

AM-88-391

CHALCOPHANITE, $ZnMn_3O_7 \cdot 3H_2O$: New Crystal-structure determinations

Post and Appleman

To be deposited: Tables 2, 3

American Mineralogist, 73, 11-12, 1401-1404

Table 2-1

Table 2. Observed and calculated structure factors for chalcophanite from Bisbee, AZ.

Note: Reflections tagged as unobserved are indicated by "<" and those rejected during merging of equivalent reflections by "M". This table does not include corrections for anomalous dispersion. Items are listed in the order k , F_{obs} , F_{calc} , $\sigma(F_{obs})$.

				4	48	53	4	1	44	33	4				-1	223	233	25	
	0,K,0			7	21	18	2	4	16	12	0	-2	19	19	2	-4	61	59	4
				-5	38	36	5	7	139	138	19	-5	8	3	2<				
3	89	86	9	-8	0	0	OM	10	18	14	0	-8	25	24	1		6,K,3		
6	13	9	2	-11	32	31	2	-2	61	53	5								
9	9	3	2<					-5	9	7	1		10,K,2			-3	80	79	10
					3,K,1			-8	11	8	2<								
	1,K,0											-1	10	7	3<		7,K,3		
				5	161	175	14		1,K,2			-4	17	17	1				
1	43	52	4	8	25	22	3					-7	0	0	1M	-2	62	67	5
4	471	517	52	-1	76	81	4	2	8	5	2					-5	26	26	2
7	49	51	8	-7	59	57	9	5	0	0	OM		11,K,2						
-5	25	26	1	-10	28	28	4	8	14	14	1						8,K,3		
-8	54	53	3					-4	15	12	0	-3	17	14	2<				
					4,K,1			-7	8	3	2<	-6	20	20	1	-1	18	18	2
	2,K,0			-10	92	94	8	-9	23	22	3	-4	36	34	5	-7	27	26	2
				6	14	8	4<												
2	101	105	12	-3	86	83	1		2,K,2				0,K,3						
5	16	18	1	-9	0	0	OM										9,K,3		
8	211	207	19					3	36	36	3	0	363	383	12				
-7	83	81	7		5,K,1			6	16	18	2	3	59	51	6	-3	11	11	1
-10	15	13	1					9	10	7	2<	6	80	79	10	-6	140	134	14
				-2	59	64	4	-6	189	184	36	9	38	35	2				
	3,K,0			-11	21	20	0	-9	25	22	2	-3	59	53	5		10,K,3		
								-6	61	59	6								
3	53	53	6		6,K,1			3,K,2				-9	42	39	5	-2	123	115	18
6	60	65	5													-5	41	40	0
-9	258	258	-46	-1	38	39	6	4	31	35	3		1,K,3		-8	46	46	7	
				-4	235	227	23	7	22	23	0								
	4,K,0							-2	278	248	3	1	95	91	3		11,K,3		
					7,K,1			-8	19	18	3	4	231	233	31				
4	30	31	3					-11	29	26	3	7	14	12	2	-4	50	45	8

Table 2-2

7	29	23	3	-3	16	16	2			-5	79	76	6	-7	47	48	3			
-11	0	4	2<	-6	32	32	2		4, K, 2	-8	52	51	3							
	5, K, 0				8, K, 1		5	12	9	2		2, K, 3			0, K, 4					
							-1	29	28	2				2	225	210	17			
5	8	2	3<	-2	39	41	4	-10	11	11	2<	2	73	79	6	5	113	111	15	
				-5	26	24	4					5	59	63	6	8	29	26	2	
	0, K, 1								5, K, 2			8	124	114	20	-1	217	207	14	
					9, K, 1							-1	113	103	3	-4	165	161	14	
2	80	78	9					6	88	94	0	-7	0	0	OM	-7	168	163	18	
5	28	26	3	-1	10	8	2<	-3	30	27	3	-10	35	34	3	-10	37	32	4	
8	49	45	2	-4	41	44	4													
-1	88	87	7	-7	26	25	2		6, K, 2				3, K, 3				1, K, 4			
-4	44	45	4																	
-7	176	174	19		10, K, 1			-2	21	22	0	3	60	61	7	3	180	182	23	
-10	30	26	2					-5	30	29	2	6	27	29	3	6	104	107	17	
				-3	17	16	3					-9	141	137	29	9	54	49	8	
	1, K, 1			-6	14	12	4			7, K, 2							-3	443	418	28
				-9	123	123	15										-6	96	97	9
3	68	73	7					-1	31	33	4						-9	88	89	10
6	27	27	4		11, K, 1			-4	22	22	2	4	34	34	4					
9	6	0	3<									7	28	23	5					
-3	305	288	35	-2	24	19	4			8, K, 2		-2	57	54	6					
-6	55	53	2	-5	118	122	0					-11	39	39	1	4	90	96	10	
-9	8	0	4<	-8	0	0	0<	-3	126	139	11					7	87	87	4	
	2, K, 1				0, K, 2			-6	0	0	1M			5, K, 3		-5	170	164	19	
									9, K, 2			5	54	54	0					
					1	211	199	23				-1	161	160	10					
	2, K, 4			4	148	144	18	-2	79	82	11	-4	133	129	12				3, K, 7	
				7	16	14	2	-5	65	69	8					5	167	172	19	
-8	105	100	2	10	56	52	7	-8	69	67	13			6, K, 6		8	0	2	0<	
-11	18	15	1	-2	182	166	11									-1	82	82	3	
				-5	115	115	10			10, K, 5		-3	106	107	9	-7	36	37	2	
	3, K, 4			-8	72	70	10									-10	7	2	2<	
5	157	164	18		1, K, 5			-1	49	43	7			7, K, 6						
8	38	33	6					-4	64	67	2									
-1	155	149	7	2	182	177	10	-7	55	52	3	-2	92	101	9					
-7	54	51	7	5	102	103	15					-5	80	80	7	6	44	44	0	
-10	32	32	6	8	72	67	6			11, K, 5						-3	36	36	4	
				-4	172	157	16	-3	53	47	8			8, K, 6		-9	50	49	4	
	4, K, 4			-7	99	98	9	-6	57	58	2	-1	70	72	9					
				-10	23	23	2	-9	51	51	7	-4	89	93	10				5, K, 7	
6	74	77	3									-7	31	32	4	-2	51	52	2	
-3	113	106	4		2, K, 5					0, K, 6						-11	21	19	2	
-9	80	79	11											9, K, 6						
				3	132	139	12	0	284	270	10									
	5, K, 4			6	86	89	11	3	168	165	19	-3	29	31	3					
				9	41	37	7	6	124	125	18	-6	92	90	6	-1	28	28	2	
-2	138	148	9	-6	30	5	9	9	73	65	1					-4	232	228	21	
-11	50	51	0	-9	70	68	3	-3	168	158	12			10, K, 6						
								-6	101	100	10									
	6, K, 4			-9	78	74	10					-2	83	78	12					
												-5	65	66	0	-3	56	61	4	
-1	77	80	10	4	94	98	9			1, K, 6		-8	60	61	10	-6	55	57	8	
-4	248	233	11	7	66	64	0													
				-2	104	93	7	1	188	177	18			11, K, 6						
				-8	95	94	12	4	159	160	25								8, K, 7	
				-11	52	57	7	7	69	68	12	-4	56	50	7	-2	43	47	4	
-3	124	132	13					-5	162	157	17	-7	68	67	2	-5	65	66	6	

Table 2-7

0, K, 22				2	31	31	2					6, K, 25			-5	24	24	3	
				5	31	27	3	3, K, 24											
2	18	12	6	-4	27	29	4					-1	46	47	10	2, K, 27			
5	14	12	1	-7	23	25	5	3	46	46	5	-4	81	80	10				
-1	22	21	3	2, K, 23				4, K, 24				7, K, 25			2	28	27	2	
-4	25	23	3												-1	28	26	3	
-7	108	111	23	3	36	35	6	4	37	38	7	-3	58	58	9	3, K, 27			
1, K, 22				6	23	21	3	-2	51	50	8	-6	50	47	4				
				-6	37	39	5	5, K, 24				0, K, 26			3	21	19	3	
3	31	29	4	3, K, 23								4, K, 27							
6	18	16	2					-1	119	119	16	1	58	58	7				
-3	170	172	20	-4	27	25	4	-4	52	49	6	4	54	52	7	-2	21	19	2
-6	11	2	3<	-2	41	39	6	6, K, 24				-2	71	71	6	5, K, 27			
2, K, 22				-8	31	29	7					-5	33	34	6				
4	24	11	8	4, K, 23				-3	46	47	7	1, K, 26			-1	57	61	11	
-5	20	18	4					7, K, 24				2	62	60	6	-4	27	24	2
-8	29	28	6	-1	40	39	6					5	37	31	5	6, K, 27			
3, K, 22				5, K, 23				-2	57	58	11	-4	56	58	4				
5	115	111	19	-3	30	28	2	-5	35	31	2	2, K, 26			-3	27	26	4	
0, K, 28				-1	0	0	OM	1, K, 29				0, K, 30			0, K, 31				
				4, K, 28				2	0	0	OM	0, K, 30			2	22	20	3	
2	0	0	1M	-4	15	14	2	0	110	107	16	0	110	107	16	-1	18	18	3
5	11	3	2<	-3	14	13	1	3	0	0	3M	-3	21	17	2	1, K, 31			
-1	18	15	2	5, K, 28				2, K, 29											
-4	23	21	3					3	13	11	1	1, K, 30			-3	130	125	17	
1, K, 28				-2	26	21	4	3, K, 29				1	21	19	2	3, K, 31			
3	34	31	4	6, K, 28								2, K, 30			-1	18	17	2	
-3	179	176	19	-4	148	147	24	-2	107	109	17								
2, K, 28				0, K, 29				4, K, 29				2	26	24	3	0, K, 32			
												-1	19	17	1				
4	0	0	OM	-1	0	0	OM	5, K, 29				4, K, 30			1	0	0	OM	
-5	10	4	2<	1	19	19	1								-2	25	24	3	
				4	12	11	2<												
3, K, 28				-2	13	11	2<	-3	0	0	OM	-2	24	21	5				

Table 3-2

5, K, 0	9, K, 1	-1 30 33 6	6, K, 3	-9 4 79 9
5 0 4 0<	-1 0 0 1M	-4 22 23 5	5, K, 4	
0, K, 1	-4 48 43 9	8, K, 2	-3 77 80 8	5, K, 4
	-7 25 24 5	-3 132 138 22	7, K, 3	-2 153 150 24
2 71 79 9	10, K, 1	-6 26 25 7	6, K, 4	
5 24 26 2		9, K, 2	-2 65 67 13	
8 43 44 4	-3 0 14 5<	-5 26 26 3	-1 76 79 9	
-1 79 87 4	-6 0 0 1M	8, K, 3	-4 225 235 30	
-4 39 45 3		-2 22 20 3		
-7 162 176 15	0, K, 2	-5 0 3 0<	7, K, 4	
		-8 25 24 3	-1 19 18 2	
1, K, 1	1 44 33 5	10, K, 2	-4 33 34 3	-3 136 133 21
	4 14 11 3		-7 26 27 2	-6 86 90 12
3 69 73 11	7 131 138 15	-4 20 17 2<	9, K, 3	8, K, 4
6 30 26 4	-2 55 53 3	-7 0 5 0<		
-3 275 289 18	-5 0 0 0M	0, K, 3	-3 15 13 3<	-2 52 53 9
-6 48 52 5	-8 0 0 0M		-6 133 138 21	-5 98 105 15
-9 0 0 0<				
2, K, 1	1, K, 2	0 369 384 7	10, K, 3	9, K, 4
	2 0 6 0<	3 56 52 7		
4 50 51 8	5 0 0 1M	6 76 78 8	-5 41 40 5	-1 76 78 8
7 18 18 4<	8 0 0 3M	9 34 35 5		-4 44 38 7
-5 35 37 2	-4 13 11 3	-3 53 53 3	0, K, 4	-7 65 66 10
-8 29 27 3	-7 0 0 1M	-6 54 59 5		
		-9 38 40 4	2 224 211 28	
	-6 88 92 13			
10, K, 4		-2 100 100 13	6, K, 7	-10 33 30 5
-3 71 73 14	9, K, 5	-5 78 79 10	-1 27 31 1	5, K, 8
-6 43 42 7	-2 79 80 12	8, K, 6	-4 232 232 22	-3 33 31 2
	-5 66 69 8			
0, K, 5	-8 67 67 10	-1 71 73 8	7, K, 7	6, K, 8
		-4 99 94 12		
1 209 200 12	10, K, 5	-7 35 32 7	-3 65 61 10	-2 0 2 0<
4 142 144 18			-6 56 58 8	-5 23 25 1
7 16 16 4	-4 69 68 10	9, K, 6		
-2 173 166 13	-7 54 54 8		8, K, 7	7, K, 8
-5 104 116 6		-3 31 30 5	-2 47 48 5	
-8 68 70 5	0, K, 6	-6 91 91 13	-5 67 66 5	-1 29 32 4
				-4 0 0 1M
1, K, 5	0 297 274 2	10, K, 6	9, K, 7	8, K, 8
	3 168 164 21			
2 187 177 33	6 124 125 16	-5 69 67 7	-1 49 50 5	
5 105 105 17	9 67 66 7		-4 0 0 0<	-3 184 173 26
8 70 67 10	-3 158 159 10	0, K, 7	-7 22 17 4	-6 35 36 3
-4 154 157 5	-6 94 102 6			
-7 93 99 4	-9 73 75 6	2 73 70 7	10, K, 7	9, K, 8
		5 66 64 8		
2, K, 5	1, K, 6	8 0 6 6<	-3 33 32 8	-2 38 36 3
		-1 87 79 5	-6 25 24 4	-5 0 7 0<
3 140 139 27	1 189 179 20	-4 90 91 5		-8 26 23 3
6 93 89 15	4 171 162 32	-7 170 177 9	0, K, 8	
-6 3 3 0<	7 71 68 12			
-9 66 69 4	-5 148 157 3	1, K, 7	1 16 11 2	10, K, 8
	-8 59 60 3		4 21 15 4	
3, K, 5		3 94 90 16	7 178 174 23	-4 28 22 6
	2, K, 6	6 44 43 6	-2 48 44 4	
4 103 98 18		-3 373 357 33	-5 22 25 3	0, K, 9

Table 3-5

0,K,15				1,K,16				6	29	27	2	-2	2	9	7<				
0	64	60	3	3	113	110	11	-6	145	145	11	5,K,18				-3	0	0	1M
3	112	111	9	6	77	75	11	3,K,17								-6	15	18	4<
6	90	85	10	-3	76	78	5					-1	242	238	18	8,K,19			
-3	110	110	9	-6	83	83	7	-4	54	53	6	-4	22	21	2				
-6	102	98	8	2,K,16				-2	180	182	0	6,K,18				-5	17	14	3<
1,K,15								-8	34	34	4					O,K,20			
1	137	137	9	4	87	83	10	4,K,17				-3	0	0	0<				
4	63	59	7	-5	92	91	9									1	49	51	0
7	59	57	10	-8	77	76	6	-1	44	41	4	7,K,18				4	37	36	3
-5	96	96	8	3,K,16				5,K,17				-2	35	32	1	-2	25	26	1
-8	52	48	5	5	53	54	7	-3	60	60	3	-5	26	25	2	-5	41	38	2
2,K,15				-1	94	97	6	6,K,17				8,K,18				1,K,20			
2	99	98	9	-7	53	52	4					-4	25	25	5	2	46	47	3
5	88	85	12	4,K,16				-2	22	21	2					5	40	38	2
-1	127	134	3					-5	26	25	3	O,K,19				-4	40	42	2
-7	71	70	4	-3	92	93	5	7,K,17				2	27	26	1	2,K,20			
3,K,15				5,K,16								5	0	20	8<	3,K,26			
3	110	106	12	-2	109	106	7	-1	41	37	7	-1	40	40	0	3	32	33	2
				4,K,21				7,K,22				-4	25	26	4	-4	25	26	4
2,K,20				-2	32	29	5					2	46	48	1	1,K,26			
-6	181	185	11	5,K,21				-3	25	26	2	-1	82	85	2				
3,K,20				O,K,23				3,K,24				2,K,24				2	60	62	2
4	0	2	0<	-1	221	216	19	O,K,23				3	48	49	3	-4	58	60	0
-2	231	238	5	-4	28	26	2	1	41	43	0					3,K,26			
4,K,20				6,K,21				4,K,24				-2	54	57	2				
-1	39	38	2	-3	21	18	2	-2	33	31	5	4,K,24				-2	54	57	2
5,K,20				1,K,23				5,K,24				-2	53	53	2	4,K,26			
-3	21	19	2<	7,K,21				1,K,23				5,K,24				-1	65	68	3
				2	32	32	3	2	32	32	3	-1	127	128	11	O,K,27			
-3	21	19	2<	-2	0	3	0<	5	31	30	2	-4	51	52	5				
6,K,20				-5	44	43	5	-4	31	29	2	6,K,24				0	70	72	1
				O,K,22				2,K,23				6,K,24				3	25	23	4
-2	35	32	3	2	3	15	8<	-3	35	37	2	-3	52	50	4	-3	28	27	1
-5	25	19	3	5	2	10	6	-6	39	44	3	O,K,25				1,K,27			
7,K,20				-1	21	20	4									1	29	29	2
-1	0	4	0<	-4	23	22	3	3,K,23				2	69	70	1	2,K,27			
-4	52	49	4	1,K,22				-2	44	43	2	-1	77	80	1				
O,K,21				3	29	30	4	4,K,23				1,K,25				2	31	29	2
0	269	276	0	-3	176	182	5									-1	27	29	1
3	35	35	2	-6	0	5	0<	-1	41	38	5	3	75	80	0	4,K,27			
6	0	4	0<	2,K,22				5,K,23				-3	94	98	3	-2	22	21	5
-3	46	47	3	4	0	0	1M	-3	27	30	3	2,K,25				O,K,28			

1,K,21				3,K,22				6,K,23				3,K,25				2	0	2	0<		
1	32	35	1	-1	0	0	1M	-2	33	33	3	-1	63	66	2	-1	22	17	5		
4	214	216	17	-7	18	20	3<	-5	31	26	2										
-5	4	12	10						0,K,24				4,K,25				-3	181	191	2	
2,K,21				4,K,22				0,K,24				4,K,25				1,K,28					
				-3	0	9	0<	0	154	159	2	-3	46	48	1						
-2	37	39	3					3	70	72	1										
5	19	12	3<		5,K,22				-3	52	52	4		5,K,25				-1	0	4	0<
-1	20	17	4						1,K,24				0,K,29								
-7	38	36	1	-2	30	28	2					-2	61	64	4						
3,K,21				6,K,22				1,K,24				0,K,26				0,K,29					
								1	59	62	1					1	16	19	4<		
3	15	8	3<	-1	0	0	1M	4	125	128	3										
				-4	146	145	6	-5	78	82	3	1	60	63	0						
									2,K,24				0,K,26				0,K,29				
												4	56	56	4						
												-2	72	75	1						

Table 3-6