

Name and formula

Reference code: 01-080-3354

Compound name: Cobalt Antimonide Sulfide
PDF index name: Cobalt Antimonide Sulfide

Empirical formula: CoSSb
Chemical formula: CoSbS

Crystallographic parameters

Crystal system: Orthorhombic
Space group: Pbca
Space group number: 61

a (Å): 5,8341
b (Å): 5,9477
c (Å): 11,6540
Alpha (°): 90,0000
Beta (°): 90,0000
Gamma (°): 90,0000

Volume of cell (10⁶ pm³): 404,39
Z: 8,00

RIR: 3,84

Subfiles and quality

Subfiles: Alloy, metal or intermetallic, ICSD Pattern, Inorganic
Quality: Indexed (I)

Comments

ANX: NOP
ICSD collection code: 180432
Creation Date: 1.9.2013
Modification Date: 1.9.2020
Cross-References: ICDD:03-065-2450, ICSD:180432
ANX: NOP
Analysis: Co1 S1 Sb1
Formula from original source: Co Sb S
ICSD Collection Code: 180432
Calculated Pattern Original Remarks: Structure refinement by Rietveld method
Minor Warning: No R factors reported/abstracted
Wyckoff Sequence: c3
Unit Cell Data Source: Powder Diffraction.

References

Primary reference: Carlini, R., Artini, C., Borzone, G., Masini, R., Zanicchi, G., Costa, G.A., J. Therm. Anal. Calorim., **103**, 23, (2011)
Structure: Carlini, R., Artini, C., Borzone, G., Masini, R., Zanicchi, G., Costa, G.A., J. Therm. Anal. Calorim., **103**, 23, (2011)

Peak list

No.	h	k	l	d [Å]	2θ [°]	I [%]
1	0	0	2	5,82 700	15,1 93	35,0
2	1	0	2	4,12 282	21,5 37	17,5

3	1	1	1	3,92	22,6	1,4
				198	54	
4	1	1	2	3,38	26,2	3,5
				837	81	
5	0	2	0	2,97	30,0	6,8
				385	24	
6	0	0	4	2,91	30,6	24,3
				350	61	
7	2	0	0	2,91	30,6	24,3
				350	61	
8	0	2	1	2,88	31,0	38,0
				151	10	
9	1	1	3	2,84	31,4	51,1
				079	66	
10	0	2	2	2,64	33,8	29,5
				883	13	
11	1	0	4	2,60	34,3	47,6
				655	78	
12	2	0	2	2,60	34,3	47,6
				655	78	
13	1	2	1	2,58	34,6	9,7
				357	93	
14	2	1	1	2,55	35,0	100,
				528	90	0
15	1	2	2	2,41	37,2	30,1
				188	51	
16	1	1	4	2,38	37,6	12,1
				882	24	
17	2	1	2	2,38	37,6	12,1
				882	24	

18	0	2	3	2,36	38,0	0,2
				136	78	
19	1	2	3	2,18	41,2	5,5
				886	09	
20	2	1	3	2,17	41,5	0,7
				158	52	
21	0	2	4	2,08	43,4	0,7
				246	19	
22	2	2	0	2,08	43,4	0,7
				246	19	
23	2	0	4	2,06	43,8	5,7
				141	85	
24	2	2	1	2,04	44,1	5,8
				999	42	
25	1	1	5	2,03	44,5	33,7
				396	09	
26	2	2	2	1,96	46,2	7,8
				018	79	
27	1	2	4	1,96	46,2	7,8
				018	79	
28	2	1	4	1,94	46,5	1,0
				774	92	
29	0	0	6	1,94	46,7	3,3
				233	30	
30	1	3	1	1,85	49,1	17,4
				325	20	
31	1	0	6	1,84	49,3	3,6
				468	64	
32	3	0	2	1,84	49,3	3,6
				468	64	

33	0	2	5	1,83	49,6	11,8
				449	56	
34	2	2	3	1,83	49,6	11,8
				449	56	
35	3	1	1	1,82	49,9	3,6
				558	15	
36	1	3	2	1,78	51,0	5,9
				672	78	
37	1	1	6	1,76	51,8	17,8
				188	51	
38	3	1	2	1,76	51,8	17,8
				188	51	
39	1	2	5	1,75	52,2	2,6
				001	29	
40	2	1	5	1,74	52,5	7,3
				114	16	
41	2	2	4	1,69	54,0	1,9
				418	88	
42	1	3	3	1,69	54,2	11,9
				016	27	
43	3	1	3	1,66	54,9	12,6
				909	69	
44	2	3	0	1,63	56,0	8,6
				971	40	
45	0	2	6	1,62	56,5	10,7
				620	47	
46	2	3	1	1,62	56,6	5,5
				371	41	
47	3	0	4	1,61	56,8	10,2
				748	79	

48	3	2	1	1,61	57,0	1,1
				195	92	
49	1	3	4	1,57	58,4	11,2
				798	39	
50	2	3	2	1,57	58,4	11,2
				798	39	
51	3	2	2	1,56	58,8	9,7
				759	64	
52	1	2	6	1,56	58,8	9,7
				759	64	
53	2	1	6	1,56	59,1	3,6
				011	74	
54	3	1	4	1,56	59,1	3,6
				011	74	
55	2	2	5	1,55	59,4	0,7
				292	76	
56	1	1	7	1,54	59,7	0,1
				592	72	
57	2	3	3	1,51	61,3	3,7
				065	16	
58	3	2	3	1,50	61,7	1,8
				116	46	
59	0	4	0	1,48	62,4	0,1
				693	03	
60	0	4	1	1,47	62,9	3,6
				497	66	
61	4	0	0	1,45	63,7	3,0
				852	59	
62	0	0	8	1,45	63,8	2,8
				675	46	

63	0	2	7	1,45	64,0	0,4
				270	45	
64	3	1	5	1,44	64,2	1,7
				827	64	
65	0	4	2	1,44	64,6	0,6
				076	40	
66	1	4	1	1,42	65,2	0,4
				895	40	
67	2	3	4	1,42	65,2	0,4
				895	40	
68	2	2	6	1,42	65,6	4,3
				091	56	
69	3	2	4	1,42	65,6	4,3
				091	56	
70	1	0	8	1,41	65,9	2,0
				488	71	
71	4	0	2	1,41	65,9	2,0
				488	71	
72	1	2	7	1,40	66,2	0,8
				966	47	
73	2	1	7	1,40	66,4	11,0
				501	94	
74	4	1	1	1,40	66,4	11,0
				501	94	
75	1	4	2	1,39	66,8	0,8
				874	31	
76	0	4	3	1,38	67,3	0,6
				867	80	
77	3	3	1	1,37	67,9	0,1
				856	42	

78	3	0	6	1,37	68,1	1,4
				427	83	
79	1	1	8	1,37	68,1	1,4
				427	83	
80	1	4	3	1,35	69,5	5,9
				093	28	
81	1	3	6	1,35	69,5	5,9
				093	28	
82	2	3	5	1,34	70,1	3,0
				109	13	
83	3	2	5	1,33	70,5	1,9
				444	14	
84	2	4	0	1,32	71,1	0,2
				475	08	
85	0	4	4	1,32	71,1	0,2
				475	08	
86	2	4	1	1,31	71,6	0,4
				627	36	
87	4	2	0	1,30	72,0	4,0
				951	64	
88	0	2	8	1,30	72,1	3,7
				822	46	
89	3	3	3	1,30	72,1	3,7
				822	46	
90	2	0	8	1,30	72,4	0,7
				327	63	
91	4	0	4	1,30	72,4	0,7
				327	63	
92	2	2	7	1,30	72,6	0,8
				037	51	

93	4	2	1	1,30	72,6	0,8
				037	51	
94	2	4	2	1,29	73,2	0,5
				155	27	
95	1	4	4	1,29	73,2	0,5
				155	27	
96	1	2	8	1,27	74,1	3,2
				764	57	
97	4	2	2	1,27	74,1	3,2
				764	57	
98	4	1	4	1,27	74,4	0,4
				396	07	
99	2	1	8	1,27	74,4	0,4
				396	07	
100	2	3	6	1,25	75,8	5,2
				294	74	
101	3	3	4	1,25	75,8	5,2
				294	74	
102	3	2	6	1,24	76,2	0,8
				751	63	
103	4	2	3	1,24	76,7	2,3
				090	43	
104	3	1	7	1,23	77,0	3,1
				651	66	
105	1	1	9	1,23	77,0	3,1
				651	66	
106	1	4	5	1,22	77,8	2,2
				559	81	
107	4	1	5	1,21	79,0	0,3
				052	38	

108	2	4	4	1,20	79,3	0,2
				594	98	
109	2	2	8	1,19	80,4	1,9
				275	54	
110	3	3	5	1,19	80,4	1,9
				275	54	
111	0	2	9	1,18	80,9	0,1
				722	06	
112	0	4	6	1,18	81,4	0,5
				068	49	
113	3	4	1	1,17	81,9	0,6
				519	10	
114	4	3	0	1,17	81,9	0,6
				519	10	
115	2	3	7	1,16	82,5	2,6
				824	03	
116	4	0	6	1,16	82,6	2,2
				631	70	
117	0	0	10	1,16	82,6	2,2
				631	70	
118	1	2	9	1,16	82,9	1,3
				338	24	
119	3	2	7	1,16	82,9	1,3
				338	24	
120	2	1	9	1,16	83,1	2,8
				076	52	
121	1	5	1	1,16	83,1	2,8
				076	52	
122	3	4	2	1,15	83,4	0,7
				766	25	

123	1	4	6	1,15	83,4	0,7
				766	25	
124	4	3	2	1,15	84,0	0,3
				085	31	
125	1	3	8	1,15	84,0	0,3
				085	31	
126	1	0	10	1,14	84,7	4,4
				292	49	
127	1	5	2	1,14	84,7	4,4
				292	49	
128	5	1	1	1,13	85,0	1,1
				951	62	
129	3	4	3	1,13	85,9	3,5
				012	39	
130	3	3	6	1,13	85,9	3,5
				012	39	
131	5	1	2	1,12	86,5	1,6
				351	69	
132	4	3	3	1,12	86,5	1,6
				351	69	
133	1	1	10	1,12	86,6	2,1
				229	86	
134	0	4	7	1,10	87,9	3,9
				901	88	
135	2	5	0	1,10	88,7	2,4
				148	47	
136	5	1	3	1,09	89,0	3,6
				828	74	
137	2	4	6	1,09	89,4	0,5
				466	47	

138	3	4	4	1,09	89,4	0,5
				466	47	
139	2	3	8	1,08	90,0	2,8
				904	34	
140	1	4	7	1,08	90,0	2,8
				904	34	
141	0	2	10	1,08	90,3	2,9
				579	78	
142	4	2	6	1,08	90,3	2,9
				579	78	
143	5	2	1	1,08	90,7	4,0
				217	65	
144	1	5	4	1,08	90,7	4,0
				217	65	
145	3	3	7	1,06	92,4	1,9
				676	55	
146	1	2	10	1,06	92,4	1,9
				676	55	
147	2	1	10	1,06	92,6	0,4
				475	81	
148	2	5	3	1,05	93,2	0,2
				970	55	
149	3	1	9	1,05	93,2	0,2
				970	55	
150	3	4	5	1,05	93,9	1,1
				363	56	
151	4	3	5	1,04	94,4	0,1
				911	86	
152	5	2	3	1,04	94,8	0,4
				608	46	

153	1	5	5	1,04	95,2	0,4
				248	77	
154	4	4	0	1,04	95,4	0,7
				123	28	
155	0	4	8	1,04	95,5	0,7
				058	07	
156	4	4	1	1,03	95,9	4,6
				710	31	
157	2	4	7	1,03	95,9	4,6
				710	31	
158	2	5	4	1,03	96,7	3,9
				070	24	
159	4	0	8	1,03	96,7	3,9
				070	24	
160	4	2	7	1,02	96,9	2,3
				927	03	
161	5	1	5	1,02	97,1	1,5
				769	02	
162	1	1	11	1,02	97,2	2,2
				676	19	
163	4	4	2	1,02	97,4	0,3
				499	44	
164	1	4	8	1,02	97,4	0,3
				499	44	
165	5	2	4	1,01	98,3	0,3
				777	75	
166	2	2	10	1,01	98,5	0,4
				622	77	
167	2	3	9	1,01	98,5	0,4
				622	77	

168	3	2	9	1,01	98,9	0,8
				332	59	
169	3	3	8	1,00	99,9	0,3
				573	76	
170	4	4	3	1,00	99,9	0,3
				573	76	
171	5	3	1	1,00	100,	0,1
				187	503	
172	3	5	2	0,99	100,	1,0
				964	811	
173	3	0	10	0,99	100,	1,0
				964	811	
174	0	2	11	0,99	101,	0,3
				801	037	
175	2	5	5	0,99	101,	0,1
				587	337	
176	0	6	0	0,99	102,	0,9
				094	036	
177	5	3	2	0,99	102,	0,9
				094	036	
178	1	3	10	0,99	102,	0,8
				010	155	
179	0	6	1	0,98	102,	1,1
				772	499	
180	1	2	11	0,98	103,	0,4
				372	080	
181	3	5	3	0,98	103,	0,3
				181	362	
182	2	1	11	0,98	103,	0,3
				181	362	

183	2	4	8	0,98	103,049	0,2557
184	4	4	4	0,98	103,049	0,2557
185	0	4	9	0,97	104,651	1,2153
186	0	6	2	0,97	104,651	1,2153
187	5	3	3	0,97	104,387	1,2552
188	4	2	8	0,97	104,387	1,2552
189	0	0	12	0,97	104,117	0,1965
190	1	6	2	0,96	106,381	0,3111
191	3	4	7	0,96	106,311	0,3223
192	1	4	9	0,96	106,311	0,3223
193	6	1	0	0,95	106,991	0,5734
194	4	3	7	0,95	106,991	0,5734
195	2	5	6	0,95	107,814	3,7019
196	1	0	12	0,95	107,814	3,7019
197	6	1	1	0,95	107,637	1,8305

1984190,95107,1,8

637305

Structure

No.	Na	Ele	X	Y	Z	Biso	sof	Wyc
	me	men						k.
		t						
1	CO1	Co	0,01	0,17	0,38	0,50	1,00	8c
			400	300	600	00	00	
2	S1	S	0,36	0,30	0,43	0,50	1,00	8c
			600	200	600	00	00	
3	SB1	Sb	0,11	0,05	0,18	0,50	1,00	8c
			800	000	000	00	00	

Stick Pattern

