

AM-86-311

Crystal structure of hasemite, BaCrO₄, a barite structure type

Duesler and Foord

To be deposited: Table 3

American Mineralogist, 71, 9-10, 1217-1220

Table 3. Structure factor amplitude table for hashemite, $F_o = F$ observed, $sf =$ standard deviation of F_o , $F_c = F$ calculated, all values multiplied by 4, unobserved data flagged by negative F_o .

Table 3. Structure factor amplitude table for hashemite, Fo = F observed, sf = standard deviation of Fo, Fc = F calculated, all values multiplied by 4, unobserved data flagged by negative Fo.

STRUCTURE FACTOR AMPLITUDES (X				4) FOR HASHEMITE				PAGE				1			
H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC
*****				6	189	1	198	7	139	1	133	8	36	1	37
K L = 0, 0				8	49	1	52	8	164	1	166	9	38	1	39
2	248	1	205	10	134	1	135	9	114	1	115	10	64	1	65
4	224	1	189	12	50	1	47	10	152	1	155	11	82	1	81
6	212	1	200	*****				11	36	1	36	12	123	1	121
8	449	1	498	*K L = 6, 0*				12	65	1	65	13	30	1	28
10	76	1	76	0	254	4	268	13	67	1	66	*****			
12	56	1	53	2	90	1	91	14	96	1	91	*K L = 5, 1*			
14	95	1	91	4	14	2	6	*****				0	100	1	98
*****				6	104	1	109	*K L = 2, 1*				1	122	1	122
K L = 1, 0				8	147	1	150	1	99	4	82	2	227	1	230
2	686	1	738	10	-15	3	9	2	413	11	362	3	56	1	56
4	455	1	430	*****				3	286	5	258	4	22	1	20
6	452	1	468	*K L = 7, 0*				4	507	4	505	5	84	2	85
8	125	1	125	2	127	1	127	5	272	3	265	6	179	1	186
10	256	2	272	4	76	1	79	6	59	1	53	7	65	1	68
12	101	1	100	6	100	1	98	7	25	2	22	8	69	1	71
14	81	1	77	8	33	1	32	8	13	2	12	9	56	1	58
*****				*****				9	57	1	57	10	81	1	80
K L = 2, 0				*K L = 8, 0*				10	135	1	139	11	17	1	17
0	865	10	932	0	151	3	149	11	97	1	97	12	34	1	32
2	380	1	330	2	27	1	20	12	163	1	165	*****			
4	43	1	36	4	15	2	13	13	51	1	49	*K L = 6, 1*			
6	321	2	323	6	27	2	25	14	-10	2	6	1	11	2	5
8	360	1	385	*****				*****				2	93	1	97
10	40	2	42	*K L = 0, 1*				*K L = 3, 1*				3	96	1	97
12	-14	3	12	1	69	1	47	0	217	1	190	4	171	1	180
14	99	1	94	2	200	1	154	1	225	5	203	5	87	1	89
*****				3	333	1	294	2	414	8	398	6	21	1	20
K L = 3, 0				4	719	1	822	3	114	3	103	7	-10	2	9
2	496	1	479	5	250	1	232	4	46	2	40	8	-6	3	4
4	322	2	310	6	57	1	49	5	151	2	149	9	19	1	19
6	327	1	340	7	32	1	27	6	284	2	293	10	56	.5	54
8	97	1	100	8	65	1	62	7	110	1	110	*****			
10	200	1	207	9	66	1	68	8	124	1	129	*K L = 7, 1*			
12	80	2	78	10	104	1	106	9	86	1	87	0	57	1	58
*****				11	126	1	127	10	125	1	126	1	54	1	54
K L = 4, 0				12	183	1	188	11	30	1	29	2	105	1	106
0	621	6	695	13	42	1	43	12	55	.5	55	3	37	1	36
2	119	1	111	14	-8	2	11	13	55	.5	53	4	17	1	16
4	74	1	73	*****				*****				5	47	1	46
6	124	1	123	*K L = 1, 1*				*K L = 4, 1*				6	85	1	85
8	283	1	298	0	284	5	222	1	38	1	35	7	37	1	36
10	42	1	42	1	375	8	304	2	99	2	92	8	35	1	35
12	34	2	33	2	622	9	603	3	177	2	174	9	28	1	26
*****				3	137	2	117	4	399	3	423	*****			
K L = 5, 0				4	40	1	36	5	132	1	132	*K L = 8, 1*			
2	279	1	286	5	207	2	197	6	35	1	36	1	11	2	9
4	155	1	156	6	399	2	407	7	15	2	14	2	18	1	16

STRUCTURE FACTOR AMPLITUDES (X				4) FOR HASHEMITE				PAGE 2								
H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	
3	46	1	44	10	24	1	24	*K L = 6, 2*	0	171	2	155				
4	108	1	104	11	33	1	33	0	96	1	100	1	552	7	539	
5	34	1	31	12	13	1	9	1	176	2	186	2	28	2	23	
6	-8	2	5	13	51	1	50	2	13	2	6	3	334	4	309	
*****				14	26	1	24	3	17	2	7	4	45	1	38	
K L = 0, 2				*****				4	-12	3	9	5	391	2	389	
0	538	5	539	*K L = 3, 2*				5	21	1	21	6	28	2	27	
1	616	6	583	1	356	2	347	6	26	1	26	7	263	2	269	
2	129	2	100	2	200	4	190	7	128	1	131	8	111	1	112	
3	280	2	225	3	361	5	356	8	65	1	64	9	186	2	194	
4	29	1	23	4	-9	3	4	9	88	.5	86	10	24	1	23	
5	164	1	145	5	243	3	243	10	13	1	13	11	61	1	60	
6	-13	3	12	6	135	1	135	*****	12	-8	3	1				
7	434	1	463	7	112	1	113	*K L = 7, 2*	13	123	1	120				
8	204	1	208	8	32	1	33	1	88	1	91	14	-8	3	7	
9	186	1	191	9	151	1	156	2	54	1	54	*****				
10	14	2	12	10	72	1	74	3	90	1	92	*K L = 2, 3*				
11	18	1	16	11	118	1	122	4	-11	2	3	1	77	1	70	
12	13	2	13	12	13	2	10	5	69	1	69	2	159	1	145	
13	49	1	47	13	77	1	74	6	44	1	44	3	531	5	541	
14	22	1	19	*****				7	41	1	39	4	23	2	16	
*****				*K L = 4, 2*				8	14	2	13	5	440	4	456	
K L = 1, 2				0	256	4	262	*****	6	70	1	70				
1	554	1	508	1	300	2	306	*K L = 8, 2*	7	56	1	58				
2	326	5	278	2	30	1	29	0	68	1	66	8	19	2	17	
3	547	6	514	3	88	1	87	1	74	1	72	9	76	1	76	
4	30	2	27	4	14	2	12	2	11	2	8	10	38	1	38	
5	350	3	332	5	77	1	81	3	16	1	14	11	178	1	181	
6	183	1	177	6	-9	3	4	4	-10	2	3	12	-10	2	9	
7	141	1	139	7	250	3	265	5	19	1	16	13	91	.5	88	
8	39	1	37	8	124	1	128	6	-11	2	2	*****				
9	189	2	197	9	115	1	116	*****	*K L = 3, 3*							
10	94	1	95	10	13	1	9	*K L = 0, 3*	0	130	2	124				
11	148	1	153	11	12	2	10	1	204	2	163	1	361	4	362	
12	14	2	14	12	-8	2	8	2	265	1	224	2	-11	3	12	
13	98	1	95	*****				3	620	3	640	3	247	2	240	
14	42	1	39	*K L = 5, 2*				4	70	1	60	4	23	1	22	
*****				1	162	1	171	5	408	2	398	5	285	4	292	
K L = 2, 2				2	117	1	120	6	87	1	81	6	22	1	20	
0	275	6	255	3	190	2	199	7	31	2	28	7	202	2	210	
1	596	1	594	4	-7	3	3	8	-8	3	5	8	84	1	86	
2	24	1	13	5	150	2	156	9	91	1	94	9	140	1	146	
3	16	2	15	6	80	1	83	10	52	1	51	10	20	2	18	
4	41	1	36	7	62	1	62	11	231	1	238	11	53	1	50	
5	66	1	56	8	18	1	18	12	-10	2	9	12	-6	3	0	
6	78	1	75	9	99	1	100	13	78	1	74	13	100	1	97	
7	347	3	362	10	52	1	51	14	24	1	23	*****				
8	151	1	154	11	74	1	72	*****	*K L = 4, 3*							
9	210	1	221	*****				*K L = 1, 3*	1	73	1	74				

STRUCTURE FACTOR AMPLITUDES (X				4) FOR HASHEMITE				PAGE 3					
H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC		
2	107	1	108	*K L = 8, 3*	10	74	1	75	1	122	2	129	
3	329	3	343	1	16	2	13	11	41	1	40		
4	22	2	21	2	28	1	26	12	23	1	22		
5	216	3	226	3	84	1	82	13	19	1	18		
6	52	1	53	4	-9	2	6	*****	5	20	1	18	
7	20	2	13	5	57	.5	53	*K L = 3, 4*	6	69	1	72	
8	-12	2	5	*****	1	237	3	239	7	84	1	85	
9	50	1	52	*K L = 0, 4*	2	140	1	137	8	54	1	53	
10	33	1	34	0	398	5	398	3	149	1	148		
11	152	1	152	1	341	2	331	4	239	1	246		
12	-11	2	4	2	251	1	230	5	133	2	137		
*****	3	-11	4	1	6	106	2	107	6	106	2	107	
K L = 5, 3	4	82	1	77	7	99	1	102	7	99	1	102	
0	78	1	82	5	21	2	17	8	33	1	33		
1	198	1	209	6	179	1	179	9	133	1	137		
2	14	2	6	7	270	3	278	10	88	1	91		
3	121	1	126	8	155	1	160	11	53	1	54		
4	-10	3	9	9	106	1	108	12	74	1	73		
5	159	2	167	10	89	1	91	*****	*****	*****	*****		
6	12	2	10	11	24	1	22	*K L = 4, 4*	*K L = 8, 4*	0	48	1	48
7	118	2	122	12	31	1	33	0	200	3	211		
8	54	1	55	13	13	2	12	1	186	3	193		
9	96	1	97	*****	2	132	1	135	2	132	1	135	
10	15	1	12	*K L = 1, 4*	3	-11	3	3	3	-11	3	3	
11	34	1	31	1	324	3	309	4	43	4	38		
*****	2	193	1	176	5	-11	2	10	5	-11	2	10	
K L = 6, 3	3	207	1	190	6	107	1	111	6	107	1	111	
1	16	1	14	4	325	3	320	7	164	1	171		
2	45	1	46	5	193	1	188	8	96	2	100		
3	173	1	182	6	144	1	142	9	66	1	67		
4	-11	2	2	7	122	1	122	10	57	1	57		
5	151	1	156	8	40	1	41	11	18	1	16		
6	32	1	31	9	167	2	172	12	22	1	22		
7	24	1	26	10	113	1	117	*****	*****	*****	*****		
8	12	2	9	11	66	1	66	*K L = 5, 4*	8	62	1	66	
9	24	1	23	12	90	1	90	1	124	2	131		
10	18	1	17	13	55	1	53	2	88	1	92		
*****	3	85	1	90	3	85	1	90	3	85	1	90	
K L = 7, 3	4	134	1	144	4	134	1	144	4	134	1	144	
0	43	1	43	5	87	1	91	5	87	1	91		
1	89	1	91	6	61	1	63	6	61	1	63		
2	-5	4	4	7	57	1	59	7	57	1	59		
3	76	1	76	8	20	1	18	8	20	1	18		
4	-7	3	4	9	88	1	89	9	88	1	89		
5	89	.5	89	10	60	1	59	10	60	1	59		
6	-10	2	4	11	32	1	30	11	32	1	30		
7	64	.5	62	*****	*****	*****	*****	*****	*****	*****	*****		
8	31	1	29	*K L = 6, 4*	5	134	1	136	5	134	1	136	
*****	9	144	3	146	0	92	2	97	0	92	2	97	

STRUCTURE FACTOR AMPLITUDES (X				4) FOR HASHEMITE				PAGE 4				
H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	
7	-10	3	3	*****	11	25	1	25	3	75	1	78
8	214	2	225	*K L = 5, 5*	12	37	1	37	4	29	2	26
9	17	2	14	0 164 3 178	*****	5	76	1	80			
10	92	1	93	1 16 2 4	*K L = 1, 6*	6	84	1	88			
11	34	1	33	2 135 1 143	1 45 1 45	7	26	1	27			
12	46	1	44	3 70 1 73	2 283 2 299	8	143	1	148			
13	44	1	42	4 16 1 14	3 161 1 165	9	34	1	35			
*****				5 66 1 67	4 208 2 220	10	29	1	28			
K L = 2, 5				6 125 1 130	5 89 1 92	*****						
1	146	1	144	7 -11 3 6	6 163 1 171	*K L = 5, 6*						
2	311	3	323	8 105 1 106	7 41 1 43	1	26	1	24			
3	119	1	118	9 12 2 9	8 44 1 45	2	133	1	142			
4	321	2	337	10 50 .5 47	9 25 1 24	3	76	1	80			
5	74	1	75	*****	10 131 1 135	4	93	1	99			
6	138	1	143	*K L = 6, 5*	11 70 1 71	5	48	1	48			
7	82	1	85	1 55 1 56	12 76 .5 75	6	84	1	85			
8	28	1	28	2 105 1 110	*****	7	24	1	23			
9	58	1	58	3 45 1 45	*K L = 2, 6*	8	22	1	21			
10	135	1	140	4 120 1 124	0 305 5 315	9	15	1	14			
11	45	1	44	5 33 1 33	1 41 1 42	*****						
12	118	1	113	6 54 1 54	2 168 1 174	*K L = 6, 6*						
*****				7 38 1 38	3 142 1 147	0	117	2	120			
K L = 3, 5				8 11 2 11	4 -12 3 4	1	18	2	18			
0	302	3	318	*****	5 121 1 126	2	59	1	62			
1	17	3	18	*K L = 7, 5*	6 173 1 186	3	58	1	58			
2	226	3	234	0 92 2 93	7 48 1 49	4	-12	2	2			
3	128	1	133	1 -8 3 5	8 178 1 186	5	55	1	55			
4	34	3	29	2 66 1 67	9 34 1 35	6	70	1	70			
5	103	1	109	3 44 1 44	10 27 1 27	7	16	1	17			
6	190	2	203	4 17 2 11	11 30 1 29	*****						
7	-8	3	2	5 42 1 41	12 15 1 14	*K L = 7, 6*						
8	170	1	177	6 63 1 60	*****	1	19	1	17			
9	13	2	9	*****	*K L = 3, 6*	2	65	1	65			
10	75	1	75	*K L = 8, 5*	1 34 1 36	3	42	1	42			
11	30	1	29	1 18 1 16	2 210 3 220	4	54	1	53			
12	38	1	37	2 40 1 38	3 122 1 129	5	28	1	27			
*****				*****	4 166 2 175	*****						
K L = 4, 5				*K L = 0, 6*	5 72 1 75	*K L = 0, 7*						
1	43	1	42	0 435 7 471	6 129 1 134	1	160	1	167			
2	159	2	166	1 69 1 65	7 35 1 35	2	-12	3	8			
3	75	1	78	2 147 2 148	8 39 1 40	3	179	1	188			
4	246	1	265	3 126 1 131	9 22 1 20	4	212	1	230			
5	22	2	17	4 41 1 44	10 104 1 105	5	155	1	164			
6	95	1	97	5 119 1 124	11 59 .5 58	6	15	2	16			
7	31	1	31	6 140 2 148	*****	7	74	1	77			
8	39	1	41	7 46 1 47	*K L = 4, 6*	8	29	1	31			
9	42	1	40	8 218 1 235	0 257 2 275	9	102	1	108			
10	84	1	84	9 53 1 55	1 45 1 44	10	27	1	28			
11	47	1	46	10 43 1 44	2 83 1 87	11	78	1	78			

STRUCTURE FACTOR AMPLITUDES (X				4) FOR HASHEMITE				PAGE 5								
H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	
*****				8	21	2	19	9	62	1	64	1	83	1	79	
K L = 1, 7	9	71	1	70	10	12	2	11	2	23	1	21	3	32	1	28
0 61 2 62	*****				*****				4	-11	2	10	*****			
1 241 2 252	*K L = 5, 7*	0	24	2	23	*K L = 2, 8*	0	37	1	37	*K L = 0, 9*	1	82	1	82	
2 139 1 145	1	120	1	121	1	195	2	206	2	126	2	128	3	132	1	136
3 26 3 13	2	73	1	76	2	46	1	46	4	22	2	20	5	83	1	87
4 40 3 32	3	-5	5	3	3	67	1	67	6	84	1	87	7	27	1	26
5 46 1 49	4	16	1	13	4	27	1	25	8	16	2	17	9	45	1	45
6 105 1 111	5	20	1	20	5	102	1	107	*****							
7 165 1 177	6	61	1	61	6	20	1	18	*K L = 1, 9*	0	161	2	165			
8 26 1 27	7	89	1	90	7	124	2	128	1	126	2	127				
9 98 1 101	8	19	3	11	8	36	1	36	2	18	2	14				
10 63 1 64	*****				9	98	1	98	3	45	1	46				
11 -11 2 5	*K L = 6, 7*	10	37	1	36	*****				4	-12	2	1			
*****				1	59	1	59	*K L = 3, 8*	5	61	1	61				
K L = 2, 7	2	24	1	23	1	57	1	57	6	29	1	29				
1 137 1 143	3	63	1	63	2	40	1	42	7	97	1	101				
2 57 1 57	4	64	1	63	3	174	1	180	8	99	1	100				
3 155 1 165	5	58	1	57	4	60	1	61	9	61	1	59				
4 141 2 150	6	-8	2	3	5	133	1	140	*****							
5 140 2 149	*****				6	34	1	33	*K L = 2, 9*	1	44	1	43			
6 14 2 16	*K L = 7, 7*	7	15	2	13	7	15	2	13	2	96	1	97			
7 66 1 66	0	18	1	14	8	13	2	7	3	119	1	121				
8 -8 3 3	1	65	1	61	9	51	1	50	4	32	1	34				
9 95 1 98	2	40	1	38	*****				5	98	1	100				
10 46 1 47	*****				0	62	1	62	6	76	.5	77				
11 69 .5 67	*K L = 0, 8*	1	91	1	94	1	130	1	132	7	-11	3	5			
*****				1	210	2	219	2	50	1	50	8	24	1	25	
K L = 3, 7	2	76	1	77	3	65	1	66	3	65	1	66	9	40	1	39
0 52 2 53	3	101	1	104	4	-8	3	4	4	-8	3	4	*****			
1 186 2 194	4	-10	3	8	5	81	1	83	5	98	1	100				
2 110 1 112	5	122	1	132	6	38	1	37	6	76	.5	77				
3 -16 3 11	6	54	1	55	7	97	1	96	7	-11	3	5				
4 29 1 27	7	144	1	153	8	39	1	38	8	24	1	25				
5 35 1 37	8	53	1	55	*****				9	40	1	39				
6 81 1 85	9	96	1	97	*K L = 4, 8*	0	62	1	62	*K L = 2, 9*	1	44	1	43		
7 134 1 142	10	33	1	32	1	130	1	132	2	96	1	97				
8 19 1 22	*****				2	50	1	50	3	119	1	121				
9 80 1 80	*K L = 1, 8*	1	70	1	70	3	65	1	66	4	32	1	34			
10 54 1 53	2	56	1	56	4	46	1	45	5	98	1	100				
*****				3	216	1	230	5	81	1	83	6	76	.5	77	
K L = 4, 7	4	78	1	79	4	46	1	45	6	38	1	37	7	-11	3	5
1 98 1 103	5	170	1	181	5	92	1	91	7	97	1	96	8	24	1	25
2 -12 3 4	6	38	1	40	6	25	1	24	8	39	1	38	9	40	1	39
3 109 1 115	7	18	2	14	7	-8	3	5	*****							
4 136 1 144	8	-8	3	6	*****				*K L = 3, 9*	0	132	2	132			
5 97 1 100	*****				1	31	1	31	1	99	2	99				
6 -9 3 7	*K L = 1, 8*	2	33	1	31	2	33	1	31	2	-12	3	11			
7 50 1 49	1	70	1	70	3	113	1	113	3	41	1	39				
*****				2	56	1	56	4	46	1	45	4	-8	3	1	
K L = 4, 7	3	216	1	230	3	113	1	113	5	92	1	91	5	50	1	50
1 98 1 103	4	78	1	79	4	46	1	45	6	25	1	24	6	25	1	23
2 -12 3 4	5	170	1	181	5	92	1	91	7	-8	3	5	7	82	1	81
3 109 1 115	6	38	1	40	6	25	1	24	*****							
4 136 1 144	7	18	2	14	7	-8	3	5	*K L = 6, 8*	0	23	1	20			
5 97 1 100	8	-8	3	6	*****				8	85	1	82				
6 -9 3 7	*****				0	23	1	20	*****							
7 50 1 49	*K L = 1, 8*	1	70	1	70	*****										

STRUCTURE FACTOR AMPLITUDES (X				4) FOR HASHEMITE				PAGE 6			
H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC	H	FO	SF	FC
*****				5	-5	5	11	*****			
K L = 4, 9				6	111	1	111	*K L = 3, 10*			
1	52	1	51	7	39	1	38	1	30	1	28
2	87	1	84	*****				2	55	1	54
3	87	1	85	*K L = 1, 10*				3	21	2	21
4	-10	2	10	1	33	1	31	4	138	1	131
5	56	1	55	2	73	2	70	5	23	1	21
6	60	1	58	3	26	2	26	6	25	1	22
*****				4	163	2	162	*****			
K L = 5, 9				5	28	1	29	*K L = 4, 10*			
0	94	2	89	6	32	1	29	0	57	1	52
1	69	1	66	7	19	1	18	1	28	1	26
2	-8	3	4	*****				2	93	1	86
3	20	1	20	*K L = 2, 10*				3	-10	3	5
4	-4	4	0	0	84	1	80	4	14	2	10
*****				1	51	1	50	*****			
K L = 0, 10				2	120	1	116	*K L = 3, 11*			
0	91	1	87	3	23	1	20	0	130	3	117
1	40	1	40	4	19	1	15	1	31	1	26
2	135	1	132	5	-8	3	3	2	101	1	96
3	-9	3	8	6	100	1	97	3	14	2	8
4	18	2	15	7	26	1	26	4	81	1	75
								5	23	1	18