AM-88-391

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

Post and Appleman

To be deposited: Tables 2, 3

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

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}).

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

Table 2-2

7	29	23	3
-11	0	4	2<

5,K,0

5	8	2	3<

0,K,1

2	80	78	9
5	28	26	3
8	49	45	2
-1	88	87	7
-4	44	45	4
-7	176	174	19
-10	30	26	2

1,K,1

3	68	73	7
6	27	27	4
9	6	0	3<
-3	305	288	35
-6	55	53	2
-9	8	0	4<

2,K,1

2,K,4

-8	105	100	2
-11	18	15	1

3,K,4

5	157	164	18
8	38	33	6
-1	155	149	7
-7	54	51	7
-10	32	32	6

4,K,4

6	74	77	3
-3	113	106	4
-9	80	79	11

5,K,4

-2	138	148	9
-11	50	51	0

6,K,4

-1	77	80	10
-4	248	233	11

7,K,4

-3	124	132	13

-3	16	16	2
-6	32	32	2

8,K,1

-2	39	41	4
-5	26	24	4

9,K,1

-1	10	8	2<
-4	41	44	4
-7	26	25	2

10,K,1

-3	17	16	3
-6	14	12	4
-9	123	123	15

11,K,1

-2	24	19	4
-5	118	122	0
-8	0	0	0<

0,K,2

1	211	199	23
4	148	144	18
7	16	14	2
10	56	52	7
-2	182	166	11
-5	115	115	10
-8	72	70	10

1,K,5

2	182	177	10
5	102	103	15
8	72	67	6
-4	172	157	16
-7	99	98	9
-10	23	23	2

2,K,5

3	132	139	12
6	86	89	11
9	41	37	7
-6	30	5	9
-9	70	68	3

3,K,5

4	94	98	9
7	66	64	0
-2	104	93	7
-8	95	94	12
-11	52	57	7

4,K,2

5	12	9	2
-1	29	28	2
-10	11	11	2<

5,K,2

6	88	94	0
-3	30	27	3

6,K,2

-2	21	22	0
-5	30	29	2

7,K,2

-1	31	33	4
-4	22	22	2

8,K,2

-3	126	139	11
-6	0	0	1M

9,K,2

-2	79	82	11
-5	65	69	8
-8	69	67	13

10,K,5

-1	49	43	7
-4	64	67	2
-7	55	52	3

11,K,5

-3	53	47	8
-6	57	58	2
-9	51	51	7

0,K,6

0	284	270	10
3	168	165	19
6	124	125	18
9	73	65	1
-3	168	158	12
-6	101	100	10
-9	78	74	10

1,K,6

1	188	177	18
4	159	160	25
7	69	68	12
-5	162	157	17

-5	79	76	6
-8	52	51	3

2,K,3

2	73	79	6
5	59	63	6
8	124	114	20
-1	113	103	3
-7	0	0	0M
-10	35	34	3

3,K,3

3	60	61	7
6	27	29	3
-9	141	137	29

4,K,3

4	34	34	4
7	28	23	5
-2	57	54	6
-11	39	39	1

5,K,3

5	54	54	0
-1	161	160	10
-4	133	129	12

6,K,6

-3	106	107	9

7,K,6

-2	92	101	9
-5	80	80	7

8,K,6

-1	70	72	9
-4	89	93	10
-7	31	32	4

9,K,6

-3	29	31	3
-6	92	90	6

10,K,6

-2	83	78	12
-5	65	66	0
-8	60	61	10

11,K,6

-4	56	50	7
-7	68	67	2

-7	47	48	3

0,K,4

2	225	210	17
5	113	111	15
8	29	26	2
-1	217	207	14
-4	165	161	14
-7	168	163	18
-10	37	32	4

1,K,4

3	180	182	23
6	104	107	17
9	54	49	8
-3	443	418	28
-6	96	97	9
-9	88	89	10

2,K,4

4	90	96	10
7	87	87	4
-5	170	164	19

3,K,7

5	167	172	19
8	0	2	0<
-1	82	82	3
-7	36	37	2
-10	7	2	2<

4,K,7

6	44	44	0
-3	36	36	4
-9	50	49	4

5,K,7

-2	51	52	2
-11	21	19	2

6,K,7

-1	28	28	2
-4	232	228	21

7,K,7

-3	56	61	4
-6	55	57	8

8,K,7

-2	43	47	4
-5	65	66	6

Table 2-3

-6	90	90	10

4,K,5

-8	61	60	6

8,K,4

-2	50	53	7
-5	104	104	12

9,K,4

-1	77	78	14
-4	38	39	3
-7	67	65	10

10,K,4

-3	67	71	6
-6	40	42	8
-9	111	109	19

11,K,4

-2	23	22	5
-5	108	109	0
-8	70	70	7

0,K,5

-8	0	0	OM

1,K,8

2	25	25	2
5	24	27	4
8	16	13	2<
-4	15	15	2
-7	21	21	0
-10	113	111	7

2,K,8

3	35	29	4
6	17	11	5
-6	235	229	16
-9	10	7	2<

3,K,8

4	30	30	3
7	22	19	0
-2	358	350	27
-8	32	31	2
-11	28	24	4

4,K,8

5	0	0	OM
-1	50	48	3
-10	27	30	4

5	67	73	7
-1	156	160	8
-10	48	50	7

5,K,5

6	21	23	1
-3	137	130	4

6,K,5

-2	104	113	6
-5	108	110	12

7,K,5

-1	88	92	11
-4	107	106	11

8,K,5

-3	13	14	0
-6	92	92	9

9,K,5

10,K,8

-1	24	23	5
-4	21	22	1
-7	18	16	2

11,K,8

-3	7	5	2<
-6	22	22	2

0,K,9

0	120	126	9
3	63	63	9
6	30	30	4
9	15	11	2
-3	52	52	3
-6	31	30	2
-9	16	11	2<

1,K,9

1	65	65	10
4	145	150	26
7	29	25	5
-5	44	46	4
-8	22	21	2

2,K,9

2	46	45	3
5	29	28	3
8	95	92	19

2,K,6

2	136	132	3
5	94	97	12
8	84	77	15
-1	215	195	11
-7	70	69	14
-10	47	46	2

3,K,6

3	82	85	6
6	49	50	6
-9	95	93	13

4,K,6

4	84	89	6
7	30	24	6
-2	110	108	0
-11	57	57	0

5,K,6

5	86	85	0

7,K,9

-2	28	30	3
-5	29	30	4

8,K,9

-1	23	21	2
-4	26	27	2
-7	30	30	6

9,K,9

-3	27	29	3
-6	104	105	13

10,K,9

-2	95	92	14
-5	13	11	3<
-8	16	10	2<

11,K,9

-4	16	11	2<
-7	0	7	2<

0,K,10

2	74	72	9
5	76	73	13
8	0	0	OM
-1	67	72	10
-4	41	41	2

0,K,7

2	76	70	8
5	63	62	10
8	10	5	2<
-1	82	77	9
-4	96	90	6
-7	177	172	19
-10	10	3	3<

1,K,7

3	92	90	13
6	42	43	8
9	34	31	4
-3	367	354	12
-6	28	25	3
-9	49	49	7

2,K,7

4	23	21	1
7	60	57	4
-5	79	78	1
-8	54	52	3

5,K,10

-2	29	29	0
-11	16	14	3

6,K,10

-1	74	76	8
-4	329	334	37

7,K,10

-3	27	29	0
-6	27	26	4

8,K,10

-2	31	32	5
-5	0	0	OM

9,K,10

-1	12	11	3<
-4	41	44	2
-7	26	25	2

10,K,10

-3	0	0	2M
-6	59	55	3

9,K,7

-1	51	49	8
-4	0	0	OM
-7	20	15	2

10,K,7

-3	28	30	3
-6	22	22	1
-9	120	119	26

11,K,7

-5	122	119	0
-8	38	37	0

0,K,8

1	18	9	2
4	20	15	3
7	172	172	31
-2	47	43	4
-5	23	26	0

6	0	0	1M
-6	251	259	4
-9	36	35	6

3,K,11

4	18	16	3
7	18	15	1
-2	371	369	19
-8	0	0	1M

4,K,11

5	40	42	2
-1	28	29	1
-10	36	33	5

5,K,11

6	131	139	0
-3	21	20	3

6,K,11

-2	62	65	3
-5	45	47	7

7,K,11

-1	25	25	2
-4	25	25	3

8,K,11

Table 2-4

5,K,8

6	107	111	0
-3	32	31	3

6,K,8

-2	0	0	OM
-5	26	23	2

7,K,8

-1	31	31	2
-4	7	0	2<

8,K,8

-3	157	171	12
-6	34	34	5

9,K,8

-2	35	35	5
-5	12	8	2
-8	25	22	4

0,K,12

3	32	30	4
6	22	21	4
9	0	0	1M
-3	22	19	2
-6	27	27	1
-9	28	25	2

1,K,12

1	26	21	8
4	165	166	31
7	21	19	5
-5	0	0	OM
-8	23	21	2

2,K,12

2	9	11	3<
5	16	16	2
8	92	87	25
-1	25	23	2
-7	11	9	1
-10	14	10	3<

3,K,12

3	0	0	2M
6	17	18	0
-9	90	101	5

4,K,12

-1	81	78	6
-7	35	35	3
-10	15	15	1

3,K,9

3	38	43	1
6	22	22	4
-9	103	106	4

4,K,9

4	23	24	1
7	25	18	5
-2	56	58	3
-11	11	8	4<

5,K,9

5	12	10	4<
-1	145	150	9
-4	43	42	6

6,K,9

-3	33	34	3

0,K,13

2	58	56	7
5	35	33	5
8	0	0	OM
-1	53	54	7
-4	54	52	5
-7	83	86	11

1,K,13

3	61	59	11
6	34	35	7
-3	116	115	21
-6	35	38	4
-9	31	30	3

2,K,13

4	32	31	4
7	45	43	8
-5	48	48	4
-8	36	41	4

-7	249	249	25

1,K,10

3	18	12	5
6	29	28	6
9	43	42	13
-3	493	514	53
-6	47	49	4
-9	15	12	1

2,K,10

4	57	58	6
7	13	10	2<
-5	43	43	5
-8	0	0	2M

3,K,10

5	237	249	18
-1	72	73	4
-7	54	57	3
-10	45	47	7

4,K,10

-2	42	44	4
-5	46	45	5

8,K,13

-1	33	32	3
-4	23	25	2
-7	26	22	1

9,K,13

1	106	107	13
4	103	100	12
7	160	152	28
-2	145	152	24
-5	65	67	6
-8	27	26	3

10,K,13

-3	29	26	1
-6	14	10	2<

0,K,14

2	121	122	21
5	44	45	9
8	64	58	12
-4	86	89	11
-7	74	82	8

1,K,14

-9	160	163	36

11,K,10

-5	165	163	0

0,K,11

1	71	74	8
4	34	34	5
7	199	200	39
-2	56	57	6
-5	45	45	3
-8	39	36	4

1,K,11

2	31	33	4
5	58	61	12
8	12	10	2<
-4	54	59	5
-7	12	3	2<
-10	140	138	10

2,K,11

3	54	47	9
-2	54	55	2
-5	80	80	10

7,K,14

-1	90	92	10
-4	50	51	4

8,K,14

-3	149	153	8
-6	69	71	9

9,K,14

-2	69	66	7
-5	54	54	3
-8	85	81	7

10,K,14

-4	76	72	6
-7	19	16	1

0,K,15

0	61	60	8
3	109	108	12
6	89	84	14
9	68	59	9
-3	101	106	14
-6	92	97	9
-9	56	55	6

-3	191	200	13
-6	11	9	1<

9,K,11

-2	5	3	4<
-5	19	20	2
-8	8	1	5<

10,K,11

-1	24	20	3
-4	6	3	4<
-7	50	48	0

11,K,11

-6	19	15	2

0,K,12

0	214	228	21

5,K,15

5	62	58	7
-1	62	57	8
-4	108	108	8

6,K,15

-3	82	82	4

7,K,15

-2	85	88	6
-5	53	53	6

8,K,15

-1	45	46	7
-4	64	66	3
-7	73	75	9

9,K,15

-3	60	58	5
-6	54	49	1

10,K,15

-5	76	70	5

0,K,16

2	113	114	12
5	65	60	9

Table 2-5

4	21	19	2
-2	12	7	8
5,K,12			
5	25	22	3
-1	161	166	10
-4	33	30	5
6,K,12			
-3	0	7	3
7,K,12			
-2	19	15	5
-5	0	0	2M
8,K,12			
-1	13	11	1<
-4	28	28	3
-7	0	0	OM
9,K,12			
3,K,16			
-7	48	51	3
-10	32	41	4
4,K,16			
6	57	53	8
-3	89	90	5
-9	42	41	6
5,K,16			
-2	104	104	7
6,K,16			
-1	60	61	5
-4	62	60	2
7,K,16			
-3	74	75	2
-6	61	62	7
8,K,16			
-2	42	44	4
-5	65	67	7
9,K,16			
-1	49	47	6
-4	57	54	3

3,K,13			
5	80	86	7
-1	68	66	9
-7	42	45	2
-10	14	12	2<
4,K,13			
6	35	31	6
-3	56	53	0
-9	24	25	2
5,K,13			
-2	45	45	0
6,K,13			
-1	26	26	4
-4	99	98	10
7,K,13			
-3	36	37	0
-6	44	44	7
3,K,17			
4	51	50	8
-2	176	175	13
-8	29	33	1
4,K,17			
5	0	0	OM
-1	44	41	6
-10	27	24	3
5,K,17			
-3	59	58	4
6,K,17			
-2	21	22	0
-5	25	23	3
7,K,17			
-1	36	34	5
-4	21	20	1
8,K,17			
-3	113	115	6

2,K,14			
3	87	89	13
6	54	54	9
-6	191	198	9
-9	42	42	7
3,K,14			
4	108	110	9
7	54	51	9
-2	291	291	13
-8	71	76	4
4,K,14			
5	33	34	0
-1	111	111	7
-10	28	24	3
5,K,14			
-3	130	130	9
6,K,14			
-5	38	38	5
-8	18	17	0
2,K,18			
2	22	19	3
5	18	16	2
-1	38	37	6
-7	0	0	2M
3,K,18			
3	21	20	6
6	26	25	5
-9	134	146	23
4,K,18			
4	9	5	4<
-2	11	9	3<
5,K,18			
-1	225	229	29
-4	23	18	1
6,K,18			
-3	0	0	OM
7,K,18			
-2	31	32	2
-5	25	24	3

1,K,15			
1	133	135	23
4	61	57	11
7	52	54	12
-5	86	94	8
-8	44	46	6
2,K,15			
2	96	95	15
5	81	83	14
-1	125	132	10
-7	61	67	4
3,K,15			
3	103	105	9
6	40	37	7
-9	46	47	8
4,K,15			
4	62	66	4
-2	116	116	6
-6	19	21	2
2,K,19			
4	27	25	3
7	12	10	3<
-5	19	16	1
-8	18	15	2
3,K,19			
5	87	89	0
-1	30	32	2
-7	27	28	1
4,K,19			
-3	32	32	3
-9	10	5	3<
5,K,19			
-2	30	29	2
6,K,19			
-1	20	21	4
-4	108	105	6
7,K,19			
-3	11	6	2<
-6	19	17	1
8,K,19			

8	49	42	6
-1	109	116	11
-4	83	86	8
-7	47	51	6
1,K,16			
3	109	108	17
6	72	72	14
-3	72	73	15
-6	71	80	7
-9	53	54	7
2,K,16			
4	81	82	12
7	68	63	11
-5	85	90	10
-8	66	75	6
3,K,16			
5	50	51	3
-1	91	94	9
2,K,20			
3	32	32	5
6	44	40	4
-6	163	176	17
3,K,20			
4	8	3	2<
-2	228	225	22
-8	21	18	3
4,K,20			
5	23	21	3
-1	36	37	4
5,K,20			
-3	20	20	2
6,K,20			
-2	30	30	4
-5	19	18	1
7,K,20			
-1	0	0	OM
-4	46	47	1
8,K,20			
-3	146	144	16
-6	23	18	2

Table 2-6

-7	67	62	3

10,K,16

-3	64	60	5
-6	29	25	2

0,K,17

1	45	46	5
4	50	46	6
7	117	115	18
-2	50	53	7
-5	42	44	3
-8	0	0	OM

1,K,17

2	51	49	6
5	29	27	4
8	36	31	4
-4	28	29	5
-7	36	40	4

2,K,17

2,K,21

5	17	14	2
-1	20	17	2
-7	32	36	3

3,K,21

3	14	9	3<

4,K,21

4	24	24	3
-2	31	30	3

5,K,21

-1	201	206	31
-4	27	25	2

6,K,21

-3	20	19	3

7,K,21

-2	11	3	2<
-5	43	41	5

8,K,21

-1	36	34	6
-4	23	20	4
-7	17	14	2

-6	30	29	3

9,K,17

-2	31	29	2
-5	42	37	3
-8	50	45	4

10,K,17

-4	45	40	4

0,K,18

0	303	321	35
3	24	20	3
6	40	38	5
-3	0	0	2M
-6	25	25	2

1,K,18

1	0	0	OM
4	231	229	34
7	0	0	OM
-1	0	0	OM
-7	19	19	2

4,K,22

-3	17	10	6

5,K,22

-2	27	26	2

6,K,22

-1	9	4	4<
-4	140	136	11

7,K,22

-3	24	23	2
-6	0	0	2M

8,K,22

-2	0	0	OM
-5	26	24	2

0,K,23

1	42	41	5
4	39	35	6
7	44	38	5
-2	29	30	2
-5	30	30	4

1,K,23

8,K,18

-1	0	0	2M
-4	26	22	1
-7	0	0	OM

9,K,18

-3	10	8	3<
-6	160	148	8

0,K,19

2	26	26	3
5	21	17	2
8	25	23	3
-1	37	38	3
-4	28	24	3
-7	85	89	11

1,K,19

3	33	33	3
6	12	10	1<
-3	123	125	23

6,K,23

-2	31	30	4
-5	26	25	2

7,K,23

-1	28	24	4
-4	22	22	1

8,K,23

-3	40	38	6
-6	33	30	1

0,K,24

0	148	147	19
3	69	67	11
6	75	71	9
-3	49	50	5
-6	42	45	9

1,K,24

1	59	58	6
4	126	119	14
-5	73	76	7

2,K,24

2	46	46	4
5	51	46	6
-1	78	79	10
-7	36	33	7

-2	24	23	2
-5	12	14	3<

9,K,19

-4	21	21	1
-7	15	11	1

0,K,20

1	50	49	5
4	37	35	4
7	155	143	16
-2	25	26	2
-5	37	38	5
-8	36	32	5

1,K,20

2	44	46	6
5	39	36	5
-4	38	40	7
-7	25	27	3

8,K,24

-4	54	52	7

0,K,25

2	66	66	8
5	69	65	9
-1	74	75	9
-4	76	78	8

1,K,25

3	77	76	8
6	54	48	5
-3	92	92	9
-6	36	39	8

2,K,25

4	45	44	5
-5	64	63	6

3,K,25

-1	61	61	8
-7	36	36	5

4,K,25

-3	47	44	5

5,K,25

-2	61	59	8

-5	21	17	1

0,K,21

0	258	265	30
3	37	35	5
6	0	0	OM
-3	45	44	6
-6	13	13	4

1,K,21

1	33	34	4
4	216	206	23
7	34	30	5
-5	16	13	7
-8	0	0	2M

2,K,21

2	37	37	6

3	54	56	7
-6	41	43	7

3,K,26

4	54	56	8
-2	52	50	8

4,K,26

-1	63	63	8

5,K,26

-3	57	59	9

6,K,26

-2	45	43	8
-5	58	57	6

7,K,26

-4	41	40	5

0,K,27

0	70	66	8
3	22	21	3
-3	27	26	3

1,K,27

1	32	28	2
4	64	61	7

0,K,22

2	18	12	6
5	14	12	1
-1	22	21	3
-4	25	23	3
-7	108	111	23

1,K,22

3	31	29	4
6	18	16	2
-3	170	172	20
-6	11	2	3<

2,K,22

4	24	11	8
-5	20	18	4
-8	29	28	6

3,K,22

5	115	111	19

0,K,28

2	0	0	1M
5	11	3	2<
-1	18	15	2
-4	23	21	3

1,K,28

3	34	31	4
-3	179	176	19

2,K,28

4	0	0	OM
-5	10	4	2<

3,K,28

2	31	31	2
5	31	27	3
-4	27	29	4
-7	23	25	5

2,K,23

3	36	35	6
6	23	21	3
-6	37	39	5

3,K,23

4	27	25	4
-2	41	39	6
-8	31	29	7

4,K,23

-1	40	39	6

5,K,23

-3	30	28	2
-1	0	0	OM

4,K,28

-3	14	13	1

5,K,28

-2	26	21	4

6,K,28

-4	148	147	24

0,K,29

1	19	19	1
4	12	11	2<
-2	13	11	2<

3,K,24

3	46	46	5

4,K,24

4	37	38	7
-2	51	50	8

5,K,24

-1	119	119	16
-4	52	49	6

6,K,24

-3	46	47	7

7,K,24

-2	57	58	11
-5	35	31	2

1,K,29

2	0	0	OM
-4	15	14	2

2,K,29

3	13	11	1

3,K,29

-2	107	109	17

4,K,29

-1	0	0	OM

5,K,29

-3	0	0	OM

6,K,25

-1	46	47	10
-4	81	80	10

7,K,25

-3	58	58	9
-6	50	47	4

0,K,26

1	58	58	7
4	54	52	7
-2	71	71	6
-5	33	34	6

1,K,26

2	62	60	6
5	37	31	5
-4	56	58	4

2,K,26

0	110	107	16
3	0	0	3M
-3	21	17	2

1,K,30

1	21	19	2

2,K,30

2	26	24	3
-1	19	17	1

4,K,30

-2	24	21	5

-5	24	24	3

2,K,27

2	28	27	2
-1	28	26	3

3,K,27

3	21	19	3

4,K,27

-2	21	19	2

5,K,27

-1	57	61	11
-4	27	24	2

6,K,27

-3	27	26	4

0,K,31

2	22	20	3
-1	18	18	3

1,K,31

-3	130	125	17

3,K,31

-1	18	17	2

0,K,32

1	0	0	OM
-2	25	24	3

Table 3. Observed and calculated structure factors for calcophanite from Sterling Hill, N.J.

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}).

0,K,0			
3	77	85	8
6	0	0	0M
9	0	2	0<
1,K,0			
1	42	52	5
4	476	518	74
7	47	51	5
-5	23	24	2
-8	47	53	6
2,K,0			
2	100	106	14
5	19	18	3
8	199	209	44
-7	74	82	7
-10	12	12	4<
3,K,0			
3	53	53	7
6	64	65	11
-9	235	260	43
4,K,0			
4	31	29	4
3,K,1			
5	183	177	28
-1	77	80	15
-7	54	56	5
-10	28	27	2
4,K,1			
6	0	0	1M
-3	72	81	11
-9	0	6	0<
5,K,1			
-2	58	63	8
6,K,1			
-1	35	38	4
-4	207	229	33
7,K,1			
-3	21	17	2
-6	29	31	5
8,K,1			
-2	39	40	7
-5	23	24	2
2,K,2			
3	43	37	8
6	0	0	2M
-6	174	184	10
-9	26	23	2
3,K,2			
4	37	35	7
7	27	24	5
-2	245	248	36
-8	0	0	2M
4,K,2			
5	11	9	4<
-1	31	30	4
-10	0	12	6<
5,K,2			
-3	27	27	4
6,K,2			
-2	24	22	3
-5	28	29	2
7,K,2			
1,K,3			
1	92	90	13
4	236	236	37
7	0	12	7<
-5	71	76	3
-8	48	51	5
2,K,3			
2	78	80	13
5	64	64	8
-1	109	103	13
-7	0	15	7<
3,K,3			
3	66	62	11
6	31	29	3
-9	137	141	8
4,K,3			
4	40	34	6
-2	55	56	7
5,K,3			
5	59	54	7
-1	224	236	29
-4	53	58	7
5	108	110	12
8	24	25	3
-1	220	206	17
-4	149	161	8
-7	158	165	11
1,K,4			
3	190	183	34
6	107	108	16
-3	441	419	28
-6	89	97	5
-9	85	90	7
2,K,4			
4	100	97	18
7	91	88	15
-5	165	164	14
-8	96	102	5
3,K,4			
5	181	166	32
-1	163	150	22
-7	54	51	5
-10	32	31	1
4,K,4			
6	86	77	12
-3	100	106	11

Table 3-2

5,K,0

5	0	4	0<

0,K,1

2	71	79	9
5	24	26	2
8	43	44	4
-1	79	87	4
-4	39	45	3
-7	162	176	15

1,K,1

3	69	73	11
6	30	26	4
-3	275	289	18
-6	48	52	5
-9	0	0	0<

2,K,1

4	50	51	8
7	18	18	4<
-5	35	37	2
-8	29	27	3

10,K,4

-3	71	73	14
-6	43	42	7

0,K,5

1	209	200	12
4	142	144	18
7	16	16	4
-2	173	166	13
-5	104	116	6
-8	68	70	5

1,K,5

2	187	177	33
5	105	105	17
8	70	67	10
-4	154	157	5
-7	93	99	4

2,K,5

3	140	139	27
6	93	89	15
-6	3	3	0<
-9	66	69	4

3,K,5

4	103	98	18

9,K,1

-1	0	0	1M
-4	48	43	9
-7	25	24	5

10,K,1

-3	0	14	5<
-6	0	0	1M

0,K,2

1	44	33	5
4	14	11	3
7	131	138	15
-2	55	53	3
-5	0	0	0M
-8	0	0	0M

1,K,2

2	0	6	0<
5	0	0	1M
8	0	0	3M
-4	13	11	3
-7	0	0	1M
-6	88	92	13

9,K,5

-2	79	80	12
-5	66	69	8
-8	67	67	10

10,K,5

-4	69	68	10
-7	54	54	8

0,K,6

0	297	274	2
3	168	164	21
6	124	125	16
9	67	66	7
-3	158	159	10
-6	94	102	6
-9	73	75	6

1,K,6

1	189	179	20
4	171	162	32
7	71	68	12
-5	148	157	3
-8	59	60	3

2,K,6

-1	30	33	6
-4	22	23	5

8,K,2

-3	132	138	22
-6	26	25	7

9,K,2

-2	22	20	3
-5	0	3	0<
-8	25	24	3

10,K,2

-4	20	17	2<
-7	0	5	0<

0,K,3

0	369	384	7
3	56	52	7
6	76	78	8
9	34	35	5
-3	53	53	3
-6	54	59	5
-9	38	40	4
-2	100	100	13
-5	78	79	10

8,K,6

-1	71	73	8
-4	99	94	12
-7	35	32	7

9,K,6

-3	31	30	5
-6	91	91	13

10,K,6

-5	69	67	7

0,K,7

2	73	70	7
5	66	64	8
8	0	6	6<
-1	87	79	5
-4	90	91	5
-7	170	177	9

1,K,7

3	94	90	16
6	44	43	6
-3	373	357	33

6,K,3

-3	77	80	8

7,K,3

-2	65	67	13
-5	26	26	3

8,K,3

-1	19	18	2
-4	33	34	3
-7	26	27	2

9,K,3

-3	15	13	3<
-6	133	138	21

10,K,3

-5	41	40	5

0,K,4

2	224	211	28

6,K,7

-1	27	31	1
-4	232	232	22

7,K,7

-3	65	61	10
-6	56	58	8

8,K,7

-2	47	48	5
-5	67	66	5

9,K,7

-1	49	50	5
-4	0	0	0<
-7	22	17	4

10,K,7

-3	33	32	8
-6	25	24	4

0,K,8

1	16	11	2
4	21	15	4
7	178	174	23
-2	48	44	4
-5	22	25	3
-9	84	79	9

5,K,4

-2	153	150	24

6,K,4

-1	76	79	9
-4	225	235	30

7,K,4

-3	136	133	21
-6	86	90	12

8,K,4

-2	52	53	9
-5	98	105	15

9,K,4

-1	76	78	8
-4	44	38	7
-7	65	66	10
-10	33	30	5

5,K,8

-3	33	31	2

6,K,8

-2	0	2	0<
-5	23	25	1

7,K,8

-1	29	32	4
-4	0	0	1M

8,K,8

-3	184	173	26
-6	35	36	3

9,K,8

-2	38	36	3
-5	0	7	0<
-8	26	23	3

10,K,8

-4	28	22	6

0,K,9

Table 3-3

-6	107	107	14

10,K,9

-5	0	0	1M

0,K,10

2	70	72	3
5	77	73	10
8	53	50	7
-1	69	72	2
-4	41	41	4
-7	247	254	10

1,K,10

3	14	12	3<
6	28	27	3
-3	535	521	49
-6	46	50	1
-9	0	0	3M

2,K,10

4	61	59	10
7	0	11	0<

3,K,14

-2	300	298	7
-8	79	80	7

4,K,14

5	40	35	4
-1	116	116	8

5,K,14

-3	135	131	10

6,K,14

-2	58	55	5
-5	83	83	9

7,K,14

-1	95	95	7
-4	54	53	3

8,K,14

-3	169	158	18
-6	75	74	7

9,K,14

-5	61	57	6

-1	0	12	6<
-4	50	46	5
-7	26	25	4

0,K,11

1	71	75	2
4	36	34	3
7	217	206	27
-2	58	57	4
-5	46	45	4
-8	36	34	3

1,K,11

2	29	33	2
5	63	61	9
-4	57	58	5
-7	0	3	0<

2,K,11

3	51	48	6
6	0	3	0<
-6	266	263	22
-9	35	35	3

4,K,15

4	70	68	6
-2	120	118	5

5,K,15

-1	63	59	6
-4	110	110	10

6,K,15

-3	89	85	6

7,K,15

-2	93	89	10
-5	59	56	5

8,K,15

-1	49	49	2
-4	74	69	9
-7	81	75	10

0,K,16

2	114	117	3
5	64	60	6
-1	117	117	3
-4	90	88	6
-7	53	54	2

-5	22	19	2<

0,K,12

0	229	233	4
3	31	29	2
6	20	21	3
-3	25	22	1
-6	30	28	3

1,K,12

1	20	22	3
4	173	169	25
7	21	20	5
-5	32	31	3
-8	20	21	6

2,K,12

2	0	10	0<
5	21	16	5
-1	25	22	0
-7	0	0	1M

3,K,12

-2	48	46	5
-5	72	69	4

0,K,17

1	48	46	2
4	51	48	6
7	126	121	14
-2	54	55	4
-5	48	46	4

1,K,17

2	52	52	4
5	32	28	4
-4	31	31	1
-7	43	42	4

2,K,17

3	34	31	6

0,K,13

2	56	55	2
5	38	35	3
8	0	0	2M
-1	55	56	2
-4	54	53	5
-7	88	90	5

1,K,13

3	61	61	6
6	36	35	3
-3	124	120	11
-6	39	38	4

2,K,13

4	34	31	5
7	48	44	7
-5	50	48	5
-8	42	42	4

3,K,13

5	91	89	14
-1	66	67	4

6,K,16

-1	64	60	5
-4	65	63	6

7,K,16

-3	82	78	8
-6	67	63	9

8,K,16

-2	48	46	5
-5	72	69	4

0,K,17

1	48	46	2
4	51	48	6
7	126	121	14
-2	54	55	4
-5	48	46	4

1,K,17

2	52	52	4
5	32	28	4
-4	31	31	1
-7	43	42	4

2,K,17

3	34	31	6

0,K,18

0	325	332	4
3	25	22	3
6	42	40	4
-3	0	4	0<
-6	28	28	3

1,K,18

1	18	13	6
4	242	238	22
-5	39	41	0

2,K,18

2	21	19	3
5	22	19	2
-1	39	38	1
-7	0	0	1M

3,K,18

3	24	20	5

4,K,18

4	0	7	0<

4	107	104	9
7	169	158	20
-2	155	155	10
-5	72	68	5
-8	27	26	2

1,K,14

2	124	124	11
5	45	44	8
-4	90	91	8
-7	84	82	6

2,K,14

3	95	91	12
6	57	56	10
-6	208	204	18

3,K,14

4	117	113	16

-7	94	94	7

1,K,19

3	34	34	1
6	0	9	4<
-3	126	130	7
-6	1	19	10

2,K,19

4	25	24	3
-5	20	18	6

3,K,19

5	94	95	11
-1	32	32	1
-7	28	28	2

4,K,19

-3	34	31	2

5,K,19

-2	30	30	1

6,K,19

-1	24	22	9
-4	112	110	7

7,K,19

Table 3-4

7	71	65	11	2	139	132	20	-6	23	25	1	-8	0	6	0<	0	127	128	0
-2	94	93	7	5	103	98	18	-9	48	49	2					3	62	64	7
-8	94	93	7	-1	206	196	12						1,K,8			6	32	30	4
				-7	68	68	2		2,K,7							-3	51	52	5
	4,K,5											2	24	23	5	-6	31	31	2
					3,K,6			4	23	23	6	5	27	27	4				
5	77	74	12					7	62	57	10	8	3	14	11		1,K,9		
-1	156	159	16	3	87	86	15	-5	78	79	8	-4	16	14	3				
-10	55	50	5	6	56	49	8	-8	51	54	1	-7	22	21	1	1	66	67	5
				-9	93	95	5									4	153	152	27
	5,K,5								3,K,7				2,K,8			7	28	24	4
					4,K,6											-5	45	47	4
-3	127	130	11					5	189	177	35	3	35	32	6	-8	20	21	3
				4	94	90	15	-1	81	83	8	6	4	10	10				
	6,K,5			-2	109	108	13	-7	40	38	5	-6	233	231	17		2,K,9		
								-10	0	1	0<	-9	0	0	1M				
-2	112	115	14		5,K,6											2	46	44	5
-5	104	111	15						4,K,7				3,K,8			5	31	28	4
				5	91	85	12									-1	78	78	3
	7,K,5			-1	161	162	15	6	49	45	7	4	31	31	5	-7	34	35	0
				-4	126	131	15	-3	36	36	4	-2	367	352	28				
-1	87	92	11					-9	53	50	5	-8	33	32	4		3,K,9		
-4	104	105	10		6,K,6														
									5,K,7				4,K,8			3	42	43	6
	8,K,5			-3	113	107	14									6	22	21	4
								-2	56	53	6	5	0	0	1M				
-3	13	16	2<		7,K,6							-1	51	49	5				
				-5	42	42	4					3	0	4	0<	-7	46	46	3
	3,K,9			-8	0	4	0<		3,K,11			6	21	18	2				
												-9	104	104	7		4,K,13		
-9	106	109	6		3,K,10			4	16	16	4<								
								-2	352	373	138		4,K,12			-3	55	54	5
	4,K,9			5	262	253	44	-8	0	6	0<					-9	24	26	7
				-1	70	73	6					4	25	22	5				
4	27	23	4	-7	58	58	5		4,K,11			-2	0	0	1M		5,K,13		
-2	56	59	5																
					4,K,10			5	45	41	4		5,K,12			-2	47	45	3
	5,K,9							-1	29	30	5								
				-3	82	83	7					-1	170	169	14		6,K,13		
5	0	10	0<	-9	36	35	4		5,K,11			-4	33	32	2				
-1	151	152	16													-1	28	27	2
-4	45	43	5		5,K,10			-3	22	21	2		6,K,12			-4	105	102	10
	6,K,9			-2	29	28	1		6,K,11			-3	0	7	0<		7,K,13		
-3	34	34	5		6,K,10			-2	68	65	8		7,K,12			-3	43	36	6
								-5	47	45	6					-6	47	45	5
	7,K,9			-1	76	76	6					-2	15	15	3<				
				-4	342	339	29		7,K,11			-5	0	1	0<		8,K,13		
-2	29	29	3																
-5	26	28	1		7,K,10			-1	25	23	3		8,K,12			-2	46	45	4
								-4	27	24	3					-5	48	46	4
	8,K,9			-3	31	27	4					-1	0	0	1M				
				-6	29	25	3		8,K,11			-4	31	28	3		9,K,13		
-1	21	20	4									-7	0	6	0<				
-4	31	27	6		8,K,10			-3	220	205	28					-4	28	25	2
-7	31	31	3					-6	0	0	1M		9,K,12			-7	27	22	3
				-2	33	31	5												
	9,K,9			-5	0	1	0<		9,K,11			-3	0	7	0<		0,K,14		
												-6	111	106	11				
-3	29	29	3		9,K,10			-2	0	3	0<					1	104	100	2

Table 3-5

0,K,15

0	64	60	3
3	112	111	9
6	90	85	10
-3	110	110	9
-6	102	98	8

1,K,15

1	137	137	9
4	63	59	7
7	59	57	10
-5	96	96	8
-8	52	48	5

2,K,15

2	99	98	9
5	88	85	12
-1	127	134	3
-7	71	70	4

3,K,15

3	110	106	12

2,K,20

-6	181	185	11

3,K,20

4	0	2	0<
-2	231	238	5

4,K,20

-1	39	38	2

5,K,20

-3	21	19	2<

6,K,20

-2	35	32	3
-5	25	19	3

7,K,20

-1	0	4	0<
-4	52	49	4

0,K,21

0	269	276	0
3	35	35	2
6	0	4	0<
-3	46	47	3

1,K,16

3	113	110	11
6	77	75	11
-3	76	78	5
-6	83	83	7

2,K,16

4	87	83	10
-5	92	91	9
-8	77	76	6

3,K,16

5	53	54	7
-1	94	97	6
-7	53	52	4

4,K,16

-3	92	93	5

5,K,16

-2	109	106	7

4,K,21

-2	32	29	5

5,K,21

-1	221	216	19
-4	28	26	2

6,K,21

-3	21	18	2

7,K,21

-2	0	3	0<
-5	44	43	5

0,K,22

2	3	15	8<
5	2	10	6
-1	21	20	4
-4	23	22	3

1,K,22

3	29	30	4
-3	176	182	5
-6	0	5	0<

2,K,22

4	0	0	1M
6	29	27	2
-6	145	145	11

3,K,17

4	54	53	6
-2	180	182	0
-8	34	34	4

4,K,17

-1	44	41	4

5,K,17

-3	60	60	3

6,K,17

-2	22	21	2
-5	26	25	3

7,K,17

-1	41	37	7
-4	25	23	4

7,K,22

-3	25	26	2

0,K,23

1	41	43	0
4	37	35	2
-2	33	31	5
-5	31	32	4

1,K,23

2	32	32	3
5	31	30	2
-4	31	29	2

2,K,23

3	35	37	2
-6	39	44	3

3,K,23

-2	44	43	2

4,K,23

-1	41	38	5

5,K,23

-3	27	30	3
-2	2	9	7<

5,K,18

-1	242	238	18
-4	22	21	2

6,K,18

-3	0	0	0<

7,K,18

-2	35	32	1
-5	26	25	2

8,K,18

-4	25	25	5

0,K,19

2	27	26	1
5	0	20	8<
-1	40	40	0
-4	25	26	4

2,K,24

2	46	48	1
-1	82	85	2

3,K,24

3	48	49	3

4,K,24

-2	53	53	2

5,K,24

-1	127	128	11
-4	51	52	5

6,K,24

-3	52	50	4

0,K,25

2	69	70	1
-1	77	80	1
-4	80	81	7

1,K,25

3	75	80	0
-3	94	98	3

2,K,25

-3	0	0	1M
-6	15	18	4<

8,K,19

-5	17	14	3<

0,K,20

1	49	51	0
4	37	36	3
-2	25	26	1
-5	41	38	2

1,K,20

2	46	47	3
5	40	38	2
-4	40	42	2
-7	30	27	6

2,K,20

3	32	33	2

1,K,26

2	60	62	2
-4	58	60	0

3,K,26

-2	54	57	2

4,K,26

-1	65	68	3

0,K,27

0	70	72	1
3	25	23	4
-3	28	27	1

1,K,27

1	29	29	2

2,K,27

2	31	29	2
-1	27	29	1

4,K,27

-2	22	21	5

0,K,28

Table 3-6

1,K,21

1	32	35	1
4	214	216	17
-5	4	12	10

2,K,21

2	37	39	3
5	19	12	3<
-1	20	17	4
-7	38	36	1

3,K,21

3	15	8	3<

3,K,22

-1	0	0	1M
-7	18	20	3<

4,K,22

-3	0	9	0<

5,K,22

-2	30	28	2

6,K,22

-1	0	0	1M
-4	146	145	6

6,K,23

-2	33	33	3
-5	31	26	2

0,K,24

0	154	159	2
3	70	72	1
-3	52	52	4

1,K,24

1	59	62	1
4	125	128	3
-5	78	82	3

2,K,24

2	0	2	0<

3,K,25

-1	22	17	5

4,K,25

-1	63	66	2
-3	181	191	2

5,K,25

-3	46	48	1
-1	0	4	0<

0,K,26

-2	61	64	4
1	16	19	4<

1,K,28

1	60	63	0
4	56	56	4
-2	72	75	1

3,K,28

1	0	2	0<

0,K,29

1	16	19	4<