

AM-86-291

F. C. Hawthorne

Lammerite,..., a modulated close-packed structure

Table 3. Anisotropic temperature factor coefficients and structure factor tables

Am. Min., 71, 1-2

Am-86-291

Table 3. Anisotropic temperature factor coefficients and structure factor tables for lammerite.

FOR DEPOSIT

TABLE 3. ANISOTROPIC TEMPERATURE FACTOR COEFFICIENTS FOR LAMMERITE

	U_{11}^*	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Cu(1)	82(4)	176(5)	121(4)	29(4)	44(3)	24(4)
Cu(2)	104(3)	141(3)	159(3)	41(3)	4(3)	-19(3)
As	72(2)	110(3)	104(2)	-7(2)	29(2)	-6(2)
O(1)	70(16)	198(20)	133(18)	-27(15)	47(14)	-7(15)
O(2)	110(18)	189(20)	123(18)	20(16)	8(15)	-47(16)
O(3)	93(17)	142(19)	132(18)	47(15)	8(15)	-5(14)
O(4)	104(17)	119(18)	142(19)	-11(15)	54(14)	-5(14)

* $U_{ij} = U_{ij} \times 10^4$

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR LAMMERITE

PAGE 1

H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C
2	0	0	67	65	6	5	0	20	20	4	11	0	7	7	-5	2	1	73	75	5	4	1	28	27
4	0	0	15	15	0	6	0	110	111	0	12	0	33	32	-4	2	1	68	67	6	4	1	21	20
5	0	0	33	33	1	6	0	34	33	1	12	0	39	38	-3	2	1	30	27	-6	5	1	7	9
1	1	0	26	22	2	6	0	41	42	2	12	0	33	33	-1	2	1	32	30	-5	5	1	12	11
2	1	0	60	57	3	6	0	53	54	3	12	0	26	25	0	2	1	79	83	-4	5	1	57	59
3	1	0	70	68	4	6	0	82	85	4	12	0	66	66	1	2	1	139	136	-3	5	1	130	136
4	1	0	39	39	5	6	0	16	18	1	13	0	52	51	2	2	1	8	7	-2	5	1	46	45
5	1	0	63	63	6	6	0	7	9	0	14	0	27	27	3	2	1	68	65	-1	5	1	23	24
6	1	0	34	34	1	7	0	19	19	1	14	0	58	58	4	2	1	24	24	0	5	1	24	24
0	2	0	24	23	2	7	0	65	65	2	14	0	11	11	5	2	1	19	19	1	5	1	24	24
1	2	0	16	15	3	7	0	31	31	3	14	0	9	8	6	2	1	25	25	2	5	1	71	70
2	2	0	67	64	4	7	0	13	12	1	15	0	19	18	-6	3	1	14	13	3	5	1	49	47
3	2	0	151	148	5	7	0	34	35	2	15	0	38	37	-5	3	1	37	36	4	5	1	55	54
4	2	0	7	8	6	7	0	29	28	0	16	0	18	18	-4	3	1	58	56	5	5	1	41	42
5	2	0	56	56	0	8	0	57	58	1	16	0	9	10	-3	3	1	14	14	-6	6	1	44	44
6	2	0	29	30	1	8	0	78	77	-6	0	1	20	21	-2	3	1	11	9	-5	6	1	44	46
1	3	0	107	111	2	8	0	55	55	-4	0	1	26	25	-1	3	1	164	165	-4	6	1	17	18
2	3	0	65	65	3	8	0	21	21	0	0	1	8	6	0	3	1	102	106	-3	6	1	21	20
3	3	0	8	8	4	8	0	27	27	2	0	1	41	39	1	3	1	9	11	-2	6	1	57	55
4	3	0	22	22	5	8	0	21	23	4	0	1	45	44	2	3	1	6	6	-1	6	1	48	45
5	3	0	5	6	1	9	0	19	19	6	0	1	60	61	3	3	1	26	25	1	6	1	73	73
6	3	0	35	35	2	9	0	19	19	-6	1	1	8	9	4	3	1	51	50	2	6	1	97	98
0	4	0	99	101	3	9	0	43	43	-5	1	1	26	25	6	3	1	11	13	3	6	1	34	33
1	4	0	36	38	4	9	0	11	12	-4	1	1	76	76	-6	4	1	41	40	4	6	1	6	7
2	4	0	59	61	5	9	0	53	55	-3	1	1	23	23	-5	4	1	24	23	5	6	1	45	45
3	4	0	38	39	0	10	0	51	50	-2	1	1	19	22	-4	4	1	37	36	-6	7	1	32	33
4	4	0	61	60	1	10	0	63	62	-1	1	1	68	64	-3	4	1	45	46	-5	7	1	10	10
5	4	0	33	33	2	10	0	49	49	0	1	1	12	11	-2	4	1	87	84	-4	7	1	27	28
6	4	0	52	51	3	10	0	6	5	1	1	1	131	126	-1	4	1	69	65	-3	7	1	37	38
1	5	0	109	110	4	10	0	31	31	2	1	1	100	93	0	4	1	72	73	-2	7	1	22	21
2	5	0	40	39	5	10	0	12	12	3	1	1	57	54	1	4	1	5	3	-1	7	1	38	35
3	5	0	26	26	1	11	0	24	23	4	1	1	76	75	2	4	1	89	89	0	7	1	131	137
4	5	0	19	19	2	11	0	57	57	5	1	1	31	32	3	4	1	6	2	1	7	1	102	105
5	5	0	6	5	3	11	0	11	11	6	1	1	9	9	4	4	1	60	59	2	7	1	43	43

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR LAMMERITE

PAGE 2

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
3	7	1	8	7	3	10	1	8	2	-1	15	1	33	32	2	2	2	36	33	2	5	2	84	84
4	7	1	14	15	4	10	1	13	11	0	15	1	41	42	3	2	2	72	70	3	5	2	62	62
5	7	1	30	30	-5	11	1	5	5	1	15	1	11	10	4	2	2	34	34	4	5	2	30	29
-6	8	1	14	15	-4	11	1	20	21	2	15	1	10	8	5	2	2	16	15	5	5	2	36	37
-5	8	1	6	5	-3	11	1	40	39	-1	16	1	7	9	-6	3	2	43	45	-6	6	2	15	16
-4	8	1	46	46	-2	11	1	21	20	0	16	1	24	24	-5	3	2	8	8	-5	6	2	24	24
-3	8	1	49	50	-1	11	1	6	6	-6	0	2	41	40	-4	3	2	27	27	-4	6	2	11	10
-2	8	1	70	68	0	11	1	80	81	-4	0	2	71	72	-3	3	2	140	143	-3	6	2	53	50
-1	8	1	67	64	1	11	1	20	19	-2	0	2	76	76	-2	3	2	67	66	-2	6	2	37	35
0	8	1	51	52	2	11	1	11	11	0	0	2	80	76	-1	3	2	79	81	-1	6	2	77	78
1	8	1	5	4	3	11	1	7	7	2	0	2	54	50	0	3	2	12	12	0	6	2	63	66
2	8	1	50	50	4	11	1	15	15	4	0	2	47	47	1	3	2	78	75	1	6	2	48	48
3	8	1	8	5	-4	12	1	6	6	-7	1	2	13	13	2	3	2	55	53	2	6	2	57	56
4	8	1	5	7	-3	12	1	35	33	-6	1	2	55	55	4	3	2	29	29	3	6	2	56	54
5	8	1	30	32	-2	12	1	7	1	-5	1	2	12	12	5	3	2	58	59	4	6	2	19	19
-5	9	1	51	52	-1	12	1	37	36	-4	1	2	48	49	-5	4	2	10	10	5	6	2	8	7
-4	9	1	19	19	0	12	1	8	7	-3	1	2	35	37	-4	4	2	35	34	-6	7	2	25	25
-3	9	1	58	58	1	12	1	20	19	-2	1	2	14	13	-3	4	2	23	22	-5	7	2	11	12
-2	9	1	33	32	2	12	1	73	73	-1	1	2	132	132	-2	4	2	40	39	-4	7	2	8	8
-1	9	1	20	18	3	12	1	5	5	0	1	2	74	74	-1	4	2	45	45	-2	7	2	113	110
0	9	1	7	6	-4	13	1	15	14	1	1	2	71	65	0	4	2	118	126	-1	7	2	81	81
1	9	1	35	36	-3	13	1	56	56	2	1	2	108	103	1	4	2	29	27	0	7	2	31	32
2	9	1	9	7	-2	13	1	15	15	3	1	2	29	28	2	4	2	52	51	1	7	2	8	8
3	9	1	90	91	-1	13	1	36	36	4	1	2	27	26	3	4	2	12	11	2	7	2	11	11
4	9	1	16	16	0	13	1	22	22	5	1	2	30	29	4	4	2	21	21	3	7	2	53	52
5	9	1	19	19	1	13	1	16	15	-7	2	2	36	38	5	4	2	7	6	4	7	2	58	58
-5	10	1	15	16	2	13	1	23	22	-6	2	2	16	16	-6	5	2	43	42	5	7	2	23	23
-4	10	1	47	47	3	13	1	42	43	-5	2	2	30	28	-5	5	2	71	75	-6	8	2	20	21
-3	10	1	38	37	-3	14	1	27	27	-4	2	2	44	45	-4	5	2	45	44	-5	8	2	10	9
-2	10	1	35	34	-2	14	1	26	25	-3	2	2	82	78	-3	5	2	63	61	-4	8	2	80	79
-1	10	1	59	58	-1	14	1	37	37	-2	2	2	69	66	-2	5	2	28	27	-3	8	2	22	20
0	10	1	45	47	0	14	1	15	15	-1	2	2	11	12	-1	5	2	8	8	-2	8	2	29	28
1	10	1	20	20	2	14	1	37	36	0	2	2	18	14	0	5	2	72	75	-1	8	2	33	33
2	10	1	19	19	-2	15	1	9	8	1	2	2	5	5	1	5	2	67	65	0	8	2	47	48

H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C	H	K	L	F _O	F _C
1	8	2	30	29	-2	12	2	33	31	-1	1	3	73	71	-3	4	3	68	69	1	7	3	22	21
2	8	2	4	3	-1	12	2	11	11	0	1	3	97	97	-2	4	3	140	148	2	7	3	35	35
3	8	2	12	12	0	12	2	34	35	1	1	3	8	7	-1	4	3	59	60	4	7	3	38	37
4	8	2	51	51	1	12	2	8	7	2	1	3	15	12	0	4	3	10	10	-6	8	3	62	61
-5	9	2	56	58	2	12	2	42	40	3	1	3	20	18	1	4	3	33	32	-5	8	3	10	8
-4	9	2	10	9	3	12	2	20	19	4	1	3	18	17	3	4	3	26	26	-3	8	3	54	53
-3	9	2	35	33	-4	13	2	15	14	5	1	3	16	17	4	4	3	24	24	-2	8	3	13	12
-2	9	2	11	10	-3	13	2	23	21	-7	2	3	21	22	-6	5	3	21	21	-1	8	3	55	55
-1	9	2	16	15	-2	13	2	19	19	-6	2	3	49	51	-5	5	3	43	43	0	8	3	12	8
0	9	2	15	16	-1	13	2	7	7	-5	2	3	64	68	-4	5	3	11	12	1	8	3	7	7
1	9	2	114	119	0	13	2	18	18	-3	2	3	6	6	-3	5	3	5	6	2	8	3	66	66
2	9	2	24	25	1	13	2	39	39	-2	2	3	63	63	-2	5	3	18	18	3	8	3	21	21
3	9	2	28	28	2	13	2	21	21	-1	2	3	7	8	-1	5	3	18	18	4	8	3	19	20
-5	10	2	14	15	-3	14	2	11	9	0	2	3	7	6	0	5	3	56	59	-5	9	3	9	7
-4	10	2	39	38	-2	14	2	18	17	1	2	3	134	133	1	5	3	35	34	-3	9	3	34	32
-3	10	2	26	26	-1	14	2	26	26	2	2	3	45	43	2	5	3	13	13	-2	9	3	10	9
-2	10	2	24	23	0	14	2	35	35	3	2	3	63	63	3	5	3	64	66	-1	9	3	89	93
-1	10	2	59	59	1	14	2	22	22	4	2	3	10	9	4	5	3	6	5	0	9	3	6	5
0	10	2	9	8	2	14	2	19	19	5	2	3	16	15	-6	6	3	27	26	1	9	3	19	19
1	10	2	35	35	-2	15	2	40	40	-7	3	3	25	24	-5	6	3	45	45	2	9	3	14	14
2	10	2	9	10	-1	15	2	17	17	-6	3	3	13	12	-4	6	3	55	55	3	9	3	9	10
3	10	2	30	31	1	15	2	30	29	-5	3	3	57	59	-3	6	3	41	40	-5	10	3	8	9
4	10	2	35	34	-6	0	3	42	44	-4	3	3	43	43	-2	6	3	16	14	-4	10	3	8	10
-5	11	2	30	30	-4	0	3	39	40	-3	3	3	52	50	-1	6	3	34	34	-3	10	3	58	56
-4	11	2	29	28	-2	0	3	94	91	-2	3	3	28	27	0	6	3	71	75	-2	10	3	17	17
-3	11	2	9	10	0	0	3	83	83	-1	3	3	47	48	1	6	3	56	54	-1	10	3	54	55
-2	11	2	93	93	2	0	3	41	40	0	3	3	73	74	2	6	3	28	26	0	10	3	13	13
-1	11	2	24	24	4	0	3	90	89	1	3	3	32	31	3	6	3	12	11	2	10	3	61	61
0	11	2	30	31	-7	1	3	6	4	2	3	3	24	23	4	6	3	37	36	3	10	3	15	16
1	11	2	6	5	-6	1	3	25	26	3	3	3	68	68	-4	7	3	57	55	-5	11	3	14	13
2	11	2	16	17	-5	1	3	13	13	4	3	3	32	32	-3	7	3	43	42	-4	11	3	60	58
3	11	2	16	15	-4	1	3	28	28	-6	4	3	8	9	-2	7	3	9	9	-3	11	3	27	24
-4	12	2	23	23	-3	1	3	103	104	-5	4	3	22	22	-1	7	3	46	47	-2	11	3	23	23
-3	12	2	25	25	-2	1	3	15	15	-4	4	3	8	8	0	7	3	42	43	-1	11	3	10	9

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	11	3	26	27	2	1	4	43	41	-4	5	4	14	13	2	8	4	18	17	-6	0	5	44	45
1	11	3	9	8	3	1	4	15	15	-3	5	4	18	17	3	8	4	34	34	-4	0	5	35	35
2	11	3	29	30	4	1	4	13	12	-2	5	4	9	10	-5	9	4	56	55	-2	0	5	68	68
3	11	3	20	19	-6	2	4	6	4	-1	5	4	49	51	-4	9	4	14	12	0	0	5	45	45
-4	12	3	31	30	-5	2	4	10	12	0	5	4	32	33	-3	9	4	35	34	2	0	5	14	13
-3	12	3	24	23	-4	2	4	46	46	1	5	4	82	81	-2	9	4	15	15	-6	1	5	20	22
-2	12	3	24	23	-3	2	4	13	13	2	5	4	39	38	-1	9	4	12	11	-5	1	5	60	61
-1	12	3	25	25	-2	2	4	7	4	3	5	4	14	14	0	9	4	6	5	-3	1	5	22	21
0	12	3	52	53	-1	2	4	108	110	-6	6	4	47	45	1	9	4	40	40	-2	1	5	57	57
1	12	3	22	21	0	2	4	59	60	-5	6	4	18	18	2	9	4	15	15	-1	1	5	9	7
2	12	3	40	40	1	2	4	60	59	-3	6	4	30	28	-5	10	4	26	27	0	1	5	61	62
-3	13	3	9	7	3	2	4	22	21	-2	6	4	62	63	-4	10	4	10	8	1	1	5	12	12
-1	13	3	28	28	4	2	4	24	25	-1	6	4	47	48	-3	10	4	39	40	2	1	5	7	7
0	13	3	11	10	-6	3	4	36	37	0	6	4	28	28	-2	10	4	17	17	3	1	5	50	50
1	13	3	43	43	-5	3	4	9	8	1	6	4	23	23	-1	10	4	5	3	-6	2	5	10	9
2	13	3	6	5	-3	3	4	27	27	2	6	4	40	40	0	10	4	71	74	-5	2	5	20	19
-3	14	3	28	28	-2	3	4	59	60	3	6	4	28	28	1	10	4	7	8	-4	2	5	30	29
-2	14	3	47	47	-1	3	4	74	77	-6	7	4	26	26	2	10	4	5	3	-3	2	5	61	59
-1	14	3	33	34	0	3	4	10	9	-5	7	4	32	32	-4	11	4	12	8	-2	2	5	29	29
0	14	3	12	12	1	3	4	33	34	-4	7	4	9	9	-3	11	4	16	16	-1	2	5	33	33
-1	15	3	17	16	2	3	4	34	34	-3	7	4	40	35	-2	11	4	55	55	0	2	5	25	25
-6	0	4	38	40	3	3	4	36	37	-2	7	4	65	65	-1	11	4	16	14	1	2	5	41	40
-4	0	4	76	76	4	3	4	18	17	-1	7	4	6	5	0	11	4	5	3	2	2	5	11	11
-2	0	4	42	40	-6	4	4	13	13	0	7	4	6	7	1	11	4	18	18	-6	3	5	7	8
0	0	4	79	78	-5	4	4	28	28	1	7	4	17	17	2	11	4	18	18	-5	3	5	23	22
2	0	4	83	82	-4	4	4	96	99	2	7	4	26	26	-4	12	4	22	21	-4	3	5	39	38
4	0	4	41	42	-3	4	4	52	52	3	7	4	8	5	-3	12	4	25	26	-3	3	5	68	68
-6	1	4	42	46	-2	4	4	10	10	-5	8	4	39	38	-2	12	4	33	33	-2	3	5	15	16
-5	1	4	51	52	-1	4	4	50	53	-4	8	4	11	10	-1	12	4	19	20	-1	3	5	6	6
-4	1	4	23	23	1	4	4	33	33	-3	8	4	55	53	0	12	4	29	29	0	3	5	47	48
-3	1	4	70	70	2	4	4	30	30	-2	8	4	12	12	-3	13	4	11	11	1	3	5	61	61
-2	1	4	32	30	3	4	4	30	29	-1	8	4	16	15	-2	13	4	5	4	2	3	5	15	16
0	1	4	38	38	4	4	4	57	59	0	8	4	62	66	-1	13	4	28	28	3	3	5	38	38
1	1	4	16	16	-6	5	4	26	26	1	8	4	23	21	0	13	4	10	9	-6	4	5	56	56

