral* 43(6): 1839-1894
- CANTRELL KJ, DEUTSCH WJ, LINDBERG MJ (2011) Thermodynamic model for uranium release from Hanford Site Tank residual waste. *Environ Sci Technol* 45: 1473-1480
- CATALANO JG, MCKINLEY JP, ZACHARA JM, HEALD SM, SMITH SC, BROWN GE JR (2006) Changes in uranium speciation through a depth sequence of contaminated Hanford sediments. *Environ Sci Technol* 40: 2517-2524

- DAL BO F, HATERT F, PHILIPPO S (2017) New crystallographic data and formula revision of phurcalumite,  $\text{Al}_2[(\text{UO}_2)_3(\text{PO}_4)_2\text{O}(\text{OH})](\text{OH})_3(\text{H}_2\text{O})_9$ . *J Geosci* 62: 87-95.
- DELIENS M, PIRET P (1978) La phurcalite,  $\text{Ca}_2(\text{UO}_2)_3(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , nouveau minéral. *Bull Minéral* 101: 356-358
- DEMARTIN F, DIELLA V, DONZELLI S, GRAMACCIOLI CM, PILATI T (1991) The importance of accurate crystal structure determination of uranium minerals. I. Phosphuranylite  $\text{KCa}(\text{H}_3\text{O})_3(\text{UO}_2)_7(\text{PO}_4)_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ . *Acta Cryst B* 47: 439-446
- FINCH RJ, MURAKAMI T (1999) Systematics and paragenesis of uranium minerals. In: BURNS PC, FINCH RJ (eds) *Uranium: Mineralogy, Geochemistry and the Environment*. *Rev Mineral Geochem* 38: 91-180
- FULLER CC, BARGAR JR, DAVIS JA, PIANA MJ (2002) Mechanisms of uranium interactions with hydroxyapatite: implications for groundwater remediation. *Environ Sci Technol* 36: 158-165
- GÖB S, GUHRING JE, BAU M, MARKL G (2013) Remobilization of U and REE and the formation of secondary minerals in oxidized U deposits. *Am Mineral* 98: 530-548
- ILTON ES, ZACHARA JM, MOORE DA, MCKINLEY JP, ECKBERG AD, CAHILL CL, FELMY AR (2010) Dissolution study of metatorbernite: thermodynamic properties and the effect of pH and phosphate. *Environ Sci Technol* 44: 7521-7526
- KRIVOVICHEV SV, PLÁŠIL J (2013) Mineralogy and crystallography of uranium. In: BURNS PC, SIGMON GE (eds) *Uranium: From Cradle to Grave*. *Mineralogical Association of Canada Short Courses* 43, pp 15-119
- LUSSIER AJ, LOPEZ RAK, BURNS PC (2016) A revised and expanded structure hierarchy of natural and synthetic hexavalent uranium compounds. *Can Mineral* 54: 177-283
- MAHER K, BARGAR JR, BROWN GE JR (2013) Environmental speciation of actinides. *Inorg Chem* 52: 3510-3532
- MILLS SJ, BIRCH WD, KOLITSCH U, MUMME WG, GREY IE (2008) Lakebogaite,  $\text{CaNaFe}^{3+}_2\text{H}(\text{UO}_2)_2(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_8$ , a new uranyl phosphate with a unique crystal structure from Victoria, Australia. *Am Mineral* 93: 691-697
- MURAKAMI T, OHNUKI T, ISOBE H, SATO T (1997) Mobility of uranium during weathering. *Amer Mineral* 88: 888-899
- ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, HLOUŠEK J, SKÁLA R, VAVŘÍN I, FRÝDA J, ČEJKA J, GABAŠOVÁ A (1997) Secondary minerals of the Jáchymov (Joachimsthal) ore district. *J Czech Geol Soc* 42: 3-69
- PEKOV IV, LEVITSKIY VV, KRIVOVICHEV SV, ZOLOTAREV AA, CHUKANOV NV, BRYZGALOV IA, ZADOV AE (2012) New nickel-uranium-arsenic mineral species from the oxidation zone of the Belorechenskoye deposit, northern Caucasus, Russia: II. Dymkovite,  $\text{Ni}(\text{UO}_2)_2(\text{As}^{3+}\text{O}_3)_2 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , a seelite-related arsenite. *Eur J Mineral* 24: 923-930
- PETŘÍČEK V, DUŠEK M, PALATINUS L (2014) Crystallographic computing system JANA2006: General features. *Z Kristallogr* 229: 345-352
- PIRET P, PIRET-MEUNIER J (1988) Nouvelle détermination de la structure cristalline de la dumontite  $\text{Pb}_2[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ . *Bull Minéral* 111: 439-442
- PIRET P, DELIENS M, PIRET-MEUNIER J (1988) La françoisite-(Nd), nouveau phosphate d'uranyle et de terres rares; propriétés et structure cristalline. *Bull Minéral* 111: 443-449
- PLÁŠIL J (2014) Oxidation-hydration weathering of uraninite: the current state-of-knowledge. *J Geosci* 59: 99-114
- PLÁŠIL J, SEJKORA J, ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, BERAN P, GOLIÁŠ V (2006) Supergene minerals in the Horní Slavkov uranium ore district, Czech Republic. *J Czech Geol Soc* 51: 149-158
- PLÁŠIL J, SEJKORA J, ČEJKA J, ŠKODA R, GOLIÁŠ V (2009) Supergene mineralization of the Medvědí uranium deposit, Krkonoše Mountains, Czech Republic. *J Geosci* 54: 15-56
- PLÁŠIL J, SEJKORA J, ČEJKA J, NOVÁK M, VIÑALS J, ONDRUŠ P, VESELOVSKÝ F, ŠKÁCHA P, JEHLIČKA J, GOLIÁŠ V, HLOUŠEK J (2010) Metarauchite,  $\text{Ni}(\text{UO}_2)_2(\text{AsO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ , from Jáchymov, Czech Republic, and Schneeberg, Germany: a new member of the autunite group. *Can Mineral* 48: 335-350
- PLÁŠIL J, KIEFER B, GHAZISAEED S, PHILIPPO S (2020) Hydrogen bonding in the crystal structure of phurcalite,  $\text{Ca}_2[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2] \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ : single-crystal X-ray study and TORQUE calculations. *Acta Cryst B* 76: 502-509