

Crystal structure and cation distribution in titanomagnetites ($\text{Fe}_{3-x}\text{Ti}_x\text{O}_4$)

BARRY A. WECHSLER,¹ DONALD H. LINDSLEY, AND CHARLES T. PREWITT

*Department of Earth and Space Sciences
State University of New York
Stony Brook, New York 11794*

Abstract

A systematic study of the crystal structure of titanomagnetites was undertaken to characterize the effects of composition and quenching temperature on the cation distribution. Powder specimens ranging in composition from pure magnetite to a slightly nonstoichiometric ulvöspinel were synthesized at temperatures between 930 and 1350°C. Several specimens quenched from 1350°C were later annealed at 800°C for up to 95 days. Unit-cell parameters were determined by X-ray diffraction, and saturation magnetization values were measured at room temperature on a vibrating sample magnetometer. The oxygen coordinate, thermal parameters, and sublattice magnetizations were determined from neutron diffraction data using profile refinement techniques.

No significant differences were found in the unit-cell parameters or magnetization resulting from different synthesis temperatures or annealing, and no change was observed in the oxygen positional parameters following annealing. Ti occupies only octahedral sites in all specimens. Temperature factors increase markedly with Ti content, indicating static positional disorder due to mixing of Fe and Ti on octahedral sites. Values of the saturation magnetization and individual sublattice magnetic moments are consistent with the cation distribution model of Akimoto and do not support models that propose a quenchable, temperature-dependent Fe^{2+} - Fe^{3+} distribution. Diffuse scattering in the neutron diffraction patterns suggests the presence of short-range order, possibly involving octahedral cations, but no long-range order inconsistent with space group $Fd3m$ was found. Systematic trends in the oxygen position and unit-cell parameter as a function of composition may be influenced by octahedral cation interactions.

Introduction

Minerals in the solid solution series between magnetite (Fe_3O_4) and ulvöspinel (Fe_2TiO_4) are common constituents of a wide variety of igneous and metamorphic rocks. Intermediate members of the series, referred to here as titanomagnetites, are the primary carriers of rock magnetism and, as such, have been the subject of numerous experimental and theoretical investigations. The magnetic properties of these materials are critically dependent upon their composition, degree of oxidation and intracrystalline cation distribution, and thus may be affected not only by conditions during petrogenesis, but by their subsequent thermal history as well.

Recent studies of deep-sea basalts have stimulated a great deal of interest in titanomagnetites and their oxidized equivalents, the titanomaghemites (e.g., Readman and O'Reilly, 1972; Keefer and Shive, 1981; Moskowitz

and Banerjee, 1981). When found in rocks coexisting with a hematite-ilmenite solid solution, the titanomagnetites may also be useful as indicators of the temperature and oxygen fugacity under which these phases equilibrated (Lindsley, 1963; Buddington and Lindsley, 1964). In recent years, attempts have been made to model the thermochemistry of these solid solutions (Rumble, 1970, 1977; Powell and Powell, 1977; Lindsley, 1978; Spencer and Lindsley, 1981). A major stumbling block to the success of these efforts has been the lack of understanding of the equilibrium cation distribution. The resulting uncertainty in the configurational entropy, which produces free energy uncertainties on the order of several kcal/mole at 1000°C, is a significant factor in solution models and cannot be neglected.

Thus, the crystal structure and cation distribution in titanomagnetites are of interest both for their importance in determining the magnetic properties of these minerals and because of the need to account accurately for their thermochemical behavior. Although a number of previous studies have examined this system, their results have been somewhat conflicting and incomplete. The present study attempts to resolve some of the discrepancies by

¹ Present address: Hughes Research Laboratories, 3011 Malibu Canyon Road, Malibu, California 90265.

Sample: MT100-1350

Starting Angle: 13 degrees two-theta
Step Width: .05 degrees two-theta

Zeropoint: -0.033 degrees two-theta
Wavelength: 1.3043 Angstroms

112	142	146	150	133	153	124	127	139	128	136	149	113	132	134	119	149	149	122	141
126	144	148	130	145	117	121	142	121	142	143	147	155	149	133	153	158	152	155	178
258	368	612	1395	2342	4012	5774	7627	8686	8707	7522	5691	4100	2463	1239	503	322	214	191	173
180	143	150	163	134	135	165	135	158	116	141	145	143	154	161	154	133	131	152	131
118	124	138	133	147	138	138	136	148	127	154	126	112	149	138	143	137	144	134	127
126	115	120	122	128	153	128	114	133	118	113	144	138	116	132	132	138	144	136	131
128	152	137	127	132	111	119	154	142	97	153	124	107	140	134	111	124	132	125	131
125	128	135	115	142	119	123	132	119	123	114	131	130	136	116	130	125	110	142	121
108	157	132	138	125	145	130	125	115	124	133	126	139	130	138	121	132	122	117	126
127	130	123	121	147	128	133	146	139	129	140	148	159	150	140	151	136	125	132	122
121	104	134	114	124	143	106	156	133	133	119	119	153	141	148	103	120	128	114	131
107	129	127	135	128	120	127	123	147	142	153	139	133	131	129	151	149	157	163	188
252	393	754	1293	2093	3264	3951	4160	3833	2962	1999	1120	592	358	232	164	162	149	152	152
141	151	150	125	140	133	146	120	137	138	129	150	125	143	137	146	117	131	138	128
128	137	112	119	117	148	142	121	128	139	115	135	134	147	115	133	135	122	111	121
123	138	122	139	143	131	106	129	133	129	132	120	120	129	137	129	119	131	148	129
124	154	160	125	167	137	216	222	225	346	672	1223	2417	4226	6671	9171	10692	10593	8884	6338
3847	2115	1141	574	365	229	201	167	182	151	151	161	158	127	121	136	156	195	307	438
696	1093	1513	1912	1947	1757	1372	953	560	371	262	185	166	147	145	103	127	156	122	130
133	122	127	123	131	154	126	122	117	106	125	143	140	143	122	107	124	109	144	130
139	124	108	109	135	125	117	114	127	113	116	126	128	128	151	151	138	129	129	109
121	138	130	115	107	153	125	115	133	143	116	113	135	137	115	140	137	117	132	136
172	152	155	145	156	176	153	163	180	160	186	154	176	206	275	358	500	884	1451	2667
3950	5927	7595	8467	8255	6869	5240	3431	2132	1210	732	446	300	225	185	177	169	143	173	142
149	145	126	152	135	131	119	166	121	120	148	116	138	143	124	126	131	136	151	130
107	119	129	108	116	123	125	111	149	126	126	142	129	120	119	118	143	103	128	125
157	129	143	176	243	334	462	741	983	1351	1564	1720	1652	1313	1031	693	522	339	256	177
154	133	138	136	111	150	125	154	152	138	125	126	119	139	132	133	130	115	129	118
111	138	132	111	112	124	114	127	139	118	140	118	128	111	107	116	109	112	132	102
108	110	125	136	143	114	118	123	115	112	117	132	116	137	130	130	137	110	130	112
106	142	116	112	129	131	117	133	144	124	151	130	135	116	131	131	121	112	120	135
117	142	144	149	163	224	223	331	426	721	894	1202	1338	1664	1764	1674	1379	1070	906	664
426	296	235	183	171	144	152	132	155	126	134	127	136	121	123	125	118	135	127	141
114	132	109	125	121	121	109	119	126	136	136	127	157	140	126	161	150	169	184	179
222	295	344	573	818	1202	1691	2312	3063	3925	4611	4972	4870	4397	3631	2927	2323	1495	1052	671
495	340	213	187	171	155	125	154	126	138	150	132	152	122	136	114	126	106	111	165
125	130	111	146	138	99	135	138	112	123	147	136	117	139	104	124	119	137	147	119
130	140	126	119	132	126	131	118	138	126	152	135	166	116	139	181	163	140	152	159
140	177	174	164	177	202	192	232	267	333	470	673	963	1436	2050	3137	4178	5606	7017	9058
10410	11688	11648	11102	9551	8058	6492	4858	3675	2497	1784	1106	774	490	415	298	270	194	194	177
178	164	167	157	141	160	162	114	142	131	136	124	113	131	135	133	114	152	122	134
155	142	172	164	180	237	268	338	369	512	610	689	775	842	837	812	685	610	528	383
359	303	220	199	171	154	160	122	165	163	141	117	122	119	142	102	139	119	157	116
118	122	118	132	125	123	112	136	127	125	123	128	136	128	115	109	126	127	111	136
133	123	132	133	140	120	114	136	120	116	124	119	119	110	122	122	142	126	130	113
125	129	132	140	156	174	216	229	283	335	393	498	505	613	663	704	702	738	630	606
510	453	334	344	275	222	192	184	176	148	135	137	128	119	134	127	133	133	146	122
118	125	118	162	137	126	141	127	144	146	183	205	211	303	349	391	503	667	737	956
1115	1234	1353	1422	1534	1487	1283	1233	971	883	810	670	577	469	462	402	398	362	346	376
342	319	326	305	258	226	212	221	192	171	156	166	141	141	124	123	123	124	136	134
148	133	133	125	125	127	139	130	115	133	146	143	132	115	130	157	134	141	136	131
142	152	150	150	141	143	171	208	241	289	349	477	488	613	758	885	1053	1202	1416	1491
1630	1658	1636	1673	1436	1293	1095	974	877	706	564	489	265	338	253	239	191	174	142	142
150	123	131	138	122	144	116	137	120	121	133	164	122	140	156	130	195	214	209	258
272	302	323	329	383	361	419	430	423	379	374	299	322	276	250	218	207	174	155	157
154	132	146	143	146	127	134	125	125	122	103	119	136	109	130	131	120	112	120	125
121	117	120	129	127	110	131	139	141	114	131	135	114	116	138	122	121	128	119	138
136	124	143	185	175	159	199	201	220	261	293	378	368	438	513	595	649	707	781	875
809	790	813	742	662	610	546	498	435	404	356	339	292	234	224	212	167	167	184	143
137	150	163	142	168	206	201	239	296	344	394	452	543	666	827	966	1110	1300	1475	1547
1868	1984	2131	2193	2294	2195	2111	1947	1898	1657	1438	1301	1140	940	849	719	622	538	394	364
280	252	231	212	188	155	164	137	151	139	137	137	123	118	135	108	142	136	137	146
144	134	130	139	123	137	133	120	125	142	145	147	113	166	163	187	183	246	206	238
317	362	424	516	606	689	740	945	1027	1174	1300	1368	1597	1606	1678	1822	1777	1704	1652	1464
1434	1301	1213	1097	958	883	726	601	565	463	380	325	295	253	219	197	219	163	132	147
149	151	138	148	152	143	140	135	125	147	161	157	135	154	132	170	138	153	153	140
157	156	163	129	153	135	146	139	137	128	127	120	106	134	129	133	136	139	125	137
130	117	122	141	106	134	124	107	127	116	124	127	111	143	124	140	110	162	132	

Starting Angle: 13 degrees two-theta
 Step Width: .05 degrees two-theta

Sample: USP25-1350

Zeropoint: -0.103 degrees two-theta
 Wavelength: 1.3000 Angstroms

38	50	46	45	44	52	56	48	45	62	44	62	50	41	54	49	46	41
45	55	46	47	29	39	46	38	49	40	35	33	58	39	46	53	49	41
237	402	544	874	1100	1297	1204	1188	862	561	326	186	108	50	37	36	50	50
45	43	45	48	39	39	47	47	33	42	39	42	45	45	47	38	35	40
37	48	44	53	49	29	44	40	35	42	44	48	45	43	40	38	45	33
35	47	47	44	48	41	46	51	40	53	45	43	54	39	30	44	43	46
33	34	42	46	42	46	39	41	35	36	51	35	46	50	39	33	46	44
35	45	41	47	36	37	33	48	44	25	58	43	49	58	39	31	40	41
53	52	41	45	44	53	37	46	43	45	47	43	46	47	40	44	51	36
45	43	56	41	42	43	36	51	59	38	44	37	43	34	35	56	38	47
45	53	47	55	44	43	45	41	38	41	41	44	45	48	43	46	38	47
34	43	49	57	35	45	38	45	55	41	50	48	44	50	55	71	63	95
463	688	748	831	688	491	303	180	110	71	69	47	47	46	26	50	43	43
32	57	32	42	45	45	46	52	40	47	40	44	54	33	51	52	43	49
53	46	47	36	50	44	49	46	27	49	41	39	52	48	43	49	58	53
44	30	47	43	43	58	55	52	49	35	52	50	48	54	45	40	57	50
43	56	62	85	97	112	196	311	587	1038	1472	1735	1711	1412	1034	554	296	172
59	72	52	55	53	63	44	47	65	60	55	49	60	70	95	145	230	333
359	254	146	99	99	56	57	61	44	35	40	52	52	48	52	47	45	47
47	69	48	53	53	40	48	53	44	46	39	53	43	52	53	59	48	40
41	46	66	49	43	48	39	41	59	54	47	55	60	57	44	44	45	30
42	39	37	51	33	44	53	65	55	59	37	49	38	45	49	52	56	41
54	71	55	73	77	58	68	60	62	81	88	97	180	292	473	929	1227	1527
959	534	307	190	84	88	68	67	53	54	52	53	46	51	52	51	41	52
65	47	37	44	47	52	54	58	45	63	47	57	40	47	43	41	53	37
42	44	55	49	50	52	54	43	45	66	53	59	41	51	49	50	47	52
92	126	179	258	296	321	270	237	140	93	81	65	57	41	58	50	46	42
42	40	50	55	42	45	49	44	52	50	53	42	37	50	45	44	47	36
44	47	52	50	49	50	40	43	49	43	41	52	49	42	52	36	45	31
45	48	45	38	35	30	40	43	42	41	40	36	45	48	43	56	48	44
38	56	54	44	47	50	47	43	43	51	45	52	42	41	40	37	40	48
49	51	87	135	210	318	422	415	402	338	237	141	102	60	58	49	60	51
47	43	40	28	37	45	39	45	37	60	41	36	41	45	40	42	37	53
47	44	41	37	32	36	35	40	43	47	42	48	44	54	49	58	63	82
339	503	785	941	1036	929	844	605	399	260	141	95	88	62	54	63	51	35
35	49	29	47	32	46	44	48	30	42	36	52	40	40	49	34	47	35
38	36	36	48	36	48	47	50	34	41	52	37	48	39	17	38	41	35
35	41	45	37	39	38	42	46	52	41	43	61	68	55	68	63	67	52
61	54	62	80	72	98	116	197	369	640	1055	1615	2101	2533	2725	2388	1930	1476
431	224	144	120	83	83	66	54	61	57	52	44	62	45	58	43	40	47
45	32	37	45	36	55	53	48	46	45	35	51	36	43	24	43	48	50
60	92	86	127	155	164	148	155	122	118	72	74	44	50	34	47	40	33
41	45	38	32	48	41	40	40	41	27	37	50	40	40	38	42	40	41
44	34	41	36	42	43	40	46	51	52	40	26	26	28	38	28	39	45
38	42	38	36	26	33	51	34	34	46	39	38	37	50	32	40	46	50
63	59	59	89	122	147	184	163	195	183	141	129	90	100	56	60	43	40
48	36	40	49	30	31	34	43	41	44	39	37	35	38	36	36	38	45
55	35	46	27	36	44	50	70	82	114	135	215	238	284	311	319	311	259
140	129	91	73	72	61	76	111	116	120	132	109	109	118	88	84	68	48
46	34	48	34	34	36	47	59	31	36	41	47	44	49	38	34	44	41
50	47	47	43	48	49	48	49	37	50	42	49	48	42	41	40	36	41
53	63	54	64	87	126	171	203	207	294	337	349	427	326	318	223	222	168
70	58	63	48	55	69	55	43	55	36	47	45	42	47	42	40	42	35
39	35	40	34	30	43	48	28	43	53	48	66	59	76	81	82	95	90
82	76	60	64	45	57	55	50	32	53	44	40	38	34	40	38	49	39
33	41	40	41	42	40	43	44	28	44	30	41	43	37	37	48	36	47
38	49	39	51	27	36	41	28	49	40	37	46	47	54	44	47	52	53
56	65	75	115	146	135	157	187	208	221	238	192	197	191	159	138	112	90
61	49	48	54	49	42	47	49	50	36	52	41	37	49	50	47	44	37
52	55	73	88	129	139	196	223	284	325	374	471	497	493	469	451	383	371
186	152	133	90	68	76	54	50	54	56	69	42	40	43	46	29	50	49
65	50	47	35	39	47	34	39	52	46	31	42	40	57	43	43	48	41
36	58	60	56	56	48	53	54	46	47	51	52	58	91	117	132	158	141
311	326	390	412	409	421	395	386	321	258	236	174	145	110	87	82	65	41
68	41	45	48	49	60	42	49	44	40	38	44	48	39	45	40	33	31
45	44	40	62	53	61	55	42	59	59	56	54	51	53	40	48	36	37
42	38	34	41	54	58	39	44	27	43	34	25	34	46	34	38	51	28
36	32	48	38	47	45	44	42	44	41	49	40	34	43	50	30	33	41
46	55	53	46	53	54	68	56	89	80	99	115	107	117	101	127	137	120
105	99	86	80	55	64	55	58	47	59	45	43	44	40	47	52	45	45
48	60	57	51	72	90	105	128	135	163	182	190	211	232	297	311	318	318
285	262	188	219	184	142	132	109	111	94	84	88	66	60	68	61	70	60
59	37	42	53	53	51	70	59	50	44	47	41	42	39	46	51	41	35
39	42	34	46	53	51	49	51	64	54	64	76	85	106	128	140	168	187
307	284	349	371	374	295	374	371	368	301	287	222	232	203	165	148	132	125
77	60	52	60	48	48	43	47	47	34	44	31	40	48	30	37	45	48
55	46	68	47	55	54	57	40	58	46	48	52	48	55	57	36	47	46
39	43	25	38	38	38	53	40	40	47	36	51	37	42	39	35	37	46
37	40	35	33	33	31	33	39	33	57	46	36	54	42	38	39	38	39

Starting Angle: 13 degrees two-theta
Step Width: .05 degrees two-theta

Zeropoint: -0.043 degrees two-theta
Wavelength: 1.3227 Angstroms

174	186	193	183	232	167	213	184	182	190	170	151	203	210	193	192	168	195	199	173
183	181	184	179	182	196	172	203	167	187	177	216	182	180	179	189	197	196	197	192
186	195	197	211	280	482	893	1759	2939	4599	6041	7431	7402	6655	5172	3588	2239	1866	605	573
245	199	200	179	177	212	210	205	207	179	178	188	198	190	179	174	189	205	170	
157	171	193	174	166	187	182	155	195	193	216	176	189	179	175	170	173	170	100	
197	190	181	198	197	176	177	181	177	153	168	196	167	165	167	199	178	181	181	
176	182	164	174	180	198	203	171	168	188	188	191	213	194	178	171	168			
187	158	201	179	194	187	152	171	200	165	155	177	165	156	175	173	181			
186	167	183	170	185	163	175	166	197	193	177	189	214	201	174	163	145			
184	187	157	193	177	185	163	170	181	194	192	181	189	173	179	200	196			
223	192	180	161	171	188	197	175	196	177	206	202	158	159	172	173	159			
171	177	187	157	157	192	167	148	145	192	167	167	177	188	154	208	173	179	155	132
172	182	189	191	218	230	329	535	963	1806	2877	3923	4551	4513	3688	2554	1671	873	466	354
209	150	165	174	176	175	186	187	141	181	189	191	183	184	187	169	196	171	193	137
168	189	199	173	179	162	194	175	173	171	193	191	180	182	172	164	165	195	201	153
196	190	163	187	179	176	189	158	150	152	175	166	174	149	187	175	186	171	152	187
173	166	171	154	187	150	183	189	178	167	167	167	189	200	230	265	424	731	1499	2565
4463	6801	9002	9923	9151	7339	4715	2761	1358	631	350	274	234	197	199	180	201	203	173	217
191	211	181	237	245	379	486	845	1344	1831	2179	2214	2043	1413	902	537	363	271	213	194
192	195	184	199	204	183	181	200	177	195	184	192	183	184	191	181	183	210	199	191
177	216	180	231	234	201	202	205	188	173	184	177	183	199	204	210	186	205	179	204
183	180	164	199	200	212	163	199	201	190	191	179	193	168	172	197	184	184	214	246
175	186	210	204	193	197	208	221	199	200	197	214	198	205	219	219	236	220	203	229
248	212	251	299	417	683	1118	1960	3221	4992	6865	8063	8025	6859	5085	3095	1869	995	570	439
259	217	202	209	219	214	178	190	187	204	202	199	190	205	233	190	182	190	179	192
203	207	186	208	182	182	204	198	191	177	206	192	202	203	200	194	198	185	193	191
181	201	203	208	161	182	194	211	206	172	195	216	245	277	354	495	683	953	1203	1381
1660	1557	1140	972	656	406	292	255	204	211	184	197	189	202	184	211	186	174	203	181
207	207	184	180	181	172	181	210	160	183	184	186	201	172	200	178	182	157	190	184
180	177	199	184	190	192	179	174	196	189	184	171	174	172	185	174	165	171	168	159
175	166	171	192	197	55	186	162	170	215	152	182	167	177	182	207	165	203	180	169
174	181	195	166	176	180	166	181	150	151	164	144	174	198	178	224	259	314	426	517
823	1145	1526	1752	2020	1856	1720	1363	1060	719	473	349	266	199	173	162	173	178	177	159
143	153	162	165	164	188	162	160	195	179	178	182	161	200	146	166	157	179	192	161
172	157	161	166	153	185	158	170	152	198	184	179	227	334	414	672	990	1392	2015	2776
3567	4438	5091	5041	4634	3902	2965	2099	1395	893	602	417	255	218	206	179	197	182	171	164
150	187	167	177	158	175	181	148	159	168	176	166	167	167	164	171	162	152	156	177
165	171	171	165	156	171	172	151	187	166	175	169	162	161	179	153	183	172	159	159
186	161	186	172	172	154	188	184	202	192	182	199	191	180	186	151	192	167	176	100
176	214	267	378	598	862	1431	2015	3238	4577	6067	8015	9593	11398	12128	12010	10598	8708	6947	5086
3613	2438	1529	942	568	407	267	227	197	210	186	171	174	157	168	174	164	163	197	164
175	195	162	179	175	152	165	175	167	166	161	150	160	147	170	178	191	187	276	255
336	335	441	501	621	635	731	739	684	598	539	447	394	321	276	241	189	211	179	176
173	177	154	183	181	168	161	144	161	151	161	174	154	151	164	179	167	178	146	161
152	165	179	171	149	169	156	159	159	136	179	152	159	175	157	141	176	156	150	168
154	142	166	155	150	160	150	149	166	158	157	125	168	159	167	172	180	184	191	217
211	248	272	351	402	484	541	648	744	800	808	845	815	746	590	510	472	386	346	252
225	197	174	169	169	169	153	177	151	158	172	163	170	146	165	164	166	170	164	165
153	164	142	139	162	176	193	225	258	330	395	503	586	701	850	1096	1179	1283	1456	1504
1525	1393	1238	1127	955	773	663	562	523	464	458	440	446	546	539	576	554	500	453	419
341	305	287	235	249	191	195	176	179	160	162	179	166	168	161	203	161	180	143	150
190	174	140	170	179	175	172	158	163	153	155	170	170	141	174	142	180	163	168	178
190	189	197	190	216	241	254	363	466	546	686	818	924	1059	1315	1485	1519	1692	1725	1644
1509	1356	1208	988	891	673	576	459	400	328	300	228	198	195	176	171	164	177	173	173
170	162	158	169	178	155	168	170	180	203	180	206	205	237	211	283	262	290	320	349
387	391	422	429	435	391	392	393	300	324	308	269	253	236	212	198	211	199	181	182
161	158	204	161	185	175	183	176	192	174	200	168	180	189	168	191	201	179	187	186
176	183	206	200	182	173	155	170	194	175	172	165	164	171	190	157	155	181	193	183
210	216	197	218	191	238	245	312	325	392	435	519	576	669	778	847	849	848	985	1023
961	911	862	778	673	629	569	488	403	387	292	275	286	232	224	208	205	183	186	185
178	193	175	168	203	206	237	272	311	359	373	481	614	741	874	1056	1209	1363	1613	1733
1992	2191	2140	2215	2334	2183	2047	1839	1571	1378	1249	989	946	736	586	512	432	375	337	246
223	228	175	186	187	223	215	190	191	188	190	177	192	184	181	171	202	179	192	223
185	185	181	184	175	202	192	179	203	190	194	170	202	198	214	219	230	205	231	254
268	363	394	495	609	641	809	864	1040	1169	1253	1424	1551	1657	1820	1836	1913	1898	1800	1713
1572	1400	1276	1130	949	814	703	651	552	433	417	352	285	284	257	247	210	205	201	227
218	204	184	210	206	201	226	169	207	224	193	201	182	214	237	194	225	245	238	210
190	219	213	217	214	224	197	208	207	222	176	208	187	177	182	177	183			
208	170	157	173	190	189	189	173	196	192	197	175	175	191	186	178	183			
169	204	174	163	143	171	168	187	180	187	180	209	220	214	205	213	202			
330	347	394	410	439	452	476	530	524	575	583	582	562	582	537	476	413			
344	320	284	271	282	252	221	211	227	194	189	208	188	225	242	278	279			
531	607	632	717	806	865	964	1068	1189	1229	1275	1386	1444	1508	1523	1457	1310			
1066	924	858	776	741	667	554	588	529	489	382	344	339	319	294	256				

Sample: USP50-1350 (77 K)

Starting Angle: 13 degrees two-theta
Step Width: .05 degrees two-theta

Zeropoint: +0.073 degrees two-theta
Wavelength: 1.3034 Angstroms

176	198	176	191	215	191	201	213	195	177	216	211	211	179	197	214	212	215	204	178
183	196	209	196	214	196	205	203	195	207	211	221	224	219	198	219	236	217	213	218
269	285	499	821	1427	2312	3477	4707	5580	5979	5169	4299	2992	1920	971	494	295	253	270	223
234	221	212	214	224	258	214	194	201	220	213	220	187	194	192	228	215	220	217	206
190	192	193	223	226	232	196	222	195	205	215	205	217	202	221	212	207	180	179	211
229	201	219	190	195	170	206	210	210	208	249	190	229	192	190	207	212	217	208	211
234	197	256	205	188	202	209	183	212	183	219	237	229	217	217	209	188	205	175	211
204	201	205	192	180	225	191	202	213	197	197	227	222	192	220	221	190	191	197	211
216	200	243	203	202	227	197	208	196	188	189	178	202	187	195	203	207	201	195	211
200	206	232	191	209	200	199	231	184	219	191	195	196	189	216	202	199	191	195	211
224	203	212	184	204	216	231	196	203	200	172	185	240	220	220	216	204	211	200	211
205	196	197	189	208	199	199	219	197	202	220	204	198	188	193	209	221	211	200	211
407	553	1054	1781	2900	3766	4150	3948	3161	2163	1256	681	371	278	253	226	197	211	200	211
214	199	199	182	211	225	189	204	178	182	175	193	191	207	172	224	196	197	197	211
171	199	211	190	219	182	187	206	186	199	189	197	195	190	206	211	176	199	197	211
213	200	187	234	192	222	188	190	205	198	197	195	193	225	201	223	209	199	194	202
217	199	212	218	222	235	222	293	371	512	973	1745	3098	4647	6058	6752	6255	4967	1297	1982
987	607	401	288	253	213	235	249	220	215	197	218	237	212	226	256	293	461	785	1220
1790	2197	2493	2244	1911	1254	830	524	353	257	265	214	224	208	244	219	207	223	223	205
204	228	232	217	232	224	239	287	382	494	648	757	831	785	707	550	445	349	264	259
264	230	248	224	236	220	207	248	233	241	214	242	252	216	229	218	234	226	215	236
236	255	243	209	230	229	236	231	250	237	243	224	214	221	226	253	235	235	240	221
241	235	216	283	241	232	243	291	294	291	288	330	316	364	504	632	1122	1753	2766	3826
5017	5764	5374	4681	3285	2213	1316	847	578	397	318	293	270	286	261	239	267	233	260	259
243	240	257	266	235	240	264	269	266	295	308	372	417	506	641	722	710	699	597	512
446	359	295	283	270	239	244	234	261	239	210	261	213	216	226	235	250	255	240	230
261	263	341	454	591	877	1124	1244	1441	1371	1282	993	776	572	420	324	266	236	272	237
242	228	209	223	226	204	217	250	231	241	224	242	215	221	238	252	211	251	226	198
229	231	233	232	203	216	224	229	203	227	213	224	204	238	228	202	224	235	208	248
229	232	211	203	239	199	220	193	229	230	235	235	218	198	231	221	244	188	229	210
217	212	193	213	235	213	216	220	203	235	256	213	224	211	206	229	212	208	207	228
215	225	254	314	445	486	764	976	1267	1538	1724	1693	1575	1388	1031	845	591	440	351	322
248	237	200	200	218	240	205	224	204	235	207	188	201	203	178	193	187	205	229	200
204	217	200	205	203	223	207	215	209	195	196	243	215	205	233	215	256	245	358	445
607	836	1137	1587	2178	2612	3158	3494	3429	3353	2848	2210	1692	1312	859	594	447	344	287	249
244	213	237	222	208	243	246	187	224	204	206	195	209	200	217	237	218	221	219	202
226	188	205	204	196	193	206	203	204	196	213	206	187	208	215	204	182	208	182	210
210	189	222	178	211	189	193	190	211	195	215	210	242	213	211	235	242	213	250	233
233	234	253	259	296	314	419	532	840	1217	1828	2507	3578	4657	6044	7143	8457	8857	8730	7984
6948	5683	4412	3327	2345	1708	1111	750	501	415	312	299	265	247	249	251	229	177	208	210
195	198	219	227	199	212	246	198	220	214	213	218	199	223	206	235	201	208	231	261
305	301	345	438	501	582	686	754	934	930	883	865	787	737	600	508	391	383	323	280
250	229	227	248	202	188	198	208	193	190	205	185	175	185	194	179	193	176	193	180
194	198	213	190	177	183	204	200	178	205	192	183	204	188	180	177	175	176	186	202
176	191	180	187	203	166	192	193	172	196	235	170	190	191	185	183	197	210	210	219
248	285	268	332	380	472	495	540	576	675	741	712	717	669	614	494	489	420	331	324
289	216	238	263	195	192	187	188	197	179	174	186	193	185	183	204	171	222	178	176
202	200	189	192	207	220	227	270	300	366	440	488	601	669	749	817	930	993	1066	967
960	857	831	791	696	637	573	594	568	540	595	647	677	650	680	635	596	537	518	449
385	366	293	287	251	239	221	220	226	207	171	216	211	174	179	207	206	206	183	173
172	181	188	194	174	232	170	201	198	205	221	203	212	200	204	208	218	212	217	237
240	264	308	334	437	455	531	657	754	908	1034	1181	1358	1405	1666	1619	1651	1679	1664	1574
1363	1350	1222	1034	945	793	642	558	480	397	348	376	270	270	247	231	212	219	241	211
217	201	209	202	239	209	226	246	237	254	247	269	280	309	311	368	365	406	401	420
379	413	420	355	345	344	353	297	278	297	259	249	257	247						

290	205	199	205	177	178	187	215	210	226	181	210	207	221	238	218	226	233	205	178
217	210	225	222	216	207	197	222	224	192	195	206	216	240	216	217	230	217	217	171
689	1076	1613	2338	3163	3775	3942	3675	2863	2166	1467	906	519	293	263	258	253	253	253	253
257	222	233	228	245	216	246	217	223	238	277	239	229	223	217	227	230	218	190	200
240	229	201	211	223	223	245	236	201	200	234	199	221	225	267	217	200	200	200	200
223	206	200	237	210	235	204	234	255	204	202	352	208	212	236	230	218	197	206	201
206	193	211	246	226	238	221	218	230	214	225	211	218	215	212	217	213	199	223	183
205	206	181	261	184	209	205	212	209	207	232	207	210	227	216	224	205	222	216	204
189	209	204	220	211	202	209	223	224	218	227	213	205	216	204	194	188	201	205	211
187	212	212	209	209	197	205	217	207	211	206	202	213	186	227	209	238	211	214	175
203	193	222	171	222	194	181	178	207	228	202	205	188	192	201	217	209	207	189	202
198	195	180	189	208	215	224	204	229	248	186	209	212	184	196	217	327	463	805	1379
2253	3192	3715	3791	3259	2470	1487	883	452	329	330	211	217	205	192	184	206	222	194	205
201	196	196	200	215	229	195	181	180	212	308	222	198	194	201	199	183	183	203	216
180	204	215	185	169	175	170	181	200	177	197	211	206	185	201	302	195	200	200	214
198	220	190	173	200	201	198	178	196	216	220	188	172	175	169	206	198	221	175	202
214	207	198	203	307	461	811	1474	2608	4207	6006	6837	6713	5574	3827	2447	1367	750	371	302
206	208	221	243	218	173	208	201	207	212	202	250	315	395	613	926	1464	1922	2071	2065
1814	1264	899	566	377	297	226	239	187	202	223	232	209	189	203	221	215	147	343	219
217	226	210	229	216	228	215	240	242	213	196	228	211	234	202	200	237	249	235	205
230	215	200	227	216	232	227	217	191	215	242	204	244	223	236	236	213	238	219	219
218	245	216	210	218	248	216	244	249	217	239	241	226	235	210	217	244	224	200	206
238	238	235	237	218	224	243	270	271	295	398	555	998	1601	2686	3892	5931	5167	295	8337
3173	2169	1298	796	454	341	300	260	254	256	232	239	274	239	240	238	245	216	205	211
223	257	226	252	237	227	239	248	240	247	243	232	212	275	243	238	254	211	235	216
269	239	220	236	237	226	215	240	252	206	240	217	223	240	232	220	224	211	211	212
468	632	831	978	1136	1038	915	774	588	460	380	303	249	222	248	232	214	211	177	200
191	219	233	237	192	211	223	233	213	214	199	192	197	199	183	204	216	211	177	200
198	222	219	218	188	201	235	233	226	226	194	202	207	221	182	229	204	201	200	211
215	186	215	208	219	212	213	204	186	213	214	211	212	185	214	217	214	201	214	211
214	225	225	237	220	215	199	220	224	222	196	202	199	200	192	193	198	224	200	211
411	588	823	1073	1337	1515	1586	1534	1393	1192	1016	685	553	423	320	249	227	235	223	211
190	208	191	195	187	213	192	163	190	201	198	204	198	180	219	221	238	220	200	211
204	188	212	206	201	196	219	180	211	213	209	217	209	261	302	403	627	881	1302	1777
2451	3115	3541	3681	3591	3209	2567	2057	1625	1189	868	585	384	276	232	216	199	204	211	208
187	191	198	215	204	209	209	207	207	165	213	185	183	216	193	197	167	181	162	213
194	186	182	191	186	187	207	178	164	204	173	222	167	215	191	216	196	187	167	198
176	192	179	192	180	206	186	189	200	197	188	180	189	203	189	194	205	203	200	211
246	265	380	553	867	1330	2209	2983	4307	5554	6657	7843	8230	8432	7866	6826	6021	4703	3222	2910
2109	1516	975	605	371	296	223	223	213	189	177	188	178	173	185	204	189	196	161	189
204	184	174	171	179	187	179	159	134	174	193	197	191	198	205	209	224	253	281	300
363	376	431	416	415	423	381	370	354	292	285	272	240	220	196	219	192	183	176	180
187	197	179	181	183	193	185	162	178	183	159	178	174	206	191	165	192	177	166	168
161	156	165	197	150	167	180	166	172	174	159	173	176	178	192	179	174	157	175	183
145	209	184	173	140	175	173	178	184	147	175	197	162	189	192	200	222	253	347	367
420	504	566	660	686	712	710	639	617	509	473	461	421	345	312	298	263	227	175	189
163	177	170	183	162	173	163	179	159	172	186	147	181	165	189	175	177	188	172	190
203	199	246	251	303	367	471	570	657	808	882	926	980	940	960	926	825	787	736	625
639	606	554	569	598	653	618	634	611	616	548	523	502	461	391	338	338	345	251	273
225	220	199	197	189	184	158	172	184	190	185	173	178	166	186	180	170	176	195	173
187	193	171	183	184	181	203	188	181	176	176	175	205	162	188	213	225	187	285	311
365	450	495	633	723	876	903	1009	1121	1021	1038	962	907	832	731	725	674	617	512	358
404	337	309	261	240	207	213	189	188	218	177	194	207	177	215	184	152	205	183	191
193	190	213	228	253	235	259	263	296	303	316	360	322	395	364	397	348	337	288	327
296	281	308	257	264	239	209	219	208	213	208	208	215	200	201	199	208	191	202	172
191	182	202	190	195	193	178	191	186	215	235	183	179	193	194	181	193	197	182	192
184	198	208	195	210	211	197	209	212	220	221	226	211	222	294	249	293	362	441	460
492	588	659	767	768	860	877	924	843	788	714	688	636	618	565	565	494	467	424	409
371	319	281	278	258	241	208	189	194	225	223	222	233	248	229	245	274	342	390	457
548	606	760	857	984	1108	1155	1314	1397	1445	1403	1386	1261	1232	1105	1124	1029	890	849	772
707	667	576	494	445	409	330	321	285	227	246	217	214	219	222	226	208	219	239	215
226	232	216	251	229	213	202	215	214	240	235	215	224	235	227	216	223	235	205	208
228	240	232	262	268	272	287	358	405	421	564	671	708	820	914	1016	1077	1199	1222	1272
1334	1277	1159	1111	1047	953	983	897	865	786	788	750	656	553	543	440	440	353	331	341
272	251	239	227	238	249	238	214	238	247	256	272	251	239	248	268	281	275	296	310
313	296	317	317	304	278	299	295	285	285	246	285	233	285	253	253	257	247	247	248
243	236	217	221	235	208	228	203	213	208	226	226	204	192	234	203	213	218	220	206
217	189	205	202	192	208	225	207	226	174	241	228	226	222	239	243	243	254	292	294
277	315	346	397	395	433	457	464	512	535	487	508	486	479	478	436	419	426	405	422
393	372	336	369	326	303	297	294	292	250	231	221	244	251	263	284	307	306	354	385
474	518	555	568	635	727	764	854	921	940	1007	971	1042	999	969	904	861	871	816	814
836	776	809	800	677	629	650	580	492	493	418	435	374	340	344	319	300	298	268	254
244	241	212	226	192	187	188	213	202	192	192	196	189	199	203	202	190	227	199	203
229	241	280	282	332	336	386	445	484	550	598	647	734</							

Starting Angle: 13 degrees two-theta
Step Width: .05 degrees two-theta

Sample: JSP75-1350

Zeropoint: -0.039 degrees two-theta
Wavelength: 1.3227 Angstroms

209	240	275	266	262	258	228	263	260	252	285	239	255	263	271	253	249	242	242	242
250	311	270	283	286	261	309	295	252	296	301	280	300	294	297	293	282	279	279	279
337	319	326	328	344	344	373	349	373	388	369	378	352	379	351	379	399	347	346	344
305	307	347	296	299	309	304	312	275	260	294	276	284	291	304	284	284	272	271	252
298	261	248	267	240	297	245	262	249	254	260	241	240	299	260	281	290	256	269	283
292	248	256	280	240	256	273	270	283	257	250	241	259	259	284	259	267	276	266	213
252	262	253	257	260	241	241	266	260	241	256	248	246	222	250	225	274	273	267	254
259	258	268	252	237	247	244	267	238	227	240	245	243	257	237	254	241	240	240	267
252	242	258	257	259	264	244	251	240	233	262	252	262	222	249	245	245	246	234	249
253	241	276	224	246	246	237	253	235	243	267	233	276	267	269	233	245	245	235	236
233	242	242	232	271	233	245	265	232	248	240	233	264	234	232	240	255	249	232	243
236	248	252	247	272	255	247	248	231	242	260	280	232	230	236	246	258	251	245	234
292	389	564	980	1561	2330	3021	3396	3413	2745	1990	1214	804	449	260	305	293	257	283	253
235	247	231	266	242	230	251	241	264	250	267	237	282	251	234	235	241	234	234	234
265	265	276	238	273	250	232	255	283	220	236	274	263	219	259	266	269	245	260	261
219	238	228	227	242	263	246	270	262	215	222	230	264	255	245	239	252	249	248	243
259	294	237	272	267	261	244	308	268	317	401	691	1057	1786	2882	4322	5559	6112	4509	4112
2924	1597	968	573	415	326	323	289	241	321	291	283	281	291	298	305	317	349	457	397
858	1383	2079	2614	2931	2818	2144	1708	1076	681	457	382	309	302	272	286	292	261	277	225
295	295	265	258	241	257	300	263	280	280	244	268	270	266	253	310	244	290	269	234
304	273	308	298	306	301	336	291	324	273	295	309	300	314	289	296	303	301	279	143
278	257	277	273	292	280	304	283	272	267	278	287	289	297	313	283	301	327	290	311
301	304	283	321	342	321	332	304	298	319	320	372	377	416	351	485	508	537	523	1100
1608	2345	3200	3765	4182	3892	3171	2284	1498	950	679	468	411	354	353	341	318	302	285	249
318	309	317	313	287	295	307	297	274	281	313	291	269	290	276	272	303	311	291	249
278	291	283	287	305	286	302	273	285	312	292	293	281	284	288	291	292			
281	324	278	277	347	353	408	412	591	760	829	957	1025	992	805	520	490			
318	277	294	284	275	291	279	263	301	323	302	273	304	277	262	274	245			
303	271	257	272	291	281	259	348	281	270	284	264	303	289	292	256	251			
284	283	298	232	266	299	267	259	266	246	275	267	270	265	243	256	274			
284	273	266	267	279	281	254	251	272	262	303	302	271	300	302	283	284			
270	280	265	259	280	323	285	345	461	536	714	917	1194	1507	1726	1789	1664	1429	1382	300
632	529	384	310	303	279	278	248	245	289	271	254	243	273	298	287	291	287	292	249
287	253	269	254	266	279	231	249	270	273	265	278	272	275	255	230	266	268	273	314
288	314	332	405	519	659	905	1259	1624	2345	3033	3647	3960	4048	3541	2972	2329	1683	1180	344
575	528	373	375	287	287	295	325	254	295	266	247	278	254	274	268	276	259	249	
240	239	242	231	229	263	244	257	221	224	231	245	236	239	230	240	245	231	224	
227	232	236	226	238	239	243	229	246	246	236	271	244	224	232	232	217	222	251	247
266	277	256	285	277	288	305	335	375	365	422	480	593	724	977	1489	2003	2864	3623	5080
6242	7528	8514	8459	8332	7457	6195	4765	3601	2524	1796	1222	857	557	444	352	325	303	317	304
284	294	244	262	259	248	251	268	234	229	215	233	218	239	251	224	245	205	224	232
216	252	260	221	254	247	225	224	211	227	250	225	238	211	249	218	227	224	234	219
245	243	259	267	246	205	215	228	249	235	244	230	188	216	246	238	235	204	223	222
208	186	216	192	230	202	215	252	231	209	189	206	234	208	184	198	212	215	220	194
196	200	221	220	198	228	217	199	214	213	240	217	201	217	210	244	228	207	205	221
222	225	227	220	218	223	245	273	241	293	388	396	474	570	643	686	759	769	833	748
692	643	544	520	362	341	314	271	253	224	237	224	221	185	202	222	250	216	215	184
243	206	225	219	220	212	213	225	211	214	219	236	198	272	266	308	323	338	342	513
586	691	755	832	912	1016	1023	901	889	806	742	672	645	615	608	607	634	794	839	807
995	952	982	889	905	757	664	560	395	414	401	347	310	266	262	252	249	238	236	204
215	182	226	218	235	204	212	195	233	200	218	211	191	239	230	223	215	223	228	258
215	259	248	224	250	244	268	251	238	273	221	287	347	342	412	508	643	623	669	772
766	836	992	1011	981	1008	811	752	717	591	495	469	443	374	348	303	289	248	295	244
256	226	244	245	265	227	216	232	248	224	243	284	260	251	245	286	295	272	299	272
321	338	365	383	387	450	456	448	469	487	465	413	406	399	359	313	341	326	305	280
273	273	261	246	247	280	256	245	267	247	265	275	223	262	260	262	264	263	258	248
264	261	244	264	263	297	255	258	233	228	227	269	264	268	289	231	275	257	261	252
233	272	226	260	279	240	277	301	296	318	357	339	486	592	566	629	710	779	817	945
1022	1027	1062	1098	1055	924	916	876	778	654	631	519	461	451	395	365	339	332	334	257
291	324	292	288	275	256	315	257	268	327	322	363	359	439	476	487	578	700	703	868
1002	1051	1106	1260	1306	1394	1462	1496	1323	1297	1125	1098	971	851	758	690	608	540	447	424
412	333	351	330	300	308	299	288	272	293	259	322	261	280	273	311	259	299	257	263
285	259	298	271	271	282	297	308	304	307	290	321	322	284	284	319	327	309	321	
120	325	364	405	441	509	557	614	671	727	853	958	1024	1031	1111	1184	1374	1325	1336	
1268	1202	1141	1040	993	856	774	676	670	599	547	484	424	411	363	344	341	323	323	243
323	326	318	355	298	285	347	292	329	353	393	439	406	410	491	463	492	538	512	340
571	484	508	564	488	537	460	466	497	426	400	373	362	336	314	303	298	292	339	295
288	303	282	303	275	283	261	278	295	301	274	288	264	241	280	264	303	297	297	204
311	279	297	284	275	289	264	260	309	272	299	275	297	320	325	380	358	412	394	408
428	474	472	505	553	562	548	631	643	683	643	616	602	591	513	542	496	501	425	
469	443	370	353	363	351	331	324	311	347	306	274	295	290	241	254	282	448	413	524
546	587	618	673	743	747	831	840	845	896	1082	1175	1163	1155	1051	1067	1031	965	929	
916	810	902	725	751	669	660	699	629	515	450	458	462	433	414	393	480	311	345	344
304	311	286	305	281	287	282	282	282	282	282	282	282	282	282	282	282	282	282	282
302	313	347	345	330															

Starting Angle: 13 degrees two-theta
Step Width: .05 degrees two-theta

Sample: US175-1350,800A

Zeropoint: -0.010 degrees two-theta
Wavelength: 1.3426 Angstroms

203	194	190	194	185	198	224	205	193	230	189	216	202	192	180	210	217	197	221	199	204
227	209	238	212	222	216	212	219	223	254	237	262	249	243	237	235	256	221	248	234	257
275	257	218	290	269	263	247	268	282	274	286	283	293	266	296	292	269	268	292	301	301
280	278	301	251	293	256	294	260	255	260	247	266	245	242	234	227	265	233	251	265	265
249	236	240	261	230	249	242	222	218	170	220	246	212	238	211	232	227	232	232	232	245
233	234	212	223	234	235	227	213	218	226	217	224	224	216	209	226	205	205	197	205	205
229	206	196	221	226	229	211	199	225	214	229	192	225	224	209	197	231	231	209	218	218
226	217	199	199	245	225	221	231	215	242	188	218	192	205	215	188	225	217	210	195	195
213	221	190	231	195	213	209	215	223	221	202	204	220	232	219	218	191	226	235	227	227
195	234	212	210	219	229	204	209	218	202	204	184	197	198	202	210	210	217	203	232	232
230	220	209	191	198	195	204	206	182	230	197	204	215	235	201	172	205	233	342	379	379
216	177	210	225	166	201	193	214	174	206	203	199	210	212	222	237	205	180	189	202	202
204	231	215	210	210	216	236	218	228	263	371	604	1062	1820	2623	3053	4107	2604	1993	1260	1260
710	382	303	237	205	210	225	208	188	223	221	211	191	244	221	322	181	212	214	214	167
232	215	199	198	209	209	198	221	215	217	203	239	226	190	206	195	202	184	181	191	191
184	191	184	200	203	206	198	195	205	210	190	202	184	185	167	209	167	217	212	195	195
211	199	194	190	187	174	186	182	198	207	206	182	201	193	215	192	222	238	239	239	239
328	575	963	1700	2864	4263	5227	5305	4642	3357	2061	1224	619	370	252	240	176	292	233	744	744
212	220	216	221	245	238	221	276	330	386	687	1083	1650	2250	2557	2542	2111	1600	991	365	365
367	276	257	220	243	222	199	255	246	219	242	209	217	243	216	216	200	224	250	220	220
218	197	243	246	239	224	227	212	240	240	234	238	258	227	262	245	260	262	250	276	276
239	241	237	233	230	220	235	253	262	250	245	225	236	241	241	243	241	263	256	251	251
249	237	257	238	291	255	244	232	247	256	233	241	265	259	269	223	267	258	261	230	230
247	252	246	273	233	240	264	297	304	391	581	945	1505	2191	2977	3486	3678	3200	2507	1730	1730
1028	638	421	336	264	271	276	273	266	247	268	232	248	267	255	241	241	244	225	260	260
247	259	246	269	262	245	242	257	262	268	260	249	250	226	227	240	246	266	265	235	235
237	229	240	241	245	255	250	259	236	244	276	230	256	242	252	231	283	235	260	345	345
409	514	630	713	880	857	802	610	482	374	328	278	244	251	220	197	243	247	237	251	251
229	217	212	235	244	234	226	199	231	237	242	241	189	238	243	249	244	247	232	211	211
239	228	227	215	220	218	212	232	217	233	196	232	208	199	244	244	205	219	254	243	243
222	205	252	225	237	215	223	222	204	192	219	216	224	242	201	216	216	231	225	223	223
239	243	247	230	237	239	241	264	250	256	236	233	240	217	214	217	211	244	234	226	226
257	235	315	386	507	707	934	1145	1453	1550	1572	1356	1169	944	615	508	384	286	187	73	73
238	228	208	234	221	212	195	199	225	197	196	213	197	201	200	201	198	229	187	229	229
238	233	202	207	207	248	233	230	246	207	231	232	183	208	201	222	188	275	205	111	111
432	560	900	1315	1880	2309	2955	3306	3611	3274	2909	2495	1856	1303	892	576	396	292	235	111	111
211	216	222	226	210	195	203	218	228	193	206	194	205	218	218	201	204	208	222	230	230
193	200	190	199	201	193	215	207	212	205	199	214	202	205	167	218	214	222	232	232	232
210	198	196	202	189	194	185	191	165	219	186	191	201	192	196	199	206	194	194	194	194
202	194	200	194	213	196	247	248	297	338	462	655	968	1360	2045	2787	3734	4283	2903	687	687
7305	7173	6229	5299	4256	3235	2238	1588	970	654	443	327	295	245	209	200	191	221	191	152	152
168	199	203	196	191	167	209	188	190	182	195	200	189	171	191	182	179	169	179	159	159
170	190	191	212	180	192	214	199	188	175	181	194	186	191	172	178	166	188	196	204	204
205	185	196	215	187	177	209	177	192	211	190	185	194	186	190	160	172	173	171	204	204
169	172	189	189	176	170	161	178	174	174	148	193	177	154	169	150	159	162	173	177	177
171	159	173	162	153	166	173	187	157	160	181	147	170	155	171	163	131	172	170	189	189
158	158	158	190	208	188	195	197	251	239	300	359	426	464	561	581	642	664	620	414	414
591	477	469	383	342	327	244	214	190	162	191	201	178	172	173	167	173	172	172	194	194
185	156	175	127	182	167	159	157	184	155	165	195	201	178	184	204	247	300	204	384	384
496	562	596	748	750	836	870	786	802	754	726	603	511	536	486	531	513	521	630	729	729
719	818	816	828	790	726	679	586	531	438	366	326	228	222	211	195	206	178	188	180	180
168	195	185	176	197	187	175	168	183	178	178	184	157	146	175	182	189	171	165	157	157
184	168	174	179	201	165	146	172	222	185	193	228	210	226	233	306	324	354	326	473	473
543	639	717	725	791	828	872	798	702	689	596	548	480	389	308	306	294	256	211	211	211
210	218	209	186	191	172	185	188	204	205	204	201	213	202	194	201	212	226	215	230	230
208	232	232	265	260	260	315	310	352	365	360	390	418	402	318	341	330	307	306	276	276
286	243	257	216	229	211	197	217	212	197	185	214	192	220	198	229	207	209	186	230	230
211	199	228	185	204	209	215	213	226	227	225	194	216	211	206	242	207	225	232	208	208
214	214	216	225	206	232	210	214	209	210	243	235	251	265	266	341	330	365	427	428	428
517	570	642	682	764	852	933	931	940	876	801	768	714	631	575	548	499	417	357	322	322
483	301	277	250	225	237	223	225	213	234	231	201	245	223	258	268	265	299	298	275	275
212	471	527	543	629	684	773	817	954	1054	1108	1250	1301	1256	1127	1084	1014	942	758	736	736
696	609	499	452	374	313	300	266	294	226	236	226	206	222	251	232	236	220	216	186	186
224	211	208	217	215	227	233	234	230	205	224	236	222	236	200	291	214	220	240	214	214
228	230	221	213	249	281	257	279	283	346	353	347	385	417	407	497	591	611	745	751	751
900	945	1033	1133	1131	1117	1165	1108	1120	1032	960	935	803	720	610	506	492	461	403	413	413
304	324	322	300	244	263	246	245	265	245	268	251	252	230	258	287	265	290	260	301	301
346	338	357	378	379	438	427	463	451	477	445	450	449	436	366	383	394	367	353	303	303
276	269	262	271	269	245	229	212	216	230	222	224	210	242	258	250	219	225	261	215	215
240	261	223	217	234	251	230	226	238	237	227	203	253	216	228	244	231	233	212	246	246
257	241	236	242	245	276	282	269	28												

Starting Angle: 13 degrees two-theta
Step Width: .05 degrees two-theta

Zeropoint: -0.034 degrees
Wavelength: 1.3426 Angstroms

263	303	279	305	266	291	289	283	260	275	265	274	278	293	280	299	266	296	279	308
268	243	293	304	282	272	269	306	264	277	270	286	250	304	302	284	307	291	308	309
310	295	291	328	338	309	328	344	329	426	463	468	463	472	456	395	376	342	427	417
292	308	312	294	292	318	356	337	353	343	347	331	338	345	319	338	306	364	341	329
321	313	312	313	330	294	318	313	312	330	302	322	344	298	319	283	334	342	339	398
341	319	335	313	334	317	396	341	374	355	360	341	330	327	319	341	346	357	335	367
320	324	318	340	339	331	337	348	296	348	310	378	353	333	325	339	373	354	333	333
325	343	335	310	351	333	306	325	352	327	339	306	345	348	329	325	328	328	359	306
314	296	329	336	317	327	361	295	333	311	310	329	355	335	333	321	312	340	357	273
322	341	331	353	318	338	324	302	328	326	326	328	328	286	311	326	337	319	309	383
313	325	283	296	316	274	316	314	315	294	322	354	314	320	310	308	317	318	311	278
292	308	321	300	277	267	322	311	297	291	311	287	319	289	290	289	278	321	303	323
287	308	291	302	333	316	333	456	665	1083	1768	2856	3867	4292	4238	3450	2513	1952	944	557
378	317	322	309	311	294	301	327	311	298	277	305	298	286	306	282	317	291	296	394
297	300	316	311	307	320	291	311	292	304	314	338	283	316	301	306	324	312	325	300
295	271	317	320	299	313	287	319	293	299	306	304	328	280	311	303	296	284	316	286
270	313	296	254	334	304	295	321	308	316	276	307	310	338	302	316	362	421	549	909
1476	2448	3633	4620	5066	4879	3752	2512	1539	891	605	395	390	358	325	346	306	377	353	334
326	328	315	367	392	479	671	1247	1993	3224	4443	5493	5568	4830	3775	2311	1435	861	573	394
375	357	381	353	310	333	360	353	375	319	392	370	346	349	361	324	313	323	368	393
371	348	366	366	344	375	373	360	365	347	344	359	332	350	390	376	368	370	370	346
363	341	361	347	360	361	398	340	337	401	380	389	344	385	423	468	484	534	486	491
460	426	399	394	371	366	359	377	384	388	400	372	399	378	382	367	403	369	403	418
366	382	410	430	417	430	546	730	1031	1467	2182	3022	3424	3537	3149	2495	1804	1153	768	547
508	430	402	385	373	327	403	399	351	351	365	372	379	364	347	344	373	378	342	374
360	351	357	334	340	352	328	336	345	368	358	364	326	348	364	357	354	329	324	381
346	345	347	322	339	358	382	355	355	351	336	362	350	389	458	507	648	883	1286	1600
1880	2090	2032	1678	1463	996	721	555	454	365	345	375	343	328	351	332	316	308	321	352
304	344	343	341	315	348	323	337	357	365	327	302	322	347	293	338	337	339	294	321
330	306	349	309	321	341	340	329	355	326	302	303	318	327	359	315	321	324	334	399
348	330	310	351	308	321	336	309	310	322	314	321	308	308	324	342	317	336	329	330
315	335	333	327	343	340	344	306	341	321	282	320	323	322	320	340	396	434	437	280
672	903	1188	1560	1983	2152	2110	2043	1684	1383	1050	755	604	507	421	425	373	480	367	337
326	360	356	337	329	332	331	321	381	353	340	342	352	325	307	384	319	346	355	331
326	350	339	355	377	404	368	330	375	350	374	408	341	429	441	530	636	984	1182	1303
2124	2761	3229	3863	3948	3875	3564	2832	2195	1545	1148	836	678	473	437	381	374	502	353	334
349	335	330	322	332	343	319	376	327	336	299	313	327	341	329	297	309	313	309	347
320	324	320	311	296	283	295	313	320	333	307	331	316	303	314	298	291	299	366	283
292	302	306	289	317	310	310	357	315	315	262	323	282	258	303	312	306	336	299	326
290	289	315	348	406	524	664	989	1423	2076	2790	3970	4944	6317	7409	8470	8785	8173	7472	6061
4837	3554	2582	1712	1237	817	634	451	417	365	363	294	329	302	322	344	311	289	306	282
282	283	300	301	286	291	283	287	272	284	283	302	256	257	267	257	291	270	274	282
271	294	285	286	301	284	322	294	326	314	290	301	304	275	259	266	278	266	274	244
261	229	264	229	290	246	247	273	240	256	278	258	237	265	269	246	271	259	274	274
250	244	246	240	227	226	240	242	255	232	266	258	234	242	235	236	251	215	258	237
256	238	236	238	247	237	238	235	254	246	241	248	261	244	227	238	240	243	242	252
263	240	317	349	361	408	494	556	674	716	819	871	936	917	885	836	744	653	525	519
379	346	318	285	275	267	257	258	230	254	240	243	285	255	252	230	252	242	250	266
245	221	246	257	264	254	257	257	238	264	280	290	379	392	481	495	602	661	721	741
839	872	844	856	779	757	713	650	756	795	921	919	1088	1230	1438	1525	1560	1738	1721	1571
1442	1243	1106	853	835	620	516	432	402	342	342	286	271	288	267	282	270	253	249	246
270	255	233	256	241	242	245	288	272	254	265	272	245	268	238	276	261	267	268	259
296	255	285	263	320	312	284	306	341	360	369	394	457	521	560	633	683	709	787	743
815	773	746	733	658	606	512	484	440	373	375	336	354	304	298	294	294	294	304	275
321	280	282	301	282	294	319	323	293	305	312	302	300	314	341	340	376	363	406	439
484	516	556	566	619	637	693	696	614	599	552	546	511	452	435	393	391	341	359	318
324	282	320	341	322	328	304	275	311	334	325	279	331	313	314	306	335	321	292	299
329	313	341	303	329	300	320	339	331	343	314	349	308	349	322	316	326	328	337	285
294	276	337	332	313	374	372	388	411	498	527	564	633	666	766	886	899	986	1144	1133
1198	1228	1259	1256	1121	1089	1007	890	807	712	635	545	523	454	428	398	428	376	361	328
352	333	324	366	320	298	388	335	347	389	381	369	441	473	511	617	665	778	823	797
958	1024	1128	1192	1305	1281	1280	1270	1271	1153	1101	957	913	789	720	660	551	502	496	469
414	375	348	353	347	331	350	322	339	367	317	334	365	337	357	313	343	336	322	303
368	345	325	289	331	326	321	355	312	304	347	350	318	339	328	381	356	339	360	377
349	380	426	394	451	508	548	629	657	706	872	884	979	982	1116	1148	1226	1305	1295	1378
1334	1237	1195	1172	1037	938	818	759	751	659	613	516	518	525	419	461	400	380	369	378
361	383	379	383	430	335	436	423	450	502	523	519	531	575	610	645	713	743	804	817
883	819	892	850	859	849	770	717	680	653	605	523	574	473	518	398	447	430	367	389
384	380	372	391	366	328	371	386	349	393	376	366	350	351	362	355	367	373	359	346
379	355	394	379	342	300	367	336	348	367	337	384	351	367	371	396	339	408	417	423
463	450	465	534	496	565	640	634	605	682	722	731	704	766	758	757	747	705	683	685
658	593	601	493	473	447	435	395	451	370	377	355	357	350	350	363	346	394	412	410
406	465	509	507	542	613	627	704	698	794	846	931	995	1010	1055	1107	1096	1151	1090	1153
1149	1104	1020	998	952	979														