

AM-92-498

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

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
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	-1	167	175	9	4	-1	307	310	9
0	-6	68	53	13*	6	0	154	155	7	4	0	326	327	10
0	-5	337	331	10	7	-5	241	240	9	5	-5	171	177	8
0	-4	667	656	17	7	-4	155	157	8	5	-4	334	337	10
0	-3	160	157	7	7	-3	325	331	10	5	-3	182	188	9
0	-2	88	88	7	7	-2	239	228	9	5	-2	615	614	16
0	-1	707	698	18	7	-1	633	647	16	5	-1	490	504	13
0	0	1833	1801	46	7	0	350	359	10	5	0	503	513	13
1	-7	130	123	8	8	-3	60	51	14*	6	-4	46	23	18*
1	-6	552	544	15	8	-2	348	346	10	6	-3	320	319	10
1	-5	266	263	9	8	-1	430	443	12	6	-2	390	389	11
1	-4	127	133	7	8	0	355	371	10	6	-1	473	471	13
1	-3	547	556	14	9	-2	200	204	10	6	0	73	78	10
1	-2	713	707	18	9	-1	98	85	9	7	-3	278	291	9
1	-1	524	521	14	9	0	179	180	10	7	-2	431	435	12
1	0	264	255	8	^^^^^^ h = 5 ^^^^^^^					7	-1	134	132	7
2	-7	377	384	11	7	0	258	263	9	7	0	258	263	9
2	-6	107	108	9	8	-2	35	69	27*	8	-2	35	69	27*
2	-5	432	433	12	0	-6	176	168	8	8	-1	298	305	10
2	-4	597	599	15	0	-5	439	432	12	8	0	381	380	11
2	-3	690	695	18	0	-4	732	735	19	^^^^^^ h = 6 ^^^^^^^				
2	-2	343	345	10	0	-3	80	58	9	0	-5	315	311	10
2	-1	260	258	8	0	-2	243	234	8	0	-4	85	89	10
2	0	0	4	23*	0	-1	644	629	16	0	-3	419	421	12
3	-7	77	82	13	1	-6	55	60	17*	0	-2	541	526	14
3	-6	519	525	14	1	-5	434	435	12	0	-1	194	195	9
3	-5	185	196	9	1	-4	374	361	11					
3	-4	136	136	7	1	-3	157	147	7					

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