

AM-92-498

Crystal structure, H positions, and the Se lone pair of synthetic chalcomenite, $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_2[\text{SeO}_3]$

Paul D. Robinson, P. K. Sen Gupta, George H. Swihart, Larry Houk

For deposit: Tables 2b and 3

American Mineralogist, 77, 7-8, 834-838.

Table 2b. Anisotropic temperature coefficients

Atom	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
Se	0.0085(3)	0.0125(3)	0.0092(3)	-0.0003(2)	0.0005(3)	-0.0004(2)
Cu	0.0167(5)	0.0187(4)	0.0100(4)	0.0092(3)	0.0008(4)	0.0001(3)
O1	0.014(2)	0.021(2)	0.013(2)	0.004(2)	-0.002(2)	0.005(2)
O2	0.019(2)	0.019(2)	0.016(2)	-0.002(2)	0.002(2)	-0.006(2)
O3	0.016(2)	0.016(2)	0.022(2)	-0.002(2)	-0.004(2)	0.001(2)
O4	0.021(2)	0.025(2)	0.018(2)	0.011(2)	0.004(3)	0.005(2)
O5	0.022(3)	0.033(2)	0.025(2)	-0.008(2)	-0.004(3)	0.005(3)

note: Anisotropic temperature coefficients are defined as:

$$T = \exp[-2\pi^2(a^2U_{11}h^2 + b^2U_{22}k^2 + c^2U_{33}l^2 + 2a*b*U_{12}hk + 2a*c*U_{13}hl + 2b*c*U_{23}kl)]$$

Numbers in the parentheses in the table are esd's and refer to the last digit given.

Table 3. Observed and calculated structure factors
of synthetic chalcocite

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
^^^^^^ h = 0 ^^^^^^^					6	-4	64	63	9	2	-3	860	856	22
					6	-3	755	744	19	2	-2	575	598	15
0	-8	400	404	11	6	-2	757	758	19	2	-1	1021	1038	26
0	-6	81	72	10	6	-1	401	385	10	2	0	1205	1177	30
0	-4	1135	1125	28	6	0	230	230	7	3	-8	203	207	10
0	-2	103	93	5	7	-6	421	403	11	3	-7	633	645	16
1	-8	74	72	13*	7	-5	239	234	8	3	-6	75	75	10
1	-7	222	222	9	7	-4	142	128	7	3	-5	856	866	22
1	-6	781	802	20	7	-3	428	423	11	3	-4	309	312	9
1	-5	209	225	8	7	-2	163	149	8	3	-3	769	771	19
1	-4	87	74	6	7	-1	842	834	21	3	-2	365	380	10
1	-3	790	803	20	8	-5	536	530	14	3	-1	361	350	9
1	-2	1043	1025	26	8	-4	370	364	10	3	0	459	453	12
1	-1	453	442	11	8	-3	35	42	23*	4	-8	442	448	12
2	-8	10	37	27*	8	-2	327	314	9	4	-7	148	154	8
2	-7	516	538	14	8	-1	639	638	16	4	-6	444	450	12
2	-6	175	170	9	8	0	518	518	13	4	-5	388	383	11
2	-5	521	518	13	9	-4	535	523	14	4	-4	746	754	19
2	-4	313	317	9	9	-3	184	180	9	4	-3	565	560	14
2	-3	1112	1146	28	9	-2	72	66	10	4	-2	456	474	12
2	-2	314	321	8	9	-1	99	91	7	4	-1	723	725	18
2	-1	517	504	13	10	-3	188	186	9	4	0	587	596	15
2	0	167	145	5	10	-2	705	700	18	5	-7	196	197	9
3	-8	236	240	9	10	-1	102	100	8	5	-6	436	424	12
3	-7	0	36	26*	10	0	84	87	9	5	-5	102	107	7
3	-6	746	749	19	^^^^^^ h = 1 ^^^^^^^					5	-4	511	515	13
3	-5	86	72	7	5	-3	204	206	7	5	-2	947	934	24
3	-4	252	256	7	5	-1	401	383	10	5	-1	401	383	10
3	-3	1037	1025	26	0	-8	508	512	14	5	0	737	736	19
3	-2	366	368	9	0	-7	91	95	10	6	-7	110	106	8
3	-1	1179	1162	30	0	-6	569	562	15	6	-6	322	313	10
4	-8	300	303	10	0	-5	349	329	10	6	-5	195	191	8
4	-7	210	217	9	0	-4	923	911	23	6	-4	320	326	9
4	-6	42	37	16*	0	-3	670	677	17	6	-3	482	479	13
4	-5	312	310	9	0	-2	678	670	17	6	-2	499	490	13
4	-4	681	669	17	0	-1	1132	1121	28	6	-1	825	825	21
4	-3	209	212	7	1	-8	452	458	12	6	0	324	321	9
4	-2	342	325	9	1	-7	439	441	12	7	-6	185	186	9
4	-1	389	408	10	1	-6	255	244	9	7	-5	600	598	16
4	0	1564	1523	39	1	-5	681	698	17	7	-4	41	21	24*
5	-7	464	458	12	1	-4	725	730	18	7	-3	537	541	14
5	-6	538	537	14	1	-3	480	473	12	7	-2	260	255	8
5	-5	504	504	13	1	-2	910	912	23	7	-1	282	272	8
5	-4	624	621	16	1	-1	423	425	11	7	0	111	106	6
5	-3	678	666	17	2	-8	133	140	8	8	-5	158	163	8
5	-2	480	485	12	2	-7	315	309	10	8	-4	372	372	10
5	-1	226	219	7	2	-6	118	99	7	8	-3	298	290	9
6	-7	303	301	10	2	-5	270	278	9	8	-2	467	457	12
6	-6	94	97	8	2	-4	521	535	13	8	-1	486	485	13

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF					
8	0	364	368	10	4	-6	49	53	16*	0	-4	314	308	9					
9	-4	384	380	11	4	-5	238	234	8	0	-3	670	663	17					
9	-3	168	167	9	4	-4	265	274	8	0	-2	719	715	18					
9	-2	418	406	11	4	-3	594	616	15	0	-1	452	455	12					
9	-1	76	69	9	4	-2	1190	1213	30	1	-8	265	258	10					
9	0	613	608	16	4	-1	392	402	10	1	-7	385	375	11					
10	-3	281	291	9	4	0	60	46	7	1	-6	437	420	12					
10	-2	207	199	9	5	-7	304	312	10	1	-5	556	544	14					
10	-1	430	435	12	5	-6	479	489	13	1	-4	454	454	12					
10	0	49	64	25*	5	-5	332	334	10	1	-3	661	658	17					
^^^^^^ h = 2 ^^^^^^^																			
					5	-4	596	597	15	1	-2	429	436	11					
					5	-3	300	295	9	1	-1	346	335	9					
					5	-2	430	442	11	1	0	1000	1007	25					
0	-8	173	163	8	5	-1	313	302	9	2	-7	0	23	28*					
0	-7	166	149	8	5	0	344	332	9	2	-6	22	42	20*					
0	-6	42	77	26*	6	-6	261	261	9	2	-5	142	145	8					
0	-5	263	268	9	6	-5	553	564	14	2	-4	638	641	16					
0	-4	176	179	8	6	-4	335	333	10	2	-3	758	776	19					
0	-3	229	227	7	6	-3	385	380	10	2	-2	232	232	7					
0	-2	885	918	22	6	-2	271	271	8	2	-1	608	633	15					
0	-1	58	59	8	6	-1	450	452	12	2	0	1190	1198	30					
0	0	502	482	13	6	0	929	958	23	3	-7	510	517	14					
1	-8	614	603	16	7	-6	314	305	10	3	-6	338	338	10					
1	-7	580	583	15	7	-5	95	84	9	3	-5	578	601	15					
1	-6	277	288	9	7	-4	412	408	11	3	-4	405	401	11					
1	-5	612	612	16	7	-3	422	422	11	3	-3	816	813	21					
1	-4	832	840	21	7	-2	323	319	9	3	-2	233	226	8					
1	-3	375	374	10	7	-1	582	576	15	3	-1	295	295	8					
1	-2	569	551	14	7	0	137	130	7	3	0	853	848	21					
1	-1	855	873	21	8	-5	245	217	9	4	-7	171	173	8					
1	0	477	476	12	8	-4	171	181	7	4	-6	701	712	18					
2	-8	129	124	8	8	-3	498	501	13	4	-5	119	113	7					
2	-7	571	589	15	8	-2	480	470	13	4	-4	444	444	12					
2	-6	324	330	10	8	-1	210	208	8	4	-3	527	540	14					
2	-5	1033	1040	26	8	0	110	115	7	4	-2	601	606	15					
2	-4	41	44	15*	9	-4	354	349	10	4	-1	516	512	13					
2	-3	44	54	12*	9	-3	212	223	9	4	0	227	225	7					
2	-2	197	195	7	9	-2	331	333	10	5	-7	144	152	8					
2	-1	1168	1187	29	9	-1	89	84	8	5	-6	343	341	10					
2	0	690	711	17	9	0	104	100	7	5	-5	94	91	8					
3	-8	494	505	13	10	-2	70	51	11	5	-4	315	313	9					
3	-7	325	322	10	10	-1	146	154	8	5	-3	449	453	12					
3	-6	88	75	9	10	0	569	567	15	5	-2	540	561	14					
3	-5	252	257	9						5	-1	411	430	11					
3	-4	894	898	23	^^^^^^ h = 3 ^^^^^^^														
3	-3	368	381	10						6	-6	149	136	7					
3	-2	115	112	6	0	-8	194	193	8	6	-5	212	204	9					
3	-1	562	575	14	0	-7	188	177	10	6	-4	433	448	12					
3	0	67	64	6	0	-6	779	776	20	6	-3	445	443	12					
4	-7	293	306	10	0	-5	50	57	25*	6	-2	152	154	7					

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF										
6	-1	714	730	18	3	-3	663	666	17	1	-2	669	666	17										
6	0	474	488	12	3	-2	639	653	16	1	-1	609	602	16										
7	-5	501	511	13	3	-1	706	723	18	1	0	323	328	9										
7	-4	244	246	9	3	0	152	152	8	2	-6	0	45	28*										
7	-3	514	511	13	4	-6	150	143	7	2	-5	437	428	12										
7	-2	184	169	8	4	-5	410	406	11	2	-4	42	22	22*										
7	-1	253	250	8	4	-4	423	424	11	2	-3	288	290	9										
7	0	137	133	7	4	-3	52	47	14*	2	-2	520	526	14										
8	-4	256	243	9	4	-2	332	337	9	2	-1	761	760	19										
8	-3	139	146	7	4	-1	442	447	12	2	0	42	32	25*										
8	-2	487	505	13	4	0	938	954	24	3	-6	260	278	10										
8	-1	397	396	11	5	-6	356	361	11	3	-5	510	515	14										
8	0	124	124	6	5	-5	407	392	11	3	-4	310	299	10										
9	-3	112	106	8	5	-4	461	465	12	3	-3	289	289	9										
9	-2	390	390	11	5	-3	407	409	11	3	-2	500	525	13										
9	-1	266	271	9	5	-2	456	456	12	3	-1	233	234	9										
9	0	456	460	12	5	-1	199	202	8	3	0	98	82	8										
10	-1	315	326	10	5	0	109	93	7	4	-6	105	81	9										
10	0	113	118	8	6	-5	265	257	9	4	-5	368	371	11										
^^^^^^ h = 4 ^^^^^^^																								
0	-7	288	287	10	6	-4	205	216	9	4	-4	592	592	15										
0	-6	68	53	13*	6	-3	573	575	15	4	-3	323	316	10										
0	-5	337	331	10	6	-2	514	522	13	4	-2	172	164	9										
0	-4	667	656	17	6	-1	167	175	9	4	-1	307	310	9										
0	-3	160	157	7	6	0	154	155	7	4	0	326	327	10										
0	-2	88	88	7	7	-5	241	240	9	5	-5	171	177	8										
0	-1	707	698	18	7	-4	155	157	8	5	-4	334	337	10										
0	0	1833	1801	46	7	-3	325	331	10	5	-3	182	188	9										
1	-7	130	123	8	7	-2	239	228	9	5	-2	615	614	16										
1	-6	552	544	15	7	-1	633	647	16	5	-1	490	504	13										
1	-5	266	263	9	7	0	350	359	10	5	0	503	513	13										
1	-4	127	133	7	8	-3	60	51	14*	6	-4	46	23	18*										
1	-3	547	556	14	8	-2	348	346	10	6	-3	320	319	10										
1	-2	713	707	18	8	-1	430	443	12	6	-2	390	389	11										
1	-1	524	521	14	8	0	355	371	10	6	-1	473	471	13										
1	0	264	255	8	9	-2	200	204	10	6	0	73	78	10										
2	-7	377	384	11	9	-1	98	85	9	7	-3	278	291	9										
2	-6	107	108	9	9	0	179	180	10	7	-2	431	435	12										
2	-5	432	433	12	^^^^^^ h = 5 ^^^^^^^																			
2	-4	597	599	15	0	-6	176	168	8	7	-1	134	132	7										
2	-3	690	695	18	0	-5	439	432	12	7	0	258	263	9										
2	-2	343	345	10	0	-4	732	735	19	8	-2	35	69	27*										
2	-1	260	258	8	0	-3	80	58	9	8	-1	298	305	10										
2	0	0	4	23*	0	-2	243	234	8	8	0	381	380	11										
3	-7	77	82	13	0	-1	644	629	16	^^^^^^ h = 6 ^^^^^^^														
3	-6	519	525	14	1	-6	55	60	17*	0	-5	315	311	10										
3	-5	185	196	9	1	-5	434	435	12	0	-4	85	89	10										
3	-4	136	136	7	1	-4	374	361	11	0	-3	419	421	12										
					1	-3	157	147	7	0	-2	541	526	14										
										0	-1	194	195	9										

k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF	k	l	Fo	Fc	sigF
0	0	418	423	11	2	0	506	498	14					
1	-5	276	276	10	3	-3	426	412	12					
1	-4	480	456	13	3	-2	222	217	10					
1	-3	490	479	13	3	-1	193	197	10					
1	-2	186	190	9	3	0	467	476	13					
1	-1	316	305	10	4	-2	378	363	11					
1	0	539	554	14	4	-1	151	152	7					
2	-5	528	526	14	4	0	24	84	29*					
2	-4	115	106	8	5	0	258	263	10					
2	-3	187	170	9										
2	-2	319	304	10										
2	-1	367	363	10										
2	0	114	115	8										
3	-5	116	97	9										
3	-4	356	352	11										
3	-3	462	477	13										
3	-2	126	119	7										
3	-1	446	454	12										
3	0	297	292	9										
4	-4	337	337	10										
4	-3	440	431	12										
4	-2	459	464	12										
4	-1	308	319	10										
4	0	185	178	9										
5	-4	375	367	11										
5	-3	273	280	10										
5	-2	336	357	10										
5	-1	173	177	8										
5	0	471	470	13										
6	-3	234	228	10										
6	-2	300	296	10										
6	-1	233	222	9										
6	0	405	402	11										
7	-1	402	419	11										
7	0	244	264	9										

^^^^^^ h = 7 ^^^^^^^

0	-4	59	26	16*
0	-3	337	317	10
0	-2	429	410	12
0	-1	74	62	12
1	-4	245	239	10
1	-3	393	395	11
1	-2	174	171	8
1	-1	372	393	11
1	0	545	533	14
2	-3	380	386	11
2	-2	198	212	10
2	-1	273	277	10