

AM-92-506

High-pressure crystal chemistry of cubanite, CuFe_2S_3

Catherine McCammon, Jinmin Zhang, Robert M. Hazen, Larry W. Finger

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 77, 9-10, 937-944., pp 1

1-3, 1-2, 1-2, 1-2

Table 4A

Cubanite in Air			Page 1			Items with Sg<0 are Rejected											
h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg
2	0	0	1478	1344	-112	1	13	0	117	105	80	1	14	1	212	216	47
4	0	0	1390	1359	107	3	13	0	185	185	55	2	14	1	78	36	160
6	0	0	1764	1710	135	5	13	0	274	270	49	3	14	1	23	6	-560
8	0	0	539	505	55	0	14	0	174	171	55	1	15	1	68	52	-252
1	1	0	21	24	-235	2	14	0	82	86	230	2	15	1	163	154	76
3	1	0	75	66	101	4	14	0	42	54	-415	0	0	2	1331	1389	101
5	1	0	51	53	-265	1	15	0	556	561	55	1	0	2	276	271	26
7	1	0	60	50	-333	1	0	1	473	450	37	2	0	2	626	621	50
9	1	0	67	39	-291	2	0	1	424	430	36	3	0	2	437	435	39
0	2	0	225	221	20	3	0	1	41	41	-169	4	0	2	585	581	50
2	2	0	128	125	44	4	0	1	386	388	38	5	0	2	147	142	58
4	2	0	19	25	-478	5	0	1	292	289	38	6	0	2	726	742	62
6	2	0	49	57	-345	6	0	1	78	85	141	7	0	2	148	154	71
8	2	0	39	41	-499	7	0	1	172	177	65	8	0	2	193	182	58
1	3	0	1670	1530	-126	8	0	1	84	63	135	0	1	2	1381	1420	104
3	3	0	2254	2052	-170	9	0	1	46	40	-409	1	1	2	84	80	39
5	3	0	954	937	77	1	1	1	38	11	-199	2	1	2	707	705	56
7	3	0	925	877	77	2	1	1	1027	1004	79	3	1	2	127	115	40
0	4	0	39	40	-165	3	1	1	32	4	-277	4	1	2	552	548	48
2	4	0	16	8	-408	4	1	1	751	758	61	5	1	2	62	21	-318
4	4	0	52	64	-262	5	1	1	29	17	-508	6	1	2	690	698	60
6	4	0	83	63	113	6	1	1	49	30	-320	7	1	2	36	43	-344
8	4	0	48	5	-383	7	1	1	51	39	-438	8	1	2	208	212	54
1	5	0	121	126	27	8	1	1	370	345	48	0	2	2	122	117	30
3	5	0	207	210	33	9	1	1	48	4	-495	1	2	2	726	721	57
5	5	0	98	98	79	1	2	1	1026	1005	78	2	2	2	53	41	112
7	5	0	22	4	-562	2	2	1	54	59	97	2	2	2	1067	1101	83
0	6	0	2327	2379	175	3	2	1	40	24	-229	3	2	2	65	54	124
2	6	0	1242	1239	96	4	2	1	41	25	-291	4	2	2	387	390	41
4	6	0	1133	1153	89	5	2	1	609	605	53	5	2	2	279	274	44
6	6	0	1491	1491	116	6	2	1	34	6	-375	6	2	2	45	4	-355
8	6	0	447	432	53	7	2	1	386	372	48	8	2	2	497	491	40
1	7	0	98	78	80	8	2	1	23	24	-580	0	3	2	274	274	44
3	7	0	129	123	66	1	3	1	448	456	37	1	3	2	274	274	44
5	7	0	41	21	-349	2	3	1	400	384	38	2	3	2	214	212	27
7	7	0	99	92	143	3	3	1	28	45	-357	3	3	2	1082	1043	82
0	8	0	264	264	31	4	3	1	276	269	35	4	3	2	216	208	36
2	8	0	131	133	57	5	3	1	222	211	41	5	3	2	328	340	40
4	8	0	91	64	105	6	3	1	65	48	215	6	3	2	277	283	41
6	8	0	122	108	85	7	3	1	150	144	70	7	3	2	395	391	46
8	8	0	1101	1100	86	8	3	1	201	191	55	8	3	2	122	90	95
1	9	0	1743	1725	134	1	4	1	1013	1002	78	0	4	2	151	154	25
3	9	0	634	651	58	2	4	1	52	40	137	1	4	2	721	721	57
5	9	0	650	649	62	3	4	1	44	24	-215	2	4	2	54	59	97
7	9	0	183	180	34	4	4	1	51	48	-246	3	4	2	1088	1117	85
0	10	0	67	71	161	5	4	1	834	824	65	3	4	2	63	68	205
2	10	0	116	109	86	6	4	1	21	5	-521	4	4	2	385	403	42
4	10	0	141	144	83	7	4	1	407	392	47	5	4	2	79	70	118
6	10	0	99	102	77	8	4	1	48	55	-390	6	4	2	299	291	45
8	10	0	202	180	47	1	5	1	83	89	78	7	4	2	48	5	-384
1	11	0	71	84	172	2	5	1	765	758	61	8	4	2	1082	1105	83
3	11	0	1501	1520	116	3	5	1	37	4	-307	0	5	2	15	39	-378
5	11	0	717	708	62	4	5	1	565	569	50	1	5	2	511	513	44
7	11	0	680	702	62	5	5	1	21	28	-514	2	5	2	50	55	-228
0	12	0	680	702	62	5	5	1	21	28	-514	3	5	2	50	55	-228
2	12	0	680	702	62	5	5	1	21	28	-514	3	5	2	50	55	-228
4	12	0	680	702	62	5	5	1	21	28	-514	3	5	2	50	55	-228

Cubanite in Air		Page 2		Items with Sg<0 are Rejected			
h	k	h	k	h	k	h	k
2	12	2	289	3	399	4	644
3	12	2	232	3	241	4	40
4	12	2	319	3	102	4	309
5	12	2	101	3	861	4	101
6	13	2	614	3	81	4	200
7	13	2	41	4	79	5	66
8	13	2	299	4	422	6	277
9	13	2	60	4	139	7	303
10	13	2	251	4	287	8	26
11	14	2	13	4	108	9	48
12	14	2	170	4	370	10	43
13	14	2	68	4	22	11	27
14	14	2	260	4	135	12	49
15	15	2	181	4	58	13	40
16	15	2	266	4	33	14	21
17	16	2	686	4	19	15	35
18	16	3	686	4	39	16	29
19	16	3	1599	4	116	17	66
20	17	3	31	4	48	18	124
21	17	3	1302	4	7	19	129
22	17	3	487	4	220	20	34
23	17	3	127	4	36	21	67
24	17	3	291	4	20	22	57
25	17	3	763	4	30	23	47
26	18	3	187	4	128	24	60
27	18	3	997	4	38	25	60
28	18	3	44	4	67	26	94
29	18	3	774	4	54	27	210
30	19	3	92	4	24	28	38
31	19	3	52	4	46	29	38
32	19	3	47	4	52	30	37
33	19	3	389	4	16	31	162
34	20	3	974	4	317	32	157
35	20	3	193	4	35	33	182
36	20	3	58	4	22	34	30
37	20	3	151	4	7	35	124
38	21	3	630	4	335	36	109
39	21	3	42	4	29	37	22
40	21	3	395	4	166	38	47
41	21	3	77	4	397	39	183
42	21	3	1584	4	88	40	403
43	22	3	619	4	87	41	87
44	22	3	104	4	651	42	651
45	22	3	465	4	33	43	33
46	22	3	1177	4	39	44	87
47	23	3	60	4	246	45	48
48	23	3	753	4	59	46	48
49	23	3	298	4	78	47	3
50	23	3	99	4	198	48	3
51	24	3	38	4	127	49	53
52	24	3	91	4	37	50	49
53	24	3	889	4	30	51	21
54	24	3	59	4	6	52	79
55	24	3	424	4	442	53	28
56	24	3	38	4	11	54	28
57	24	3	424	4	4	55	281
58	24	3	38	4	0	56	43
59	24	3	424	4	12	57	28
60	24	3	424	4	12	58	140
61	24	3	424	4	12	59	55
62	24	3	424	4	12	60	55
63	24	3	424	4	12	61	55
64	24	3	424	4	12	62	55
65	24	3	424	4	12	63	55
66	24	3	424	4	12	64	55
67	24	3	424	4	12	65	55
68	24	3	424	4	12	66	55
69	24	3	424	4	12	67	55
70	24	3	424	4	12	68	55
71	24	3	424	4	12	69	55
72	24	3	424	4	12	70	55
73	24	3	424	4	12	71	55
74	24	3	424	4	12	72	55
75	24	3	424	4	12	73	55
76	24	3	424	4	12	74	55
77	24	3	424	4	12	75	55
78	24	3	424	4	12	76	55
79	24	3	424	4	12	77	55
80	24	3	424	4	12	78	55
81	24	3	424	4	12	79	55
82	24	3	424	4	12	80	55
83	24	3	424	4	12	81	55
84	24	3	424	4	12	82	55
85	24	3	424	4	12	83	55
86	24	3	424	4	12	84	55
87	24	3	424	4	12	85	55
88	24	3	424	4	12	86	55
89	24	3	424	4	12	87	55
90	24	3	424	4	12	88	55
91	24	3	424	4	12	89	55
92	24	3	424	4	12	90	55
93	24	3	424	4	12	91	55
94	24	3	424	4	12	92	55
95	24	3	424	4	12	93	55
96	24	3	424	4	12	94	55
97	24	3	424	4	12	95	55
98	24	3	424	4	12	96	55
99	24	3	424	4	12	97	55
100	24	3	424	4	12	98	55

Table 4A (cont)

Cubanite in Air		Page 3		Items with Sg<0 are Rejected		50Sg																											
h	k	h	k	h	k	h	k																										
2	9	5	119	110	78	69	106	105	6	2	2	6	105	106	69	4	6	6	141	142	70	1	1	7	118	114	65	3	7	7	68	5	180
3	9	5	56	49	-294	66	784	787	83	104	83	104	784	784	66	5	6	6	129	117	93	2	1	7	260	259	41	1	8	7	158	147	61
4	9	5	91	80	209	104	83	98	83	104	83	104	83	840	69	3	1	7	838	840	69	3	1	7	42	3	-315	2	8	7	72	88	186
5	9	5	826	823	72	45	278	282	278	45	278	45	278	384	75	4	1	7	118	103	75	4	1	7	229	222	46	1	9	7	61	56	202
1	10	5	182	185	51	83	137	144	137	83	137	83	384	44	4	5	1	7	389	384	44	5	1	7	47	64	-324	0	8	8	1013	1019	82
2	10	5	137	147	67	45	469	472	469	45	469	45	188	49	4	1	2	7	185	188	49	1	2	7	253	250	40	1	0	8	248	253	45
3	10	5	58	4	-298	48	155	160	155	48	155	48	370	46	2	2	2	7	363	370	46	2	2	7	100	112	83	2	0	8	472	469	50
4	10	5	119	122	105	39	196	205	196	39	196	39	41	82	468	3	2	7	41	82	468	3	2	7	21	7	-519	3	0	8	446	443	50
1	11	5	64	56	-243	40	264	261	264	40	264	40	56	142	143	56	2	7	142	143	56	2	7	97	88	127	0	1	8	304	299	44	
2	11	5	141	112	70	42	250	250	250	42	250	42	295	42	5	2	7	304	295	42	5	2	7	169	170	72	1	1	8	21	35	-533	
3	11	5	69	9	-281	150	69	85	69	150	69	150	69	70	-316	2	1	3	68	70	-316	2	1	3	52	46	-282	2	1	8	147	134	65
1	12	5	49	75	-378	48	331	315	331	48	331	48	52	52	52	2	3	7	520	512	52	2	3	7	153	150	57	3	1	8	50	61	-305
2	12	5	822	804	71	38	234	233	234	38	234	38	57	56	-345	3	3	7	57	56	-345	3	3	7	30	12	-477	0	2	8	115	102	98
0	0	6	296	299	37	46	483	487	483	46	483	46	366	44	4	4	3	7	360	366	44	4	4	3	148	146	68	1	2	8	133	139	68
1	0	6	256	257	36	87	113	97	113	87	113	87	125	68	5	3	7	125	120	68	5	3	7	78	59	185	2	2	8	48	52	-411	
2	0	6	118	122	65	68	823	823	823	68	823	68	155	62	1	4	7	159	155	62	1	4	7	276	274	40	3	2	8	250	246	47	
3	0	6	441	440	45	195	89	98	89	195	89	195	203	52	2	4	7	203	203	52	2	4	7	89	84	123	0	3	8	476	476	50	
4	0	6	170	162	50	46	295	308	295	46	295	46	198	53	3	4	7	198	198	53	3	4	7	50	7	-277	1	3	8	512	504	52	
5	0	6	132	130	72	72	148	147	148	72	148	72	187	58	4	4	7	187	179	58	4	4	7	63	67	-346	2	3	8	209	213	49	
6	0	6	192	195	59	63	762	751	762	63	762	63	355	46	1	5	7	355	355	46	1	5	7	103	112	80	3	3	8	877	879	74	
0	1	6	957	974	78	79	90	105	90	79	90	79	87	187	2	5	7	80	87	187	2	5	7	195	189	45	0	4	8	59	44	201	
1	1	6	126	116	52	41	345	344	345	41	345	41	623	61	3	5	7	646	623	61	3	5	7	60	1	-245	1	4	8	153	158	66	
2	1	6	445	444	44	52	163	160	163	52	163	52	412	49	4	5	7	422	412	49	4	5	7	169	164	62	2	4	8	72	24	170	
3	1	6	213	208	40	44	327	325	327	44	327	44	51	-566	1	6	7	23	51	-566	1	6	7	144	145	63	0	5	8	218	229	47	
4	1	6	408	410	44	191	71	74	71	191	71	191	163	49	2	6	7	168	163	49	2	6	7	53	58	-272	1	5	8	50	52	-357	
5	1	6	71	89	180	39	268	268	267	39	268	39	51	-414	3	6	7	26	51	-414	3	6	7	36	8	-387	2	5	8	100	101	131	
6	1	6	573	574	56	39	225	225	225	39	225	39	41	9	-332	4	6	7	41	9	-332	4	6	7	51	47	-376	0	6	8	880	879	74
0	2	6	220	220	38	57	109	126	109	57	109	57	68	44	162	1	7	7	68	44	162	1	7	7	76	63	206	1	6	8	222	219	48
1	2	6	460	462	44	45	389	408	389	45	389	45	92	181	5	5	0	7	92	132	181	5	5	0	234	234	46	1	6	8	8	8	8

TABLE 4B (cont.)

Cubanite at 0 GPa in Cell			Page 2			Items with $Sg < 0$ are Rejected					
h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg
0	10	6	208	166	307	2	1	7	234	218	220
1	10	6	289	297	216	3	1	7	135	16	-482
2	10	6	98	68	-813	1	2	7	168	200	521
3	10	6	409	500	166	2	2	7	104	111	-667
0	11	6	372	339	186	3	2	7	124	9	-730
1	11	6	84	45	-847	1	3	7	120	44	-561
1	0	7	184	212	292	2	3	7	117	207	-615
2	0	7	61	70	-919	3	3	7	80	54	-841
3	0	7	149	28	374	1	4	7	209	238	280
1	1	7	118	125	-585	2	4	7	139	95	470
1	8	7	144	96	190	1	8	7	123	4	-554
2	8	7	49	80	-1214	2	8	7	79	112	-866
1	9	7	160	42	-428	2	5	7	189	137	329
1	0	8	258	230	234	3	5	7	101	14	-751
2	0	8	365	356	171	1	6	7	111	177	-644
3	0	8	398	387	163	2	6	7	122	67	-608
1	1	8	108	10	-773	3	6	7	84	21	-832
2	1	8	142	97	-577	1	7	7	99	83	-910
3	1	8	118	13	-677	2	7	7	217	210	283
1	2	8	48	124	-1181	3	7	7	50	12	-1247
2	2	8	143	179	421	1	3	8	143	179	421
3	3	8	708	703	116	2	3	8	708	703	116
1	4	8	116	138	-889	3	4	8	116	138	-889
2	4	8	63	2	-989	2	4	8	63	2	-989
1	5	8	90	31	-1193	1	5	8	90	31	-1193
2	5	8	75	71	-892	2	5	8	75	71	-892
1	6	8	186	193	-732	1	6	8	186	193	-732

TABLE 4C (cont.)

Cubanite at 1.7 GPa			Page 2			Items with $Sg < 0$ are Rejected										
h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg					
0	9	6	182	281	352	3	7	7	97	24-1015	1	2	8	74	57	-813
1	9	6	121	151	-494	1	1	7	135	95-502	2	2	8	158	10	485
2	9	6	131	113	-623	2	1	7	282	191-180	3	2	8	148	91	451
3	9	6	247	243	227	3	1	7	109	29-686	1	3	8	401	421	149
0	10	6	130	138	-546	1	2	7	185	172-441	1	0	8	118	143	-743
1	10	6	216	257	265	2	2	7	139	76-458	2	0	8	367	354	159
2	10	6	47	50-1163		3	2	7	46	6-1139	3	0	8	275	297	214
0	11	6	312	285	215	1	3	7	73	28-782	1	1	8	98	2	-749
1	11	6	91	60	-857	2	3	7	188	213-275	2	1	8	75	44	-887
1	0	7	247	215	184	3	3	7	87	31-769	2	1	8	81	6	-857
2	0	7	44	28-1111		1	4	7	222	198-231	3	1	8	73	29-1013	

TABLE 4D (cont)

Cubanite at 3.8 GPa		Page 2		Items with $Sg \leq 0$ are Rejected		10Fo 10Fc 50Sg		10Fo 10Fc 50Sg			
h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg	h	k	l	10Fo	10Fc	50Sg
2	6	6	211	251	365	1	9	6	129	217	-843
3	6	6	304	321	259	2	9	6	159	103	-735
4	6	6	235	203	324	3	9	6	333	368	268
0	7	6	629	604	145	1	10	6	219	249	704
1	7	6	114	102	-819	2	10	6	139	9	-893
2	7	6	274	253	285	1	0	7	261	243	277
3	7	6	216	104	376	2	0	7	68	85	-1088
0	8	6	208	157	411	3	0	7	192	87	386
1	8	6	248	209	333	4	0	7	131	54	-856
2	8	6	153	20	-657	1	1	7	138	151	-803
3	8	6	275	351	287	2	1	7	246	204	302
0	9	6	289	300	302	3	1	7	84	112	-1003
3	4	7	64	45	-2372	3	4	7	55	127	-1384
4	4	7	116	172	-976	4	4	7	150	170	-696
1	5	7	55	137	-1382	2	2	7	122	91	-800
2	5	7	136	144	-869	3	2	7	55	38	-1375
3	5	7	57	91	-1371	4	2	7	168	185	-665
4	5	7	108	91	-887	1	3	7	54	88	-1367
1	6	7	98	188	-930	2	3	7	200	263	381
2	6	7	55	63	-1382	3	3	7	97	26	-1017
3	6	7	142	73	-1250	4	3	7	160	139	-642
1	7	7	78	109	-1135	1	4	7	250	192	336
2	7	7	253	188	324	2	4	7	55	74	-1379
3	7	7	175	94	-647	4	1	7	55	127	-1384
7	7	7	106	96	-1030	1	2	7	150	170	-696
7	7	7	126	73	-852	2	2	7	122	91	-800
8	7	7	481	395	184	3	2	7	55	38	-1375
8	8	7	315	280	261	4	2	7	168	185	-665
1	8	8	122	18	-852	1	3	7	54	88	-1367
1	8	8	126	78	-2026	2	3	7	200	263	381
2	8	8	57	44	-1426	3	3	7	97	26	-1017
2	8	8	139	36	-849	4	3	7	160	139	-642
3	8	8	101	142	-801	1	4	7	250	192	336
4	8	8	165	68	-593	2	4	7	55	74	-1379