AM-86-294

The crystal structure of $Fe^{2+}Fe_2^{3+}$ $(PO_3(OH)_4(H_2O)_4$: a new synthetic compound of mineralogic interest

Vencato et al.

Table 3&4

Am. Min., 71, 1-2

Table 4. Anisotropic temperature factors*
for $Fe^{2+}Fe_2^{3+}(PO_3OH)_4(H_2O)_4$

Atom	U(11)	U(22)	U(33)	U(23)	U(13)	U(12)
Fe(1)	99(6)	128(6)	157(7)	21(5)	13(5)	-5(5)
Fe(2)	80(4)	100(4)	105(4)	-9(4)	-6(3)	8(3)
P(1)	70(7)	78(7)	76(7)	-12(6)	-10(5)	8(6)
P(2)	72(7)	83(7)	152(8)	-6(6)	-3(6)	2(6)
O(1)	7(2)	12(2)	18(2)	0(2)	-4(2)	1(2)
O(2)	21(3)	20(3)	8(2)	5(2)	-1(2)	-3(2)
O(3)	9(2)	11(2)	14(2)	1(2)	-4(2)	0(2)
O(4)	12(2)	17(2)	8(2)	1(2)	2(2)	5(2)
O(5)	5(2)	18(3)	28(3)	-6(2)	-5(2)	4(2)
O(6)	12(2)	18(3)	31(3)	-5(2)	1(2)	4(2)
O(7)	12(2)	18(3)	19(3)	-6(2)	-4(2)	3(2)
O(8)	37(4)	18(3)	44(4)	20(3)	19(3)	2(3)
OW(1)	29(3)	18(3)	25(3)	7(2)	-7(2)	-3(2)
OW(2)	21(3)	28(3)	12(3)	4(2)	-4(2)	2(2)

* Fe(1) to P(2) ($x10^4$) and O(1) to OW(2) ($x10^3$).

To be deposited

Am-86-294

COLUMNS GIVE VALUES OF H , 10*FOBS & 10*FCALC

K=	0	L= 0	3	227	243	-5	256	268	-4	486	510	4	228	183	0	104	81
2	1515	1607	4	998	974	-4	589	580	-3	111	114	5	248	234	1	216	218
4	1826	1901	5	192	217	-3	1005	1044	-2	647	647	K=	17	L= 1	3	805	787
6	640	658	6	258	248	-1	519	460	-1	154	175	-1	275	258	4	190	167
K=	1	L= 0	K=	11	L= 0	0	944	941	0	680	658	0	335	337	7	299	314
1	546	496	1	544	556	1	1272	1325	1	314	338	3	253	275	K=	4	L= 2
2	150	158	3	374	403	2	672	715	2	837	849	4	341	359	-6	192	212
3	427	445	5	201	205	3	526	537	3	207	228	K=	18	L= 1	-4	618	632
4	246	143	K=	12	L= 0	4	335	319	4	323	357	-2	121	103	-3	237	243
5	261	280	0	168	138	5	502	515	6	304	336	0	126	129	-2	686	677
7	149	153	1	809	860	6	399	436	K=	9	L= 1	2	154	146	-1	491	491
K=	2	L= 0	2	261	242	K=	3	L= 1	-6	266	262	K=	19	L= 1	0	611	596
0	588	520	3	559	549	-3	268	263	-4	311	325	-2	344	348	2	339	314
1	579	538	5	411	423	-2	203	209	-2	487	540	2	202	200	3	166	192
2	601	611	6	275	272	-1	195	194	-1	148	147	K=	20	L= 1	5	227	206
3	472	452	K=	13	L= 0	0	411	350	0	271	245	-3	146	131	7	287	274
4	363	367	5	132	142	1	160	178	2	409	449	-1	563	570	K=	5	L= 2
5	272	280	K=	14	L= 0	2	242	260	3	171	178	3	368	383	-3	740	765
6	526	510	0	692	698	3	154	176	K=	10	L= 1	K=	21	L= 1	1	1179	1217
K=	3	L= 0	1	463	466	4	490	519	-5	495	530	0	335	346	2	226	214
1	428	400	3	572	588	5	236	203	-2	178	168	2	167	192	3	368	385
2	87	85	4	401	406	K=	4	L= 1	-1	541	562	3	157	165	4	152	144
3	323	304	5	363	344	-5	504	543	3	378	344	K=	22	L= 1	5	754	757
4	424	435	K=	15	L= 0	-3	266	244	4	213	210	1	310	308	K=	6	L= 2
K=	4	L= 0	1	246	231	-2	234	268	K=	11	L= 1	K=	23	L= 1	-4	633	634
0	832	764	3	126	146	-1	881	879	-4	140	163	-1	165	187	-3	248	277
1	1864	2263	5	216	219	0	159	166	-2	190	185	K=	0	L= 2	-2	287	253
2	101	95	K=	16	L= 0	2	355	314	-1	183	209	-6	229	256	-1	344	337
3	1506	1528	0	462	477	3	515	520	0	105	151	-4	253	229	0	1014	1027
4	448	454	1	161	193	4	212	215	2	472	435	-2	305	276	1	243	261
5	839	837	2	134	144	7	262	273	5	203	198	0	642	586	3	186	183
7	597	611	3	305	330	K=	5	L= 1	6	183	205	2	256	265	4	485	492
K=	5	L= 0	4	276	294	-6	249	228	K=	12	L= 1	4	586	553	K=	7	L= 2
1	270	278	K=	17	L= 0	-4	206	186	-5	298	301	K=	1	L= 2	-5	531	549
2	406	375	3	129	140	-3	142	178	-3	741	759	-7	227	249	-2	191	216
3	356	383	K=	18	L= 0	-2	1116	1108	-1	490	493	-6	276	289	-1	976	955
5	169	134	0	245	240	-1	159	160	1	817	815	-4	382	391	1	215	227
6	191	206	1	351	342	0	365	305	2	125	102	-3	446	494	2	455	458
7	173	216	2	549	562	1	118	116	3	300	328	-1	604	636	3	383	407
K=	6	L= 0	3	297	308	2	1139	1103	5	406	390	0	1254	1254	4	157	196
1	835	837	4	252	255	4	301	335	K=	13	L= 1	1	97	81	K=	8	L= 2
2	423	430	K=	19	L= 0	6	171	195	-3	302	309	2	162	104	-5	160	155
3	628	638	1	237	225	K=	6	L= 1	-2	345	361	3	562	545	-4	179	194
4	126	139	3	288	281	-6	351	357	-1	194	202	4	680	683	-3	268	262
5	546	539	K=	20	L= 0	-5	529	513	1	467	502	6	284	281	-2	116	129
6	167	179	0	564	574	-4	439	443	2	370	411	K=	2	L= 2	-1	432	448
K=	7	L= 0	K=	21	L= 0	-2	943	973	3	360	365	-7	208	207	0	286	287
3	366	329	3	204	206	-1	751	757	K=	14	L= 1	-6	184	235	1	164	166
4	237	233	K=	22	L= 0	1	738	728	-4	159	164	-5	409	419	2	515	528
K=	8	L= 0	1	364	368	2	900	818	-1	243	261	-4	212	192	3	341	325
0	753	766	2	293	298	3	521	489	1	410	410	-3	580	599	6	434	457
1	760	728	K=	0	L= 1	4	257	234	3	190	212	-2	494	481	K=	9	L= 2
2	1410	1421	-5	189	205	6	218	234	5	284	292	-1	1028	1038	-6	243	229
3	222	223	-3	221	220	K=	7	L= 1	K=	15	L= 1	0	226	200	-4	478	528
4	569	569	-1	569	569	-6	136	144	-3	215	208	1	814	802	-3	229	248
5	339	342	1	404	407	-4	141	136	-2	432	460	2	765	737	-2	635	651
6	582	579	3	524	516	-3	248	261	2	343	373	3	556	528	0	808	785
K=	9	L= 0	K=	1	L= 1	-2	170	188	4	152	149	5	142	126	1	437	449
1	218	246	-6	247	264	-1	261	269	K=	16	L= 1	6	397	391	2	675	697
2	192	216	-4	308	327	0	258	195	-5	187	195	7	199	206	3	200	192
3	522	513	-2	627	617	1	816	762	-4	383	412	K=	3	L= 2	4	637	662
6	152	160	0	394	385	3	213	200	-2	521	525	-5	354	343	5	389	363
K=	10	L= 0	3	240	225	4	305	293	-1	273	297	-4	228	224	6	334	318
0	1530	1540	K=	2	L= 1	5	216	206	0	461	468	-3	134	147	K=	10	L= 2
1	371	404	-7	450	450	K=	8	L= 1	1	299	340	-2	111	137	-5	250	281
2	436	430	-6	285	249	-6	206	189	2	390	419	-1	752	753	-4	525	518

Table 3

COLUMNS GIVE VALUES OF H , 10*FOBS & 10*FCALC

-3	348	347	1	254	243	5	282	289	3	414	391	3	200	212	0	186	161
-1	629	644	2	345	331	6	528	536	4	284	289	4	284	243	1	826	833
0	860	843	3	468	480	K= 4 L=		3	5	279	277	K= 18 L=		3	2	799	818
1	304	322	4	258	254	-6	293	341	K= 10 L=		3	-3	459	460	3	464	448
3	403	374	K= 18 L=		2	-5	165	192	-6	242	267	-2	218	233	5	374	365
4	363	336	-2	199	212	-4	233	220	-5	355	360	0	228	201	6	220	212
5	217	193	2	164	176	-3	213	222	-2	453	432	1	508	518	K= 5 L=		4
K= 11 L=		2	K= 19 L=		2	-2	495	496	-1	815	815	2	265	277	-5	443	477
-6	298	320	-4	261	276	-1	389	417	0	222	221	4	177	213	-3	127	135
-4	511	499	-3	401	401	0	187	176	2	203	217	K= 19 L=		3	-2	315	346
-3	131	124	-2	263	324	1	498	503	3	555	553	-3	290	289	%1	829	836
-2	400	413	-1	234	241	2	356	364	4	223	222	-1	413	440	1	130	137
-1	393	415	0	357	338	3	297	287	K= 11 L=		3	1	248	247	3	410	432
0	768	760	1	446	473	K= 5 L=		3	-5	542	564	2	239	218	4	138	195
2	199	221	2	181	271	-4	652	628	-4	508	527	3	345	371	K= 6 L=		4
3	410	430	4	254	266	-3	153	129	-3	570	572	K= 20 L=		3	-6	216	202
4	433	434	K= 20 L=		2	-2	347	319	-2	372	410	-3	182	197	-5	207	225
K= 12 L=		2	-3	200	199	-1	240	218	-1	882	902	-1	187	183	-3	378	391
-5	194	203	-1	155	129	0	675	710	0	1039	1052	3	218	239	-2	509	538
-2	320	319	0	376	420	1	104	108	1	711	738	K= 21 L=		3	-1	438	429
-1	473	457	1	232	248	2	502	489	2	393	387	-1	552	578	0	219	229
2	443	440	K= 21 L=		2	3	249	221	3	620	656	0	266	223	1	532	552
3	507	494	-2	162	182	4	450	458	4	723	732	1	458	466	2	365	367
5	187	163	-1	160	177	6	201	163	5	483	506	K= 22 L=		3	4	319	344
6	331	297	0	258	222	K= 6 L=		3	K= 12 L=		3	1	302	284	5	184	194
K= 13 L=		2	K= 23 L=		2	-4	252	265	-3	270	302	K= 0 L=		4	K= 7 L=		4
-5	336	352	0	279	304	-3	431	452	1	451	461	-6	300	300	-5	211	195
-4	189	189	K= 0 L=		3	-2	592	597	5	293	287	-4	133	169	-2	206	169
-3	223	277	-5	517	488	-1	248	246	K= 13 L=		3	-2	484	514	-1	689	695
-2	214	241	-3	179	163	1	481	508	-4	197	208	0	991	935	0	174	170
-1	788	805	-1	569	635	2	664	689	-3	315	338	2	555	538	3	574	570
0	586	579	1	404	377	5	225	231	-2	533	531	4	523	575	K= 8 L=		4
1	431	429	3	811	786	6	229	209	-1	353	384	6	386	361	-5	306	291
2	331	330	K= 1 L=		3	K= 7 L=		3	0	199	224	K= 1 L=		4	-4	203	221
3	692	728	-7	346	339	-6	434	445	1	313	321	-3	334	346	-2	181	170
4	389	363	-5	476	482	-5	352	383	2	390	390	-2	291	318	-1	397	405
5	267	273	-4	647	669	-4	429	457	3	477	472	-1	204	181	0	330	324
K= 14 L=		2	-3	746	758	-3	483	515	5	154	153	0	212	221	1	251	287
-2	544	542	-2	188	153	-2	1049	1080	K= 14 L=		3	1	577	601	4	352	351
-1	196	202	-1	969	1004	-1	894	909	-5	274	294	2	300	332	5	289	285
2	469	479	0	1258	1200	0	131	143	-4	257	271	4	128	98	K= 9 L=		4
3	181	185	1	764	743	1	630	657	-2	372	375	5	246	245	-6	216	197
K= 15 L=		2	3	698	660	2	971	1015	-1	267	278	K= 2 L=		4	-5	234	230
-4	239	252	4	611	616	3	696	730	0	288	311	-4	589	596	-3	173	184
-3	704	712	5	270	261	4	247	246	2	228	263	-3	262	233	-2	496	502
-2	261	243	6	191	221	5	310	326	3	284	318	-1	115	142	-1	470	479
0	394	388	K= 2 L=		3	6	544	553	K= 15 L=		3	0	1022	1017	0	320	320
1	597	656	-7	172	201	K= 8 L=		3	-5	232	201	2	315	322	2	441	442
2	267	245	-4	320	312	-3	385	382	-4	521	515	4	414	395	3	239	258
3	317	305	-3	649	669	-2	285	326	-2	258	259	6	176	143	4	300	290
4	275	288	-2	299	307	-1	89	108	-1	342	355	K= 3 L=		4	K= 10 L=		4
5	378	351	-1	239	198	1	491	496	0	732	745	-5	156	183	-3	122	89
K= 16 L=		2	1	759	766	2	428	433	1	321	335	-4	299	291	-2	248	268
-5	155	211	4	277	257	3	208	187	2	322	346	-3	265	244	-1	183	178
-4	245	250	5	299	258	4	231	246	3	253	231	-1	203	200	1	191	200
-3	175	172	K= 3 L=		3	5	341	300	4	552	544	0	916	888	2	197	196
-1	214	179	-6	515	544	K= 9 L=		3	5	257	250	1	362	400	3	205	239
0	335	323	-5	302	301	-6	143	146	K= 16 L=		3	2	495	489	5	257	227
1	250	245	-4	488	531	-5	501	503	-3	225	236	4	341	338	K= 11 L=		4
3	227	224	-3	419	434	-4	413	407	1	293	281	5	266	274	-3	244	255
4	281	312	-2	978	1024	-3	383	404	2	145	193	6	362	366	0	211	238
K= 17 L=		2	-1	125	168	-2	138	141	K= 17 L=		3	K= 4 L=		4	4	201	183
-3	257	263	0	867	858	-1	791	796	-4	287	291	-6	255	233	K= 12 L=		4
-2	194	201	1	206	254	0	769	742	-2	654	644	-3	378	378	-4	348	398
-1	467	462	2	1024	1034	1	567	604	0	429	439	-2	738	752	-3	158	148
0	193	212	3	469	474	2	119	97	2	625	664	-1	374	355	0	607	602

COLUMNS GIVE VALUES OF H , 10*FOBS & 10*FCALC

4	388	409	0	718	700	2	366	369	K=	18 L=	5	0	300	302	2	146	138
K=	13 L=	4	1	473	468	3	506	492	-1	341	362	2	156	166	4	196	197
-3	341	355	2	191	206	4	270	248	0	160	184	K=	6 L=	6	K=	14 L=	6
1	629	633	3	889	913	6	181	219	3	348	335	-5	246	266	-3	194	216
5	376	379	4	255	306	K=	9 L=	5	K=	19 L=	5	-4	130	129	-1	231	215
K=	14 L=	4	5	201	199	-5	549	562	-3	186	209	-3	230	226	1	213	212
-2	339	340	6	284	265	-4	181	180	-2	198	168	-2	414	417	3	192	157
0	166	183	K=	3 L=	5	-3	597	623	-1	244	271	-1	311	345	4	218	194
2	428	415	-6	509	472	-2	108	124	0	314	342	1	168	161	K=	15 L=	6
4	145	138	-2	957	989	-1	1043	1031	1	306	328	2	390	408	-3	343	391
K=	15 L=	4	0	151	147	0	282	285	K=	20 L=	5	3	237	244	-1	396	403
-2	228	258	2	872	912	1	703	730	1	278	251	K=	7 L=	6	1	310	304
-1	204	186	4	310	340	3	716	750	K=	21 L=	5	-5	267	268	3	324	324
1	292	297	6	450	486	4	355	354	0	407	403	-4	230	193	K=	16 L=	6
2	203	189	K=	4 L=	5	5	546	522	K=	0 L=	6	-3	653	655	-2	151	118
4	166	161	-4	328	352	K=	10 L=	5	-6	264	213	-2	197	187	0	218	234
K=	16 L=	4	-3	529	546	-5	291	319	-4	529	543	-1	562	570	3	132	108
-4	228	195	-2	250	285	-4	167	160	-2	331	333	1	938	985	K=	17 L=	6
-3	411	397	0	510	509	-3	540	540	0	1021	1021	2	202	186	-3	425	491
-2	167	169	1	764	784	-1	340	320	2	489	478	3	228	268	-1	151	134
0	200	210	2	519	564	1	499	498	4	579	606	5	613	586	0	161	187
1	303	333	4	296	309	5	296	287	6	259	246	K=	8 L=	6	1	559	550
2	205	223	5	321	337	K=	11 L=	5	K=	1 L=	6	-5	253	265	3	172	190
4	153	169	6	285	280	-5	189	190	-6	197	191	-3	186	177	K=	18 L=	6
K=	17 L=	4	K=	5 L=	5	-4	330	360	-5	425	419	-2	687	705	-2	377	355
-1	205	221	-6	228	218	-1	420	443	-3	143	176	-1	330	345	1	142	126
1	148	131	-4	755	799	0	464	458	-2	124	96	1	235	235	2	416	417
2	130	150	-2	591	612	1	157	172	-1	754	759	2	615	653	K=	19 L=	6
3	150	173	0	1053	1051	3	285	298	0	321	343	K=	9 L=	6	-2	262	263
K=	18 L=	4	1	116	138	4	239	242	1	194	185	-5	246	245	-1	270	282
-2	207	213	2	818	846	K=	12 L=	5	3	530	563	-3	256	226	0	267	232
2	255	231	3	170	180	-5	173	204	4	390	368	-1	347	319	2	246	235
K=	19 L=	4	4	694	709	-1	496	515	K=	2 L=	6	1	228	225	K=	20 L=	6
-1	325	340	6	474	492	3	563	609	-6	398	411	2	205	213	0	293	274
1	153	185	K=	6 L=	5	K=	13 L=	5	-5	176	232	3	263	259	K=	0 L=	7
3	259	260	-6	201	162	-4	333	326	-3	201	188	K=	10 L=	6	-3	402	415
K=	20 L=	4	-5	171	185	-2	704	722	-2	738	746	-4	382	383	1	247	231
-2	270	242	-4	483	516	0	394	397	-1	266	268	-1	224	256	3	184	201
2	259	232	-3	303	342	2	703	722	0	174	188	0	432	429	5	200	206
K=	22 L=	4	-2	618	640	4	281	270	2	474	474	3	281	279	K=	1 L=	7
0	251	261	0	540	543	K=	14 L=	5	K=	3 L=	6	4	304	317	-4	359	390
K=	0 L=	5	1	335	347	-4	283	278	-6	284	297	K=	11 L=	6	-3	186	214
-5	175	205	2	754	744	-3	428	417	-4	456	459	-5	187	218	0	337	345
-3	761	779	4	346	355	-2	290	276	-3	385	398	-4	356	387	4	190	231
-1	218	210	5	247	296	-1	128	114	-2	536	526	-2	569	601	K=	2 L=	7
1	678	738	6	312	352	0	394	366	-1	190	137	-1	304	285	-3	135	149
3	252	234	K=	7 L=	5	1	280	256	0	586	612	0	664	657	-1	424	461
5	292	298	-6	168	174	2	201	186	1	539	568	1	137	163	0	165	161
K=	1 L=	5	-5	214	243	4	203	205	2	437	439	2	501	495	3	419	448
-5	453	489	-3	195	200	K=	15 L=	5	4	270	253	3	218	229	K=	3 L=	7
-4	185	176	-2	435	441	-4	307	297	5	368	352	4	473	467	-4	312	326
-3	654	673	-1	213	228	0	403	440	6	159	190	K=	12 L=	6	-2	229	232
-1	1010	1001	0	303	313	4	266	271	K=	4 L=	6	-5	261	274	-1	170	193
0	575	561	1	382	356	K=	16 L=	5	-5	233	280	-3	200	189	0	484	445
1	800	820	2	554	599	-2	132	153	-3	316	336	-2	391	415	2	270	262
2	154	194	3	213	212	0	315	314	-1	573	594	-1	249	231	4	245	222
3	920	958	4	143	174	1	142	147	1	439	398	1	406	424	K=	4 L=	7
4	218	246	5	277	328	2	244	286	3	539	546	2	297	306	-4	200	199
5	452	471	6	286	267	4	286	280	4	280	270	5	210	238	-3	151	176
6	236	233	K=	8 L=	5	K=	17 L=	5	5	352	337	K=	13 L=	6	-2	301	335
K=	2 L=	5	-5	223	254	-3	315	321	6	198	150	-4	210	237	-1	177	186
-5	326	390	-4	294	336	-2	210	201	K=	5 L=	6	-3	188	211	0	252	225
-4	344	379	-3	183	194	-1	254	305	-5	253	280	-2	278	246	1	166	150
-3	326	341	-2	253	274	1	409	429	-4	131	125	-1	160	141	2	379	393
-2	201	188	-1	412	430	2	238	216	-2	288	299	0	268	292	3	164	124
-1	942	942	0	419	395	3	244	230	-1	196	193	1	245	244	4	266	269

COLUMNS GIVE VALUES OF H , 10*FOBS & 10*FCALC

K= 5 L= 7			2	228	197	-5	343	371	1	369	373	0	393	407	-2	415	427
-4	171	170	K= 17 L= 7			-2	252	237	3	547	583	4	241	234	0	283	259
-2	420	427	0	359	352	-1	417	426	K= 1 L= 9			K= 1 L= 10			1	177	177
-1	120	101	K= 18 L= 7			0	220	201	-4	209	183	-3	226	225	2	351	347
1	249	256	-1	399	381	2	352	374	-2	227	200	-2	290	323	K= 4 L= 11		
2	453	476	1	281	274	3	193	225	0	206	228	0	277	277	-1	163	140
5	163	163	K= 0 L= 8			K= 8 L= 8			2	194	173	1	310	315	K= 5 L= 11		
K= 6 L= 7			-4	475	478	-3	305	322	K= 2 L= 9			2	210	239	-2	243	207
-4	133	138	-2	440	447	-2	483	494	-3	396	417	4	289	290	0	536	538
-1	360	385	0	818	830	-1	552	565	0	233	235	K= 2 L= 10			2	314	324
0	245	230	2	228	210	1	430	430	1	475	480	-4	211	178	K= 6 L= 11		
1	207	208	4	562	608	2	485	513	K= 3 L= 9			0	194	215	-1	188	169
2	427	444	K= 1 L= 8			3	370	391	2	146	151	K= 3 L= 10			K= 7 L= 11		
3	238	267	-3	403	424	K= 9 L= 8			K= 4 L= 9			-2	215	240	-2	298	306
K= 7 L= 7			-2	114	155	-2	168	171	-4	354	363	-1	357	383	-1	206	185
-4	193	220	1	286	295	-1	158	176	-2	247	274	0	365	385	1	151	212
-2	264	263	2	138	173	0	110	74	-1	138	157	2	397	423	2	320	312
0	199	171	K= 2 L= 8			2	224	225	0	383	375	3	300	340	K= 8 L= 11		
2	186	215	-5	365	374	K= 10 L= 8			2	254	266	4	376	386	-2	157	180
K= 8 L= 7			-4	279	302	-4	458	414	4	180	247	K= 4 L= 10			K= 9 L= 11		
-5	267	287	-3	489	506	-3	168	156	K= 5 L= 9			-3	228	168	-1	455	447
-1	525	546	-2	793	791	-2	356	355	-2	174	154	-2	370	385	0	262	277
0	183	161	-1	597	623	0	626	619	0	117	76	-1	169	166	1	460	458
3	404	415	0	454	479	1	221	213	2	277	253	1	337	321	K= 1 L= 12		
K= 9 L= 7			1	598	607	2	344	356	K= 6 L= 9			2	323	319	-1	363	324
-5	254	236	2	684	701	4	430	460	-4	368	330	K= 5 L= 10			K= 4 L= 12		
-3	153	171	3	488	490	K= 11 L= 8			-3	197	222	-3	372	355	-1	201	205
-1	323	297	4	330	355	-4	235	241	-2	307	264	-1	252	241	K= 5 L= 12		
1	214	191	5	308	312	-3	274	252	0	252	307	1	461	498	0	218	216
2	306	335	K= 3 L= 8			-2	289	275	1	309	314	K= 7 L= 10					
3	161	145	-5	183	215	0	196	205	2	274	297	-2	196	177			
K= 10 L= 7			-2	399	427	1	375	393	K= 7 L= 9			-1	520	518			
-3	230	231	-1	365	388	K= 12 L= 8			-2	163	191	1	195	219			
-2	231	244	2	238	262	-4	161	203	K= 8 L= 9			2	252	255			
-1	164	170	3	361	396	-3	302	289	-3	286	253	3	476	471			
1	296	287	K= 4 L= 8			-2	603	584	0	135	141	K= 8 L= 10					
2	197	188	-5	341	339	-1	298	335	1	274	290	-2	294	292			
3	238	249	-4	355	337	0	347	322	K= 9 L= 9			-1	263	253			
5	292	293	-3	365	389	1	255	258	-4	192	184	2	301	291			
K= 11 L= 7			-1	378	358	2	544	571	-3	174	182	3	200	218			
-4	347	357	0	481	467	3	232	252	-2	251	255	K= 9 L= 10					
0	345	361	1	465	477	K= 13 L= 8			0	176	184	-2	276	280			
K= 12 L= 7			3	268	282	-3	171	153	1	172	171	2	264	261			
-1	276	286	4	317	347	-1	160	225	2	275	275	K= 10 L= 10					
3	270	283	5	345	384	2	176	174	K= 10 L= 9			0	272	289			
K= 13 L= 7			K= 5 L= 8			3	196	200	-3	147	163	K= 11 L= 10					
-4	328	312	-4	203	243	K= 14 L= 8			-2	191	178	-2	310	309			
-3	330	299	-3	263	257	-3	264	279	-1	502	524	0	282	282			
-1	203	188	-1	138	129	-2	177	192	0	247	227	2	379	360			
0	358	372	0	318	321	1	310	321	1	203	227	K= 12 L= 10					
1	248	266	1	350	363	2	166	177	2	179	177	-1	253	233			
3	272	289	3	178	196	3	181	224	3	325	383	0	289	288			
4	245	251	5	230	256	K= 15 L= 8			K= 11 L= 9			1	178	198			
K= 14 L= 7			K= 6 L= 8			-3	335	331	0	161	194	K= 13 L= 10					
-4	174	170	-5	385	399	-1	153	160	1	137	124	-1	225	254			
-3	235	245	-4	280	303	1	291	319	K= 12 L= 9			K= 0 L= 11					
-2	231	260	-3	430	415	K= 16 L= 8			-1	169	198	-3	164	196			
0	390	388	-2	131	122	-1	294	339	K= 13 L= 9			1	247	260			
1	331	376	-1	597	605	0	240	234	-2	278	289	K= 1 L= 11					
2	419	414	0	543	503	1	543	537	2	176	202	-3	403	437			
4	326	339	1	592	641	K= 17 L= 8			K= 14 L= 9			-1	326	310			
K= 15 L= 7			2	250	243	-1	180	185	-2	212	224	0	172	164			
-3	341	354	3	406	391	K= 0 L= 9			-1	181	233	1	428	449			
-2	187	198	4	377	390	-5	396	419	0	358	306	3	331	321			
-1	226	233	5	431	475	-3	400	405	K= 0 L= 10			K= 3 L= 11					
1	292	330	K= 7 L= 8			-1	592	597	-4	331	327	-3	176	142			

COLUMNS GIVE VALUES OF H , 10*FOBS & 10*FCALC

K=	1	L=	0	-3	22	76	-6	67	105	K=	23	L=	1	1	96	69	-6	96	140
6	107	147		-1	81	100	-4	78	76	0	9	102		4	89	95	-5	9	44
K=	2	L=	0	1	16	11	-2	40	91	1	148	181		K=	14	L=	2		
7	142	144		2	42	59	0	78	16	K=	0	L=	2	-5	33	52	3	101	76
K=	3	L=	0	4	114	130	4	9	42	6	10	80		-4	9	68	4	9	74
5	82	139		5	9	101	6	9	76	K=	1	L=	2	-3	9	51	K=	8	L= 3
6	66	86		6	117	188	K=	13	L= 1	-5	10	96		0	9	68	-6	117	47
7	133	106		7	83	72	-5	9	48	-2	71	42		1	9	78	-5	59	91
K=	4	L=	0	K=	2	L= 1	-4	90	99	5	9	131		4	79	75	-4	65	127
6	41	127		-2	78	120	0	97	79	7	170	218		5	9	61	0	9	72
K=	5	L=	0	7	126	140	4	9	43	K=	2	L=	2	K=	15	L=	2	6	136 155
4	82	38		K=	3	L= 1	5	140	199	4	76	87		-5	9	56	K=	9	L= 3
K=	6	L=	0	-7	69	73	K=	14	L= 1	K=	3	L=	2	-1	97	117	6	9	53
0	63	66		-6	78	104	-5	9	111	-7	61	80		K=	16	L=	2	K=	10 L= 3
K=	7	L=	0	-5	68	106	-3	86	56	-6	104	117		-2	9	25	-4	99	109
1	80	123		-4	93	66	-2	72	118	2	93	151		2	9	66	-3	56	157
2	11	71		6	9	107	0	68	69	5	90	92		5	79	174	1	9	52
5	89	87		7	117	167	2	9	76	6	119	116		K=	17	L=	2	5	138 169
6	9	51		K=	4	L= 1	4	85	64	K=	4	L=	2	-4	9	88	6	100	68
K=	9	L=	0	-7	9	128	K=	15	L= 1	-7	121	142		K=	18	L=	2	K=	11 L= 3
4	9	78		-6	9	82	-5	9	133	-5	92	106		-4	121	129	-6	86	125
5	9	46		-4	52	86	-4	77	107	1	71	43		-3	98	108	6	9	126
K=	11	L=	0	1	13	28	-1	9	76	4	9	42		-1	9	50	K=	12	L= 3
2	59	23		5	104	154	0	9	65	6	75	92		0	41	80	-5	83	94
4	9	36		6	91	100	1	9	72	K=	5	L=	2	1	76	106	-4	50	43
6	62	56		K=	5	L= 1	3	88	31	-6	113	122		3	9	62	-2	55	93
K=	12	L=	0	-7	34	106	5	103	118	-5	83	15		4	33	62	-1	9	60
4	87	78		-5	39	51	K=	16	L= 1	-4	9	46		K=	19	L=	2	0	9 29
K=	13	L=	0	3	110	160	-3	115	185	-2	76	66		3	102	131	2	78	106
1	9	30		5	90	44	3	50	113	-1	63	44		K=	20	L=	2	3	9 101
2	42	51		7	9	88	K=	17	L= 1	0	9	30		-2	131	154	4	9	80
3	35	102		K=	6	L= 1	-4	108	138	6	9	110		2	9	77	K=	13	L= 3
4	9	65		-3	9	103	-3	30	76	K=	6	L=	2	3	74	130	-5	96	126
6	107	92		0	74	51	-2	9	41	-6	9	115		K=	21	L=	2	4	30 101
K=	14	L=	0	5	103	162	1	9	36	-5	126	164		1	116	98	K=	14	L= 3
2	9	87		K=	7	L= 1	2	106	136	2	54	68		2	114	157	-3	112	109
K=	15	L=	0	-5	9	33	K=	18	L= 1	5	115	139		K=	22	L=	2	1	9 81
2	90	114		2	9	73	-4	70	100	6	54	12		-2	9	90	4	68	121
4	9	88		6	9	20	-3	123	83	K=	7	L=	2	-1	94	172	5	9	68
K=	16	L=	0	K=	8	L= 1	-1	9	73	-6	9	17		0	119	146	K=	15	L= 3
5	88	77		-5	49	132	1	9	42	-4	9	82		1	57	64	-3	112	131
K=	17	L=	0	5	94	101	3	9	8	-3	59	101		2	83	130	K=	16	L= 3
1	117	150		K=	9	L= 1	4	93	84	0	57	71		K=	0	L=	3	-5	76	141
2	84	48		-5	9	91	K=	19	L= 1	5	9	107		-7	10	125	-4	9	33
4	83	36		-3	9	112	-4	58	93	6	114	137		5	10	34	-2	49	90
K=	19	L=	0	1	54	74	-3	95	44	K=	8	L=	2	K=	1	L=	3	-1	9 52
2	9	90		4	58	85	-1	142	181	-6	9	27		-6	10	94	0	9	62
4	73	92		5	9	53	0	77	91	4	51	82		2	79	69	3	9	84
K=	20	L=	0	6	90	151	1	66	68	5	9	97		K=	2	L=	3	4	96 93
1	43	96		K=	10	L= 1	3	127	149	K=	9	L=	2	-6	10	98	K=	17	L= 3
2	112	161		-6	45	146	4	106	139	-5	92	72		-5	10	44	-3	81	118
3	49	97		-4	37	97	K=	20	L= 1	-1	81	103		0	13	75	-1	133	182
K=	21	L=	0	-3	106	112	-2	83	19	K=	10	L=	2	2	87	60	1	9	63
1	98	104		0	9	75	0	30	114	-2	52	103		3	62	95	K=	18	L= 3
2	93	45		1	73	88	1	125	170	2	63	52		6	9	115	-4	9	121
K=	22	L=	0	2	71	25	2	9	28	6	9	54		K=	3	L=	3	-1	93 103
0	9	74		5	102	98	K=	21	L= 1	K=	11	L=	2	4	9	136	3	9	66
K=	23	L=	0	6	9	53	-3	9	84	-5	96	167		K=	4	L=	3	K=	19 L= 3
1	31	85		K=	11	L= 1	-2	33	101	1	9	44		4	43	64	-2	131	197
K=	0	L=	1	-6	33	56	-1	131	154	5	9	88		5	56	118	0	90	118
-7	137	190		-5	9	113	1	127	212	6	121	140		6	100	102	K=	20	L= 3
5	96	162		-3	55	58	K=	22	L= 1	K=	12	L=	2	K=	5	L=	3	-2	133 167
7	145	196		1	9	112	-2	106	153	-5	9	115		-6	120	113	0	121	113
K=	1	L=	1	3	9	74	-1	84	151	-4	56	32		-5	9	92	1	9	25
-7	10	73		4	118	129	0	65	70	-3	86	88		5	124	149	2	86	177
-5	75	98		K=	12	L= 1	2	9	102	0	9	48		K=	6	L=	3	K=	21 L= 3

COLUMNS GIVE VALUES OF H , 10*FOBS & 10*FCALC

-2	110	124	-4	35	74	0	24	110	-5	34	107	0	9	28	-1	50	39
2	58	106	-2	9	73	1	120	94	3	9	73	4	9	51	1	86	94
K=	22 L=	3	-1	9	66	2	76	105	K=	15 L=	5	K=	8 L=	6	2	78	116
-1	112	146	1	47	37	K=	1 L=	5	-3	115	154	-4	9	79	3	130	157
0	133	188	2	58	147	-6	59	82	-2	9	100	0	69	51	5	110	20
K=	1 L=	4	3	89	96	-2	81	144	-1	94	112	3	28	86	K=	2 L=	7
-6	116	174	5	95	114	K=	2 L=	5	1	90	114	4	9	110	-5	93	151
-5	60	135	K=	12 L=	4	-6	84	160	2	81	131	5	47	68	-4	92	144
-4	46	114	-5	125	115	K=	3 L=	5	3	9	109	K=	9 L=	6	-2	37	114
3	10	13	-2	9	76	-5	10	97	K=	16 L=	5	-4	80	103	1	97	96
6	120	89	-1	88	95	-4	78	108	-4	126	168	-2	105	167	2	70	79
K=	2 L=	4	1	24	68	-3	10	63	-3	55	70	0	56	118	4	101	56
-6	111	135	2	103	128	-1	10	94	-1	72	103	4	131	166	5	10	68
-5	111	165	3	67	13	1	10	79	3	55	18	5	46	67	K=	3 L=	7
-2	58	106	5	105	94	3	83	71	K=	17 L=	5	K=	10 L=	6	-5	100	136
1	10	80	K=	13 L=	4	5	10	80	-4	9	116	-5	74	48	-3	63	97
3	10	20	-5	87	78	K=	4 L=	5	0	97	158	-3	9	33	1	67	42
5	41	38	-4	9	85	-6	141	143	K=	18 L=	5	-2	127	193	3	113	139
K=	3 L=	4	-2	96	119	-5	10	73	-3	9	95	1	69	118	5	58	135
-6	105	137	-1	95	100	-1	77	93	-2	102	123	2	77	129	K=	4 L=	7
-2	81	105	0	9	78	3	97	84	1	32	57	5	75	147	-5	116	146
3	110	133	2	9	99	K=	5 L=	5	2	72	53	K=	11 L=	6	5	140	153
K=	4 L=	4	3	9	60	-5	10	65	K=	19 L=	5	-3	92	80	K=	5 L=	7
-5	10	57	4	91	144	-3	9	48	2	94	128	5	35	78	-5	142	137
-4	103	145	K=	14 L=	4	-1	80	121	K=	20 L=	5	K=	12 L=	6	-3	114	143
4	46	77	-5	67	132	5	110	145	-2	9	103	-4	45	30	0	10	72
K=	5 L=	4	-4	76	102	K=	6 L=	5	-1	88	162	0	60	109	3	90	112
-6	99	88	-3	29	115	-1	98	133	0	9	52	3	9	119	4	87	107
-4	118	104	-1	91	137	3	88	111	2	68	85	4	115	152	K=	6 L=	7
0	9	80	1	75	98	K=	7 L=	5	K=	21 L=	5	K=	13 L=	6	-5	89	168
2	103	130	3	50	51	-4	89	125	-1	119	157	3	69	121	-3	9	18
5	122	153	5	34	70	K=	8 L=	5	K=	1 L=	6	K=	14 L=	6	-2	111	168
6	113	43	K=	15 L=	4	-6	85	112	-4	10	21	-4	33	74	4	132	178
K=	6 L=	4	-5	137	223	1	9	50	2	10	25	-2	84	117	5	120	144
-4	100	122	-4	127	130	5	44	99	5	32	107	0	111	138	K=	7 L=	7
3	35	40	-3	55	87	K=	9 L=	5	6	71	108	2	9	65	-5	9	43
6	9	47	0	9	138	-6	9	86	K=	2 L=	6	K=	15 L=	6	-3	82	86
K=	7 L=	4	3	60	72	2	9	75	-4	58	12	-4	117	71	-1	87	92
-6	88	74	K=	16 L=	4	K=	10 L=	5	1	10	12	-2	43	82	1	65	100
-4	108	129	-1	100	85	-2	57	65	3	10	65	0	9	107	3	90	71
-3	81	47	3	130	201	0	103	98	4	105	94	2	9	86	4	104	121
1	83	105	K=	17 L=	4	2	9	67	5	90	87	4	123	101	5	9	66
2	86	76	-4	111	166	3	9	9	6	127	205	K=	16 L=	6	K=	8 L=	7
4	97	140	-3	55	74	4	72	106	K=	3 L=	6	-3	114	134	-3	51	48
5	9	69	-2	109	158	K=	11 L=	5	-5	10	97	-1	101	171	-2	39	135
6	74	112	0	9	82	-3	115	159	3	10	69	1	9	99	1	9	84
K=	8 L=	4	4	9	74	-2	26	121	K=	4 L=	6	2	9	11	2	74	45
-6	67	188	K=	18 L=	4	2	9	82	-6	10	73	K=	17 L=	6	4	9	149
-3	74	96	-4	9	90	5	135	115	-4	42	44	-2	9	63	5	137	158
2	60	52	-3	117	88	K=	12 L=	5	-2	10	37	2	112	75	K=	9 L=	7
3	70	134	-1	91	113	-4	30	90	0	46	75	K=	18 L=	6	-4	9	101
6	100	58	0	30	73	-3	64	45	2	96	83	-3	88	134	-2	118	177
K=	9 L=	4	1	117	174	-2	27	107	K=	5 L=	6	-1	112	98	0	9	84
-4	118	153	3	134	167	0	80	83	-6	87	138	0	107	120	4	101	91
1	81	104	K=	19 L=	4	1	118	150	-3	54	100	K=	19 L=	6	5	77	122
5	9	115	-3	9	128	2	9	129	1	9	64	1	9	59	K=	10 L=	7
6	131	168	-2	9	31	4	139	163	3	89	115	K=	20 L=	6	-5	35	80
K=	10 L=	4	0	9	99	5	129	150	4	106	87	-1	103	106	-4	9	32
-6	108	160	2	9	68	K=	13 L=	5	5	9	16	1	9	102	0	102	124
-5	69	115	K=	20 L=	4	-5	89	71	6	9	87	K=	0 L=	7	4	119	159
-4	115	143	-1	158	196	-3	9	57	K=	6 L=	6	-5	33	70	K=	11 L=	7
0	90	93	0	9	28	-1	94	128	-6	62	121	-1	43	38	-3	9	79
4	9	35	1	9	130	1	92	121	0	78	70	K=	1 L=	7	-2	9	69
6	103	123	K=	21 L=	4	3	65	112	4	98	82	-6	10	101	-1	98	115
K=	11 L=	4	-2	59	106	5	122	148	5	131	131	-5	10	62	1	102	70
-5	100	77	-1	100	171	K=	14 L=	5	K=	7 L=	6	-2	80	142	2	83	46

COLUMNS GIVE VALUES OF H , 10*FOBS & 10*FCALC

3	97	118	K=	8	L= 8	1	51	36	-4	110	151	0	71	133
4	109	100	-4	119	192	3	85	145	-3	114	58	1	110	176
K=	12	L= 7	0	80	68	4	9	109	1	116	144	2	113	158
-4	84	131	4	67	102	K=	6	L= 9	K=	4	L= 10	K=	5	L= 11
-3	9	117	K=	9	L= 8	-1	52	43	-4	70	85	-1	9	55
-2	9	66	-4	106	52	3	92	8	0	88	104	1	9	106
0	99	90	-3	9	89	4	131	145	3	101	117	K=	6	L= 11
1	100	100	1	9	38	K=	7	L= 9	K=	5	L= 10	-2	59	99
2	9	80	3	112	190	-4	103	147	-4	70	92	0	9	55
4	67	67	4	126	136	-3	9	20	-2	65	71	1	9	75
K=	13	L= 7	K=	10	L= 8	-1	9	59	0	63	98	2	92	72
-2	9	79	-1	137	125	0	60	81	2	9	133	K=	7	L= 11
2	118	155	3	130	146	1	9	65	3	68	134	0	9	134
K=	14	L= 7	K=	11	L= 8	2	54	111	K=	6	L= 10	K=	8	L= 11
-1	9	76	-1	61	59	3	46	119	-3	9	47	-1	9	127
3	9	82	2	114	167	4	60	83	-2	66	95	0	77	118
K=	15	L= 7	3	110	90	K=	8	L= 9	-1	9	120	1	9	69
0	107	119	4	112	87	-4	74	150	0	105	159	K=	10	L= 11
3	134	185	K=	13	L= 8	-2	109	91	1	63	103	-1	137	145
K=	16	L= 7	-2	111	73	-1	9	70	2	93	97	0	102	156
-3	123	138	0	9	88	2	44	119	3	9	57	K=	0	L= 12
-2	103	44	1	54	94	3	9	25	K=	7	L= 10	0	69	72
-1	148	152	K=	14	L= 8	4	9	123	-3	84	57	K=	1	L= 12
0	112	104	-1	120	156	K=	9	L= 9	0	95	209	0	114	73
1	120	136	0	44	122	-1	82	77	K=	8	L= 10	1	55	109
2	9	79	K=	15	L= 8	3	34	83	-3	129	112	K=	2	L= 12
3	9	166	-2	9	54	K=	11	L= 9	0	121	149	-1	9	111
K=	17	L= 7	0	9	87	-3	9	72	1	113	101	0	88	129
-2	9	61	2	89	80	-2	9	25	K=	9	L= 10	1	9	107
-1	9	73	K=	16	L= 8	-1	85	31	-3	35	168	K=	3	L= 12
1	93	46	-2	76	89	2	9	29	-1	81	22	-1	35	91
2	9	73	2	73	129	3	59	79	0	80	172	0	115	95
K=	18	L= 7	K=	17	L= 8	K=	12	L= 9	1	9	61	1	82	98
-2	129	186	0	9	97	-3	155	172	3	106	137	K=	4	L= 12
0	111	132	1	9	100	-2	89	53	K=	10	L= 10	0	9	91
2	134	184	K=	1	L= 9	0	56	27	-2	96	71			
K=	19	L= 7	-5	128	140	1	104	98	1	9	47			
0	150	200	-3	9	84	2	58	47	2	9	69			
K=	1	L= 8	-1	9	16	3	130	138	K=	11	L= 10			
-5	132	123	1	50	35	K=	13	L= 9	-1	83	78			
-4	9	88	3	94	194	-1	47	62	1	113	133			
-1	108	152	4	91	121	0	57	42	K=	12	L= 10			
0	64	98	K=	2	L= 9	1	105	54	-2	9	133			
3	118	118	-4	33	50	K=	14	L= 9	K=	13	L= 10			
4	119	125	-2	9	55	1	9	127	0	105	213			
5	124	118	-1	9	32	2	125	161	1	35	99			
K=	3	L= 8	2	30	54	K=	15	L= 9	K=	0	L= 11			
-4	131	156	3	31	85	-1	69	94	-1	9	26			
-3	99	124	4	132	147	0	103	116	3	9	109			
0	10	107	K=	3	L= 9	1	98	134	K=	1	L= 11			
1	118	163	-4	9	58	K=	0	L= 10	-2	9	101			
4	10	103	-3	104	101	-2	89	143	2	75	148			
5	69	65	-2	103	147	2	92	134	K=	2	L= 11			
K=	4	L= 8	-1	98	105	K=	1	L= 10	-3	9	149			
-3	10	12	0	76	63	-4	115	150	-2	111	121			
2	70	122	1	105	25	-1	111	66	-1	98	130			
K=	5	L= 8	3	9	109	3	110	119	0	65	37			
-5	25	85	4	90	120	K=	2	L= 10	1	118	79			
-2	77	132	K=	4	L= 9	-3	9	29	2	68	126			
2	99	123	-3	9	85	-2	9	103	3	9	93			
4	9	31	1	10	54	-1	111	107	K=	3	L= 11			
K=	7	L= 8	3	111	106	1	92	90	-1	9	32			
-4	111	133	K=	5	L= 9	2	9	95	3	99	92			
-3	87	65	-4	9	120	3	9	80	K=	4	L= 11			
1	113	96	-3	9	101	4	121	119	-3	116	99			
4	132	185	-1	10	80	K=	3	L= 10	-2	133	135			

$