

Cerite, $\text{RE}_9(\text{Fe}^{3+}, \text{Mg})(\text{SiO}_4)_6(\text{SiO}_3\text{OH})(\text{OH})_3$: its crystal structure and relation to whitlockite

PAUL BRIAN MOORE

*Department of the Geophysical Sciences
The University of Chicago, Chicago, Illinois 60637*

AND JINCHUAN SHEN

*X-ray Laboratory, Graduate School
Wuhan College of Geology, Beijing, China*

Abstract

Cerite, $(\text{Ce}, \text{La}, \text{Nd}, \text{Ca})_9(\text{Fe}^{3+}, \text{Mg}, \text{Al})(\text{SiO}_4)_6(\text{SiO}_3\text{OH})(\text{OH})_3$, rhombohedral, $a = 10.779(6)$, $c = 38.061(7)\text{\AA}$, $Z = 6$, space group $R3c$, is nearly isostructural to whitlockite, $\text{Ca}_9\text{Mg}(\text{PO}_4)_6(\text{PO}_3\text{OH})$. $R = 0.032$ for 1711 independent reflections.

Cerite is related to a large family of "bracelet and pinwheel" structures derived from glaserite, $\text{KNa}_3(\text{SO}_4)_2$. Rods of two kinds run parallel to the c -axis. One rod is partly disordered at $(00z)$ and includes the (SiO_3OH) tetrahedron and $(\text{OH})^-$ groups, the latter bonded to the RE ions. The other rod at (x, y, z) which is fully occupied is based on the corner-, edge-, and face-linkages of $\text{Si}(1)\text{O}_4$ and $\text{Si}(2)\text{O}_4$ tetrahedra and $\text{RE}(1)\text{O}_8\text{OH}$, $\text{RE}(2)\text{O}_8\text{OH}$ and $\text{RE}(3)\text{O}_8\text{OH}$ polyhedra. Omitting the bond to OH, the anhydrous REO_8 group is a polyhedron of order 8 and has maximal point symmetry $D2d$. The OH^- ligands bond through a rhombus-shaped window in this polyhedron. Average distances are $^{[9]}\text{RE}(1)\text{-O} = 2.59$, $^{[9]}\text{RE}(2)\text{-O} = 2.55$, $^{[9]}\text{RE}(3)\text{-O} = 2.59$, $^{[6]}\text{(Mg, Fe}^{3+}, \text{Al)}\text{-O} = 2.07$, $^{[4]}\text{Si}(1)\text{-O} = 1.63$ and $^{[4]}\text{Si}(2)\text{-O} = 1.63\text{\AA}$.

It is suggested that cerite probably has F^- analogues, and is related to a substantial family of rare earth silicates with rhombohedral structures such as cappelenite, okanoganite and steenstrupine.

Introduction

Cerite, a silicate of the rare earths ($=\text{RE}$), was first named and described by Jöns Jacob Berzelius. The mineral from the Bastnäs Mine, Riddarhyttan, Sweden, provided Berzelius and his students with a source for several new rare earth elements, including cerium (Jorpes, 1966).

Cerite has been suspected to be isostructural with whitlockite, $\text{Ca}_9\text{Mg}(\text{PO}_4)_6(\text{PO}_3\text{OH})$, just as beckelite, $\text{Ca}_2\text{RE}_3(\text{SiO}_4)_3(\text{OH})$ is isostructural with apatite, $\text{Ca}_2\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$. In addition, törnebohmitte, $\text{RE}_2\text{Al}(\text{OH})(\text{SiO}_4)_2$, which occurs with cerite at the type locality, is found to be isostructural with fornacite, $\text{Pb}_2\text{Cu}(\text{OH})(\text{AsO}_4)(\text{CrO}_4)$ (Shen and Moore, 1982). Therefore, a structure study of cerite seemed highly desirable. In addition, a suspected kinship with equally complex RE silicates okanoganite, cappelenite and steenstrupine warranted the investigation.

Experimental procedure

Cerites from several sources were studied. We thank Messrs. John S. White, Jr. and Pete J. Dunn, U.S. National Museum of Natural History, Smithsonian Institution for cerite from Bastnäs, Sweden (USNM R3925) and Mountain Pass, San Bernardino County, California (USNM 117769); Dr. Carl A. Francis of Harvard Mineralogical Museum for Riddarhyttan, Sweden material (HMM 86268); and Dr. John W. Adams of Lakewood, Colorado for a related material from Jamestown, Colorado. The chemical investigation by Glass *et al.* (1958) suggested that Mountain Pass material would be more appropriate for study than Bastnäs material. Dr. Howard T. Evans, Jr. traced this original sample studied by Glass *et al.* to the Smithsonian specimen. A nearly equant grain measuring $0.09 \times 0.11 \times 0.12$ mm from Mountain Pass, California was selected for the ensuing study.

Precession photographs indicated good quality of the

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	12	-12	98	87	-1	7	-5	167	168	-1	14	-3	255	254	-2	11	-1	118	115
-1	14	-12	68	69	-2	9	-5	65	63	-6	15	-3	68	65	-4	12	-1	46	55
-1	13	-11	50	30	-1	10	-5	192	185	-3	15	-3	174	178	-1	12	-1	146	140
0	10	-10	486	505	-3	11	-5	55	51	0	2	-2	691	721	-6	13	-1	45	41
-1	12	-10	110	103	-2	12	-5	40	63	-1	4	-2	443	450	-3	13	-1	76	80
0	13	-10	515	512	-4	13	-5	119	115	0	5	-2	1376	1371	-2	14	-1	167	158
-2	14	-10	70	68	-1	13	-5	147	141	-2	6	-2	241	195	-7	15	-1	184	187
-1	11	-9	126	121	-3	14	-5	85	79	-1	7	-2	96	82	-4	15	-1	202	205
-2	13	-9	193	193	-5	15	-5	81	79	-3	8	-2	804	826	-6	16	-1	153	142
-1	14	-9	64	76	0	4	-4	506	463	0	8	-2	470	457	-1	2	0	389	378
-3	15	-9	52	45	-1	6	-4	93	102	-2	9	-2	248	225	0	3	0	1111	1087
0	8	-8	1032	1029	0	7	-4	483	482	-4	10	-2	178	165	-2	4	0	1407	1406
-1	10	-8	346	338	-2	8	-4	587	604	-1	10	-2	70	67	-1	5	0	223	244
0	11	-8	464	462	-1	9	-4	64	51	-3	11	-2	654	655	-3	6	0	1369	1381
-2	12	-8	580	567	-3	10	-4	169	179	0	11	-2	444	436	0	6	0	351	369
-1	13	-8	219	215	0	10	-4	436	449	-5	12	-2	338	335	-2	7	0	660	645
-3	14	-8	189	182	-2	11	-4	137	141	-2	12	-2	235	224	-4	8	0	200	188
-1	9	-7	74	68	-4	12	-4	138	116	-4	13	-2	233	230	-1	8	0	848	843
-2	11	-7	76	78	-1	12	-4	77	58	-1	13	-2	237	230	-3	9	0	358	349
-1	12	-7	232	222	-3	13	-4	141	117	-6	14	-2	204	207	0	9	0	242	241
-3	13	-7	102	96	0	13	-4	133	128	-3	14	-2	207	203	-5	10	0	1113	1123
-2	14	-7	41	30	-5	14	-4	129	124	0	14	-2	255	234	-2	10	0	434	456
-4	15	-7	72	69	-2	14	-4	109	115	-5	15	-2	431	435	-4	11	0	151	159
0	6	-6	213	203	-4	15	-4	85	82	-2	15	-2	251	258	-1	11	0	270	250
-1	8	-6	157	150	-1	5	-3	73	60	-7	16	-2	129	138	-6	12	0	162	151
0	9	-6	179	160	-2	7	-3	146	145	-1	3	-1	52	49	-3	12	0	293	301
-2	10	-6	255	248	-1	8	-3	197	214	-2	5	-1	224	234	0	12	0	80	84
-1	11	-6	272	261	-2	10	-3	124	116	-1	6	-1	114	116	-5	13	0	490	489
-3	12	-6	157	158	-4	11	-3	142	144	-3	7	-1	60	44	-2	13	0	570	558
0	12	-6	73	56	-1	11	-3	289	287	-2	8	-1	124	122	-7	14	0	214	213
-2	13	-6	148	143	-3	12	-3	132	126	-4	9	-1	125	126	-4	14	0	246	228
-4	14	-6	102	112	-5	13	-3	42	51	-1	9	-1	221	210	-1	14	0	217	223
-1	14	-6	95	98	-2	13	-3	55	46	-3	10	-1	145	136	-6	15	0	50	51
-3	15	-6	131	135	-4	14	-3	40	24	-5	11	-1	146	143	-3	15	0	208	187

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

PAGE 2

-5	8	2	816	825	-2	10	3	155	167	-1	10	4	93	86	-2	11	5	118	113	-5	10	6	284	271
-2	8	2	921	920	-7	11	3	141	143	-6	11	4	59	57	-7	12	5	39	38	-2	10	6	591	587
-4	9	2	160	150	-4	11	3	176	185	-3	11	4	238	238	-4	12	5	184	178	-7	11	6	109	99
-1	9	2	347	345	-1	11	3	152	153	0	11	4	59	33	-1	12	5	113	108	-4	11	6	58	38
-6	10	2	163	180	-6	12	3	233	240	-8	12	4	126	124	-9	13	5	113	119	-1	11	6	120	119
-3	10	2	498	510	-3	12	3	60	61	-5	12	4	125	127	-6	13	5	161	153	-9	12	6	159	157
0	10	2	776	771	-8	13	3	48	48	-2	12	4	133	142	-3	13	5	95	94	-6	12	6	34	32
-5	11	2	350	352	-5	13	3	76	82	-7	13	4	184	182	-8	14	5	90	95	-3	12	6	96	78
-2	11	2	215	208	-2	13	3	114	99	-4	13	4	51	52	-5	14	5	82	74	0	12	6	256	259
-7	12	2	334	333	-7	14	3	116	105	-1	13	4	121	127	-2	14	5	100	97	-8	13	6	357	344
-4	12	2	364	352	-4	14	3	103	120	-9	14	4	142	122	-10	15	5	87	78	-5	13	6	159	159
-1	12	2	70	59	-1	14	3	177	167	-6	14	4	62	67	-7	15	5	83	81	-2	13	6	206	198
-6	13	2	424	417	-9	15	3	63	68	-3	14	4	98	107	-4	15	5	124	135	-10	14	6	98	106
-3	13	2	363	363	-6	15	3	146	147	-8	15	4	122	108	-9	16	5	122	125	-7	14	6	39	17
0	13	2	399	378	-3	15	3	85	88	-8	15	4	75	89	-6	16	5	88	90	-1	14	6	136	130
-8	14	2	209	206	-8	16	3	57	64	-5	15	4	175	177	0	16	5	515	518	-9	15	6	51	42
-5	14	2	125	113	-1	16	4	291	286	-10	16	4	41	31	-1	2	6	91	65	-6	15	6	105	99
-2	14	2	123	134	0	16	4	234	233	0	16	5	18	0	-3	3	6	1029	998	-3	15	6	116	118
-7	15	2	263	250	-2	16	4	802	753	-1	16	5	105	108	0	3	6	632	631	-8	16	6	170	162
-4	15	2	111	100	-4	16	4	491	483	-3	16	5	120	110	-2	4	6	69	60	-2	3	7	85	80
-9	16	2	129	132	-1	16	4	332	337	-2	16	5	92	85	-4	5	6	559	551	-1	4	7	106	105
-6	16	2	206	196	-3	16	4	590	565	-4	16	5	164	153	-1	5	6	536	518	-3	5	7	136	133
-1	16	2	95	99	0	16	4	1054	1036	-1	16	5	176	179	-6	6	6	217	199	-5	6	7	108	105
-2	4	2	182	177	-5	6	4	116	85	-6	7	5	174	164	-3	6	6	351	362	-4	6	7	113	107
-4	5	3	83	64	-2	6	4	82	102	-3	7	5	185	185	0	6	6	612	605	-2	6	7	121	109
-1	5	3	215	220	-4	7	4	441	416	-5	7	5	115	115	-5	7	6	734	697	-1	7	7	101	116
-3	6	3	41	47	-1	7	4	138	123	-2	7	5	104	103	-2	7	6	426	429	-6	8	7	229	236
-5	7	3	146	150	-6	8	4	605	599	-7	8	5	66	68	-7	8	6	150	152	-3	8	7	62	55
-2	7	3	50	49	-3	8	4	240	245	-4	8	5	148	149	-4	8	6	193	191	-8	9	7	68	71
-4	8	3	272	279	0	8	4	429	416	-1	9	5	216	214	-1	8	6	295	293	-5	9	7	121	118
-1	8	3	85	80	-5	9	4	135	127	-6	10	5	184	188	-6	9	6	214	201	-2	9	7	145	143
-6	9	3	31	15	-2	9	4	336	325	-3	10	5	90	86	-3	9	6	75	92	-7	10	7	93	91
-3	9	3	107	103	-7	10	4	180	176	-8	11	5	61	49	0	9	6	384	397	-4	10	7	279	280
-5	10	3	55	55	-4	10	4	131	142	-5	11	5	73	85	-8	10	6	255	252	-1	10	7	235	241

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

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	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-9	11	7	81	75	-4	9	8	240	180	-1	8	9	209	196	-4	7	10	497	498	-2	5	11	101	105										
-6	11	7	132	126	-1	9	8	305	297	-6	9	9	249	250	-1	7	10	72	36	-4	6	11	54	56										
-3	11	7	87	80	-9	10	8	351	337	-8	10	9	169	167	-6	8	10	475	472	-1	6	11	266	272										
-8	12	7	181	178	-6	10	8	552	544	-5	10	9	114	117	-3	8	10	1104	1101	-6	7	11	205	202										
-5	12	7	45	38	-3	10	8	521	515	-10	11	9	130	122	0	8	10	552	559	-3	7	11	201	203										
-2	12	7	84	93	0	10	8	444	435	-7	11	9	319	317	-8	9	10	238	237	-5	8	11	64	63										
-10	13	7	104	100	-8	11	8	577	572	-4	11	9	33	37	-5	9	10	490	490	-2	8	11	122	128										
-7	13	7	152	154	-5	11	8	560	556	-1	11	9	222	217	-2	9	10	234	215	-7	9	11	50	55										
-4	13	7	153	152	-2	11	8	267	256	-9	12	9	197	194	-10	10	10	493	496	-4	9	11	150	151										
-1	13	7	305	297	-10	12	8	577	567	-6	12	9	176	174	-7	10	10	714	709	-1	9	11	295	292										
-9	14	7	82	70	-7	12	8	303	287	-3	12	9	169	170	-4	10	10	209	243	-9	10	11	211	219										
-6	14	7	111	110	-4	12	8	290	288	-11	13	9	200	190	-1	10	10	175	172	-3	10	11	224	225										
-3	14	7	173	169	-1	12	8	44	72	-8	13	9	61	61	-9	11	10	285	273	-8	11	11	67	66										
-11	15	7	84	65	-9	13	8	174	160	-5	13	9	90	89	-6	11	10	413	419	-5	11	11	34	16										
-8	15	7	96	108	-6	13	8	401	400	-2	13	9	122	124	-3	11	10	532	525	-2	12	11	169	172										
-5	15	7	60	47	-3	13	8	598	589	-10	14	9	206	203	0	11	10	581	564	-10	12	11	98	86										
-10	16	7	74	65	0	13	8	394	387	-7	14	9	196	191	-11	12	10	121	102	-7	12	11	33	35										
-7	16	7	151	149	-11	14	8	196	184	-4	14	9	143	138	-8	12	10	517	95	-4	12	11	167	164										
0	1	8	670	684	-8	14	8	219	233	-1	14	9	114	117	-5	12	10	245	518	-1	12	11	135	126										
-2	2	8	500	505	-5	14	8	287	290	-12	15	9	39	42	-2	12	10	245	240	-9	13	11	195	196										
-1	3	8	868	886	-2	14	8	85	72	-9	15	9	307	311	-10	13	10	399	389	-6	13	11	265	262										
-3	4	8	289	264	-10	15	8	371	381	-6	15	9	66	54	-7	13	10	352	355	-3	13	11	79	57										
0	4	8	934	906	-4	15	8	369	364	-3	15	9	69	74	-4	13	10	234	237	-8	14	11	57	65										
-5	5	8	1108	1096	-7	15	8	202	201	-8	16	9	58	49	-1	13	10	318	303	-5	14	11	56	53										
-2	5	8	1443	1450	-9	16	8	212	139	-1	16	9	828	806	-12	14	10	62	81	-5	14	11	131	132										
-4	6	8	594	602	-1	16	8	112	108	0	2	10	1897	1943	-9	14	10	201	200	-2	14	11	138	136										
-1	6	8	649	639	-2	4	9	115	111	-2	3	10	800	798	-6	14	10	369	355	-7	15	11	61	67										
-6	7	8	204	201	-4	5	9	348	346	-4	4	10	879	848	-3	14	10	240	241	-4	15	11	252	255										
-3	7	8	481	490	-1	5	9	161	169	-1	4	10	585	586	-1	15	10	231	226	0	0	12	913	901										
0	7	8	769	744	-3	6	9	166	169	-3	5	10	795	789	-8	15	10	263	258	-1	2	12	189	192										
-8	8	8	1021	1025	-5	7	9	107	102	0	5	10	1036	1036	-5	15	10	399	382	-3	3	12	1330	1319										
-5	8	8	820	801	-2	7	9	153	151	-5	6	10	670	666	-7	16	10	163	164	0	3	12	426	457										
-2	8	8	467	466	-7	8	9	240	236	-2	6	10	328	320	-1	3	11	140	151	-2	4	12	644	637										
-7	9	8	267	254	-4	8	9	190	177	-7	7	10	456	462	-3	4	11	43	35	-4	5	12	426	427										

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

PAGE 4

-1	5	12	217	221	-12	15	12	200	216	-11	15	13	72	75	-6	13	14	54	57	-13	14	15	88	87
-6	6	12	321	322	-9	15	12	144	145	-8	15	13	77	76	-3	13	14	126	131	-10	14	15	106	105
-3	6	12	767	779	-6	15	12	98	98	-5	15	13	57	52	0	13	14	134	110	-7	14	15	94	87
0	6	12	490	498	-3	15	12	89	92	0	1	14	138	131	-11	14	14	129	115	-4	14	15	187	178
-5	7	12	595	588	-2	3	13	144	147	-2	2	14	311	482	-8	14	14	117	110	-1	14	15	91	87
-2	7	12	220	213	-1	4	13	111	110	-1	3	14	263	293	-5	14	14	53	51	-9	15	15	73	70
-7	8	12	461	466	-3	5	13	100	94	-3	4	14	160	127	-2	14	14	84	86	-6	15	15	152	146
-4	8	12	407	414	-5	6	13	71	77	0	4	14	255	242	-10	15	14	98	95	-1	1	16	817	779
-1	8	12	516	514	-2	6	13	91	96	-5	5	14	381	382	-7	15	14	54	74	-1	1	16	690	695
-9	9	12	192	194	-4	7	13	67	66	-2	5	14	528	542	-1	2	15	147	149	-2	3	16	425	434
-6	9	12	188	195	-1	7	13	170	173	-4	6	14	123	132	-2	4	15	27	15	-4	4	16	105	108
-3	9	12	137	141	-6	8	13	152	154	-1	6	14	212	189	-4	5	15	92	94	-1	4	16	193	181
0	9	12	304	289	-3	8	13	87	93	-6	7	14	141	133	-1	5	15	184	185	-3	5	16	1069	1067
-8	10	12	187	191	-8	9	13	161	165	-3	7	14	214	208	-3	6	15	31	14	0	5	16	489	501
-5	10	12	721	718	-5	9	13	92	91	0	7	14	293	287	-5	7	15	50	47	-5	6	16	567	573
-2	10	12	567	569	-2	9	13	113	122	-8	8	14	304	316	-2	7	15	61	55	-2	6	16	373	386
-10	11	12	279	283	-7	10	13	100	101	-5	8	14	429	424	-7	8	15	159	158	-7	7	16	837	837
-7	11	12	109	101	-4	10	13	210	213	-2	8	14	138	152	-4	8	15	177	179	-4	7	16	205	208
-4	11	12	169	178	-1	10	13	114	118	-7	9	14	148	148	-1	8	15	213	216	-1	7	16	74	70
-1	11	12	254	250	-9	11	13	67	60	-4	9	14	145	137	-3	9	15	148	143	-6	8	16	177	173
-12	12	12	85	94	-6	11	13	91	96	-1	9	14	85	98	-8	10	15	87	88	-3	8	16	591	607
-9	12	12	264	266	-3	11	13	71	70	-6	10	14	151	155	-5	10	15	51	55	0	8	16	1038	1051
-6	12	12	81	74	-11	12	13	246	248	-3	10	14	240	220	-2	10	15	121	122	-8	9	16	190	188
-3	12	12	214	213	-8	12	13	74	78	0	10	14	173	166	-10	11	15	166	171	-5	9	16	329	331
0	12	12	330	327	-5	12	13	75	75	-11	11	14	266	258	-7	11	15	74	86	-2	9	16	228	251
-11	13	12	393	381	-2	12	13	114	114	-8	11	14	81	69	-4	11	15	208	179	-10	10	16	250	223
-8	13	12	443	450	-10	13	13	135	126	-5	11	14	173	185	-1	11	15	113	106	-7	10	16	343	349
-5	13	12	256	253	-7	13	13	123	123	-2	11	14	80	61	-9	12	15	81	80	-4	10	16	371	372
-2	13	12	295	282	-4	13	13	165	171	-10	12	14	130	131	-6	12	15	133	128	-1	10	16	187	189
-13	14	12	66	62	-1	13	13	152	149	-7	12	14	80	81	-3	12	15	110	117	-9	11	16	118	108
-10	14	12	148	135	-12	14	13	37	44	-4	12	14	75	75	-11	13	15	67	66	-6	11	16	391	400
-7	14	12	134	131	-9	14	13	43	63	-1	12	14	68	62	-8	13	15	60	57	-3	11	16	179	185
-4	14	12	134	130	-6	14	13	133	144	-12	13	14	96	89	-5	13	15	78	70	0	11	16	432	426
-1	14	12	97	77	-3	14	13	53	45	-9	13	14	103	95	-2	13	15	149	154	-11	12	16	96	80

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

PAGE 5

-8	12	16	82	71	-7	12	17	49	46	-2	10	18	488	488	-9	11	19	213	207	-9	10	20	315	311
-5	12	16	151	149	-4	12	17	200	214	-10	11	18	418	421	-5	11	19	158	158	-6	10	20	168	176
-2	12	16	389	395	-1	12	17	262	263	-7	11	18	161	161	-3	11	19	74	70	-3	10	20	611	634
-13	13	16	245	242	-12	13	17	215	214	-4	11	18	256	259	-11	12	19	34	22	0	10	20	317	331
-10	13	16	434	426	-9	13	17	79	81	-1	11	18	400	409	-8	12	19	221	225	-11	11	20	378	387
-7	13	16	164	161	-6	13	17	171	171	-12	12	18	371	377	-5	12	19	49	48	-8	11	20	297	311
-4	13	16	63	66	-3	13	17	151	153	-9	12	18	93	94	-2	12	19	60	59	-5	11	20	469	474
-1	13	16	76	70	-11	14	17	89	91	-6	12	18	121	134	-10	13	19	53	46	-2	11	20	277	278
-12	14	16	45	35	-8	14	17	115	121	-3	12	18	219	221	-7	13	19	268	274	-10	12	20	188	201
-9	14	16	151	157	-5	14	17	43	39	0	12	18	195	167	-4	13	19	63	61	-7	12	20	446	458
-6	14	16	144	142	-2	14	17	40	17	-1	13	18	317	330	-1	13	19	209	212	-4	12	20	175	173
-3	14	16	255	239	-7	15	17	105	110	-8	13	18	591	595	-12	14	19	101	106	-1	12	20	95	84
-11	15	16	119	97	-4	15	17	63	72	-5	13	18	654	672	-9	14	19	179	178	-12	13	20	117	112
-8	15	16	272	268	0	15	17	900	885	-10	14	18	185	189	-6	14	19	44	52	-9	13	20	117	129
-5	15	16	136	147	-1	2	18	164	150	-7	14	18	97	88	-3	14	19	72	83	-6	13	20	179	190
-1	3	17	90	88	-3	3	18	1347	1355	-10	14	18	100	108	-8	15	19	103	90	-3	13	20	419	429
-3	4	17	93	98	0	3	18	1311	1326	-4	14	18	100	108	0	1	20	889	858	0	13	20	504	495
-2	5	17	59	58	-2	4	18	204	210	-9	15	18	169	171	-2	2	20	1766	1759	-11	14	20	202	198
-4	6	17	184	186	-4	5	18	385	368	-6	15	18	141	152	-1	3	20	297	298	-8	14	20	303	289
-1	6	17	53	46	-1	5	18	574	582	-2	3	19	186	186	-3	4	20	218	226	-5	14	20	174	186
-6	7	17	51	54	-6	6	18	989	999	-1	4	19	85	92	0	4	20	762	770	-2	14	20	49	24
-3	7	17	115	112	-3	6	18	496	515	-3	5	19	79	78	-5	5	20	457	449	-10	15	20	200	201
-5	8	17	60	59	0	6	18	568	574	-5	6	19	260	266	-2	5	20	910	917	-7	15	20	318	332
-2	8	17	247	254	-5	7	18	606	590	-2	6	19	141	149	-4	6	20	210	203	-1	2	21	44	47
-7	9	17	118	123	-2	7	18	859	878	-4	7	19	229	234	-6	7	20	718	734	-2	4	21	33	32
-4	9	17	196	201	-7	8	18	404	410	-1	7	19	45	42	-6	7	20	158	154	-4	5	21	101	92
-1	9	17	151	156	-4	8	18	283	278	-6	8	19	171	170	-3	7	20	266	270	-1	5	21	197	204
-9	10	17	200	195	-1	8	18	351	371	-3	8	19	46	61	0	8	20	516	512	-3	6	21	76	78
-6	10	17	272	276	-9	9	18	342	294	-8	9	19	127	125	-8	8	20	663	664	-5	7	21	27	4
-3	10	17	87	96	-9	9	18	302	344	-5	9	19	150	153	-5	8	20	944	964	-2	7	21	82	89
-8	11	17	85	93	-3	9	18	339	348	-2	9	19	67	76	-2	8	20	324	343	-7	8	21	188	186
-5	11	17	59	60	0	9	18	271	205	-7	10	19	179	183	-7	9	20	100	85	-4	8	21	74	80
-2	11	17	159	162	-8	10	18	872	878	-4	10	19	187	196	-4	9	20	290	292	-1	8	21	255	262
-10	12	17	103	70	-5	10	18	484	506	-1	10	19	207	214	-1	9	20	179	178	-6	9	21	75	73

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

PAGE 6

-3	9	21	153	156	0	8	22	540	561	-7	9	23	73	72	-1	8	24	148	146	-5	9	25	58	65
-8	10	21	62	60	-8	9	22	146	143	-4	9	23	52	48	-9	9	24	97	98	-2	9	25	95	92
-5	10	21	49	51	-5	9	22	153	152	-1	9	23	116	118	-6	9	24	194	202	-7	10	25	100	106
-2	10	21	71	73	-2	9	22	67	68	-9	10	23	148	141	-3	9	24	224	228	-4	10	25	136	142
-10	11	21	74	66	-10	10	22	46	17	-6	10	23	123	132	0	9	24	125	130	-1	10	25	187	189
-7	11	21	126	130	-7	10	22	314	322	-3	10	23	80	80	-8	10	24	272	272	-9	11	25	89	94
-4	11	21	175	177	-4	10	22	273	282	-8	11	23	75	75	-5	10	24	377	384	-6	11	25	113	111
-1	11	21	169	166	-1	10	22	188	199	-5	11	23	76	86	-2	10	24	114	121	-3	11	25	127	128
-9	12	21	82	78	-9	11	22	244	236	-2	11	23	122	122	-10	11	24	107	98	-11	12	25	151	156
-6	12	21	58	65	-6	11	22	284	289	-10	12	23	54	46	-7	11	24	152	152	-8	12	25	43	29
-3	12	21	149	149	-3	11	22	49	47	-7	12	23	104	106	-4	11	24	113	114	-5	12	25	93	95
-11	13	21	127	125	0	11	22	162	149	-4	12	23	127	140	-1	11	24	160	155	-2	12	25	140	146
-8	13	21	92	91	-11	12	22	67	62	-1	12	23	110	117	-12	12	24	157	162	-10	13	25	84	85
-5	13	21	34	25	-8	12	22	51	33	-12	13	23	160	160	-9	12	24	33	20	-7	13	25	50	40
-2	13	21	157	156	-5	12	22	182	182	-9	13	23	111	106	-6	12	24	41	27	-4	13	25	235	237
-10	14	21	166	164	-2	12	22	242	265	-6	13	23	130	139	-3	12	24	140	146	-1	13	25	71	70
-7	14	21	62	62	-13	13	22	249	258	-3	13	23	62	57	0	12	24	167	179	-9	14	25	41	41
-4	14	21	180	185	-10	13	22	279	285	-11	14	23	79	78	-11	13	24	220	215	-6	14	25	131	126
-9	15	21	156	165	-7	13	22	116	109	-8	14	23	44	59	-8	13	24	157	157	0	1	26	621	591
-6	15	21	215	223	-4	13	22	43	24	-5	14	23	62	60	-5	13	24	230	229	-2	2	26	373	370
-1	1	22	415	408	-1	13	22	51	33	0	0	24	653	646	-2	13	24	112	104	-1	3	26	576	564
0	2	22	539	524	-9	14	22	114	122	-1	2	24	280	274	-10	14	24	61	49	-3	4	26	218	229
-2	3	22	209	207	-6	14	22	122	111	-3	3	24	312	305	-7	14	24	51	46	0	4	26	373	370
-4	4	22	178	176	-3	14	22	96	89	0	3	24	727	737	-4	14	24	53	31	-5	5	26	1084	1083
-1	4	22	62	52	-8	15	22	218	236	-2	4	24	352	355	-2	3	25	37	32	-2	5	26	544	553
-3	5	22	487	491	-1	3	23	68	72	-4	5	24	328	326	-1	4	25	163	171	-4	6	26	154	157
0	5	22	32	16	-3	4	23	73	79	-1	5	24	64	63	-3	5	25	132	139	-1	6	26	426	431
-5	6	22	418	426	-2	5	23	38	43	-6	6	24	269	275	-5	6	25	113	110	-6	7	26	240	237
-2	6	22	199	214	-4	6	23	85	87	0	6	24	344	349	-2	6	25	68	69	-3	7	26	546	555
-7	7	22	427	428	-1	6	23	193	202	-3	6	24	37	20	-4	7	25	68	65	0	7	26	331	334
-4	7	22	96	102	-6	7	23	134	137	-5	7	24	239	240	-1	7	25	223	229	-8	8	26	316	321
-1	7	22	133	139	-3	7	23	126	129	-2	7	24	481	495	-6	8	25	39	33	-5	8	26	667	678
-6	8	22	90	75	-5	8	23	73	72	-7	8	24	249	244	-3	8	25	123	123	-2	8	26	680	709
-3	8	22	494	505	-2	8	23	90	89	-4	8	24	263	266	-8	9	25	133	136	-7	9	26	192	185

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

PAGE 7

-4	9	26	104	94	-2	10	27	170	177	-1	10	28	90	76	-1	12	29	200	212	-3	12	30	150	159
-1	9	26	178	193	-10	11	27	198	197	-9	11	28	218	219	-9	13	29	215	215	0	12	30	120	112
-9	10	26	76	67	-7	11	27	71	74	-6	11	28	469	474	-6	13	29	88	91	-8	13	30	209	215
-6	10	26	126	119	-4	11	27	215	214	-3	11	28	520	532	-3	13	29	94	100	-5	13	30	442	451
-3	10	26	439	448	-1	11	27	170	173	0	11	28	238	250	-8	14	29	128	133	-2	3	31	92	88
0	10	26	625	654	-9	12	27	145	148	-11	12	28	123	117	0	0	30	1163	1137	-1	4	31	55	54
-11	11	26	334	319	-6	12	27	186	195	-8	12	28	382	392	-1	2	30	175	153	-3	5	31	87	87
-8	11	26	477	484	-3	12	27	80	81	-5	12	28	212	214	-3	3	30	323	317	-5	6	31	83	85
-5	11	26	219	233	-11	13	27	53	53	-2	12	28	293	306	-2	4	30	916	946	-2	6	31	62	61
-2	11	26	345	349	-8	13	27	65	61	-10	13	28	496	493	-2	4	30	602	589	-4	7	31	108	113
-10	12	26	152	150	-5	13	27	40	40	-7	13	28	319	332	-4	5	30	258	260	-1	7	31	154	160
-7	12	26	259	267	-2	13	27	73	71	-4	13	28	171	176	-1	5	30	98	96	-6	8	31	85	83
-4	12	26	225	242	-7	14	27	108	107	-9	14	28	129	132	-6	6	30	281	290	-3	8	31	107	102
-1	12	26	85	78	-1	1	28	662	639	-6	14	28	189	199	-3	6	30	506	519	-8	9	31	105	107
-12	13	26	231	226	0	2	28	421	406	-1	3	29	59	59	0	6	30	326	334	-5	9	31	61	56
-9	13	26	188	186	-2	3	28	676	672	-3	4	29	177	178	-5	7	30	207	204	-2	9	31	41	34
-6	13	26	242	246	-4	4	28	512	522	-2	5	29	167	173	-2	7	30	497	500	-7	10	31	61	57
-3	13	26	227	243	-1	4	28	348	344	-4	6	29	119	122	-4	8	30	342	347	-4	10	31	67	68
-8	14	26	236	241	-3	5	28	1091	1096	-1	6	29	36	34	-4	8	30	248	256	-9	11	31	113	111
-5	14	26	135	119	0	5	28	1069	1094	-6	7	29	196	198	-1	8	30	248	256	-9	11	31	96	90
-1	2	27	74	74	-5	6	28	259	260	-3	7	29	36	31	-9	9	30	114	106	-6	11	31	85	89
-2	4	27	43	43	-2	6	28	210	203	-5	8	29	91	93	-6	9	30	162	153	-3	11	31	85	89
-4	5	27	54	55	-7	7	28	638	641	-2	8	29	128	132	-3	9	30	291	294	-11	12	31	40	38
-1	5	27	101	98	-4	7	28	372	371	-7	9	29	126	123	0	9	30	58	31	-8	12	31	97	95
-3	6	27	36	32	-1	7	28	169	165	-4	9	29	136	138	-8	10	30	374	392	-5	12	31	60	55
-5	7	27	71	75	-6	8	28	676	684	-1	9	29	147	155	-5	10	30	552	580	-2	12	31	65	68
-2	7	27	136	141	-3	8	28	420	439	-9	10	29	86	91	-5	10	30	248	256	-10	13	31	41	21
-7	8	27	136	140	0	8	28	669	678	-6	10	29	233	230	-2	10	30	152	154	-7	13	31	117	115
-4	8	27	225	230	-8	9	28	364	365	-3	10	29	69	65	-7	11	30	240	249	-4	13	31	158	168
-1	8	27	52	51	-5	9	28	131	128	-8	11	29	99	105	-4	11	30	121	119	0	1	32	222	214
-6	9	27	38	25	-2	9	28	257	268	-5	11	29	157	161	-4	11	30	286	281	-2	2	32	503	495
-3	9	27	67	75	-10	10	28	726	731	-10	12	29	92	92	-12	12	30	181	192	-1	3	32	179	164
-8	10	27	105	111	-7	10	28	288	294	-7	12	29	161	158	-9	12	30	161	167	-3	4	32	204	200
-5	10	27	50	44	-4	10	28	192	199	-4	12	29	78	86	-6	12	30	78	71	0	4	32	226	224

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

PAGE 8

-5	5	32	343	332	-7	8	33	107	119	-2	9	34	114	108	0	0	36	897	893	-4	7	37	52	53
-2	5	32	223	233	-4	8	33	121	119	-10	10	34	266	271	-1	2	36	197	191	-1	7	37	90	94
-4	6	32	73	71	-1	8	33	144	148	-7	10	34	323	328	-3	3	36	871	860	-6	8	37	111	114
-1	6	32	246	249	-6	9	33	55	60	-4	10	34	64	67	0	3	36	386	391	-3	8	37	35	31
-6	7	32	109	106	-3	9	33	90	92	-1	10	34	111	115	-2	4	36	215	215	-8	9	37	165	164
-3	7	32	88	77	-8	10	33	66	65	-9	11	34	146	146	-4	5	36	260	255	-5	9	37	63	64
0	7	32	130	141	-5	10	33	32	21	-6	11	34	135	130	-1	5	36	307	304	-2	9	37	121	119
-8	8	32	171	164	-2	10	33	76	83	-3	11	34	328	336	-6	6	36	277	271	-7	10	37	131	137
-5	8	32	389	395	-10	11	33	92	91	0	11	34	179	178	-3	6	36	611	615	-4	10	37	220	230
-2	8	32	230	225	-7	11	33	113	112	-8	12	34	62	67	0	6	36	598	611	-1	10	37	81	82
-7	9	32	83	83	-4	11	33	88	93	-5	12	34	200	206	-5	7	36	672	672	-9	11	37	40	23
-4	9	32	63	62	-1	11	33	120	124	-2	12	34	71	63	-2	7	36	672	672	-6	11	37	104	104
-1	9	32	147	149	-9	12	33	76	84	-7	13	34	147	144	-7	8	36	209	209	-3	11	37	53	41
-9	10	32	124	122	-6	12	33	91	74	-1	13	34	146	118	-4	8	36	372	371	-8	12	37	89	93
-6	10	32	109	94	-3	12	33	63	62	-3	4	35	35	16	-1	8	36	414	413	-5	12	37	48	26
-3	10	32	279	292	-8	13	33	38	18	-2	5	35	56	59	-9	9	36	142	139	0	1	38	311	305
0	10	32	188	200	-5	13	33	33	36	-4	6	35	30	28	-6	9	36	230	230	-2	2	38	422	409
-11	11	32	210	210	-1	1	34	323	312	-1	6	35	150	147	-3	9	36	246	258	-1	3	38	635	627
-8	11	32	185	182	0	2	34	726	706	-6	7	35	96	95	0	9	36	298	297	-3	4	38	241	240
-5	11	32	127	116	-2	3	34	385	377	-3	7	35	133	133	-8	10	36	265	257	0	4	38	133	115
-2	11	32	88	97	-4	4	34	166	153	-5	8	35	26	19	-5	10	36	583	591	-5	5	38	842	847
-10	12	32	92	73	-1	4	34	104	100	-2	8	35	59	58	-2	10	36	588	607	-2	5	38	662	660
-7	12	32	216	216	-3	5	34	107	102	-7	9	35	59	53	-10	11	36	282	276	-4	6	38	268	271
-4	12	32	72	78	0	5	34	585	589	-4	9	35	75	73	-7	11	36	78	84	-1	6	38	264	275
-1	12	32	77	87	-5	6	34	287	286	-1	9	35	206	202	-4	11	36	109	122	-6	7	38	59	42
-9	13	32	150	141	-2	6	34	101	97	-9	10	35	149	154	-1	11	36	172	181	-3	7	38	328	326
-6	13	32	105	104	-7	7	34	133	134	-6	10	35	45	39	-9	12	36	156	158	0	7	38	561	572
-1	2	33	57	54	-4	7	34	296	292	-3	10	35	152	151	-6	12	36	76	80	-8	8	38	681	688
-2	4	33	39	41	-1	7	34	48	45	-8	11	35	44	41	-3	12	36	85	94	-5	8	38	328	341
-4	5	33	95	98	-6	8	34	320	327	-5	11	35	41	21	-2	13	37	38	36	-2	8	38	393	399
-1	5	33	63	59	-3	8	34	428	433	-2	11	35	146	147	-1	4	37	75	71	-7	9	38	247	248
-3	6	33	41	36	0	8	34	110	98	-10	12	35	82	76	-3	5	37	93	87	-4	9	38	175	177
-5	7	33	57	60	-8	9	34	100	98	-7	12	35	32	24	-5	6	37	83	81	-1	9	38	198	198
-2	7	33	61	63	-5	9	34	252	258	-4	12	35	151	153	-2	6	37	125	122	-9	10	38	165	171

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

-6	10	38	294	300	-7	7	40	111	109	-1	2	42	86	81	-2	9	43	48	47	-1	1	46	350	340
-3	10	38	200	198	-4	7	40	252	258	-3	3	42	256	251	-7	10	43	58	55	0	2	46	495	490
0	10	38	420	439	-1	7	40	74	67	0	3	42	314	314	-4	10	43	80	80	-2	3	46	224	232
-8	11	38	439	443	-6	8	40	257	262	-2	4	42	95	97	0	1	44	446	440	-4	4	46	226	219
-5	11	38	278	281	-3	8	40	147	350	-4	5	42	161	161	-2	2	44	528	522	-1	4	46	183	186
-2	11	38	92	106	0	8	40	217	218	-1	5	42	65	63	-1	3	44	142	141	-3	5	46	574	565
-7	12	38	157	152	-8	9	40	179	173	-6	6	42	139	132	-3	4	44	78	78	0	5	46	332	332
-4	12	38	133	147	-5	9	40	131	144	-3	6	42	89	79	-3	4	44	280	288	-5	6	46	442	442
-1	2	39	73	76	-2	9	40	130	144	0	6	42	247	242	-5	5	44	203	207	-2	6	46	205	201
-2	4	39	71	69	-10	10	40	296	302	-5	7	42	163	167	-2	5	44	625	625	-2	7	46	261	364
-4	5	39	111	114	-7	10	40	282	285	-2	7	42	168	172	-4	6	44	106	107	-4	7	46	126	135
-1	5	39	63	63	-4	10	40	76	77	-7	8	42	94	99	-1	6	44	216	218	-1	7	46	35	30
-3	6	39	84	83	-4	10	40	70	60	-4	8	42	43	31	-6	7	44	56	61	-6	8	46	332	325
-5	7	39	81	74	-9	11	40	60	66	-1	8	42	105	102	-3	7	44	119	112	-3	8	46	664	629
-2	7	39	85	86	-6	11	40	134	129	-9	9	42	153	143	0	7	44	399	416	0	8	46	534	545
-7	8	39	71	77	-3	11	40	289	284	-6	9	42	130	126	-8	8	44	480	485	-5	9	46	213	221
-4	8	39	166	164	-1	3	41	66	69	-3	9	42	111	101	-5	8	44	392	389	-2	9	46	111	109
-1	8	39	66	72	-3	4	41	40	43	0	10	42	96	95	-2	8	44	161	157	-1	3	47	54	43
-6	9	39	124	129	-2	5	41	49	42	-8	10	42	177	165	-7	9	44	171	158	-3	4	47	33	11
-3	9	39	48	46	-4	6	41	45	36	-5	10	42	100	103	-4	9	44	194	203	-4	6	47	64	63
-8	10	39	99	94	-1	6	41	108	109	-2	10	42	152	165	-1	9	44	178	172	-1	6	47	74	73
-5	10	39	69	68	-6	7	41	83	80	-7	11	42	139	137	-6	10	44	199	207	-6	7	47	92	85
-2	10	39	71	73	-3	7	41	59	52	-4	11	42	40	25	-3	10	44	243	254	-3	7	47	72	73
-7	11	39	144	143	-5	8	41	49	50	-2	4	43	38	31	-1	2	45	42	42	-5	8	47	73	78
-4	11	39	113	115	-2	8	41	60	67	-1	4	43	31	28	-2	4	45	29	24	-2	8	47	100	100
-1	1	40	86	82	-7	9	41	62	51	-3	5	43	43	38	-4	5	45	80	83	-4	9	47	81	78
0	2	40	617	605	-4	9	41	77	81	-5	6	43	100	96	-1	5	45	144	149	0	2	48	477	470
-2	3	40	403	391	-1	9	41	111	115	-3	6	43	53	50	-3	6	45	47	50	-1	3	48	117	115
-4	4	40	202	193	-9	10	41	50	46	-2	7	43	87	84	-5	7	45	57	51	-3	3	48	761	753
-1	4	40	204	199	-6	10	41	76	77	-1	7	43	109	113	-7	8	45	102	100	0	3	48	429	422
-3	5	40	144	143	-3	10	41	84	84	-6	8	43	66	66	-1	8	45	210	205	-2	4	48	178	174
0	5	40	573	576	-8	11	41	54	33	-3	8	43	53	50	-6	9	45	55	60	-4	5	48	218	212
-5	6	40	179	175	-5	11	41	51	47	-8	9	43	48	46	-3	9	45	98	96	-1	5	48	342	342
-2	6	40	223	230	0	0	42	266	252	-5	9	43	59	59	-5	10	45	45	34	-6	6	48	311	305

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CERITE

PAGE 10

	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC				
-3	6	48	209	205	-4	7	49	90	95	-1	6	50	98	92	-4	4	52	157	153	-3	3	54	218	215
0	6	48	341	337	-1	7	49	56	52	-6	7	50	60	47	-1	4	52	37	15	0	3	54	584	571
-5	7	48	503	507	-6	8	49	104	104	-3	7	50	65	63	-3	5	52	249	252	-2	4	54	300	302
-2	7	48	314	315	-3	8	49	51	24	-1	2	51	44	39	0	5	52	245	254	-4	5	54	217	199
-7	8	48	96	101	0	1	50	204	198	-2	4	51	32	21	-5	6	52	94	93	-1	5	54	132	123
-4	8	48	61	58	-2	2	50	274	275	-4	5	51	54	50	-2	6	52	120	122	-2	3	55	34	34
-1	8	48	123	120	-1	3	50	49	43	-1	5	51	53	48	-1	3	53	39	32	-1	4	55	53	51
-2	3	49	73	65	-3	4	50	73	62	-5	7	51	33	16	-3	4	53	62	55	0	1	56	247	246
-1	4	49	63	57	0	4	50	226	236	-2	7	51	39	34	-2	5	53	66	72	-2	2	56	404	395
-3	5	49	60	66	-5	5	50	81	72	-1	1	52	153	148	-4	6	53	77	74	-1	3	56	265	251
-5	6	49	65	72	-2	5	50	307	312	0	2	52	88	88	0	0	54	644	620	-1	2	57	47	42
-2	6	49	71	67	-4	6	50	68	43	-2	3	52	193	187	-1	2	54	162	153					