AM-79-112

American Mineralogist, Volume 64, pages 1235–1242, 1979

Versiliaite and apuanite: derivative structures related to schafarzikite

MARCELLO MELLINI AND STEFANO MERLINO

Istituto di Mineralogia e Petrografia
C.N.R., Centro di Studio per la Geologia Strutturale e Dinamica dell' Appennino
Via S. Maria 53, 56100 Pisa, Italy

Abstract

Schafarzikite, $FeSb_2O_4$, is tetragonal, space group $P4_2/mbc$, with $a = 8.59$, $c = 5.91$A. The crystal structure is characterized by the presence of edge-sharing iron octahedra connected with corner-sharing antimony ψ-tetrahedra (Fischer and Pertlik, 1975).

Versiliaite is orthorhombic, space group *Pbam*, $a = 8.492$, $b = 8.326$, $c = 11.938$A. Its crystal structure is related to that of schafarzikite in the following manner: every fourth Sb^{3+} ion in the ψ-tetrahedral chains is substituted by a Fe^{3+} ion and a sulphide anion is added between two Fe^{3+} cations in adjacent chains. The corner-sharing Fe^{3+} tetrahedra connect the chains to build double-chain ribbons. The charge balance, altered by the insertion of sulphide anions, is restored by the substitution of Fe^{2+} cations in the octahedral chains by Fe^{3+} cations.

Apuanite is tetragonal, space group $P4_2/mbc$, $a = 8.372$, $c = 17.974$A. Its crystal structure can be derived from that of schafarzikite by substituting every third Sb^{3+} ion in the ψ-tetrahedral chains with an Fe^{3+} cation and adding sulphide anions which connect adjacent chains to build infinite l. vers. As in versiliaite the charge balance is restored by substitution of Fe^{2+} cations in octahe..al chains with Fe^{3+} cations.

The crystal chemistry of these minerals is clarified and the vacancies in sulphide sites as well as the incompleteness in cationic substitutions are explained. The lines for a systematic derivation of possible, yet unknown, related structures are developed.

Introduction

Versiliaite and apuanite were described by Mellini *et al.* (1979); they showed the close chemical, physical, and crystallographic relationships of the two minerals with schafarzikite, $FeSb_2O_4$, from which versiliaite and apuanite can be derived by a concerted mechanism of insertion, substitution, and oxidation.

The aim of this paper is to describe and discuss the main features of their crystal structures and to develop a comprehensive crystal chemistry for the schafarzikite group of minerals.

Structure determination

The experimental parameters characterizing the intensity data collection step are summarized in Table 1. Two equivalent sets were collected for both crystals; the diffraction intensities were corrected for the usual geometrical factors, as well as for absorption by the semiempirical method of North *et al.* (1968); symmetry-related reflections were thereafter checked for equivalence and averaged to produce the unique sets. In the subsequent structure-factor calculations, all the scattering factors for neutral atoms and anomalous dispersion corrections were taken from the International Tables for X-ray Crystallography, or calculated from them when a hybrid curve was used.

Versiliaite

The structure determination was undertaken in the centrosymmetric space group *Pbam*, indicated by the statistical averages and distribution of E_{hkl} values; the choice appeared correct in the subsequent refinement stage. A trial model was built, starting from the parameters given by Fischer and Pertlik (1975) for schafarzikite and taking account of the doubled c parameter. The use of the scattering factors of antimony for atoms at $z = 0.0$ and $z = 0.25$ and of arsenic for an atom at $z = 0.5$ led to the doubling of the c translation. Moreover we used the full reflections set, including the weakest ones corresponding to $l = 2n + 1$. The refinement was led by Fourier syntheses and least-squares cycles for all the three-coordinated and

0003-004X/79/1112-1235$02.00

```
LISTFC

CALL LISTFC FOR CH1

***BENCH MARK  PROGRAM  TOTAL MIN CPU  TOTAL CHARGE UNITS  ELAPSED MIN CPU  ELAPSED CHARGE UNITS
               LISTFC    ********        ********            ********          0.0

INPUT FILE CONTAINS DATA FOR CH1   . IT HAS BEEN WRITTEN   3 TIMES.
FILE LABEL -( NO FILE LABEL                                              )
THE PROGRAMS WHICH HAVE COPIED AND UPDATED THE FILE ARE...
 DATRDN  LOADAT  ORFLS
   H,0,0        H,3,0     6  300  288 2 2477 2335    H,0,1        H,3,1     6  121   90
                          7  484 -484 3   26  -27                           7  384  407
 4 1214 -859 1 3211-3264 8  760  766 4 1390 1326 2  590 -384 1  686 -542 8  561 -572
 6 5125 5548 2  549  439 9 1762-1694 5  413  409 4 1002 -927 2  174  181 9  505 -533
 8 1760-1576 3 3115 283410  716 -771 6  981-1019 6  831  789 3  520  44210  500  531
10  712  745 4  327  343             7  502 -570 8  258 -208 4  284 -291
             5 3969-3889     H,6,0   8 1908 203410  771 -832 5  203 -102     H,6,1
   H,1,0     6  463 -466                                     6  174  152
             7 1908-1789 0 5270 5787     H,9,0       H,1,1   7  688 -641 0  370  335
 1 1215-1145 8   46  -59 1  751  734                         8   36   67 1   21    2
 2  789 -561 9 1979 1977 2 1390-1248 1 2195-2157 1   69   59 9  580  611 2  325 -287
 3 3334-343110   66   78 3  192  174 2  194 -185 2  772  60410   75   64 3  115   94
 4 1522 121511 2083-2104 4  229 -149 3 2025 2055 3  360 -82511  332 -366 4  602 -547
 5  500  407             5  304 -310 4  447  417 4  654 -501               5  166 -176
 6  282 -218    H,4,0    6 4175 4193 5 2033-2006 5  137 -126     H,4,1     6  430  421
 7  522 -483             7   14  -20 6  285 -277 6  296 -311               7  162  183
 8  990 -971 0 1780-1534 8 1393-1427 7 1289-1363 7   93  108 0  461 -417 8  264 -298
 9 2201-2208 1  346 -366 9  226 -231             8  861  870 1  669 -537 9  168  177
10  752  811 2 3032 279210  456  445   H,10,0    9  374 -371 2   68  -510  426 -441
11  211  153 3  338  295                        10  536 -565 3  254 -251
             4 2798 2591    H,7,0    0    0 -10111   92  144 4   68    3     H,7,1
   H,2,0     5  337 -299             1  195  178                 5  971  898
             6  478 -368 1  448 -412 2 1278 1216     H,2,1       6  489 -495 1  189  185
 0 2012-1867 7  127   99 2  945 -931 3   82 -103                 7  561 -526 2  550  478
 1  648 -444 8 1925 1821 3 2207-2079 4 1168 1114 0  666 -496 8    0  -47 3  573 -541
 2 3945 4066 9  157  117 4  640  551 5  310 -392 1  653  494 9  236 -216 4  331 -267
 3 1220-108710  896  820 5  124  -64 6  195 -130 2  236 -23910  149  158 5  195  179
 4 2678 244711  491 -545 6  167  160             3  396  38711  731  792 6  178 -151
 5  708  615             7   97   47   H,11,0    4  229  228               7    0   -2
 6 1101 -951    H,5,0    8  553 -588             5  758 -680     H,5,1     8  554  579
 7   17   65             9 1671-1738 1  212  126 6  598 -545               9  256 -269
 8 2612 2521 1  255  212             2  759  832 7  455  445 1   37  -19
 9  193 -177 2  860  728    H,8,0    3 1887-1920 8   90  -67 2  694 -611     H,8,1
10  929  893 3 3635-3518             4  797 -838 9  171  125 3  377 -268
11  357  397 4 1340-1204 0 1104-1006            10  234  229 4  659  624 0  476 -436
             5  280  250 1  550 -510            11  555 -596 5  172 -153
   H,8,1     4  452  466 9 1008 -967 2 2945-2770    H,8,2    3  192  276 9  101   79
                        10  196 -133 3  115   27                          10  235  231
 1  521  509    H,0,2   11 1202-1232 4 3246 3087 0   17   25     H,0,3    11  373 -409
 2  114  -67                         5  164  177 1 2456 2354
 3    0   39 0  659 -452    H,3,2    6  732 -679 2  172  136 0 1046  867     H,3,3
 4  251  207 2  454  257             7  118 -106 3   82   -4 2  798 -582
 5  460 -467 4  238  750 1  481  359 8 1837-1864 4   44  -38 1 1030 -930 1  820 -684
 6  430 -471 6  554 -465 2  134  -86 9  394  400 5 1895-1929 6 1091 1030 2   47    2
 7  424  465 8  510  430 3  701 -51010 1836 1932 6  309  339 8  426 -379 3  839  688
 8    0  2210  373  322 4  326  187             7 1709 174010  681 -732 4  102  -81
                          5  541  436    H,6,2   8   34   68               5  367 -277
   H,9,1        H,1,2     6  373 -305                            H,1,3     6   90   96
```

1	341	-334
2	109	42
3	500	518
4	136	-105
5	288	-296
6	218	248
7	385	-441
H,10,1		
0	176	-224
1	422	-432
2	121	-9
3	111	10
4	58	-131
5	480	546
6	196	-106
H,11,1		
1	58	29
2	471	-453
3	96	-159
H,5,3		
2	274	-271
3	731	-661
4	271	223
5	77	-8
6	224	212
7	402	425
8	396	-374
9	710	-727
10	256	323
H,6,3		
0	758	740
1	242	-247
2	519	-412
3	146	155
4	632	-601
5	0	-51
6	691	697
7	0	-16
8	383	-423
9	212	233
10	401	-426
H,7,3		
1	111	56
2	377	343
3	472	-457
4	156	-141
5	75	65
6	202	-142
7	115	28
8	462	474
H,2,5		

1	71	-54
2	3892	4230
3	922	695
4	4165	-4350
5	123	-54
6	1065	965
7	327	-309
8	2060	1978
9	545	547
10	2204	-2255
11	99	-19
H,2,2		
0	802	529
1	4002	4359
2	245	257
3	436	-450
4	296	-268
5	2812	-2611
6	507	424
7	2930	2801
8	97	79
9	239	-305
H,8,3		
0	334	-283
1	443	454
2	98	-55
3	27	-10
4	260	246
5	377	-394
6	399	-419
7	378	417
8	82	16
H,9,3		
1	438	-457
2	31	-110
3	590	636
4	114	115
5	400	-428
6	188	160
7	444	-518
H,10,3		
0	481	-502
1	204	-208
2	204	210
3	140	-50
4	18	24
5	398	373
H,11,3		
1	128	111
3	424	-366

7	749	727
8	124	107
9	739	-792
10	135	129
11	264	338
H,4,2		
0	1055	914
1	4043	-4220
2	134	-144
3	435	400
4	134	-115
5	2843	2630
6	528	432
7	2903	-2771
8	269	-271
9	863	820
10	139	137
11	1073	1122
H,5,2		
1	175	176
2	191	-191
3	432	-443
H,0,4		
0	3836	4357
2	3650	-3942
4	3317	-3269
6	2384	2165
8	2788	-2670
10	995	-908
H,1,4		
1	2912	2758
2	725	596
3	1032	-854
4	59	-16
5	3339	3255
6	191	183
7	1561	1450
8	678	-725
9	666	-668
10	342	398
11	1618	1632
H,2,4		
0	3581	-3911
1	2025	-1645
2	145	40
3	631	-544
4	562	-556
5	1171	1001
6	2753	-2639
7	628	-525
1	726	759

0	969	-911
1	515	491
2	527	430
3	321	-318
4	771	757
5	319	-229
6	609	-596
7	366	364
8	367	381
9	260	-203
10	319	328
H,7,2		
1	96	-54
2	2681	2556
3	692	660
4	2958	-2843
5	477	-497
6	755	749
7	78	-42
8	1405	1442
9	510	592
8	428	378
9	153	189
10	569	-511
11	405	364
H,3,4		
1	770	-651
2	314	227
3	5766	6439
4	345	338
5	2248	-2063
6	361	-361
7	281	261
8	119	-173
9	3558	3701
10	158	113
11	1134	-1170
H,4,4		
0	3508	-3535
1	856	671
2	412	-410
3	44	63
4	123	102
5	810	-705
6	2268	-2089
7	704	648
8	100	-109
9	161	-138
10	352	-352
H,5,4		
1	2933	2859
6	442	-417

H,9,2		
1	345	345
2	545	-556
3	574	-567
4	383	349
5	505	524
6	200	-190
7	271	290
H,10,2		
0	1025	1087
1	2190	-2167
2	294	-332
3	301	333
4	261	-306
5	1555	1636
6	504	566
H,11,2		
1	201	-166
2	1403	-1464
2	176	159
3	1629	-1498
4	583	-514
5	2603	2454
6	0	-79
7	1353	1260
8	635	668
9	503	-497
10	409	-506
H,6,4		
0	2540	2431
1	577	577
2	2915	-2806
3	115	89
4	2090	-1969
5	111	-125
6	1940	1915
7	0	-56
8	2317	-2361
9	232	-273
H,7,4		
1	1683	1602
2	459	-444
3	455	-315
4	63	44
5	1851	1778
6	316	303
7	1264	1285
8	417	-430
9	430	-429
3	638	-533

1	69	49
2	499	384
3	661	-525
4	287	-168
5	138	-119
6	410	-430
7	217	191
8	749	736
9	484	-521
10	383	-396
11	140	143
H,2,3		
0	632	-467
1	370	274
2	135	-132
3	230	218
4	274	273
5	495	-429
6	622	-545
7	335	311
8	0	28
H,8,4		
0	2440	-2379
1	417	-823
2	377	375
3	145	144
4	426	-403
5	507	511
6	2064	-2106
7	714	-789
8	482	563
H,9,4		
1	661	-679
2	249	-275
3	3643	3742
4	429	427
5	893	-884
6	225	-203
7	141	-27
H,10,4		
0	1434	-1376
1	455	438
2	296	-275
3	119	-146
4	128	-123
5	466	-519
H,11,4		
1	1483	1424
2	594	681
3	301	-837
H,6,6		

7	857	-844
8	22	-8
9	793	849
10	142	124
11	384	-444
H,4,3		
0	967	-852
1	273	-155
2	312	291
3	209	-221
4	160	171
5	649	579
6	691	-651
7	302	-292
8	149	150
9	241	-228
10	204	141
11	552	594
H,0,5		
0	198	-253
2	112	-17
4	512	-450
6	419	417
8	90	-21
10	563	-623
H,1,5		
1	69	-35
2	1056	893
3	334	-267
4	938	-814
5	286	-282
6	247	-265
7	116	41
8	1039	1075
9	288	-278
10	701	-751
11	41	63
H,2,5		
0	0	69
1	852	728
2	330	-290
3	308	300
4	141	118
5	866	-778
6	272	-206
7	627	563
8	91	-121
9	0	29

10	226	184
11	580	-616
H,3,5		
1	517	-445
2	0	-40
3	180	144
4	107	-97
5	25	24
6	109	113
7	603	-587
8	141	7
9	348	381
10	99	122
H,4,5		
0	313	-279
1	665	-580
2	96	103
3	216	-217
4	61	0
5	958	889
6	370	-370
7	607	-597
8	70	12
9	178	-164
10	139	145
H,5,5		
1	18	-39
2	756	-680
H,1,7		
10	218	-222
H,2,7		
0	656	-603
1	169	-187
2	20	19
3	244	235
4	345	330
5	187	-169
6	698	-638
7	125	35
8	76	100
9	113	214
10	269	271
H,3,7		
1	767	-692
2	106	138
3	1089	1004
4	194	-186
5	576	-521
6	142	120

4	752	738
5	132	-147
6	154	87
7	278	325
8	675	-700
9	529	-535
10	559	640
H,6,5		
0	119	67
1	179	-224
2	51	-57
3	43	82
4	355	-296
5	0	-43
6	252	220
7	94	48
8	129	-110
9	204	206
H,7,5		
1	82	-22
2	769	722
3	264	-265
4	553	-550
5	51	-74
6	124	-83
7	128	-103
8	646	727
H,8,5		
0	0	-52
10	129	51
H,4,7		
1	183	73
2	134	133
3	203	-202
4	193	200
5	379	355
6	570	-557
7	139	-100
8	56	69
9	314	-266
10	205	203
H,5,7		
1	169	154
2	193	-218
3	583	-545
4	159	154
5	59	17
6	145	108
7	391	415
8	207	-192
9	610	-675

2	184	-172
3	52	24
4	189	175
5	627	-659
6	122	-148
7	596	637
H,9,5		
1	254	-253
2	208	-144
3	200	215
4	124	84
5	235	-214
6	204	179
H,10,5		
0	253	-220
1	502	-489
2	187	109
3	169	-6
4	165	-73
5	541	612
H,11,5		
1	64	-18
2	495	-459
H,0,6		
0	428	-268
2	164	59
4	654	582
7	132	108
8	379	-445
H,7,7		
1	209	214
2	132	99
3	690	-678
4	45	53
5	273	319
6	197	-162
7	145	74
8	264	280
H,8,7		
0	485	-549
1	76	82
2	39	109
3	107	27
4	275	253
5	105	-126
6	530	-604
7	143	135
H,9,7		

8	334	307
10	312	319
H,1,6		
1	98	-70
2	3469	3309
3	800	661
4	3621	-3528
5	56	-81
6	849	769
7	230	-206
8	1859	1790
9	503	519
10	1966	-2034
11	33	-41
H,2,6		
0	429	286
1	3658	3631
2	172	162
3	574	-449
4	297	-260
5	2461	-2310
6	338	324
7	2676	2535
8	87	53
9	947	-928
10	173	-163
H,3,6		
1	498	411
2	236	-129
1	134	-101
2	36	84
3	16	-33
H,0,8		
0	5495	6665
2	1513	-1341
4	640	-521
6	4091	4145
8	1315	-1285
10	648	578
H,1,8		
1	561	-510
2	476	-384
3	2634	-2550
4	821	718
5	360	313
6	152	-108
7	423	-369
8	718	-743
9	1766	-1823
10	577	662

4	201	212
5	571	496
6	306	-275
7	642	613
8	148	86
9	668	-712
10	214	128
H,4,6		
0	692	592
1	3612	-3592
2	137	-109
3	407	393
4	136	-134
5	2487	2310
6	373	360
7	2627	-2552
8	220	-205
9	787	797
10	124	65
H,5,6		
1	159	166
2	2529	-2342
3	138	72
4	2734	2585
5	151	174
6	584	-542
7	45	-72
8	1649	-1684
9	351	380
8	2000	2007
9	129	-112
10	729	748
H,3,8		
1	2499	-2449
2	244	174
3	2440	2297
4	206	228
5	3052	-2940
6	313	-312
7	1470	-1413
8	31	-45
9	1488	1645
10	146	66
H,4,8		
0	1027	-950
1	132	-90
2	2084	1967
3	194	177
4	1960	1842
5	301	-275
6	345	-331

0	787	-722
1	409	366
2	347	290
3	254	-245
4	647	607
5	186	-178
6	538	-530
7	333	289
8	205	275
9	228	-160
H,7,6		
1	129	-72
2	2308	2229
3	722	697
4	2572	-2540
5	470	-484
6	648	659
7	47	-3
8	1250	1325
H,8,6		
0	124	24
1	2222	2204
2	158	75
3	145	-41
4	110	-61
5	1724	-1784
6	240	285
7	1626	1672
H,9,6		
5	253	244
6	179	204
7	411	-386
8	609	613
9	1401	-1458
H,6,8		
0	4199	4306
1	521	501
2	1015	-954
3	95	89
4	146	-150
5	253	-234
6	3310	3411
7	100	8
8	1123	-1192
H,7,8		
1	352	-282
2	678	-684
3	1751	-1691
4	469	441
5	113	-41
6	123	120

1	371	360
2	540	-529
3	548	-558
4	394	370
5	498	537
6	215	-205
H,10,6		
0	852	849
1	2022	-2002
2	264	-283
3	292	304
4	295	-293
H,0,7		
0	1062	933
2	612	-476
4	1031	-971
6	1110	1065
8	412	-390
10	745	-785
H,1,7		
1	219	194
2	210	152
3	784	-677
4	79	-8
5	135	137
6	279	-294
7	187	188
8	425	420
9	529	-578
6	806	-854
H,9,8		
1	1723	-1788
2	51	-155
3	1600	1721
4	360	333
5	1664	-1725
H,10,8		
0	155	-89
1	130	164
2	1022	1015
H,0,9		
0	291	-269
2	89	-37
4	382	-349
6	212	218
8	31	-10
10	498	-543
H,1,9		

7	717	-737								H,2,8			7	154	139	7	75	10	
8	49	-4		H,6,7		1	485	-503					8	1520	1480				1 46 -30
9	946	988				2	124	74	0	1285	-1181		9	116	79		H,8,8		2 826 734
			0	808	811	3	815	865	1	448	-370								3 30 24
	H,4,7		1	18	17	4	94	-85	2	2755	2634			H,5,8		0	915	-862	4 303 -731
			2	474	-443	5	471	-509	3	594	-541					1	445	-453	5 226 -247
0	621	-633	3	116	110				4	1895	1728		1	213	153	2	1883	1870	6 174 -176
			4	658	-657		H,10,7		5	500	480		2	592	545	3	13	0	7 64 29
	H,3,7		5	147	-136				6	792	-734		3	2733	-2648	4	1083	1090	8 984 975
			6	766	781	0	352	-377	7	59	-49		4	899	-849	5	287	355	
	H,1,9		4	132	-134	5	37	-21	7	280	-239		5	1900	1831		H,8,10		1 205 -156
			5	996	1006	6	164	-93	8	1442	1459		6	400	423				2 122 107
9	124	-64	6	219	-221	7	75	-50	9	284	359		7	2042	-2053	0	0	38	3 159 92
10	660	-733	7	764	-791								8	222	-231	1	1670	1694	4 273 288
			8	59	-80		H,8,9			H,2,10						2	113	110	5 40 -32
	H,2,9		9	176	-71									H,5,10		3	48	-10	6 592 -616
						0	183	-168	0	381	302					4	0	-24	7 0 -5
0	0	-65		H,5,9		1	706	768	1	2668	2525		1	118	50	5	1334	-1445	8 118 164
1	973	914				2	166	-151	2	83	117		2	2046	-1971				
2	262	-234	1	144	-106	3	152	19	3	324	-281		3	40	22		H,9,10		H,3,11
3	227	214	2	721	-706	4	156	119	4	142	-122		4	2243	2215				
4	104	49	3	98	56	5	601	-658	5	1555	-1777		5	77	78	1	207	221	1 603 -574
5	937	-881	4	761	782				6	337	325		6	656	-522	2	355	-366	2 51 26
6	246	-219	5	187	-201		H,9,9		7	2008	1997		7	27	-111				3 986 941
7	709	719	6	132	39				8	45	26		8	1371	-1411		H,0,11		4 29 -36
8	165	-133	7	259	245	1	116	-64	9	641	-671								5 434 -458
9	71	-21	8	673	-756	2	104	-27						H,6,10		0	1179	1124	6 130 52
						3	135	47		H,3,10						2	654	-598	7 682 -712
	H,3,9			H,6,9		4	29	-65					0	614	-639	4	818	-815	8 133 -26
									1	187	205		1	386	371	6	1077	1109	
1	141	-79	0	140	-133		H,0,10		2	159	-61		2	361	370	8	511	-551	H,4,11
2	73	48	1	0	-35				3	398	-383		3	219	-211				
3	148	-179	2	0	-45	0	389	-369	4	138	117		4	505	512		H,1,11		0 747 -772
4	204	-153	3	33	35	2	318	278	5	174	202		5	266	-174				1 109 176
5	283	278	4	253	-218	4	517	459	6	197	-185		6	389	-489	1	217	186	2 278 272
6	113	100	5	35	-133	6	373	-399	7	494	481		7	274	293	2	111	-89	3 184 -132
7	290	-311	6	38	35	8	379	419	8	69	67					3	582	-537	4 205 228
8	99	51	7	136	170				9	541	-602			H,7,10		4	256	246	5 134 132
9	138	95	8	21	-69		H,1,10									5	32	135	6 626 -623
										H,4,10			1	125	-77	6	318	-315	7 160 19
	H,4,9			H,7,9		1	52	-91					2	1855	1886	7	267	255	8 210 216
						2	2724	2562	0	670	638		3	394	408	8	218	230	
0	0	-77	1	136	64	3	359	323	1	2712	-2607		4	2115	-2148				H,5,11
1	882	-853	2	677	686	4	2898	-2775	2	151	-147		5	324	-338		H,2,11		
2	105	-65	3	182	-165	5	113	-40	3	305	281		6	561	580				1 226 230
3	137	-140	4	523	-547	6	736	690	4	85	-58					0	669	-590	
	H,5,11		0	2405	2323	6	224	-202	3	227	-242			H,3,13			H,7,13		4 119 142
			2	2372	-2291	7	149	123	4	130	81								5 303 326
2	86	70	4	1894	-1806								1	102	-89	1	0	-45	
3	618	-613	6	1510	1523		H,4,12			H,8,12			2	54	-33	2	700	791	H,4,14
4	183	-162	8	1848	-1933								3	225	-189				
5	151	146				0	2145	-2011	0	1602	-1685		4	145	-55		H,0,14		0 280 262
6	219	193		H,1,12		1	375	333	1	549	-540		5	175	180				1 2021 -2011
7	338	382				2	284	-140					6	136	80	0	109	-191	2 135 -98
			1	1618	1471	3	20	38		H,0,13						2	44	33	3 263 257
	H,6,11		2	133	33	4	0	8						H,4,13		4	254	267	4 55 -101
			3	591	-543	5	432	-419	0	559	-513					6	237	-299	5 1419 1430
0	946	993	4	106	118	6	1461	-1451	2	250	233		0	72	111				
1	139	-118	5	1933	1827	7	377	431	4	90	-50		1	661	-680		H,1,14		H,5,14
2	543	-536	6	28	82				6	79	-87		2	144	-47				
3	197	135	7	972	942		H,5,12						3	158	-111	1	127	-48	1 88 82

4	589	-621	9	417	-465				H,1,13			4	76	-81	2	1822	1768	2	1414-1395
5	99	-51				1	1710	1633				5	757	816	3	365	370	3	116 68
6	852	897	H,2,12			2	96	216	1	33	-71	6	29	-48	4	1962	-1938	1	1485 1552
						3	937	-922	2	888	856				5	74	-65		
	H,7,11		0	2358	-2218	4	356	-380	3	47	-6		H,5,13		6	459	433		H,6,14
			1	744	-646	5	1610	1598	4	872	-883								
1	90	143	2	80	117	6	58	-15	5	239	-222	1	0	-97		H,2,14		0	395 -412
2	44	-35	3	246	-209				6	13	-61	2	709	-746				1	222 199
3	463	-473	4	361	-271		H,6,12		7	27	-32	3	111	-38	0	257	101	2	43 140
4	167	160	5	533	549							4	789	837	1	2018	1956		
5	202	206	6	1712	-1738	0	1655	1655		H,2,13		5	190	-152	2	117	32		H,0,15
			7	330	-356	1	338	316							3	289	-277		
	H,8,11		8	231	276	2	1856	-1859	0	276	228		H,6,13		4	173	-157	0	927 992
						3	91	35	1	755	748				5	1369	-1394	2	444 -455
0	342	-431		H,3,12		4	1322	-1333	2	227	-219	0	366	-314	6	89	161	4	662 -664
1	90	50				5	114	-82	3	214	165	1	30	-102					
2	32	99	1	512	-463				4	47	7	2	202	166		H,3,14			H,1,15
3	27	-25	2	38	38		H,7,12		5	722	-767	3	79	7					
			3	3693	3674				6	92	55	4	114	-22	1	261	270	1	271 199
	H,0,12		4	160	187	1	1054	1051	7	553	624				2	0	-89	2	164 -132
			5	1291	-1221	2	258	-305							3	299	-349	3	542 -581
	H,1,15		1	330	-324		H,3,15					1	221	201				1	191 -236
			2	142	174				0	507	-540				1	232	-169	2	1363 1314
4	207	236	3	81	102	1	519	-570	1	244	278		H,0,16		2	131	-200	3	258 -186
5	200	211	4	294	300	2	0	56	2	191	212				3	1374	-1425		
			5	132	116	3	896	978	3	106	-112	0	3106	3120					H,3,16
	H,2,15					4	55	-73				2	691	-689		H,2,16			
										H,5,15								1	1314-1378
0	463	-510					H,4,15						H,1,16		0	563	-610	2	50 47

LISTFC

CALL LISTFC FOR CH4

***BENCH MARK PROGRAM	TOTAL MIN CPU	TOTAL CHARGE UNITS	ELAPSED MIN CPU	ELAPSED CHARGE UNITS	DATE(M/D/Y)
LISTFC	********	********	********	0.0	1/**/1972

INPUT FILE CONTAINS DATA FOR CH4 . IT HAS BEEN WRITTEN 3 TIMES.
FILE LABEL -(NO FILE LABEL
THE PROGRAMS WHICH HAVE COPIED AND UPDATED THE FILE ARE...
DATRDN LOADAT FC

```
   H,0,0      4  180  158     H,7,0      6  126 -141     H,6,1     10  147 -11410  137  -99
              5 4770-5035                7  863 -846               11   36 -13511    0   90
 2 2536-2553  6  427  448  7  137   44  8   13   38  7  133   80
 4 1618-1434  7 2357-2331  3  373  359  9  259 -239  8   73   -7     H,2,2          H,5,2
 6 7117 7748  8  200 -154  9 1710-169810   58   54  9  432 -372
 8 1606-1578  9 2340 2356                11  983  98410   47  -94  2  441  445  5  331  307
10  577  53310   22   17     H,8,0                                   3  100   86  6  107   55
           11 2440-2409                   H,3,1          H,7,1     4  249 -260  7  467 -503
    H,1,0                  8 2461 2452                              5    0   -4  8    0  -21
                H,4,0                      4  536  560  8  860 -891  6  816  765  9  649  710
 2  267  287                H,0,1      5   34  -38  9    0    4  7    0 2410     73   58
 3 4079-4582  4 3572 3665                6  194 -187               8  207  165
 4 1073-1028  5  311 -294  2    0    6  7  166  175     H,8,1      9   97 -110     H,6,2
 5  513  455  6  203 -135  4  309 -318  8  105  -90               10  292 -256
 6  185  154  7  364  327  6  310  320  9    0   33  8    0   011    0   27  6  869 -864
 7  687 -688  8 2064 2066  8  108   7810  130   -8                                7   73  127
 8  616  654  9  195 -21910  238 -26411  234 -273     H,0,2          H,3,2      8  538  605
 9 2707-266210 1291 1254                                                        9   21  -29
10  343 -28411  206  191     H,1,1          H,4,1     0  897 -772  3 1012 -91410  625  582
11  236  205                                          2 1099  925  4   86 -119
              H,5,0      2 1295-1147  5 1436-1431  4 1425 1390  5  481  409     H,7,2
    H,2,0                3   89   78  6   63   -54  6 1161-1145  6    0   45
           5  419  385  4 1148 1019  7  676  687  8  522  526  7 1189 1169  7   65  -49
 3 1433 1389  6    0  -16  5   87   55  8  117 -11810 1052 1056  8   68   87  8   29  -66
 4 3663 3773  7  451 -457  5  324  347  9  464  421                9  953 -996  9  623  644
 5   54   -8  8  325 -354  7  158 -17710   28  125     H,1,2     10   79    3
 6 1402-1332  9 2187-2202  8 1243-124611 1096-1070                11  347  419     H,8,2
 7  922 -92910   59  -50  9   45  -25                        1   63  -85
 8 3283 3284              10  748  805     H,5,1             2   20  -12     H,4,2      8  110   91
 9  453  461     H,6,0    11  191  191                       3 1164 1054
10 1335 1336                          6   28   50  4    0  -14  4   53  -98     H,0,3
11    0   23  6 5234 5466     H,2,1    7   36   26  5  157  175  5   96  106
           7  421  483                 8  960  990  6    0  -62  6 1065 1057  2  462  399
    H,3,0      8 1372-1406  3  556 -566  9   44  -15  7  251 -264  7  195 -195  4  243 -250
           9   78  -47  4   82   8110  864 -908  8  208  185  8  204 -189
 3 3760 377010  355  257  5 1309 1283                9  692  671  9   56   38
    H,0,3      7  476 -491     H,0,4          H,3,4     9   71   38  5  834  803     H,6,5
           8    0   57                                              6   54  -12
 6  215 -218  9  216  202  0 1793-1656  3 1401-1319     H,7,4      7  688 -695  7  303  246
 8  131  13510  411  304  2 1270 1106  4   51  -38                8   90  131  8   89 -134
10  142  -9611  274  318  4 1772 1734  5  840  763  8    0 -114  9   88  -24  9  372 -339
                          6 1583-1589  6   26  -36  9  727  74310   70  -81
    H,1,3          H,4,3   8  609  573  7 1251 1262               11  613  640     H,7,5
                          10 1194 1179  8   78  111     H,8,4
 2 5220 6011  5 3694 3730                9 1225-1228
 3  165 -140  6  388  411     H,1,4     10    0   47  8  157   77          H,3,5      8  815 -832
 4 5506-5921  7 3605-3647                11  579  639                              9  122   92
 5  104  -89  8  198 -174  1  124 -118                                4  286  300
                                                        H,0,5      5  217  223     H,0,6
```

6	1058	1065	9	830	793	2	11	-2	H,4,4						6	208	-201						
7	372	378	10	0	-83	3	1355	1214				2	184	-188	7	167	-182	0	5252	6130			
8	2719	2684				4	0	-43	4	252	-292	4	95	89	8	50	14	2	4867	-5522			
9	145	-102		H,5,3		5	155	31	5	122	137	6	185	184	9	28	106	4	4394	-4590			
10	2732	-2670				6	66	43	6	1212	1211	8	171	-162	10	43	-26	6	3087	2937			
11	256	-289	6	626	-614	7	281	-254	7	130	-153	10	26	69	11	56	-68	8	3342	-3296			
			7	121	109	8	66	77	8	334	-333							10	1323	-1257			
	H,2,3		8	2167	-2228	9	844	841	9	25	-64		H,1,5			H,4,5							
			9	205	-210	10	210	-161	10	141	-183								H,1,6				
3	413	-442	10	1999	2052	11	159	-186				2	953	-829	5	838	-822						
4	330	348							H,5,4			3	128	124	6	154	-138	1	3798	4109			
5	3569	-3547		H,6,3			H,2,4					4	552	451	7	413	447	2	1682	-1546			
6	162	-175							5	152	124	5	134	-142	8	32	30	3	914	-819			
7	3470	3486	7	727	755	2	298	304	6	103	33	6	665	680	9	235	190	4	643	602			
8	54	-105	8	314	340	3	56	53	7	444	-469	7	23	22	10	101	32	5	4201	4379			
9	998	-994	9	348	-338	4	447	-464	8	50	52	8	1159	-1160				6	115	-103			
10	94	190	10	276	-303	5	75	-44	9	841	902	9	0	-66		H,5,5		7	2198	2094			
11	1521	-1512				6	940	891	10	114	81	10	484	531				8	211	195			
				H,7,3		7	42	46				11	54	48	6	215	-189	9	698	-721			
	H,3,3					8	131	92		H,6,4					7	198	200	10	146	151			
			8	1790	1836	9	37	-88					H,2,5		8	800	822	11	1961	1903			
4	470	480	9	148	137	10	427	-394	6	1211	-1207				9	131	-131						
5	233	107				11	106	5	7	37	-7	3	198	-212	10	623	-631						
6	435	-449							8	613	669	4	132	-133									
	H,2,6		5	3349	3364	4	1331	1233	8	62	30	4	215	-231	6	748	745	2	4572	4826			
			6	280	329	5	116	-109	9	218	182	5	264	241	7	44	-32	3	157	-102			
3	882	875	7	1988	1978	6	540	563	10	79	73	6	31	66	8	199	-168	4	4677	-4893			
4	760	-765	8	159	-127	7	82	-70				7	73	-92	9	59	-76	5	0	-40			
5	804	-784	9	715	-719	8	1576	-1593		H,5,7		8	149	165	10	138	-125	6	832	826			
6	3528	-3604	10	234	-289	9	84	-47				9	534	548				7	299	273			
7	173	-169				10	892	918	6	153	-103	10	150	-177		H,5,8		8	2458	2457			
8	549	557		H,6,6		11	154	122	7	192	176	11	0	-56				9	47	-77			
9	167	187							8	1177	1202				5	306	275	10	2459	-2431			
10	617	-551	6	2308	2343		H,2,7		9	50	-100		H,2,8		6	53	9						
11	125	-113	7	506	502				10	923	-967				7	254	-293		H,2,9				
			8	2701	-2731	3	231	-252				2	515	505	8	19	-11						
	H,3,6		9	29	45	4	130	-148		H,6,7		3	205	205	9	556	640	3	476	-452			
						5	1393	1338				4	171	-194				4	322	335			
3	7735	9063		H,7,6		6	42	-12	7	217	163	5	69	7		H,6,8		5	3076	-3035			
4	67	48				7	1163	-1152	8	176	-167	6	396	352				6	189	-184			
5	2296	-2284	7	1623	1639	8	156	141	9	389	-348	7	66	-116	6	548	-521	7	3121	3116			
6	314	315	8	112	97	9	88	51				8	293	265	7	0	38	8	78	-118			
7	248	145	9	94	-102	10	117	-88		H,7,7		9	29	-1	8	214	263	9	935	-956			
8	57	48				11	934	944				10	316	-283	9	63	101	10	241	218			
9	4535	4631		H,8,6					8	1097	-1127												
10	113	12					H,3,7						H,3,8			H,7,8			H,3,9				
11	1127	-1141	8	651	724					H,0,8													
						4	295	328				4	15	12	7	75	93	4	473	473			
	H,4,6			H,0,7		5	194	182	0	52	192	5	390	372	8	39	-14	5	107	41			
						6	206	-156	2	294	169	6	102	39				6	399	-377			
4	164	93	2	208	-210	7	58	-64	4	857	847	7	902	904		H,0,9		7	328	-342			
5	488	488	4	62	54	8	71	-30	6	596	-588	8	23	47				8	160	21			
6	2586	-2527	6	245	264	9	67	72	8	171	127	9	593	-654	2	325	331	9	132	150			
7	390	-391	8	153	-149	10	26	-52	10	863	856	3	561	-545	4	311	-308	10	296	289			
8	414	-377	10	0	18							10	45	51	6	191	-136						
9	107	-126					H,4,7			H,1,8					8	158	189		H,4,9				
10	396	-287		H,1,7									H,4,8		10	192	-183						
						5	1383	-1416	1	27	-27							5	3160	3182			
	H,5,6		2	1671	-1546	6	203	-197	2	112	128	4	0	-54		H,1,9		6	360	382			
			3	148	140	7	888	925	3	896	819	5	31	7									
	H,4,9		2	228	235	5	42	2		H,1,11		7	136	160	10	271	-226	7	367	-352			

```
             3 1374 1313 6 1139 1130             6    0   41             8  296 -272
 7 3226-3257 4  128 -141 7  103 -119 2  271 -215 8   93 -117   H,2,12    9 1895-1857
 8  191 -195 5  217 -176 8  279 -281 3   46    5 9  443  382
 9  810  785 6   91  -24 9   92   45 4  181  146             2 3770 3852   H,6,12
10   22  -56 7  368 -34010  240 -224 5   57   50   H,5,11    3  745  752
             8  151  130             6  290  270             4 2649 2624 6 4152 4378
   H,5,9     9  893  896   H,5,10    7   51  -77 6    0   15 5   75  -24 7  384  380
            10  124 -155             8  573 -565 7    0   -4 6 1067-1043 8 1142-1183
 6  509 -402             5  177   50 9   68  -33 8  460  461 7  661 -662
 7   62   52   H,2,10    6   57   -910  294  349 9   55  -15 8 2644 2596   H,7,12
 8 1999-2035             7  627 -615                         9  384  364
 9  216 -159 2    0   46 8   61    4   H,2,11      H,6,11   10 1110 1100 7   84  -31
             3   81  -30 9  858  930
   H,6,9     4  396 -401             3  357 -353 7  135  106   H,3,12      H,0,13
             5   86  118   H,6,10    4  117  112 8    0   58
 7  633  638 6  941  918             5  551  563             3 3032 2968 2    0  -63
 8  317  346 7   90   15 6 1268-1267 6  158 -122   H,0,12    5 3727-3768 4  132 -105
 9  314 -278 8    0  -61 7    0   51 7  227 -275             6  280  297 6  208  248
             9  116 -124 8  679  770 8   49   -2 2 1657-1632 7 1898-1848 8   80  -12
   H,7,9    10  379 -320 9    0  -60 9  356 -290 4  955 -888 8  130 -11610  198 -166
                                    10   31   85 6 5556 5764 9 1900 1951
 8 1636 1728   H,3,10      H,7,10                8 1290-1292               H,1,13
                                       H,3,11   10  500  411   H,4,12
   H,0,10    3 1815-1763 7   87 -142                                     2 1503-1458
             4   57 -102 8   86  -75 4  375  376   H,1,12    4 2629 2606 3   97 [illegible]
 0 1775-1659 5  893  911             5  114  -54             5  197 -156 4 1369 1361
 2 1090  974 6    0   12   H,0,11    6  194 -17[illegible] 1  752 -822 6  199 -166 5   41   17
 4 1515 1499 7 1307 1303             7  102   92 2  171  148 7  234  236 6  256  249
 6 1591-1608 8  110   79 2   84   74 8  104  -40 3 3272-3352 8 1685 1661 7  117 -153
 8  711  705 9 1427-1457 4  197 -229 9    0   44 4  521 -531 9  200 -186 8 1404-1438
10 1131 109310   22   -4 6  169  15810   85   24 5  536  349             9   44  -16
                         8   47   96             6  121   64   H,5,12   10  933 1019
   H,1,10      H,4,10    9   69    0   H,4,11    7  547 -494
                        10  227 -220             8  511  493 5  361  353
 1  311 -314 4  347 -353             5  599 -635 9 2247-2182 6    0   24
   H,2,13      H,0,14    7  560  548 5  110 -103   H,6,15      H,3,16    2   82  -30
                         8   36   58 6  767  767                         3   48   28
 4    0  -24 0  172  102 9  248 -289 7  252  272 7  580  595 3 1569-1546 4  181 -157
 5 1402 1403 2  295  290             8 1891 1905             4   70  -40 5   51  -69
 6   61  -64 4  528  574   H,4,14    9  119  -75   H,0,16    5  788  843 6  408  404
 7 1099-1129 6  277 -347                                     6   64  -63 7    0   63
 8   58   66 8  238  222 4  106  137   H,2,15    0 1954-1965 7 1028 1063 8  405 -415
 9   69  -60             5  136  153             2 1078 1077 8   70  106
               H,1,14    6  546  553 3  303 -261 4 1415 1445               H,2,17
   H,3,13                8   97  -80 4  145  157 6 1685-1743   H,4,16
             2  180 -216 7  176 -192 5 2436-2438 8  673  738             3  150 -102
 4  308  328 3  234  228             6   77  -91             4  379 -375 4    0  -23
 5    0    5 4  112  124   H,5,14    7 2485 2462   H,1,16    5   91  116 5  172  175
 6  107 -110 5  274  289             8  120  -55             6 1066 1087 6    0  -19
 7  155  142 6    0  -59 5  341  333 9  711 -674 1  326 -293 7   89 -147 7   73 -141
 8  134  -70 7  126 -117 6  103   92             2   93  -26 8  380 -381 8  106   68
 9    0   25 8  119   77 7  238 -227   H,3,15    3 1011 1007
             9  207  225 8  107  -36             5  255 -231   H,5,16      H,3,17
   H,4,13                            4  333  301 4   63   35
               H,2,14      H,6,14    5  127  142 6   41   32 5    0 -123 4  119  150
 5 1519-1533                         6  323 -288 7  344 -314 6   57   13 5  116  113
 6   75 -120 2  375  346 6  276 -292 7  396 -394 8    0   -8 7  467 -475 6  164 -145
 7  967 1007 3   96  104 7  141  146 8   70   39 9  795  813             7  150 -161
 8  131  -46 4   64  -55                                       H,6,16    8   62   43
 9  316  260 5  119 -127   H,0,15      H,4,15      H,2,16
             6  279  361
                                                             6 1327-1412   H,4,17
```

H,5,13

6	86	55
7	81	44
8	1135	1174

H,6,13

7	114	34
8	45	-83

H,0,18

0	3192	3220
2	3068	-3063
4	2583	-2530
6	1962	1989
8	2329	-2259

H,1,18

1	2129	2105
2	505	-486
3	565	-576
4	259	246
5	2471	2448
6	57	-84
7	1328	1323
8	89	137

H,2,18

2	171	175
3	379	379
4	454	-329
5	363	-381
6	2331	-2317
7	52	-119
8	478	375

7	84	52
8	314	233
9	54	-68

H,3,14

H,6,13

3	68	98
4	0	-49
5	197	-157
6	32	43

H,3,18

3	4927	5063
4	88	43
5	1370	-1384
6	210	172
7	158	39

H,4,18

4	135	42
5	279	269
6	1741	-1688
7	210	-238

H,5,18

5	2176	2131
6	191	204

H,0,19

2	247	-88
4	13	10
6	165	182

H,1,19

2	1348	-1364
3	90	56
4	1203	1270

2	143	144
4	178	-109
6	171	-121
8	47	62

H,1,19

0	674	678
2	287	-253
4	104	87
6	174	138

5	2609	2614
6	243	238
7	2640	-2663
8	0	-103

H,5,15

2	3462	3477
3	80	-28
4	3647	-3694
5	44	-23
6	273	232
7	26	-99

H,2,19

3	71	-137
4	48	-75
5	1217	1250
6	39	-10
7	1053	-1128

H,3,19

4	205	183
5	37	50
6	36	-72
7	80	51

H,4,19

5	1272	-1338
6	118	-147

H,0,20

0	674	678
2	287	-253
4	104	87
6	174	138

6	526	-470
7	113	131
8	1620	-1668

H,1,20

1	148	55
2	133	119
3	254	274
4	147	-206
5	273	224
6	0	51
7	63	19

H,2,20

2	346	341
3	173	164
4	14	-9
5	14	31
6	173	-81

H,3,20

3	154	44
4	69	34
5	101	37
6	64	63

H,4,20

4	64	69
5	89	-72

H,5,20

5	1864	1886

2	130	-126
3	50	-57
4	461	-464
5	98	-32
6	930	954
7	60	120
8	0	-134

5	286	225

H,0,21

2	107	149
4	194	-193

H,1,21

2	2534	2515
3	99	-32
4	2693	-2643
5	0	-18
6	494	439

H,2,21

3	291	-273
4	199	182
5	1804	-1776
6	132	-120

H,3,21

4	292	296
5	0	15

H,4,21

4	363	-380

0	1502	-1594
2	747	813
4	1007	1052

H,1,22

1	303	-319
2	198	131
3	955	978
4	70	-87
5	324	-304

H,2,22

2	143	-210
3	73	-60
4	397	-379
5	134	102

H,3,22

3	1524	-1593
4	59	-67

H,4,22

4	363	-380

H,0,17

2	55	-27
4	13	21
6	94	52
8	130	-92

H,1,17

H,0,22

0	1502	-1594
2	747	813
4	1007	1052

H,1,22

1	303	-319
2	198	131
3	955	978
4	70	-87
5	324	-304

H,2,22

2	143	-210
3	73	-60
4	397	-379
5	134	102

H,3,22

3	1524	-1593
4	59	-67

H,4,22

4	363	-380

5	147	-147
6	0	-24
7	69	-9

H,5,17

5	157	-184
7	92	126

H,0,23

2	43	52
4	30	-106

H,1,23

2	254	194
3	87	-11
4	338	-253

H,2,23

3	166	-142
4	74	74

H,0,24

0	4346	4411
2	821	-848

H,1,24

1	318	-281
2	82	53
3	1863	-1790

H,2,24

2	1370	1853
3	333	329