

Supplementary Materials: EMP, XRD and Raman Characterization of Ag-bearing Djurleite from the Lubin Mine, Lower Silesia, Poland

Krzysztof Szopa *, Tomasz Krzykawski, Kamila Banasik, Piotr Król, Sylwia Skreczko, Stefania Andriopoulou Mounteanou and Marta Koziarska

Table S1. Relevant parameters of djurleite (structure and profile data).

Global Parameters	
Profile function:	Pseudo Voigt
Background:	Polynomial
R (expected)/%:	1.37608
R (profile)/%:	2.42522
R (weighted profile)/%:	3.45941
GOF:	6.31999
R (Bragg)/%	3.84969
Relevant Parameters of Djurleite	
Formula sum	Cu _{248.00} S _{128.00}
Formula mass/g/mol	19863.09
Density (calculated)/g/cm ³	5.7712
F(000)	9240.00
Weight fraction/%	100.00
Space group (No.)	P 1 21/n 1 (14)
Lattice Parameters	
a/Å	26.885(4)
b/Å	15.706(2)
c/Å	13.533(2)
alpha/°	90
beta/°	89.909(2)
gamma/°	90
V/10 ⁶ pm ³	5715.7730
Fitting Mode (Structure Fit)	
U Left	−0.06(3)
V Left	−0.01(3)
W Left	0.031(7)
Preferred orientation direction/hkl	0.00 0.00 1.00
Preferred orientation parameter	0.989989
Peak Shape	
parameter 1 Left	1.0(1)
parameter 2 Left	−0.006(3)
parameter 3 Left	0.000000

R—values are a measure of the fit quality. The following R-parameters are given: the profile R-value (R_{pr}), the weighted profile R-value (R_{wp}) and the expected profile R-value (R_{exp}). The fit quality of djurleite is described by the Bragg R-value. GOF—the Goodness of Fit. F[000] is the calculated structure factor for the phase. The Cagliotti function, describing the variation of the full width at the half maximum (FWHM) of the peaks with 2Theta position, was refined with the parameters U, V and W.

Table S2. The occupancy, atomic fract. coordinates and biso for djurleite.

Atom	Wyck.	S.O.F.	x	y	z	Biso/10 ⁴ pm ²
CU1	4e	1.000000	0.447800	0.129400	0.190100	1.341437
CU2	4e	1.000000	0.197700	0.001300	0.181100	2.340840
CU3	4e	1.000000	0.199100	0.249700	0.194300	1.552464
CU4	4e	1.000000	0.073800	0.366400	0.318900	2.026331
CU5	4e	1.000000	0.052700	0.114800	0.311200	2.000126
CU6	4e	1.000000	0.046100	0.622500	0.307200	2.526633
CU7	4e	1.000000	0.550000	0.346900	0.483700	1.656664
CU8	4e	1.000000	0.380000	0.609500	0.017100	1.787787
CU9	4e	1.000000	0.394600	0.365600	0.018300	2.420515
CU10	4e	1.000000	0.390700	0.123900	0.014900	1.578781
CU11	4e	1.000000	0.208000	0.710400	0.014400	1.526266
CU12	4e	1.000000	0.196800	0.535500	0.015900	2.026205
CU13	4e	1.000000	0.183900	0.260900	0.017400	3.184486
CU14	4e	1.000000	0.078900	0.395500	0.485800	2.579148
CU15	4e	1.000000	0.051500	0.111700	0.489500	3.548295
S1	4e	1.000000	0.385500	0.370900	0.311400	1.367990
S2	4e	1.000000	0.391800	0.116600	0.312800	1.105640
S3	4e	1.000000	0.603300	0.376700	0.183400	1.288322
S4	4e	1.000000	0.609000	0.130000	0.183800	1.340718
S5	4e	1.000000	0.631800	0.495600	0.311100	1.342155
S6	4e	1.000000	0.648600	0.243000	0.307200	1.209721
S7	4e	1.000000	0.349700	0.504900	0.187100	1.393832
S8	4e	1.000000	0.366000	0.252700	0.195000	1.236992
S9	4e	1.000000	0.105900	0.876100	0.182700	1.157799
S10	4e	1.000000	0.110400	0.622000	0.182200	1.894734
S11	4e	1.000000	0.110000	0.378400	0.190000	1.025965
S12	4e	1.000000	0.112000	0.122200	0.187500	1.078123
S13	4e	1.000000	0.140500	0.501100	0.314900	1.656908
S14	4e	1.000000	0.138900	0.239700	0.311800	1.129927
S15	4e	1.000000	0.143600	0.508000	0.806600	1.052044
S16	4e	1.000000	0.133100	0.747200	0.308500	1.447073
CU16	4e	1.000000	0.443100	0.000799	0.441100	2.051692
CU17	4e	1.000000	0.557000	0.244800	0.063000	2.051692
CU18	4e	1.000000	0.680700	0.371400	0.434100	1.761945
CU19	4e	1.000000	0.071500	0.010100	0.065900	2.394317
CU20	4e	1.000000	0.055900	0.757500	0.055800	1.814940
CU21	4e	1.000000	0.069100	0.491500	0.064300	2.210562
CU22	4e	1.000000	0.191900	0.387400	0.432600	1.683462
CU23	4e	1.000000	0.181700	0.140200	0.438400	2.447550
CU24	4e	1.000000	0.814100	0.384500	0.068300	1.446591
CU25	4e	1.000000	0.309500	0.500500	0.311600	1.789098
CU26	4e	1.000000	0.300500	0.246500	0.306900	1.921532
CU27	4e	1.000000	0.691400	0.254100	0.180600	4.787798
CU28	4e	1.000000	0.550200	0.374500	0.311300	2.342632
CU29	4e	1.000000	0.445100	0.378600	0.194600	2.341677
S17	4e	1.000000	0.158400	0.367400	0.069800	1.342747
S18	4e	1.000000	0.152300	0.136300	0.066900	1.210676
S19	4e	1.000000	0.105700	0.506800	0.443100	1.419083
S20	4e	1.000000	0.100500	0.264400	0.433900	1.130882
S21	4e	1.000000	0.102100	0.009600	0.435500	1.262598
S22	4e	1.000000	0.103500	0.752300	0.431700	1.103848
S23	4e	1.000000	0.362600	0.368600	0.435000	0.973087
S24	4e	1.000000	0.351500	0.125800	0.436600	1.184597
S25	4e	1.000000	0.638100	0.370300	0.061700	2.079683
S26	4e	1.000000	0.662900	0.124700	0.066000	1.053355
CU30	4e	1.000000	0.116100	0.640100	0.482900	2.183171
CU31	4e	1.000000	0.701400	0.033200	0.014800	1.472433
CU32	4e	1.000000	0.463500	0.417600	0.391800	1.419793
CU33	4e	1.000000	0.455700	0.157400	0.392700	1.789098
CU34	4e	1.000000	0.552800	0.089000	0.103500	1.446354
CU35	4e	1.000000	0.295400	0.465400	0.107700	2.289392

CU36	4e	1.000000	0.285700	0.233300	0.112500	5.210099
CU37	4e	1.000000	0.292800	0.042700	0.108700	2.077653
CU38	4e	1.000000	0.046600	0.341100	0.107700	1.499950
CU39	4e	1.000000	0.049600	0.167000	0.107600	2.577710
CU40	4e	1.000000	0.282800	0.492600	0.395400	1.815541
CU41	4e	1.000000	0.269800	0.249900	0.392600	1.946056
CU42	4e	1.000000	0.221100	0.028300	0.387100	3.393721
CU43	4e	1.000000	0.793300	0.225200	0.109500	1.947130
CU44	4e	1.000000	0.488800	0.000600	0.361000	1.893297
CU45	4e	1.000000	0.028200	0.496900	0.144500	2.447195
CU46	4e	1.000000	0.712500	0.402400	0.142800	5.472804
CU47	4e	1.000000	0.462000	0.211600	0.275900	2.104570
CU48	4e	1.000000	0.468900	0.037800	0.270200	1.973328
CU49	4e	1.000000	0.689300	0.361900	0.265600	4.761829
CU50	4e	1.000000	0.326400	0.609000	0.234200	4.973220
CU51	4e	1.000000	0.294500	0.411600	0.231100	2.157566
CU52	4e	1.000000	0.041500	0.459100	0.234000	2.079201
CU53	4e	1.000000	0.050800	0.285700	0.232200	1.921287
CU54	4e	1.000000	0.489100	0.267800	0.137400	5.868788
CU55	4e	1.000000	0.217000	0.830000	0.139000	3.024061
CU56	4e	1.000000	0.218700	0.633500	0.139800	6.183888
CU57	4e	1.000000	0.017400	0.494400	0.359300	2.025968
CU58	4e	1.000000	0.035400	0.744900	0.145500	2.341559
S27	4e	1.000000	0.390300	0.008900	0.064600	1.156961
S28	4e	1.000000	0.606400	0.243300	0.443000	1.051207
S29	4e	1.000000	0.384100	0.487300	0.058700	1.289870
S30	4e	1.000000	0.381600	0.244100	0.056300	1.183878
S31	4e	1.000000	0.148200	0.616700	0.562100	1.421230
S32	4e	1.000000	0.137700	0.627100	0.056900	0.868651
CU59	4e	1.000000	0.206000	0.091400	0.269400	2.893301
CU60	4e	1.000000	0.139200	0.865500	0.263300	3.341925
CU61	4e	1.000000	0.176600	0.646600	0.264400	5.396950
CU62	4e	1.000000	0.616900	0.238500	0.372300	4.765659

S.O.F—site occupancy factor. 1 means the position is 100% occupied; Biso— isotropic displacement parameter. The x, y and z are the atomic coordinates of a structure in units of the unit cell.

Table S3. Selected representative electron microprobe analyses of bornite from the Lubin mine, Poland. Crystal chemical formulae recalculated on basis of 4 S₂[−].

Compound	an.1	an.2	an.3	an.4	an.5	an.6	an.7	an.8	an.9	an.10	an.11	an.12	an.13	an.14	an.15	an.16
Ag (at%)	0.44	0.50	0.50	0.42	0.49	0.47	0.46	0.43	0.43	0.45	0.58	0.38	0.43	0.42	0.47	0.38
Fe	11.06	11.21	11.05	11.09	11.01	11.14	11.05	11.29	11.29	11.35	11.21	11.52	11.25	11.09	11.00	11.22
Cu	63.66	63.00	63.36	62.84	62.89	63.53	62.99	63.04	63.04	62.87	62.67	63.01	63.30	63.38	63.39	63.33
S	25.26	25.42	25.18	24.93	25.01	25.20	25.11	25.18	25.18	25.02	24.91	24.99	25.14	25.00	25.01	25.13
TOTAL	100.47	100.16	100.11	99.44	99.45	100.38	99.64	100.05	100.05	99.78	99.45	99.99	100.24	100.07	99.99	100.21
Ag (apfu)	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
Fe	1.01	1.01	1.01	1.02	1.01	1.02	1.01	1.03	1.03	1.04	1.03	1.06	1.03	1.02	1.01	1.03
Cu	5.09	5.00	5.08	5.09	5.08	5.09	5.06	5.05	5.05	5.07	5.08	5.09	5.10	5.12	5.12	5.09
S	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4	4

b.d.l.—below detection limit; an—analyze no.