

AM-88-368

Structure and crystal chemistry of clintionite

MacKinney, et al.

To be deposited: Tables 4, 9

American Mineralogist, 73, 3-4, 365-375

TABLE 4

				USNM #105455							
K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
H = 0				6	6	463	459	1	7	444	433
				6	7	396	402	1	-7	429	414
0	1	314	258	6	8	395	394	1	8	115	115
0	2	90	85	6	9	109	110	1	-8	343	342
0	3	1254	1262	6	10	605	592	1	11	236	235
0	4	63	86	6	11	303	294	1	-11	95	92
0	5	964	965	8	0	233	239	1	12	250	251
0	6	735	707	8	1	101	100	1	-12	291	288
0	7	416	420	8	2	356	353	1	-13	181	174
0	8	554	567	8	3	394	392	3	0	429	416
0	9	210	215	8	4	77	75	3	1	655	579
0	10	709	708	8	5	48	44	3	-1	1309	1306
0	11	412	408	8	6	55	52	3	2	661	643
0	13	163	168	8	7	306	302	3	-2	531	514
2	0	249	268	8	8	110	112	3	3	637	595
2	1	185	162	8	9	62	67	3	-3	1190	1150
2	2	755	715	10	0	146	142	3	4	600	600
2	3	672	608	10	1	120	123	3	-4	543	529
2	4	177	153	10	2	273	272	3	5	1626	1604
2	5	59	56	10	3	62	55	3	-5	1147	1191
2	6	145	132	10	4	51	41	3	6	857	877
2	7	478	473	10	5	63	53	3	-6	301	276
2	8	198	198	10	6	236	238	3	-7	247	256
2	11	181	180	10	7	332	335	3	8	356	359
2	12	302	300	10	8	200	194	3	-8	141	136
2	13	85	83	12	0	758	736	3	9	676	679
4	0	196	165	12	1	85	86	3	-9	627	650
4	1	260	245	12	2	53	50	3	10	385	385
4	2	566	542	12	3	252	241	3	-10	442	444
4	3	250	243	12	4	259	262	3	11	68	76
4	4	40	34					3	-11	399	402
4	5	77	73					3	12	193	185
4	6	291	280					3	-12	652	648
4	7	510	520					3	-13	169	161
4	8	248	253					5	1	423	412
4	9	69	73	1	0	155	175	5	-1	117	120
4	10	49	44	1	1	372	363	5	2	659	658
4	11	107	101	1	-1	54	67	5	-2	309	322
4	12	317	316	1	2	798	779	5	-2	309	322
4	12	317	316	1	-2	578	586	5	3	261	248
6	0	1845	1918	1	3	510	454	5	-3	369	351
6	1	199	183	1	-3	753	732	5	4	88	86
6	2	79	67	1	4	47	37	5	-4	252	235
6	3	686	692	1	-4	290	270	5	5	170	176
6	4	349	348	1	5	55	45	5	6	281	285
6	5	572	590	1	6	295	272	5	-6	143	136

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
5	7	396	402	11	-1	59	59	2	4	127	128
5	-7	357	362	11	2	321	321	2	-4	116	114
5	8	194	196	11	-2	212	209	2	5	146	142
5	-8	251	258	11	3	127	123	2	-5	60	62
5	-9	54	47	11	-3	174	171	2	6	494	501
5	11	154	147	11	-4	155	151	2	7	386	395
5	-11	78	78	11	5	97	94	2	-7	431	419
5	12	212	212	11	6	196	195	2	-8	478	485
5	-12	332	331	11	-6	91	89	2	9	80	78
7	0	220	230					2	-9	105	108
7	1	86	81					2	-10	68	74
7	-1	48	44					2	11	283	283
7	2	330	331					2	12	211	214
7	-2	428	426					2	-12	199	197
7	3	337	344	0	0	1308	1308	2	-13	294	292
7	-3	572	583	0	1	538	527	4	0	161	145
7	-4	122	119	0	-1	417	412	4	1	508	513
7	5	96	95	0	2	1207	1157	4	-1	134	144
7	-5	102	101	0	-2	627	574	4	2	595	593
7	6	156	155	0	3	547	529	4	-2	143	153
7	-6	114	121	0	-3	637	645	4	3	82	76
7	7	247	243	0	4	1169	1194	4	-3	394	397
7	-7	262	267	0	-4	610	587	4	4	144	144
7	8	278	279	0	5	282	275	4	-4	293	281
7	-8	278	279	0	-5	601	607	4	-4	293	281
7	-9	143	147	0	6	241	261	4	-5	70	68
7	10	90	90	0	6	241	261	4	6	380	379
7	-11	89	79	0	-6	1604	1606	4	-6	85	83
9	0	274	272	0	7	133	130	4	7	347	356
9	-1	667	658	0	-7	864	869	4	-7	269	269
9	2	387	390	0	8	625	646	4	8	97	103
9	-2	385	390	0	9	435	440	4	-8	349	352
9	3	275	275	0	-9	367	368	4	11	195	191
9	-3	328	322	0	10	392	404	4	-12	258	259
9	4	243	242	0	-10	660	680	4	-13	268	266
9	-4	219	220	0	11	645	652	6	0	894	910
9	5	803	794	0	-11	385	385	6	1	480	468
9	-5	732	737	0	12	168	172	6	-1	349	342
9	6	459	455	0	-12	79	85	6	2	535	516
9	-6	54	46	0	-13	186	185	6	-2	94	90
9	7	110	95	2	0	221	198	6	3	333	345
9	8	145	144	2	1	483	487	6	-3	537	547
9	-8	130	126	2	-1	152	127	6	4	891	907
9	9	459	454	2	2	381	380	6	-4	368	351
9	-9	369	364	2	-2	375	385	6	5	118	118
11	1	177	176	2	3	45	40	6	-5	337	349
				2	-3	505	508				

H = 2

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
6	6	140	135	12	1	251	246	3	9	598	597
6	-6	1077	1090	12	-1	240	233	3	-9	385	390
6	7	129	125	12	-2	58	59	3	10	299	299
6	-7	572	583	12	-3	262	254	3	-10	110	110
6	8	478	479					3	-11	587	586
6	9	334	321					3	-12	296	296
6	-9	235	237					5	1	254	258
6	10	315	321					5	-1	225	240
6	-10	537	536					5	2	391	395
6	-11	286	283	1	1	346	350	5	-2	190	190
8	0	42	40	1	-1	73	86	5	-3	155	162
8	1	288	290	1	2	364	356	5	-4	539	549
8	-1	71	65	1	-2	243	234	5	4	69	65
8	2	180	181	1	3	128	120	5	-4	448	454
8	-2	226	231	1	-3	659	659	5	5	125	123
8	3	67	69	1	4	47	42	5	6	268	266
8	-3	338	340	1	-4	396	402	5	-6	156	164
8	4	99	96	1	5	217	217	5	7	56	51
8	-4	58	57	1	6	358	363	5	-8	344	350
8	5	139	139	1	-6	170	171	5	-9	202	207
8	-5	49	51	1	7	130	133	5	10	223	226
8	6	335	336	1	-7	99	92	5	-10	115	122
8	-6	65	66	1	8	67	66	5	-12	105	105
8	7	270	269	1	-8	444	446	7	0	94	97
8	-7	316	319	1	-9	252	260	7	1	289	293
8	8	324	326	1	10	183	187	7	-1	78	77
8	9	61	55	1	11	307	311	7	2	139	139
8	-9	118	121	1	-12	87	85	7	-2	126	128
8	-10	70	59	1	-13	238	237	7	-3	352	361
10	0	67	72	3	0	201	191	7	-4	137	137
10	1	286	284	3	1	71	65	7	5	224	226
10	-1	154	157	3	-1	1832	1922	7	6	328	326
10	2	410	403	3	2	665	687	7	-6	78	82
10	-2	62	55	3	-2	193	181	7	7	176	180
10	3	70	66	3	3	345	348	7	-7	189	192
10	-3	196	193	3	-3	88	76	7	8	73	75
10	4	77	75	3	4	563	588	7	-8	360	360
10	-4	237	236	3	-4	689	704	7	-9	211	208
10	5	85	86	3	5	452	453	9	0	133	134
10	-5	76	82	3	-5	341	343	9	-1	945	946
10	6	197	198	3	6	401	406	9	2	343	338
10	-6	103	102	3	-6	576	584	9	-2	86	82
10	7	111	112	3	7	397	403	9	3	314	317
10	-7	111	112	3	-7	470	465	9	-3	72	81
10	8	174	168	3	8	108	114	9	4	378	371
12	0	452	451	3	-8	390	395				

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
3	6	130	120	0	3	323	316	1	-4	119	122
3	-6	244	241	0	-3	130	132	1	-5	217	211
3	7	373	362	0	4	231	230	1	-6	132	131
3	-7	804	798	0	5	297	283	3	0	263	255
3	-8	449	447	0	-5	362	354	3	-2	229	222
3	-10	165	161	0	-6	311	311	3	-3	457	452
3	-11	462	454	0	-7	370	362	3	-4	243	242
5	0	248	249	0	-8	275	270				
5	1	141	139	0	-9	285	283				
5	-1	122	122	2	0	156	155				
5	-2	100	102	2	1	256	253				
5	3	107	105	2	2	123	124				
5	-3	192	193	2	-2	123	122				
5	4	139	142	2	3	70	76				
5	-4	237	233	2	-3	122	130				
5	5	347	341	2	4	116	116				
5	6	282	276	2	-4	392	393				
5	-6	58	54	2	5	173	165				
5	-8	316	318	2	-5	293	292				
5	-9	327	324	2	-7	130	127				
5	-10	78	76	2	-9	256	253				
7	0	214	215	4	0	202	201				
7	1	300	296	4	1	194	189				
7	-1	67	73	4	2	60	63				
7	-2	72	73	4	-3	79	82				
7	3	60	46	4	4	133	131				
7	-3	110	108	4	-4	315	315				
7	-4	212	208	4	-5	195	192				
7	-5	157	157	4	-7	81	73				
7	-7	53	51	4	-8	68	69				
7	-8	140	141	6	1	241	240				
9	0	251	250	6	-1	93	97				
9	-1	457	451	6	2	261	263				
9	-2	237	229	6	-2	754	739				
9	-3	54	61	6	-3	88	87				
9	-4	266	256	6	-5	258	252				
				6	-6	254	257				

H = 6

0	0	71	79
0	1	313	320
0	-1	97	98
0	2	285	287
0	-2	959	948

H = 7

1	0	303	300
1	1	180	176
1	-1	175	172
1	-3	81	76

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CLINTONITE-2

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
H = 0											
				6	7	405	413	1	-9	49	44
				6	8	397	396	1	10	59	60
0	1	299	263	6	9	109	115	1	11	236	237
0	2	85	93	6	10	604	604	1	-11	89	93
0	3	1188	1253	6	11	297	296	1	12	254	258
0	4	74	76	8	0	222	230	1	-12	294	293
0	5	984	958	8	1	92	96	1	-13	182	184
0	6	740	723	8	2	336	342	3	0	412	400
0	7	424	427	8	3	377	383	3	1	620	573
0	8	573	575	8	4	71	67	3	-1	1299	1295
0	9	224	224	8	6	49	51	3	2	654	629
0	10	748	725	8	7	297	298	3	-2	539	510
0	11	419	408	8	8	109	112	3	3	639	604
0	13	164	164	8	9	57	57	3	-3	1197	1165
2	0	227	256	10	0	133	129	3	4	585	579
2	1	158	162	10	1	112	114	3	-4	565	536
2	2	682	706	10	2	264	263	3	5	1564	1604
2	3	630	606	10	3	58	56	3	-5	1181	1178
2	4	162	154	10	5	62	57	3	6	885	879
2	5	57	46	10	6	231	227	3	-6	280	274
2	6	127	134	10	7	330	322	3	-7	247	252
2	7	485	470	10	8	192	190	3	8	373	359
2	8	201	203	12	0	732	716	3	-8	157	139
2	11	179	185	12	1	89	91	3	9	691	687
2	12	304	307	12	3	246	244	3	-9	644	659
2	13	88	92	12	4	257	255	3	10	396	390
4	0	175	165					3	-10	449	440
4	1	241	245					3	11	75	76
4	2	512	531					3	-11	427	417
4	3	241	241					3	12	200	208
4	4	31	27	1	0	150	170	3	-12	664	672
4	5	69	69	1	1	365	362	3	-13	166	164
4	6	280	279	1	-1	49	57	5	1	392	400
4	7	517	515	1	2	774	773	5	-1	112	112
4	8	252	255	1	-2	575	581	5	2	632	647
4	9	68	76	1	3	504	454	5	-2	293	315
4	11	101	106	1	-3	774	727	5	3	240	244
4	12	316	323	1	4	46	41	5	-3	341	347
6	0	1829	1893	1	-4	306	270	5	4	84	83
6	1	195	190	1	5	53	43	5	-4	231	229
6	2	78	75	1	6	268	268	5	5	170	170
6	3	676	683	1	7	445	433	5	6	285	280
6	4	345	342	1	-7	432	411	5	-6	134	137
6	5	571	579	1	8	124	121	5	7	398	401
6	6	475	465	1	-8	356	351	5	-7	357	356

H = 1

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
5	8	198	197	11	2	312	312	2	-4	118	118
5	-8	263	265	11	-2	200	201	2	5	148	143
5	-9	53	48	11	3	118	115	2	-5	59	59
5	11	146	149	11	-3	168	167	2	6	506	497
5	-11	69	78	11	-4	146	140	2	7	391	398
5	12	210	217	11	5	89	92	2	-7	429	414
5	-12	325	331	11	6	188	186	2	-8	476	483
7	0	212	225	11	-6	87	83	2	9	78	82
7	1	80	82					2	-9	112	113
7	-1	44	43					2	-10	76	79
7	2	318	324					2	11	287	288
7	-2	401	415					2	12	215	221
7	3	330	338					2	-12	200	200
7	-3	552	570					2	-13	296	301
7	4	87	84					4	0	147	143
7	-4	120	117					4	1	490	505
7	5	91	87					4	-1	129	137
7	-5	94	102					4	2	575	582
7	6	151	150					4	-2	138	152
7	-6	119	119					4	3	78	77
7	7	242	244					4	-3	382	390
7	-7	263	265					4	4	143	140
7	-8	275	280					4	-4	282	283
7	-9	144	144					4	5	59	40
7	10	86	83					4	-5	70	67
7	-11	83	77					4	6	381	378
9	0	268	259					4	-6	84	82
9	-1	659	646					4	7	348	358
9	2	395	388					4	-7	267	265
9	-2	393	390					4	8	100	103
9	3	273	272					4	-8	353	352
9	-3	326	320					4	11	193	195
9	4	238	226					4	-12	260	261
9	-4	225	226					4	-13	273	272
9	5	801	787					6	0	889	901
9	-5	724	726					6	1	477	465
9	6	454	455					6	-1	335	328
9	-6	48	49					6	2	527	519
9	-7	105	94					6	-2	82	88
9	8	152	148					6	3	337	351
9	-8	136	136					6	-3	537	541
9	9	460	457					6	4	911	899
9	-9	368	366					6	-4	363	355
11	1	166	162					6	5	121	114
11	-1	63	60					6	-5	328	335

H = 2

0 0 1325 1303

0 1 605 521

0 -1 443 397

0 2 1175 1170

0 -2 683 575

0 3 560 538

0 -3 669 634

0 4 1139 1179

0 -4 645 600

0 5 282 269

0 -5 583 590

0 6 248 255

0 -6 1535 1615

0 7 154 135

0 -7 881 878

0 8 650 653

0 9 451 434

0 -9 396 371

0 10 421 418

0 -10 712 692

0 11 670 671

0 -11 396 393

0 12 173 172

0 -12 73 85

0 -13 202 208

2 0 205 196

2 1 472 480

2 -1 145 133

2 2 375 375

2 -2 370 379

2 3 46 42

2 -3 503 503

2 4 122 123

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
6	6	138	132	12	-1	233	218	3	-9	394	400
6	-6	1095	1091	12	-2	51	57	3	10	303	299
6	7	140	133	12	-3	259	256	3	-10	115	117
6	-7	582	591					3	-11	606	606
6	8	486	481					3	-12	305	304
6	9	326	316					5	1	246	256
6	-9	244	241					5	-1	219	232
6	10	328	332					5	2	385	390
6	-10	541	546	1	1	338	347	5	-2	180	186
6	-11	290	286	1	-1	76	82	5	3	152	157
8	1	279	282	1	2	354	352	5	-3	521	536
8	-1	66	64	1	-2	233	235	5	4	65	62
8	2	179	180	1	3	132	123	5	-4	440	448
8	-2	214	219	1	-3	638	646	5	5	122	119
8	3	71	67	1	4	44	40	5	6	269	265
8	-3	333	336	1	-4	395	400	5	-6	155	157
8	4	96	95	1	5	216	213	5	7	63	56
8	-4	52	56	1	6	368	362	5	-8	344	350
8	5	134	134	1	-6	173	166	5	9	203	207
8	-5	50	51	1	7	133	136	5	-9	219	225
8	6	326	326	1	-7	99	95	5	10	116	111
8	-6	70	64	1	8	64	67	5	-10	109	109
8	7	269	268	1	-8	453	448	7	0	92	91
8	-7	306	309	1	9	262	264	7	1	286	289
8	8	320	320	1	10	186	189	7	-1	77	71
8	9	54	57	1	11	317	315	7	2	137	138
8	-9	119	118	1	-12	91	90	7	-2	121	125
8	-10	60	65	1	-13	247	245	7	-3	345	353
10	0	66	66	3	0	204	196	7	-4	140	138
10	1	273	272	3	1	81	72	7	5	217	219
10	-1	153	153	3	-1	1866	1912	7	6	320	321
10	2	392	388	3	2	682	683	7	-6	82	84
10	-2	50	56	3	-2	197	191	7	7	179	179
10	3	64	62	3	3	353	343	7	-7	185	188
10	-3	187	188	3	-3	87	83	7	8	77	75
10	4	74	74	3	4	577	582	7	-8	351	356
10	-4	232	229	3	-4	693	700	7	-9	209	210
10	5	85	85	3	5	471	462	9	0	138	137
10	-5	76	71	3	-5	347	339	9	-1	942	933
10	6	195	197	3	6	409	419	9	2	346	339
10	-6	99	93	3	-6	578	581	9	-2	82	90
10	7	108	107	3	7	400	403	9	3	311	313
10	-7	173	170	3	-7	488	472	9	-3	78	80
12	0	447	439	3	8	118	118	9	4	369	362
12	1	250	248	3	-8	402	409	9	-4	326	330
				3	9	602	611				

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
9	5	267	262	2	-4	362	366	8	2	182	183
9	-5	278	282	2	5	143	144	8	-2	141	140
9	6	300	302	2	-5	254	253	8	-3	148	153
9	-6	320	313	2	6	316	319	8	4	154	146
9	-7	245	241	2	-6	75	70	8	-4	202	203
9	-8	290	287	2	7	194	194	8	5	129	132
11	1	141	139	2	-7	72	70	8	-5	199	200
11	-1	129	129	2	8	60	58	8	6	222	225
11	2	219	222	2	-8	242	240	8	-7	90	89
11	-2	128	122	2	9	61	57	8	-8	163	166
11	-3	259	255	2	-9	172	168	10	0	75	78
11	-4	250	245	2	-12	123	124	10	1	168	173
				4	0	179	183	10	-1	100	99
				4	1	400	405	10	2	191	193
				4	-1	133	142	10	-3	212	207
				4	2	292	294	10	-4	303	303
				4	-2	61	61	10	-5	68	61
				4	-3	273	281				
				4	-4	430	433				
				4	5	137	133				
				4	-5	153	153				
				4	6	271	272				
				4	7	85	88				
				4	-8	240	242				
				4	9	67	64				
				4	-9	208	211				
				4	-10	57	57				
				6	1	399	392				
				6	-1	268	260	1	0	276	278
				6	2	279	279	1	1	260	263
				6	-2	666	654	1	-1	121	120
				6	3	234	226	1	3	104	101
				6	-3	395	393	1	-3	185	183
				6	4	802	798	1	4	82	82
				6	-4	331	330	1	-4	270	271
				6	5	461	464	1	5	344	341
				6	-5	227	231	1	-5	81	77
				6	-6	730	740	1	6	290	287
				6	7	154	148	1	8	73	74
				6	8	452	458	1	-8	282	278
				6	-8	102	96	1	-9	336	336
				6	-9	146	141	3	0	410	407
				6	-10	368	373	3	1	336	335
				8	0	216	216	3	-1	675	663
				8	1	408	408	3	2	226	235
								3	-2	265	259
								3	3	738	741
								3	4	51	52
								3	-4	403	400
								3	5	101	101
								3	-5	274	271
								3	6	130	133

H = 4

H = 5

K	L	10FO	10FC
3	-6	238	235
3	7	358	365
3	-7	817	813
3	-8	457	464
3	-10	168	168
3	-11	461	467
5	0	242	244
5	1	139	142
5	-1	117	112
5	-2	96	97
5	3	108	104
5	-3	184	187
5	4	135	135
5	-4	231	235
5	5	335	335
5	6	274	273
5	-6	62	57
5	-8	309	313
5	-9	326	323
5	-10	77	76
7	0	211	212
7	1	289	292
7	-1	65	67
7	-2	72	74
7	-3	108	108
7	-4	205	207
7	-5	156	157
7	-8	135	139
9	0	251	253
9	-1	450	450
9	-2	230	222
9	-4	264	261

H = 6

0	0	72	75
0	1	329	331
0	-1	101	105
0	2	288	286
0	-2	961	957
0	3	315	317
0	-3	133	142
0	4	237	235
0	5	301	301

K	L	10FO	10FC
0	-5	374	363
0	-6	309	313
0	-7	363	364
0	-8	275	272
0	-9	301	303
2	0	156	158
2	1	248	250
2	2	113	118
2	-2	119	124
2	3	69	65
2	-3	121	126
2	4	113	110
2	-4	382	387
2	5	170	167
2	-5	292	290
2	-7	127	128
2	-9	253	258
4	0	201	203
4	1	188	186
4	2	64	61
4	-3	74	80
4	4	129	126
4	-4	306	311
4	-5	196	192
4	-7	74	77
4	-8	71	70
6	1	249	248
6	-1	100	101
6	2	262	262
6	-2	750	745
6	-3	91	95
6	-4	59	59
6	-5	261	260
6	-6	256	259

H = 7

1	0	300	296
1	1	173	172
1	-1	170	167
1	-3	77	77
1	-4	124	122
1	-5	210	213
1	-6	126	125

K	L	10FO	10FC
3	0	268	266
3	-2	227	221
3	-3	458	454
3	-4	251	258

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR CLINTONITE-3

OBSERVED AND CALCULATED				STRUCTURE FACTORS				FOR CLINTONITE-3			
K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
H = 0				6	7	403	423	1	-7	363	389
				6	8	373	397	1	8	99	100
0	1	246	301	6	9	107	129	1	-8	310	331
0	2	94	113	6	10	610	586	1	10	48	45
0	3	1253	1168	6	11	295	290	1	-10	18	7
0	4	33	53	8	0	195	206	1	11	211	205
0	5	945	888	8	1	75	76	1	-11	78	76
0	6	741	722	8	2	343	357	1	12	239	236
0	7	439	432	8	3	369	379	1	-12	261	261
0	8	588	575	8	4	72	73	1	-13	167	164
0	9	223	230	8	5	38	47	3	0	441	410
0	10	692	685	8	6	46	47	3	1	624	575
0	11	415	400	8	7	277	286	3	-1	1359	1316
0	13	147	140	8	8	108	113	3	2	637	645
2	0	217	206	8	9	41	41	3	-2	577	569
2	1	128	137	10	0	142	134	3	3	612	609
2	2	635	684	10	1	127	125	3	-3	1187	1190
2	3	592	623	10	2	252	266	3	4	551	527
2	4	157	153	10	3	51	59	3	-4	541	543
2	6	102	116	10	4	59	57	3	5	1576	1606
2	7	436	450	10	5	58	63	3	-5	1187	1184
2	8	193	193	10	6	220	217	3	6	853	855
2	10	19	12	10	7	335	339	3	-6	262	260
2	11	148	148	10	8	181	190	3	-7	272	266
2	12	274	278	12	0	779	760	3	8	371	371
2	13	73	72	12	1	115	121	3	-8	177	169
4	0	194	201	12	2	59	60	3	9	615	621
4	1	239	250	12	3	240	242	3	-9	602	616
4	2	486	517	12	4	282	257	3	10	377	368
4	3	210	246					3	-10	428	417
4	4	51	53					3	11	73	69
4	5	69	80					3	-11	454	426
4	6	245	262					3	12	207	198
4	7	471	518	1	0	156	140	3	-12	661	646
4	8	240	249	1	1	321	327	3	-13	139	130
4	9	73	76	1	-1	55	48	5	0	19	9
4	10	55	62	1	2	705	765	5	1	398	396
4	11	73	70	1	-2	510	537	5	-1	110	111
4	12	294	287	1	3	433	464	5	2	619	657
6	0	1996	1928	1	-3	695	739	5	-2	260	278
6	1	231	224	1	-4	264	282	5	3	227	256
6	3	679	673	1	5	44	50	5	-3	344	366
6	4	347	332	1	6	225	252	5	4	87	95
6	5	577	563	1	-6	15	2	5	-4	211	218
6	6	473	456	1	7	388	416	5	5	160	171
5	6	247	248	9	-6	24	34	0	12	142	138
5	-6	128	125	9	7	38	42	0	-12	84	80
5	7	400	398	9	-7	113	107	0	-13	215	202
5	-7	344	350	9	8	142	154	2	0	211	214
5	8	169	177	9	-8	153	148	2	1	420	457
5	-8	234	247	9	9	440	425	2	-1	163	172
5	-9	55	59	9	-9	334	335	2	2	329	381
5	10	19	10	11	1	158	166	2	-2	340	365

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
5	-10	22	26	11	-1	52	52	2	3	10	21
5	11	127	123	11	2	303	312	2	-3	441	496
5	-11	68	65	11	-2	190	195	2	4	110	126
5	-12	300	298	11	3	127	129	2	-4	88	112
7	0	215	227	11	-3	182	192	2	5	124	125
7	1	53	54	11	-4	132	131	2	-5	81	85
7	-1	42	36	11	5	80	83	2	6	461	487
7	2	311	330	11	-5	17	21	2	-6	18	25
7	-2	406	430	11	6	162	167	2	7	371	388
7	3	317	335	11	-6	68	65	2	-7	383	401
7	-3	552	587					2	-8	461	490
7	4	104	98					2	9	79	83
7	-4	128	130					2	-9	94	103
7	5	94	87					2	-10	69	84
7	-5	107	114					2	11	247	245
7	6	143	153	0	0	1356	1316	2	-11	41	46
7	-6	127	135	0	1	581	577	2	12	201	200
7	7	221	230	0	-1	433	412	2	-12	165	164
7	-7	226	243	0	2	1222	1188	2	-13	269	274
7	8	28	22	0	-2	625	570	4	0	145	138
7	-8	270	275	0	3	554	543	4	1	490	508
7	9	140	136	0	-3	661	655	4	-1	126	126
7	-9	74	72	0	4	1192	1179	4	2	560	594
7	10	56	49	0	-4	625	604	4	-2	117	124
7	-10	66	62	0	5	257	255	4	3	75	86
9	0	303	281	0	-5	571	537	4	-3	366	393
9	1	32	24	0	6	268	265	4	4	136	150
9	-1	682	666	0	-6	1627	1621	4	-4	267	283
9	2	391	388	0	7	166	161	4	5	55	55
9	-2	441	435	0	-7	839	852	4	-5	75	67
9	3	276	270	0	8	569	605	4	6	348	353
9	-3	333	334	0	-8	27	23	4	-6	86	77
9	4	223	199	0	9	407	407	4	7	326	347
9	-4	236	250	0	-9	365	385	4	-7	246	262
9	5	812	809	0	10	431	420	4	8	92	92
9	-5	775	758	0	-10	591	629	4	-8	331	343
9	6	454	469	0	11	644	637	4	10	40	35
4	-10	41	46	0	-11	373	373	4	11	282	288
4	11	170	168	8	-9	110	106	1	-12	60	65
4	-11	29	25	8	-10	62	63	1	-13	204	215
4	-12	228	233	10	0	60	56	3	0	230	230
4	-13	255	258	10	1	284	287	3	-1	1981	1928
6	0	927	924	10	-1	156	159	3	2	652	664
6	1	515	510	10	2	397	401	3	-2	225	218
6	-1	377	353	10	-2	39	42	3	3	343	334
6	2	514	533	10	3	75	73	3	-3	106	100
6	-2	78	83	10	-3	185	198	3	4	570	560
6	3	340	374	10	4	74	83	3	-4	683	686
6	-3	555	550	10	-4	224	230	3	5	468	447
6	4	918	909	10	5	94	96	3	-5	342	331
6	-4	355	345	10	-5	87	80	3	6	414	424
6	5	99	101	10	6	171	180	3	-6	575	563
6	-5	297	296	10	-6	100	89	3	7	391	398
6	6	145	140	10	-7	113	111	3	-7	485	466
				10	-8	160	163				

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
6	-6	1122	1111	12	0	486	467	3	8	105	129
6	7	151	145	12	1	287	286	3	-8	418	422
6	-7	571	585	12	-1	278	247	3	9	589	583
6	8	458	443	12	-2	69	60	3	-9	393	397
6	-8	46	26	12	-3	271	263	3	10	279	287
6	9	308	292					3	-10	108	128
6	-9	246	250					3	-11	596	588
6	10	344	333					3	-12	285	295
6	-10	530	499					5	0	54	56
6	-11	283	272					5	1	230	256
6	-12	38	38					5	-1	199	221
8	0	55	50					5	2	352	383
8	1	256	272					5	-2	165	173
8	-1	73	65					5	3	163	163
8	2	176	197					5	-3	515	555
8	-2	212	223					5	4	80	67
8	3	41	46					5	-4	431	462
8	-3	310	332					5	5	112	116
8	4	87	90					5	-5	30	27
8	-4	51	61					5	6	241	253
8	5	113	114					5	-6	163	173
8	-5	60	67					5	7	39	45
8	6	318	328					5	-7	31	26
8	7	258	262					5	8	37	33
8	-7	297	293					5	-8	309	326
8	8	25	25					5	9	30	29
8	-8	335	334					5	-9	198	209
8	9	63	63					5	10	198	193
5	-10	108	107					2	-11	23	17
5	-12	81	83					2	-12	108	114
7	0	101	99					4	0	168	176
7	1	276	291					4	1	387	409
7	-1	79	72					4	-1	124	133
7	2	128	143					4	2	272	285
7	-2	123	128					4	-2	58	60
7	3	21	18					4	-3	256	277
7	-3	331	349					4	4	26	26
7	4	41	45					4	-4	409	432
7	-4	130	145					4	5	126	131
7	5	196	202					4	-5	147	156
7	-5	35	38					4	6	254	260
7	6	315	328					4	7	74	75
7	-6	76	88					4	-7	29	32
7	7	171	173					4	8	26	23
7	-7	172	177					4	-8	226	236
7	8	71	72					4	9	56	51
7	-8	341	360					4	-9	193	203
7	9	198	204					4	-10	46	45
7	-10	48	48					4	-11	34	27
9	0	168	173					6	0	27	21
9	1	29	30					6	1	384	388
9	-1	962	965					6	-1	290	277
9	2	325	335					6	2	273	273
9	-2	103	113					6	-2	685	668

H = 3

H = 4

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
9	3	318	313	2	1	552	597	6	3	216	196
9	-3	96	98	2	-1	84	94	6	-3	438	432
9	4	378	372	2	2	287	307	6	4	806	803
9	-4	311	323	2	-2	185	198	6	-4	332	334
9	5	255	255	2	3	73	79	6	5	462	469
9	-5	285	279	2	-3	165	184	6	-5	238	252
9	6	321	322	2	4	161	170	6	6	48	47
9	-6	318	316	2	-4	342	370	6	-6	771	762
9	-7	227	230	2	5	112	122	6	7	135	150
9	-8	326	312	2	-5	238	252	6	-7	24	37
11	0	21	20	2	6	296	306	6	8	417	419
11	1	139	150	2	-6	96	85	6	-8	113	105
11	-1	106	118	2	7	175	176	6	-9	162	156
11	2	202	211	2	-7	72	71	6	-10	345	341
11	-2	111	111	2	8	69	62	8	0	213	224
11	-3	266	273	2	-8	225	237	8	1	402	412
11	-4	235	243	2	9	52	50	8	-1	44	45
				2	-9	141	149	8	2	187	192
				2	-10	50	51	8	-2	138	140
8	3	44	51	3	3	760	752	9	-4	271	266
8	-3	123	134	3	-3	39	32				
8	4	143	145	3	4	27	37				
8	-4	205	215	3	-4	401	397				
8	5	101	108	3	5	114	108				
8	-5	190	193	3	-5	270	266				
8	6	203	220	3	6	150	140	0	0	90	93
8	-6	67	59	3	-6	219	204	0	1	300	311
8	-7	85	81	3	7	345	325	0	-1	110	122
8	-8	162	169	3	-7	831	823	0	2	292	280
10	0	68	71	3	-8	460	467	0	-2	959	966
10	1	170	177	3	-9	38	35	0	3	318	309
10	-1	92	98	3	-10	163	170	0	-3	161	165
10	2	176	183	3	-11	461	437	0	4	218	215
10	-2	40	32	5	0	228	239	0	-4	38	37
10	-3	213	217	5	1	130	146	0	5	322	308
10	-4	302	306	5	-1	123	120	0	-5	351	354
10	-5	62	63	5	2	36	28	0	-6	329	315
				5	-2	106	100	0	-7	392	374
				5	3	100	102	0	-8	284	273
				5	-3	184	194	0	-9	330	324
				5	4	120	119	2	0	152	164
				5	-4	215	232	2	1	235	245
				5	5	330	331	2	-1	46	42
				5	6	269	266	2	2	121	120
				5	-6	73	77	2	-2	119	125
				5	-8	299	302	2	3	73	62
				5	-9	339	338	2	-3	114	119
				5	-10	78	75	2	4	107	105
				7	0	203	212	2	-4	383	393
				7	1	279	291	2	5	161	163
				7	-1	54	51	2	-5	291	300
				7	2	51	52	2	-6	20	17
				7	-2	71	77	2	-7	129	135
				7	3	44	47	2	-8	28	19
								2	-9	233	238

H = 6

H = 5

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
1	8	69	69	7	-3	101	108	4	0	201	212
1	-8	258	270	7	-4	212	220	4	1	186	191
1	-9	332	341	7	-5	157	161	4	-1	25	23
1	-10	52	51	7	-6	25	18	4	2	58	57
1	-11	60	65	7	-7	37	32	4	-2	38	43
3	0	444	441	7	-8	128	133	4	-3	68	72
3	1	335	338	9	0	280	287	4	4	109	110
3	-1	670	663	9	-1	472	466	4	-4	294	305
3	2	231	246	9	-2	273	245	4	-5	196	201
3	-2	299	279	9	-3	71	62	4	-6	29	25
4	-7	68	76								
4	-8	62	62								
6	0	56	59								
6	1	233	238								
6	-1	119	125								
6	2	270	257								
6	-2	769	761								
6	-3	113	116								
6	-4	63	65								
6	-5	248	254								
6	-6	271	259								

H = 7

1	0	295	293
1	1	162	165
1	-1	173	170
1	-2	33	38
1	-3	72	69
1	-4	115	120
1	-5	205	210
1	-6	121	121
3	0	270	263
3	-1	61	53
3	-2	266	240
3	-3	492	473
3	-4	279	279

TABLE 9. Thermal ellipsoid orientations

Atom	Axis	Chichibu mine			Irian Jaya				
		RMS (Å) displacement	Angle (deg.) with respect to X Y Z	Angle (deg.) with respect to Y Z	RMS (Å) displacement	Angle (deg.) with respect to X Y Z	Angle (deg.) with respect to Y Z		
T	R1	0.082(2)	95(23)	116(64)	150(58)	0.073(2)	83(9)	88(6)	176(8)
	R2	0.083(2)	87(35)	26(63)	116(63)	0.082(2)	7(10)	87(13)	93(9)
	R3	0.085(2)	174(27)	85(3)	77(25)	0.088(2)	87(13)	176(11)	93(6)
M1	R1	0.074(4)	90.0(0)	180.0(0)	90.0(0)	0.067(5)	169(2)	90.0(0)	90(21)
	R2	0.075(4)	11(16)	90.0(0)	90(16)	0.073(4)	90.0(0)	0.0(0)	90.0(0)
	R3	0.086(4)	79(16)	90.0(0)	180(16)	0.077(4)	79(21)	90.0(0)	180(21)
M2	R1	0.075(3)	90.0(1)	180(1)	90.0(0)	0.066(3)	163(22)	90.0(0)	63(22)
	R2	0.075(3)	9(14)	90.0(1)	92(14)	0.072(3)	73(22)	90.0(1)	27(22)
	R3	0.083(3)	81(14)	90.0(0)	178(14)	0.073(3)	90.0(0)	180(2)	90.0(0)
Ca	R1	0.081(2)	92(6)	90.0(0)	167(6)	0.075(3)	89(4)	90.0(0)	171(4)
	R2	0.094(2)	90.0(0)	0.0(0)	90.0(0)	0.099(2)	1(4)	90.0(0)	99(4)
	R3	0.097(2)	178(6)	90.0(0)	77(6)	0.101(2)	90.0(0)	180.0(0)	90.0(0)
O1	R1	0.095(6)	118(11)	90.0(0)	142(11)	0.092(6)	108(10)	90.0(0)	152(10)
	R2	0.107(5)	90.0(0)	0.0(0)	90.0(0)	0.115(5)	90.0(0)	0.0(0)	90.0(0)
	R3	0.116(5)	28(11)	90.0(0)	128(11)	0.117(5)	162(10)	90.0(0)	62(10)
O2	R1	0.097(4)	81(22)	109(14)	161(14)	0.095(4)	79(15)	102(8)	168(7)
	R2	0.104(4)	28(11)	62(12)	100(24)	0.106(4)	24(10)	67(8)	94(16)
	R3	0.121(3)	64(8)	145(8)	74(7)	0.128(3)	69(7)	154(7)	79(5)
O3	R1	0.091(4)	91(6)	88(11)	169(6)	0.088(4)	88(7)	87(8)	171(7)
	R2	0.108(3)	83(17)	7(17)	89(11)	0.112(4)	78(--)	13(--)	89(36)
	R3	0.118(3)	173(17)	83(17)	79(6)	0.112(3)	167(--)	77(--)	81(9)
OH	R1	0.077(7)	98(7)	90.0(0)	162(7)	0.067(8)	92(7)	90.0(0)	168(7)
	R2	0.114(5)	8(7)	90.0(0)	108(7)	0.109(5)	2(7)	90.0(0)	102(7)
	R3	0.139(4)	90.0(0)	180.0(0)	90.0(0)	0.139(5)	90.0(0)	180.0(0)	90.0(0)

TABLE 9 (Cont.)

Edenville

RMS (Å) displacement	Angle (deg.) with respect to		
	X	Y	Z
.073(2)	23(33)	81(82)	121(9)
.075(2)	99(76)	9(79)	87(43)
.085(2)	111(8)	92(10)	149(8)
.057(7)	90.0(0)	180.0(0)	90.0(0)
.064(6)	7(8)	90.0(0)	108(8)
.092(5)	97(8)	90.0(0)	162(8)
.069(4)	174(7)	90.0(0)	73(7)
.070(4)	90.0(0)	0.0(0)	90.0(1)
.091(3)	96(7)	90.0(0)	163(7)
.099(3)	90.0(2)	180.0(3)	90.0(1)
.100(3)	11(10)	90.0(2)	111(10)
.110(3)	101(10)	90.0(0)	159(10)
.103(7)	103(12)	90.0(0)	157(12)
.112(6)	90.0(0)	0.0(0)	90.0(0)
.127(6)	167(12)	90.0(0)	67(12)
.099(5)	61(17)	98(15)	159(10)
.109(5)	47(16)	48(10)	81(20)
.129(4)	57(9)	137(9)	71(7)
.092(5)	81(20)	94(--)	176(--)
.094(5)	89(32)	4(--)	94(--)
.103(4)	171(20)	89(25)	89(20)
.082(8)	96(12)	90.0(0)	164(12)
.017(6)	6(12)	90.0(0)	106(12)
.117(6)	90.0(0)	180.0(0)	90.0(0)