

AM-91-472

A structural investigation of oxidation effects in air-heated grunerite

Michael W. Phillips, Robert K. Popp, Celia A. Clowe

For deposit: Tables 5 & 6

American Mineralogist, 76, 9-10, 1502-1509.

GRUNERITE (Natural)

Table of General Displacement Parameter Expressions - B's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)	Beqv
T(1)	0.44(1)	0.41(1)	0.50(1)	-0.03(1)	0.07(1)	-0.01(1)	0.454(6)
T(2)	0.42(1)	0.51(1)	0.52(1)	-0.10(1)	0.06(1)	0.02(1)	0.487(6)
M(1)	0.62(1)	0.54(1)	0.53(1)	0	0.146(8)	0	0.560(5)
M(2)	0.57(1)	0.43(1)	0.56(1)	0	0.120(9)	0	0.518(6)
M(3)	0.53(1)	0.43(1)	0.53(1)	0	0.06(1)	0	0.520(7)
M(4)	0.73(1)	0.97(1)	0.75(1)	0	0.262(8)	0	0.801(6)
O1	0.43(3)	0.70(3)	0.66(3)	-0.05(3)	0.07(3)	0.04(3)	0.60(2)
O2	0.51(3)	0.73(4)	0.80(4)	0.04(3)	0.06(3)	0.05(3)	0.69(2)
O3	0.83(5)	0.79(5)	0.89(6)	0	0.15(5)	0	0.84(3)
O4	0.90(4)	0.75(4)	0.86(4)	-0.27(3)	0.15(3)	0.09(3)	0.84(2)
O5	0.66(4)	1.17(4)	0.88(4)	-0.06(3)	0.10(3)	0.44(4)	0.91(2)
O6	0.62(4)	1.66(5)	0.78(4)	0.13(4)	0.01(3)	-0.53(4)	1.04(2)
O7	0.79(5)	0.48(5)	1.68(7)	0	0.31(5)	0	0.98(3)

The form of the anisotropic displacement parameter is:  
 $\exp[-0.25(h^2a^2B(1,1) + k^2b^2B(2,2) + l^2c^2B(3,3) + 2hkabB(1,2) + 2hlacB(1,3) + 2klbcB(2,3))]$  where a, b, and c are reciprocal lattice constants.

GRUNERITE (Natural)

Table of Refined Displacement Parameter Expressions - Beta's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)
T(1)	0.00124(3)	0.00030(1)	0.0046(1)	-0.00008(3)	0.0007(1)	-0.00005(6)
T(2)	0.00121(3)	0.00037(1)	0.0047(1)	-0.00028(3)	0.0006(1)	0.00012(6)
M(1)	0.00177(3)	0.00040(1)	0.00483(9)	0	0.00149(8)	0
M(2)	0.00161(3)	0.00032(1)	0.0051(1)	0	0.00122(9)	0
M(3)	0.00166(4)	0.00032(1)	0.0048(1)	0	0.0006(1)	0
M(4)	0.00209(3)	0.00072(1)	0.00682(9)	0	0.00268(9)	0
O1	0.00123(9)	0.00052(3)	0.0061(3)	-0.00015(9)	0.0007(3)	0.0002(2)
O2	0.00145(9)	0.00054(3)	0.0073(3)	0.00012(9)	0.0007(3)	0.0002(2)
O3	0.0024(2)	0.00059(4)	0.0081(5)	0	0.0015(5)	0
O4	0.0026(1)	0.00055(3)	0.0079(3)	-0.00078(9)	0.0015(3)	0.0005(2)
O5	0.0019(1)	0.00086(3)	0.0080(4)	-0.0002(1)	0.0010(3)	0.0023(2)
O6	0.0018(1)	0.00122(4)	0.0071(3)	0.0004(1)	0.0001(3)	-0.0028(2)
O7	0.0022(2)	0.00036(4)	0.0154(6)	0	0.0032(5)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:  
 $\exp[-(B(1,1)h^2 + B(2,2)k^2 + B(3,3)l^2 + B(1,2)hk + B(1,3)hl + B(2,3)kl)]$ .

GRUNERITE (Natural)

Table of General Displacement Parameter Expressions - U's

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
T(1)	0.0055(2)	0.0052(2)	0.0064(2)	-0.0004(1)	0.0009(1)	-0.0001(2)
T(2)	0.0054(2)	0.0064(2)	0.0065(2)	-0.0012(1)	0.0007(1)	0.0003(2)
M(1)	0.0079(1)	0.0069(1)	0.0067(1)	0	0.0018(1)	0
M(2)	0.0073(1)	0.0054(1)	0.0071(1)	0	0.0015(1)	0
M(3)	0.0074(2)	0.0054(2)	0.0067(2)	0	0.0007(2)	0
M(4)	0.0093(1)	0.0123(2)	0.0094(1)	0	0.0033(1)	0
O1	0.0055(4)	0.0089(4)	0.0084(4)	-0.0006(4)	0.0009(4)	0.0005(4)
O2	0.0065(4)	0.0092(5)	0.0101(5)	0.0005(4)	0.0008(4)	0.0006(4)
O3	0.0105(7)	0.0101(7)	0.0112(7)	0	0.0019(6)	0
O4	0.0114(5)	0.0095(5)	0.0110(5)	-0.0034(4)	0.0019(4)	0.0011(4)
O5	0.0083(5)	0.0148(5)	0.0111(5)	-0.0007(4)	0.0013(4)	0.0056(5)
O6	0.0079(5)	0.0210(6)	0.0099(5)	0.0016(5)	0.0001(4)	-0.0068(5)
O7	0.0100(7)	0.0061(6)	0.0213(8)	0	0.0039(6)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$\exp[-2\pi^2(h^2a^2U_{11} + k^2b^2U_{22} + l^2c^2U_{33} + 2hkaU_{12} + 2hlcU_{13} + 2klbcU_{23})]$  where a, b, and c are reciprocal lattice constants.

Table of Root-Mean-Square Amplitudes of Thermal Vibration in Angstroms.

Atom	Min.	Int' med.	Max.	Atom	Min.	Int' med.	Max.
Si1	0.070	0.075	0.081	Mg4	0.087	0.102	0.111
Si2	0.067	0.079	0.088	O1	0.073	0.090	0.097
Fe1	0.081	0.083	0.089	O2	0.079	0.096	0.103
Mg1	0.081	0.083	0.089	O3	0.100	0.102	0.107
Fe2	0.074	0.084	0.084	O4	0.081	0.104	0.121
Mg2	0.074	0.084	0.084	O5	0.084	0.091	0.139
Fe3	0.074	0.079	0.090	O6	0.081	0.089	0.158
Mg3	0.074	0.079	0.090	O7	0.078	0.098	0.146
Fe4	0.087	0.102	0.111				

GRUNERITE (30 minutes)

Table of General Displacement Parameter Expressions - B's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)	Beqv
T(1)	0.52(2)	0.47(2)	0.54(2)	-0.05(1)	0.08(1)	-0.01(1)	0.516(8)
T(2)	0.52(1)	0.55(1)	0.54(1)	-0.06(1)	0.08(1)	0.02(1)	0.542(8)
M(1)	0.68(1)	0.65(1)	0.58(1)	0	0.15(1)	0	0.632(7)
M(2)	0.60(1)	0.49(1)	0.65(1)	0	0.13(1)	0	0.580(7)
M(3)	0.66(2)	0.46(2)	0.58(2)	0	0.05(2)	0	0.576(9)
M(4)	0.81(1)	0.95(1)	0.76(1)	0	0.26(1)	0	0.825(7)
O1	0.57(4)	0.69(4)	0.74(4)	-0.03(4)	0.08(3)	-0.00(4)	0.68(2)
O2	0.56(4)	0.86(5)	0.90(4)	0.07(4)	0.11(4)	0.05(4)	0.78(2)
O3	1.08(7)	0.81(7)	1.06(7)	0	0.25(6)	0	0.98(4)
O4	1.08(5)	0.79(5)	1.05(5)	-0.37(4)	0.10(4)	0.10(4)	0.99(2)
O5	0.76(4)	1.19(5)	0.80(4)	-0.07(4)	0.12(4)	0.39(4)	0.93(2)
O6	0.76(5)	1.74(6)	0.82(5)	0.17(5)	0.03(4)	-0.46(5)	1.13(3)
O7	0.84(6)	0.44(6)	1.63(8)	0	0.30(6)	0	0.96(4)

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$$\exp[-0.25(a^2u^2 + b^2v^2 + c^2w^2) + 2hku + 2hkv + 2kvw + 2hkw + 2hvw + 2kuv] \text{ where } a, b, \text{ and } c \text{ are reciprocal lattice constants.}$$

GRUNERITE (30 minutes)

Table of Refined Displacement Parameter Expressions - Beta's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)
T(1)	0.00150(4)	0.00035(1)	0.0050(1)	-0.00014(4)	0.0008(1)	-0.00005(7)
T(2)	0.00149(4)	0.00041(1)	0.0050(1)	-0.00018(4)	0.0008(1)	0.00009(8)
M(1)	0.00195(4)	0.00048(1)	0.0053(1)	0	0.0016(1)	0
M(2)	0.00172(4)	0.00036(1)	0.0060(1)	0	0.0014(1)	0
M(3)	0.00190(5)	0.00034(1)	0.0053(2)	0	0.0005(2)	0
M(4)	0.00233(4)	0.00070(1)	0.0070(1)	0	0.0027(1)	0
O1	0.0016(1)	0.00052(3)	0.0068(4)	-0.0001(1)	0.0008(4)	-0.0000(2)
O2	0.0016(1)	0.00064(3)	0.0082(4)	0.0002(1)	0.0011(4)	0.0003(2)
O3	0.0031(2)	0.00060(5)	0.0098(6)	0	0.0025(6)	0
O4	0.0031(1)	0.00058(4)	0.0096(4)	-0.0011(1)	0.0011(4)	0.0005(2)
O5	0.0022(1)	0.00069(4)	0.0074(4)	-0.0002(1)	0.0012(4)	0.0020(2)
O6	0.0022(1)	0.00129(4)	0.0075(4)	0.0005(1)	0.0003(4)	-0.0024(2)
O7	0.0024(2)	0.00033(4)	0.0150(7)	0	0.0031(6)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$$\exp[-(B(1,1)h^2 + B(2,2)k^2 + B(3,3)l^2 + B(1,2)hk + B(1,3)hl + B(2,3)kl)].$$

GRUNERITE (30 minutes)

Table of General Displacement Parameter Expressions - U's

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
T(1)	0.0066(2)	0.0060(2)	0.0068(2)	-0.0006(2)	0.0010(2)	-0.0001(2)
T(2)	0.0066(2)	0.0070(2)	0.0069(2)	-0.0008(2)	0.0010(2)	0.0002(2)
M(1)	0.0086(2)	0.0082(2)	0.0073(2)	0	0.0019(1)	0
M(2)	0.0076(2)	0.0062(2)	0.0082(2)	0	0.0017(1)	0
M(3)	0.0084(2)	0.0058(2)	0.0073(2)	0	0.0007(2)	0
M(4)	0.0103(2)	0.0120(2)	0.0096(2)	0	0.0034(1)	0
O1	0.0072(5)	0.0088(5)	0.0094(5)	-0.0003(5)	0.0010(4)	-0.0000(5)
O2	0.0071(5)	0.0109(6)	0.0113(6)	0.0008(5)	0.0014(5)	0.0007(5)
O3	0.0136(9)	0.0103(9)	0.0135(9)	0	0.0031(7)	0
O4	0.0137(6)	0.0100(6)	0.0132(6)	-0.0047(5)	0.0013(5)	0.0012(5)
O5	0.0097(6)	0.0151(6)	0.0101(6)	-0.0009(5)	0.0015(5)	0.0049(6)
O6	0.0096(6)	0.0221(7)	0.0103(6)	0.0022(6)	0.0004(5)	-0.0059(6)
O7	0.0106(8)	0.0056(8)	0.021(1)	0	0.0038(8)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$\exp[-2\pi i^2(h^2a^2U(1,1) + k^2b^2U(2,2) + l^2c^2U(3,3) + 2hkabU(1,2) + 2hlacU(1,3) + 2klbcU(2,3))]$  where a, b, and c are reciprocal lattice constants.

Table of Root-Mean-Square Amplitudes of Thermal Vibration in Angstroms.

Atom	Min.	Int' med.	Max.	Atom	Min.	Int' med.	Max.
Si1	0.075	0.082	0.085	Mg4	0.091	0.105	0.110
Si2	0.077	0.082	0.089	O1	0.084	0.094	0.099
Fe1	0.085	0.090	0.093	O2	0.083	0.104	0.109
Mg1	0.085	0.090	0.093	O3	0.101	0.115	0.118
Fe2	0.079	0.087	0.091	O4	0.081	0.112	0.136
Mg2	0.079	0.087	0.091	O5	0.084	0.098	0.136
Fe3	0.076	0.083	0.096	O6	0.089	0.097	0.160
Mg3	0.076	0.083	0.096	O7	0.075	0.102	0.144
Fe4	0.091	0.105	0.110				

GRUNERITE (2 hours, crystal A)

Table of General Displacement Parameter Expressions - B's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)	Beqv
T(1)	0.72(4)	0.42(4)	0.65(4)	-0.03(4)	0.22(3)	0.07(4)	0.59(2)
T(2)	0.55(4)	0.51(4)	0.65(4)	-0.09(4)	0.12(3)	-0.02(4)	0.57(2)
M(1)	0.89(3)	0.83(3)	0.62(3)	0	0.23(3)	0	0.77(2)
M(2)	0.67(4)	0.39(3)	0.73(3)	0	0.14(3)	0	0.60(2)
M(3)	0.72(5)	0.38(4)	0.66(5)	0	0.09(4)	0	0.59(2)
M(4)	1.05(4)	0.83(4)	0.76(3)	0	0.32(3)	0	0.86(2)
O1	0.8(1)	0.6(1)	1.0(1)	0.0(1)	0.39(9)	0.1(1)	0.75(6)
O2	0.6(1)	0.9(1)	0.9(1)	0.1(1)	-0.0(1)	0.1(1)	0.83(6)
O3	1.2(2)	0.7(2)	1.3(2)	0	0.2(2)	0	1.1(1)
O4	1.3(1)	0.9(1)	1.1(1)	-0.5(1)	0.2(1)	0.2(1)	1.14(7)
O5	0.9(1)	1.1(1)	0.8(1)	0.1(1)	0.1(1)	0.5(1)	0.97(6)
O6	0.9(1)	1.6(1)	1.0(1)	0.2(1)	0.1(1)	-0.5(1)	1.19(7)
O7	0.7(2)	0.6(2)	1.8(2)	0	0.5(1)	0	0.99(9)

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$\exp[-0.25(h^2a^2B(1,1) + k^2b^2B(2,2) + l^2c^2B(3,3) + 2hkabB(1,2) + 2hlacB(1,3) + 2klbcB(2,3))]$  where a, b, and c are reciprocal lattice constants.

GRUNERITE (2 hours, crystal A)

Table of Refined Displacement Parameter Expressions - Beta's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)
T(1)	0.0021(1)	0.00031(3)	0.0060(4)	-0.0001(1)	0.0023(3)	0.0003(2)
T(2)	0.0016(1)	0.00038(3)	0.0060(3)	-0.0003(1)	0.0012(3)	-0.0001(2)
M(1)	0.0026(1)	0.00062(3)	0.0057(3)	0	0.0024(3)	0
M(2)	0.0019(1)	0.00029(3)	0.0067(3)	0	0.0014(3)	0
M(3)	0.0021(1)	0.00028(3)	0.0061(4)	0	0.0009(4)	0
M(4)	0.0030(1)	0.00062(3)	0.0070(3)	0	0.0033(3)	0
O1	0.0022(3)	0.00045(8)	0.009(1)	0.0001(3)	0.0040(9)	0.0005(6)
O2	0.0017(3)	0.00065(9)	0.009(1)	0.0002(3)	-0.000(1)	0.0004(6)
O3	0.0034(6)	0.0005(1)	0.012(2)	0	0.002(2)	0
O4	0.0039(4)	0.00067(9)	0.011(1)	-0.0015(3)	0.002(1)	0.0008(6)
O5	0.0025(4)	0.00085(9)	0.008(1)	0.0002(3)	0.001(1)	0.0025(6)
O6	0.0026(4)	0.0012(1)	0.010(1)	0.0005(4)	0.002(1)	-0.0028(6)
O7	0.0021(5)	0.0004(1)	0.016(2)	0	0.005(2)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$\exp[-(B(1,1)h^2 + B(2,2)k^2 + B(3,3)l^2 + B(1,2)hk + B(1,3)hl + B(2,3)kl)]$ .

GRUNERITE (2 hours, crystal A)

Table of General Displacement Parameter Expressions - U's

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
T(1)	0.0091(5)	0.0053(5)	0.0083(5)	-0.0003(5)	0.0028(4)	0.0008(5)
T(2)	0.0070(5)	0.0065(5)	0.0082(5)	-0.0011(5)	0.0015(4)	-0.0002(5)
M(1)	0.0112(4)	0.0105(4)	0.0078(4)	0	0.0030(4)	0
M(2)	0.0084(4)	0.0050(4)	0.0092(4)	0	0.0018(4)	0
M(3)	0.0091(6)	0.0048(6)	0.0083(6)	0	0.0012(5)	0
M(4)	0.0133(5)	0.0106(5)	0.0096(4)	0	0.0040(4)	0
O1	0.010(1)	0.008(1)	0.013(1)	0.000(1)	0.005(1)	0.001(1)
O2	0.008(1)	0.011(2)	0.012(1)	0.001(1)	-0.000(1)	0.001(1)
O3	0.015(2)	0.009(2)	0.016(2)	0	0.003(2)	0
O4	0.017(2)	0.011(2)	0.015(2)	-0.006(1)	0.002(1)	0.002(1)
O5	0.011(2)	0.014(2)	0.011(1)	0.001(1)	0.001(1)	0.006(1)
O6	0.011(2)	0.021(2)	0.013(2)	0.002(2)	0.002(1)	-0.007(2)
O7	0.009(2)	0.007(2)	0.023(3)	0	0.007(2)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$\exp[-2\pi i^2(h^2a^2U(1,1) + k^2b^2U(2,2) + l^2c^2U(3,3) + 2hkaU(1,2) + 2hlcU(1,3) + 2klbcU(2,3))]$  where a, b, and c are reciprocal lattice constants.

Table of Root-Mean-Square Amplitudes of Thermal Vibration in Angstroms.

Atom	Min.	Int'med.	Max.	Atom	Min.	Int'med.	Max.
Si1	0.070	0.088	0.098	Mg4	0.092	0.103	0.117
Si2	0.075	0.089	0.091	O1	0.083	0.089	0.118
Fe1	0.085	0.103	0.107	O2	0.081	0.106	0.117
Mg1	0.085	0.103	0.107	O3	0.096	0.122	0.128
Fe2	0.070	0.092	0.096	O4	0.081	0.120	0.150
Mg2	0.070	0.092	0.096	O5	0.078	0.108	0.138
Fe3	0.069	0.090	0.098	O6	0.092	0.106	0.160
Mg3	0.069	0.090	0.098	O7	0.084	0.087	0.151
Fe4	0.092	0.103	0.117				

GRUNERITE (2 hours, crystal B)

Table of General Displacement Parameter Expressions - B's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)	Beqv
T(1)	1.30(4)	1.20(4)	1.30(4)	-0.04(3)	0.36(3)	0.02(4)	1.25(2)
T(2)	1.22(3)	1.35(4)	1.23(3)	-0.12(3)	0.25(3)	0.04(4)	1.27(2)
M(1)	1.39(3)	1.82(4)	1.26(3)	0	0.39(2)	0	1.47(2)
M(2)	1.36(3)	1.23(3)	1.48(3)	0	0.37(3)	0	1.35(2)
M(3)	1.38(4)	1.25(4)	1.31(4)	0	0.22(4)	0	1.32(2)
M(4)	1.55(3)	1.73(4)	1.52(3)	0	0.51(3)	0	1.57(2)
O1	1.29(9)	1.5(1)	1.6(1)	-0.05(9)	0.40(8)	-0.1(1)	1.42(5)
O2	1.4(1)	1.9(1)	1.7(1)	0.1(1)	0.37(8)	0.1(1)	1.66(6)
O3	2.0(2)	1.6(2)	2.0(2)	0	0.6(1)	0	1.82(9)
O4	1.9(1)	1.7(1)	2.0(1)	-0.5(1)	0.3(1)	0.3(1)	1.92(6)
O5	1.4(1)	2.1(1)	1.5(1)	-0.0(1)	0.18(9)	0.4(1)	1.68(6)
O6	1.6(1)	2.4(1)	1.7(1)	0.1(1)	0.33(9)	-0.4(1)	1.91(6)
O7	1.7(2)	1.1(1)	2.3(2)	0	0.5(1)	0	1.69(8)

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$$\exp[-0.25(h^2a^2B(1,1) + k^2b^2B(2,2) + l^2c^2B(3,3) + 2hkabB(1,2) + 2hlacB(1,3) + 2klbcB(2,3))] \text{ where } a, b, \text{ and } c \text{ are reciprocal lattice constants.}$$

GRUNERITE (2 hours, crystal B)

Table of Refined Displacement Parameter Expressions - Beta's

Name	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)
T(1)	0.0037(1)	0.00090(3)	0.0120(3)	-0.0001(1)	0.0037(3)	0.0001(2)
T(2)	0.0035(1)	0.00102(3)	0.0114(3)	-0.0004(1)	0.0026(3)	0.0002(2)
M(1)	0.00401(8)	0.00136(3)	0.0116(3)	0	0.0041(2)	0
M(2)	0.00393(9)	0.00093(3)	0.0136(3)	0	0.0038(3)	0
M(3)	0.0040(1)	0.00094(3)	0.0121(4)	0	0.0022(4)	0
M(4)	0.00448(9)	0.00130(3)	0.0141(3)	0	0.0053(3)	0
O1	0.0037(3)	0.00109(8)	0.0145(9)	-0.0001(3)	0.0041(8)	-0.0003(5)
O2	0.0041(3)	0.00145(9)	0.0153(9)	0.0002(3)	0.0038(9)	0.0005(6)
O3	0.0058(5)	0.0012(1)	0.018(2)	0	0.006(1)	0
O4	0.0055(3)	0.00130(9)	0.019(1)	-0.0016(3)	0.003(1)	0.0015(6)
O5	0.0041(3)	0.00156(9)	0.014(1)	-0.0001(3)	0.0019(9)	0.0022(5)
O6	0.0047(3)	0.0018(1)	0.015(1)	0.0004(3)	0.0034(9)	-0.0023(6)
O7	0.0048(4)	0.0008(1)	0.022(2)	0	0.005(1)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$$\exp[-(B(1,1)h^2 + B(2,2)k^2 + B(3,3)l^2 + B(1,2)hk + B(1,3)hl + B(2,3)kl)].$$



GRUNERITE (2 hours, crystal B)

Table of General Displacement Parameter Expressions - U's

Name	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
T(1)	0.0164(5)	0.0153(5)	0.0164(4)	-0.0005(4)	0.0045(4)	0.0003(4)
T(2)	0.0154(4)	0.0172(5)	0.0156(4)	-0.0016(4)	0.0032(4)	0.0005(5)
M(1)	0.0176(4)	0.0230(5)	0.0159(4)	0	0.0050(3)	0
M(2)	0.0173(4)	0.0156(4)	0.0187(4)	0	0.0047(3)	0
M(3)	0.0175(6)	0.0159(6)	0.0166(5)	0	0.0027(5)	0
M(4)	0.0197(4)	0.0219(5)	0.0193(4)	0	0.0064(3)	0
O1	0.016(1)	0.018(1)	0.020(1)	-0.001(1)	0.005(1)	-0.001(1)
O2	0.018(1)	0.024(2)	0.021(1)	0.001(1)	0.005(1)	0.001(1)
O3	0.025(2)	0.020(2)	0.025(2)	0	0.008(2)	0
O4	0.024(1)	0.022(1)	0.026(1)	-0.007(1)	0.003(1)	0.004(1)
O5	0.018(1)	0.026(2)	0.019(1)	-0.001(1)	0.002(1)	0.005(1)
O6	0.021(1)	0.031(2)	0.021(1)	0.002(1)	0.004(1)	-0.006(1)
O7	0.021(2)	0.014(2)	0.030(2)	0	0.006(2)	0

The form of the anisotropic displacement parameter is:

$\exp[-2\pi i^2(h^2a^2U(1,1) + k^2b^2U(2,2) + l^2c^2U(3,3) + 2hkabU(1,2) + 2hlacU(1,3) + 2klbcU(2,3))]$  where a, b, and c are reciprocal lattice constants.

Table of Root-Mean-Square Amplitudes of Thermal Vibration in Angstroms.

Atom	Min.	Int./med.	Max.	Atom	Min.	Int./med.	Max.
Si1	0.120	0.126	0.132	Mg4	0.128	0.147	0.147
Si2	0.120	0.125	0.135	O1	0.125	0.134	0.143
Fe1	0.121	0.135	0.152	O2	0.132	0.143	0.158
Mg1	0.121	0.135	0.152	O3	0.143	0.148	0.165
Fe2	0.125	0.128	0.138	O4	0.125	0.155	0.183
Mg2	0.125	0.128	0.138	O5	0.126	0.135	0.172
Fe3	0.126	0.128	0.135	O6	0.134	0.144	0.184
Mg3	0.126	0.128	0.135	O7	0.119	0.143	0.173
Fe4	0.128	0.147	0.147				

Table 6. Structure Factors  
A. Grunerite (Natural)

Values of 10×Fobs and 10×Fcalc

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
1	1	-8	594	605	15	8	8	-7	247	259	15	7	7	-6	162	144	16	2	18	-5	376	364	11
1	3	-8	340	332	14	9	5	-7	796	802	14	7	9	-6	329	323	15	2	20	-5	129	128	21
1	9	-8	175	147	20	9	7	-7	334	344	14	7	11	-6	128	125	20	2	24	-5	239	240	18
2	0	-8	148	109	21	10	0	-7	227	245	17	7	13	-6	393	398	12	3	1	-5	183	174	13
2	4	-8	311	315	15	10	2	-7	366	358	13	7	15	-6	390	381	12	3	3	-5	653	654	15
2	8	-8	158	182	22	10	6	-7	362	365	21	8	0	-6	432	422	11	3	5	-5	1632	1622	21
3	1	-8	163	147	18	10	8	-7	271	276	16	8	2	-6	147	144	19	3	7	-5	1001	980	16
4	0	-8	1424	1425	29	11	5	-7	491	490	13	8	4	-6	444	441	11	3	9	-5	518	517	9
4	4	-8	322	304	14	1	1	-6	603	602	10	8	10	-6	135	121	22	3	13	-5	234	214	11
4	10	-8	257	248	15	1	7	-6	164	168	16	8	12	-6	545	555	11	3	15	-5	347	333	14
5	1	-8	420	405	14	1	9	-6	288	297	16	8	14	-6	158	173	25	3	17	-5	1303	1302	19
6	0	-8	497	502	12	1	11	-6	612	597	12	8	16	-6	183	162	16	3	19	-5	325	315	12
6	2	-8	159	139	19	1	13	-6	233	238	14	9	1	-6	929	929	17	3	21	-5	172	149	21
6	4	-8	465	454	13	1	15	-6	294	298	14	9	3	-6	521	529	11	3	23	-5	200	198	16
7	1	-8	755	741	15	1	21	-6	210	205	34	9	9	-6	343	334	12	4	0	-5	180	182	13
7	3	-8	351	348	14	2	0	-6	2087	2096	36	9	11	-6	984	995	35	4	2	-5	356	358	9
7	5	-8	150	135	21	2	2	-6	168	178	16	9	13	-6	327	319	13	4	6	-5	1456	1448	16
8	0	-8	898	881	37	2	6	-6	145	160	18	9	15	-6	215	215	16	4	8	-5	305	306	10
8	2	-8	194	196	20	2	8	-6	363	363	11	10	0	-6	1080	1065	25	4	10	-5	413	424	10
1	3	-7	432	415	15	2	10	-6	290	291	21	10	6	-6	254	264	14	4	12	-5	234	231	14
1	5	-7	1041	1057	23	2	12	-6	1797	1809	19	10	10	-6	291	290	13	4	14	-5	286	286	12
1	7	-7	559	554	15	2	14	-6	279	284	13	10	12	-6	621	642	12	4	16	-5	582	573	13
1	9	-7	256	275	24	2	18	-6	204	209	32	10	14	-6	224	228	18	4	18	-5	522	521	12
1	11	-7	172	189	19	3	1	-6	717	716	12	11	1	-6	146	145	19	4	20	-5	252	267	31
1	15	-7	182	180	22	3	3	-6	219	214	13	11	3	-6	208	201	15	4	22	-5	422	434	12
2	0	-7	137	148	21	3	9	-6	268	259	14	11	5	-6	274	277	20	5	1	-5	185	186	12
2	6	-7	1178	1178	22	3	11	-6	1100	1093	19	11	11	-6	634	628	12	5	5	-5	653	660	11
2	8	-7	325	326	14	4	0	-6	797	774	21	12	0	-6	1321	1299	44	5	9	-5	248	252	12
2	10	-7	142	160	22	4	2	-6	318	317	11	12	2	-6	273	268	14	5	11	-5	152	141	15
2	16	-7	256	232	15	4	4	-6	464	462	10	12	6	-6	148	155	20	5	17	-5	747	761	30
3	1	-7	146	159	19	4	6	-6	296	292	12	13	1	-6	517	520	13	5	19	-5	367	381	12
3	3	-7	244	233	14	4	8	-6	670	676	22	1	1	-5	254	251	15	5	21	-5	310	315	17
3	7	-7	289	297	14	4	14	-6	365	374	12	1	3	-5	337	336	10	5	23	-5	161	157	20
3	9	-7	361	352	14	4	16	-6	661	670	17	1	5	-5	169	157	13	6	0	-5	312	310	10
3	17	-7	229	249	24	4	18	-6	204	201	18	1	7	-5	219	211	11	6	4	-5	149	151	24
4	6	-7	591	586	11	4	20	-6	221	224	16	1	9	-5	404	393	21	6	6	-5	1979	1991	16
4	8	-7	217	225	16	5	1	-6	514	524	11	1	13	-5	176	171	14	6	8	-5	510	504	10
4	12	-7	152	197	22	5	9	-6	388	379	11	1	15	-5	491	481	10	6	12	-5	260	258	12
4	16	-7	201	174	17	5	11	-6	985	993	21	1	17	-5	151	153	16	6	14	-5	140	135	17
5	3	-7	349	344	12	5	13	-6	267	271	14	1	19	-5	508	496	11	6	16	-5	297	319	13
5	5	-7	841	842	37	5	17	-6	234	205	14	1	21	-5	466	478	12	6	18	-5	1048	1048	17
5	7	-7	553	543	11	6	0	-6	1251	1249	18	1	23	-5	149	135	19	6	20	-5	291	302	14
5	9	-7	234	230	26	6	2	-6	248	222	12	2	0	-5	184	180	12	7	3	-5	200	211	13
5	15	-7	173	192	20	6	6	-6	311	291	19	2	2	-5	165	164	12	7	5	-5	1092	1087	26
6	2	-7	227	223	15	6	8	-6	167	155	16	2	6	-5	740	742	12	7	7	-5	535	546	12
6	6	-7	429	435	12	6	12	-6	839	854	15	2	8	-5	248	247	11	7	11	-5	228	208	13
6	10	-7	356	353	12	6	14	-6	243	238	14	2	10	-5	350	349	15	7	17	-5	927	941	16
7	5	-7	439	432	25	6	18	-6	254	248	20	2	12	-5	188	210	14	7	21	-5	239	226	15
8	6	-7	1422	1449	23	7	3	-6	155	138	16	2	16	-5	339	338	12	8	0	-5	321	310	11

Table 6. continued  
A. Grunerite (Natural)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
8	2	-5	558	547	10	3	7	-4	141	151	13	8	6	-4	560	552	9	1	21	-3	136	129	20
8	8	-5	318	306	11	3	11	-4	816	801	13	8	10	-4	246	240	15	1	23	-3	291	280	12
8	10	-5	644	637	17	3	15	-4	167	170	14	8	12	-4	1257	1286	18	1	25	-3	137	119	20
8	12	-5	267	260	13	3	23	-4	547	547	11	8	14	-4	333	347	11	2	0	-3	475	470	8
8	14	-5	268	259	13	4	0	-4	2169	2182	14	8	16	-4	160	154	17	2	2	-3	698	681	12
8	16	-5	149	163	19	4	2	-4	188	174	11	8	18	-4	441	441	12	2	6	-3	2439	2410	27
9	3	-5	239	228	21	4	4	-4	422	434	8	8	22	-4	526	540	12	2	8	-3	703	695	13
9	5	-5	462	458	12	4	6	-4	226	218	18	9	1	-4	315	324	24	2	10	-3	830	849	13
9	17	-5	395	413	13	4	8	-4	291	281	9	9	3	-4	181	174	12	2	12	-3	316	328	9
9	19	-5	146	138	23	4	10	-4	275	272	9	9	7	-4	385	387	10	2	16	-3	592	574	10
10	2	-5	220	195	13	4	12	-4	1381	1356	16	9	9	-4	388	396	11	2	18	-3	1095	1077	17
10	6	-5	1259	1252	30	4	14	-4	269	272	11	9	11	-4	406	416	11	2	20	-3	302	297	11
10	8	-5	139	133	18	4	18	-4	249	236	12	9	13	-4	482	479	11	2	22	-3	287	271	12
10	12	-5	133	133	20	4	20	-4	261	265	13	9	15	-4	546	544	15	2	24	-3	264	263	24
10	14	-5	161	162	18	4	22	-4	401	394	12	9	21	-4	234	216	16	2	26	-3	255	260	15
10	16	-5	315	326	19	4	24	-4	610	624	12	10	0	-4	1192	1199	18	3	1	-3	305	312	7
10	18	-5	678	672	13	5	3	-4	376	375	8	10	2	-4	323	332	11	3	3	-3	256	259	11
11	5	-5	327	346	13	5	5	-4	359	367	8	10	12	-4	874	901	18	3	5	-3	796	781	22
11	9	-5	156	144	25	5	7	-4	192	210	13	10	14	-4	305	309	13	3	7	-3	181	195	12
11	13	-5	172	154	16	5	11	-4	750	757	13	11	1	-4	479	478	10	3	9	-3	491	495	8
12	2	-5	195	197	15	5	15	-4	166	190	16	11	7	-4	293	299	13	3	13	-3	302	297	9
12	6	-5	625	625	11	5	17	-4	135	115	17	11	9	-4	305	304	12	3	15	-3	399	402	11
12	8	-5	325	318	12	5	21	-4	422	411	12	11	11	-4	805	817	27	3	17	-3	615	616	10
12	10	-5	295	275	13	5	23	-4	331	332	13	11	13	-4	276	270	14	3	19	-3	731	724	12
13	3	-5	353	358	13	5	25	-4	442	436	21	11	17	-4	259	273	14	3	21	-3	638	619	21
13	5	-5	983	1003	18	6	0	-4	1666	1653	29	12	0	-4	357	351	12	3	25	-3	135	144	21
13	7	-5	585	591	13	6	2	-4	266	257	9	12	4	-4	243	232	19	3	27	-3	336	327	16
13	9	-5	276	259	21	6	4	-4	372	352	9	12	8	-4	442	454	12	4	0	-3	479	448	9
14	0	-5	459	430	13	6	8	-4	573	571	10	12	10	-4	207	208	16	4	2	-3	156	162	10
1	1	-4	1190	1206	14	6	10	-4	319	322	10	12	12	-4	142	128	19	4	4	-3	329	321	7
1	3	-4	572	576	10	6	12	-4	660	676	11	12	16	-4	520	522	13	4	6	-3	1877	1910	31
1	5	-4	195	212	11	6	14	-4	398	408	10	13	1	-4	152	149	17	4	8	-3	599	604	11
1	7	-4	167	174	11	6	16	-4	661	666	14	13	3	-4	167	150	16	4	12	-3	369	374	8
1	9	-4	214	222	11	6	20	-4	153	146	20	13	5	-4	281	282	13	4	14	-3	180	171	12
1	11	-4	1211	1196	15	6	22	-4	472	495	19	13	9	-4	218	220	19	4	16	-3	278	272	10
1	23	-4	831	833	14	6	24	-4	259	267	30	13	11	-4	415	422	26	4	18	-3	863	848	14
2	0	-4	433	439	8	7	1	-4	1558	1559	15	14	0	-4	1125	1144	26	4	20	-3	305	295	12
2	2	-4	425	440	13	7	3	-4	719	736	13	14	2	-4	160	173	19	4	24	-3	243	231	17
2	4	-4	1222	1231	48	7	5	-4	145	142	21	14	8	-4	314	308	17	5	3	-3	297	286	8
2	6	-4	343	340	12	7	9	-4	594	589	11	1	1	-3	349	255	7	5	5	-3	1247	1238	22
2	8	-4	236	223	10	7	11	-4	1747	1756	17	1	3	-3	1251	1234	11	5	7	-3	639	639	11
2	14	-4	311	325	10	7	13	-4	515	531	10	1	5	-3	2706	2672	17	5	13	-3	335	331	10
2	16	-4	466	473	10	7	15	-4	392	279	15	1	7	-3	1518	1520	12	5	15	-3	333	325	11
2	18	-4	324	321	13	7	17	-4	313	179	12	1	9	-3	784	791	12	5	17	-3	1074	1071	17
2	20	-4	475	481	21	7	21	-4	158	163	19	1	11	-3	380	398	8	5	19	-3	285	277	15
2	22	-4	306	315	13	7	23	-4	1154	1159	19	1	13	-3	175	171	11	5	23	-3	273	276	13
2	24	-4	456	464	12	8	0	-4	1404	1411	47	1	15	-3	503	507	9	6	0	-3	211	192	14
3	1	-4	842	844	15	8	2	-4	286	286	10	1	17	-3	1968	1950	19	6	2	-3	620	608	11
3	3	-4	247	258	9	8	4	-4	551	545	13	1	19	-3	204	191	12	6	6	-3	115	98	14

Table 6. continued  
A. Grunerite (Natural)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

Page 3

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
6	8	-3	228	239	10	11	17	-3	1096	1137	19	4	2	-2	661	642	17	8	6	-2	156	152	12
6	10	-3	660	656	10	12	0	-3	514	519	17	4	4	-2	1323	1307	11	8	8	-2	140	150	21
6	12	-3	252	252	15	12	6	-3	1068	1063	17	4	6	-2	384	376	7	8	12	-2	890	900	15
6	14	-3	499	485	9	12	12	-3	465	467	24	4	8	-2	639	637	11	8	14	-2	269	272	11
6	16	-3	372	372	11	12	16	-3	378	381	13	4	10	-2	343	334	7	8	16	-2	153	138	20
6	18	-3	346	346	11	13	3	-3	180	191	17	4	12	-2	1310	1300	14	8	22	-2	255	261	14
6	20	-3	157	143	16	13	7	-3	265	272	14	4	14	-2	613	620	23	8	24	-2	247	242	15
6	22	-3	563	560	11	13	9	-3	292	279	13	4	16	-2	760	747	13	9	1	-2	1176	1176	17
6	24	-3	192	188	16	13	15	-3	171	162	20	4	18	-2	249	245	11	9	3	-2	751	757	13
6	26	-3	249	234	16	14	0	-3	219	221	14	4	20	-2	449	444	10	9	5	-2	428	424	13
7	1	-3	145	161	14	14	4	-3	145	120	18	4	22	-2	635	649	11	9	7	-2	118	130	16
7	3	-3	344	346	9	14	6	-3	532	542	12	4	28	-2	377	377	17	9	9	-2	264	253	10
7	5	-3	697	678	12	14	8	-3	234	235	15	5	1	-2	1743	1752	33	9	11	-2	974	974	15
7	7	-3	130	141	14	14	10	-3	193	193	18	5	3	-2	439	459	8	9	13	-2	189	193	15
7	9	-3	158	179	12	15	3	-3	270	269	16	5	5	-2	184	187	10	9	15	-2	137	122	20
7	11	-3	153	151	13	15	5	-3	651	631	35	5	7	-2	184	181	9	9	19	-2	353	357	13
7	17	-3	576	591	11	1	1	-2	1105	1110	9	5	9	-2	913	894	31	9	21	-2	196	184	30
7	19	-3	227	231	13	1	3	-2	149	154	10	5	11	-2	2332	2340	14	9	23	-2	739	733	18
8	2	-3	230	248	10	1	11	-2	1281	1287	13	5	13	-2	776	791	17	10	0	-2	500	485	9
8	6	-3	2225	2265	15	1	15	-2	193	183	11	5	15	-2	265	274	20	10	2	-2	141	119	14
8	8	-3	363	358	9	1	21	-2	225	216	12	5	17	-2	325	320	10	10	4	-2	726	713	24
8	12	-3	118	135	18	1	23	-2	671	679	28	5	23	-2	1263	1260	19	10	6	-2	245	227	11
8	14	-3	386	385	10	1	25	-2	198	174	16	6	0	-2	2340	2362	12	10	10	-2	281	288	22
8	16	-3	452	465	17	1	27	-2	263	260	15	6	2	-2	379	385	7	10	12	-2	525	532	13
8	18	-3	1338	1354	19	2	0	-2	3329	3320	9	6	4	-2	306	305	12	10	14	-2	203	213	16
8	20	-3	209	207	16	2	2	-2	349	352	6	6	6	-2	794	797	13	10	16	-2	400	395	11
8	24	-3	217	209	17	2	4	-2	631	583	20	6	8	-2	361	371	8	10	18	-2	264	271	14
9	5	-3	1006	1019	17	2	6	-2	214	219	7	6	10	-2	262	270	9	10	20	-2	277	291	19
9	7	-3	347	340	10	2	8	-2	864	848	19	6	12	-2	929	922	23	10	22	-2	484	478	36
9	15	-3	236	236	17	2	10	-2	481	481	8	6	14	-2	427	421	9	11	1	-2	428	419	10
9	17	-3	887	894	15	2	12	-2	2995	2965	15	6	16	-2	387	386	10	11	5	-2	364	348	11
9	19	-3	309	317	13	2	14	-2	442	443	10	6	18	-2	470	470	10	11	7	-2	259	261	12
9	21	-3	346	343	32	2	16	-2	170	170	12	6	20	-2	172	166	15	11	11	-2	770	761	13
10	0	-3	190	197	13	2	18	-2	292	297	17	6	22	-2	435	443	11	11	17	-2	165	155	18
10	2	-3	475	468	10	2	22	-2	694	699	12	6	24	-2	424	444	12	12	0	-2	2074	2067	19
10	4	-3	186	183	13	2	24	-2	963	966	17	7	1	-2	316	321	8	12	2	-2	323	316	12
10	6	-3	833	826	19	2	26	-2	154	136	18	7	3	-2	681	688	13	12	4	-2	308	306	13
10	8	-3	509	521	13	3	1	-2	1715	1684	10	7	5	-2	392	401	8	12	6	-2	234	224	13
10	10	-3	551	543	10	3	3	-2	729	672	14	7	7	-2	115	102	14	12	10	-2	144	143	19
10	12	-3	143	177	18	3	5	-2	520	488	8	7	9	-2	329	320	10	12	12	-2	1286	1267	20
10	14	-3	261	266	12	3	7	-2	387	367	7	7	11	-2	313	304	9	12	14	-2	417	433	12
10	16	-3	372	373	13	3	9	-2	217	225	8	7	13	-2	460	458	9	13	1	-2	507	504	14
10	18	-3	288	302	14	3	11	-2	1399	1372	13	7	15	-2	537	531	9	13	3	-2	231	231	15
10	20	-3	337	333	26	3	13	-2	520	533	9	7	19	-2	165	173	17	13	7	-2	248	235	14
11	3	-3	419	406	10	3	15	-2	451	444	10	7	21	-2	498	492	16	13	11	-2	1001	998	29
11	5	-3	1205	1207	18	3	23	-2	917	909	23	7	25	-2	482	488	13	13	13	-2	223	209	15
11	7	-3	652	649	24	3	25	-2	434	424	11	8	0	-2	1077	1050	27	13	15	-2	159	169	21
11	9	-3	213	208	28	3	27	-2	312	320	13	8	2	-2	283	294	9	14	0	-2	453	438	21
11	15	-3	256	281	15	4	0	-2	2334	2308	12	8	4	-2	290	292	20	14	2	-2	147	157	19

Table 6. continued  
A. Grunerite (Natural)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

Page 4

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
14	4	-2	399	405	14	4	16	-1	612	607	10	9	5	-1	1148	1110	16	0	24	0	1392	1390	19
14	6	-2	147	152	22	4	18	-1	255	251	11	9	7	-1	634	623	13	1	1	0	1286	1271	20
14	8	-2	380	384	13	4	20	-1	215	202	12	9	9	-1	329	325	10	1	3	0	122	135	18
14	12	-2	221	210	18	4	22	-1	573	573	11	9	15	-1	145	157	18	1	5	0	401	402	10
15	1	-2	429	435	14	4	24	-1	268	253	29	9	17	-1	839	838	14	1	7	0	261	243	5
15	3	-2	321	329	15	4	26	-1	399	398	12	10	0	-1	370	353	10	1	9	0	621	582	16
1	1	-1	596	602	15	4	28	-1	560	551	13	10	4	-1	185	179	13	1	11	0	2194	2184	11
1	3	-1	923	938	32	5	1	-1	236	244	7	10	6	-1	1129	1110	24	1	15	0	179	173	10
1	7	-1	607	617	10	5	3	-1	500	478	9	10	10	-1	162	162	18	1	17	0	285	293	12
1	9	-1	915	905	10	5	5	-1	1449	1424	11	10	12	-1	316	319	11	1	21	0	265	262	11
1	11	-1	405	399	7	5	7	-1	234	238	12	10	14	-1	176	175	16	1	23	0	962	949	19
1	13	-1	192	202	11	5	11	-1	167	172	11	10	16	-1	377	376	12	1	25	0	482	472	11
1	15	-1	602	612	10	5	15	-1	127	136	14	10	18	-1	675	678	20	1	27	0	383	380	14
1	17	-1	288	268	9	5	17	-1	1141	1130	16	11	3	-1	181	170	15	1	29	0	211	205	17
1	19	-1	669	654	11	5	19	-1	401	387	14	11	7	-1	308	309	12	2	0	0	1081	1048	7
1	21	-1	704	688	14	5	21	-1	215	219	14	11	9	-1	256	264	30	2	2	0	753	750	10
1	27	-1	519	536	12	5	27	-1	225	243	17	11	15	-1	244	245	15	2	4	0	1509	1507	11
2	0	-1	371	371	6	6	0	-1	465	453	8	11	19	-1	424	432	13	2	6	0	579	579	9
2	2	-1	361	359	20	6	2	-1	236	227	9	12	0	-1	289	288	12	2	8	0	504	534	9
2	4	-1	232	244	6	6	4	-1	127	118	20	12	4	-1	181	182	16	2	10	0	241	236	7
2	6	-1	1147	1222	9	6	6	-1	3447	3497	13	12	6	-1	791	793	14	2	12	0	676	687	11
2	8	-1	577	580	9	6	8	-1	692	710	12	12	8	-1	389	402	12	2	14	0	571	576	10
2	10	-1	173	165	8	6	10	-1	116	99	13	12	10	-1	189	194	17	2	16	0	770	750	13
2	12	-1	312	316	7	6	12	-1	376	382	12	12	12	-1	207	183	15	2	18	0	354	352	15
2	14	-1	348	369	8	6	14	-1	209	186	16	12	18	-1	288	296	16	2	20	0	476	476	9
2	16	-1	276	261	20	6	16	-1	625	621	11	13	3	-1	400	389	25	2	22	0	533	535	10
2	18	-1	776	768	26	6	18	-1	1618	1612	17	13	5	-1	1062	1051	18	2	24	0	213	224	14
2	20	-1	212	208	12	6	20	-1	438	435	11	13	7	-1	593	592	11	2	28	0	382	372	12
2	24	-1	307	300	12	6	24	-1	194	193	18	13	9	-1	258	246	14	3	1	0	2273	2291	8
2	28	-1	287	308	15	6	28	-1	189	194	16	13	13	-1	149	140	20	3	3	0	1076	1091	9
3	1	-1	245	249	6	7	5	-1	1535	1554	14	13	15	-1	248	266	18	3	5	0	513	494	9
3	3	-1	851	866	9	7	7	-1	528	537	10	14	0	-1	415	412	19	3	7	0	483	451	8
3	5	-1	1929	1934	14	7	9	-1	295	303	9	14	6	-1	764	746	12	3	11	0	1532	1551	12
3	7	-1	1220	1219	10	7	17	-1	1312	1313	26	14	8	-1	188	208	18	3	13	0	313	335	7
3	9	-1	601	598	15	7	21	-1	374	373	12	14	10	-1	251	252	26	3	19	0	144	146	14
3	11	-1	303	294	7	7	23	-1	273	298	23	14	12	-1	397	403	15	3	21	0	152	164	15
3	13	-1	213	212	11	8	0	-1	364	377	11	15	1	-1	154	180	23	3	23	0	1045	1036	27
3	15	-1	173	170	22	8	2	-1	685	679	11	15	5	-1	480	455	18	3	25	0	205	222	16
3	17	-1	1328	1313	15	8	4	-1	192	198	11	0	2	0	648	648	5	3	29	0	244	217	21
3	25	-1	201	208	15	8	6	-1	536	529	9	0	4	0	761	781	7	4	0	0	886	972	10
3	29	-1	635	639	13	8	8	-1	517	511	9	0	6	0	526	531	9	4	2	0	252	269	6
4	0	-1	189	202	7	8	10	-1	720	720	12	0	8	0	688	626	9	4	4	0	463	460	9
4	2	-1	1036	1034	10	8	12	-1	297	307	10	0	10	0	745	743	10	4	6	0	511	509	9
4	4	-1	173	172	8	8	14	-1	388	397	10	0	12	0	3097	3121	11	4	8	0	778	758	12
4	6	-1	1226	1203	11	8	16	-1	284	289	12	0	14	0	757	747	13	4	10	0	214	219	23
4	8	-1	465	458	7	8	20	-1	254	268	16	0	16	0	430	440	8	4	12	0	1469	1448	19
4	10	-1	1162	1150	12	8	22	-1	374	376	12	0	18	0	266	255	9	4	14	0	251	247	9
4	12	-1	257	258	8	8	24	-1	212	202	17	0	20	0	364	382	10	4	18	0	458	463	9
4	14	-1	433	452	8	9	3	-1	495	479	18	0	22	0	810	814	13	4	22	0	431	428	11

Table 6. continued  
A. Grunerite (Natural)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

Page 5

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
4	24	0	309	311	13	9	15	0	352	359	27	0	24	1	211	214	15	4	20	1	330	322	11
5	1	0	386	355	7	9	17	0	208	186	14	0	28	1	400	409	13	4	22	1	177	186	16
5	3	0	476	470	10	9	19	0	221	227	16	1	1	1	337	340	5	4	24	1	290	301	14
5	5	0	293	281	7	9	21	0	181	162	18	1	3	1	1386	1398	22	4	28	1	541	547	14
5	9	0	392	406	9	9	23	0	693	692	13	1	5	1	2809	2761	8	5	3	1	93	72	14
5	11	0	188	160	10	10	0	0	1775	1744	17	1	7	1	1380	1402	14	5	5	1	1384	1393	12
5	13	0	681	687	12	10	2	0	336	337	10	1	9	1	708	704	11	5	7	1	681	681	27
5	15	0	562	571	10	10	4	0	182	182	13	1	11	1	223	212	11	5	9	1	207	215	10
5	21	0	465	457	11	10	6	0	217	210	13	1	13	1	310	324	9	5	11	1	161	168	21
5	25	0	505	524	12	10	8	0	449	442	10	1	15	1	745	752	26	5	15	1	253	254	11
5	27	0	438	450	13	10	12	0	1675	1656	27	1	17	1	2075	2073	18	5	17	1	1025	1043	17
6	0	0	2332	2310	15	10	14	0	353	350	12	1	19	1	369	349	9	5	21	1	343	337	11
6	2	0	400	392	13	10	16	0	195	180	16	1	21	1	166	161	14	5	23	1	144	159	20
6	6	0	181	186	10	10	18	0	212	216	17	1	23	1	456	449	19	5	27	1	296	289	15
6	8	0	490	495	9	10	22	0	416	405	14	1	29	1	901	905	15	6	0	1	220	230	11
6	10	0	234	232	9	11	1	0	701	706	18	2	0	1	541	545	9	6	2	1	673	667	12
6	12	0	899	924	15	11	5	0	354	357	12	2	2	1	1292	1331	8	6	6	1	123	105	13
6	14	0	482	480	16	11	7	0	159	161	17	2	6	1	2702	2660	9	6	8	1	318	316	13
6	16	0	600	597	10	11	9	0	131	147	20	2	8	1	745	736	11	6	10	1	672	692	12
6	22	0	407	387	11	11	11	0	772	755	13	2	10	1	1215	1225	20	6	12	1	220	225	11
6	24	0	420	415	16	11	15	0	245	246	14	2	12	1	425	438	9	6	14	1	515	524	9
7	1	0	1332	1347	26	11	17	0	201	220	18	2	14	1	561	584	11	6	16	1	293	308	11
7	3	0	578	570	10	11	19	0	178	202	21	2	16	1	773	797	13	6	18	1	414	411	11
7	7	0	490	479	8	12	0	0	195	184	15	2	18	1	696	688	12	6	20	1	154	159	17
7	9	0	1003	985	26	12	4	0	413	416	11	2	20	1	358	351	10	6	22	1	523	528	12
7	11	0	2048	2049	15	12	8	0	466	465	12	2	22	1	643	631	12	6	24	1	192	175	15
7	13	0	732	738	13	12	10	0	194	181	19	2	24	1	240	243	13	6	26	1	295	285	15
7	15	0	432	434	10	12	16	0	482	479	12	2	26	1	363	338	13	7	3	1	533	528	13
7	17	0	378	372	15	13	3	0	192	201	31	2	28	1	673	695	12	7	5	1	801	780	16
7	23	0	1111	1106	18	13	5	0	313	318	14	3	1	1	311	313	6	7	7	1	319	302	9
8	0	0	1689	1697	18	13	9	0	428	430	13	3	3	1	277	251	6	7	9	1	317	309	13
8	2	0	329	316	11	13	11	0	510	510	19	3	5	1	1851	1829	15	7	11	1	190	192	18
8	4	0	550	526	9	13	15	0	213	203	18	3	7	1	424	418	17	7	15	1	361	365	10
8	6	0	570	584	15	14	0	0	1086	1088	19	3	9	1	115	92	11	7	17	1	720	732	21
8	8	0	432	438	9	14	4	0	223	199	14	3	13	1	317	321	9	7	23	1	145	137	19
8	10	0	362	358	10	14	6	0	154	165	20	3	15	1	224	213	10	8	0	1	208	198	20
8	12	0	872	871	21	15	1	0	227	220	18	3	17	1	1148	1161	43	8	2	1	172	155	18
8	14	0	430	421	10	0	0	1	508	509	13	3	19	1	627	624	22	8	6	1	1719	1745	16
8	16	0	594	587	10	0	2	1	189	186	6	3	21	1	467	462	10	8	8	1	190	191	12
8	18	0	438	428	20	0	4	1	210	213	6	3	27	1	239	245	15	8	12	1	292	277	12
8	20	0	193	166	25	0	6	1	2354	2340	16	4	0	1	612	602	10	8	14	1	157	151	16
8	22	0	615	613	12	0	8	1	691	700	10	4	2	1	326	319	6	8	16	1	452	463	11
8	24	0	222	214	26	0	10	1	276	285	10	4	4	1	149	156	9	8	18	1	844	851	16
9	1	0	746	736	12	0	12	1	415	425	7	4	6	1	3035	3052	13	8	22	1	178	163	16
9	5	0	191	179	12	0	14	1	172	173	14	4	8	1	740	750	13	8	24	1	212	221	20
9	7	0	492	491	13	0	16	1	532	524	9	4	12	1	387	386	8	9	3	1	151	128	17
9	9	0	173	178	13	0	18	1	720	713	12	4	14	1	518	521	9	9	5	1	459	465	9
9	11	0	887	877	30	0	20	1	354	349	10	4	16	1	478	465	10	9	9	1	249	240	12
9	13	0	289	292	12	0	22	1	359	354	11	4	18	1	1659	1667	17	9	15	1	239	240	14

Table 6. continued  
A. Grunerite (Natural)

Values of  $10 \times F_{obs}$  and  $10 \times F_{calc}$

Page 6

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
9	17	1	472	483	12	1	13	2	632	647	11	6	0	2	1717	1757	19	11	7	2	337	332	12
9	19	1	469	470	21	1	15	2	211	208	10	6	2	2	249	244	10	11	9	2	164	190	19
9	21	1	406	398	13	1	17	2	212	210	11	6	4	2	343	332	8	11	11	2	488	511	12
10	0	1	113	109	18	1	23	2	666	675	12	6	6	2	712	724	13	11	13	2	144	137	19
10	2	1	258	260	12	1	27	2	151	169	20	6	8	2	330	349	15	11	17	2	256	261	18
10	4	1	269	276	12	2	0	2	2679	2732	49	6	10	2	393	403	9	12	0	2	1374	1373	21
10	6	1	1065	1046	17	2	2	2	346	357	7	6	12	2	890	890	25	12	2	2	230	223	16
10	8	1	595	588	13	2	4	2	203	207	7	6	14	2	378	375	10	12	6	2	236	219	19
10	10	1	438	447	11	2	6	2	379	393	6	6	16	2	438	445	11	12	8	2	289	268	14
10	16	1	174	186	18	2	10	2	317	301	7	6	18	2	469	474	11	12	10	2	136	136	21
10	18	1	556	568	12	2	12	2	1626	1623	25	6	20	2	133	111	18	12	12	2	1113	1124	20
10	20	1	368	362	14	2	14	2	376	380	11	6	22	2	563	582	12	12	14	2	331	311	16
11	3	1	476	471	10	2	16	2	190	189	12	6	24	2	249	241	14	13	1	2	344	324	15
11	5	1	1436	1420	25	2	18	2	329	332	17	7	3	2	542	532	11	13	3	2	235	222	15
11	7	1	853	859	16	2	20	2	208	200	17	7	5	2	532	539	9	0	0	3	431	435	8
11	9	1	312	305	12	2	22	2	474	480	11	7	7	2	115	112	17	0	2	3	622	617	10
11	15	1	190	178	16	2	24	2	678	658	12	7	11	2	713	713	15	0	4	3	135	132	11
11	17	1	1255	1244	19	3	1	2	506	495	12	7	13	2	135	117	16	0	6	3	1951	1929	13
12	0	1	574	582	11	3	5	2	152	126	11	7	15	2	300	306	12	0	8	3	508	516	9
12	2	1	222	207	14	3	7	2	306	288	7	7	19	2	271	264	20	0	10	3	670	687	12
12	4	1	168	164	17	3	9	2	325	333	7	7	21	2	455	452	15	0	12	3	356	355	17
12	6	1	895	892	15	3	11	2	655	643	11	7	23	2	321	327	15	0	14	3	368	365	9
12	8	1	156	144	18	3	13	2	774	801	13	8	0	2	1787	1798	16	0	16	3	644	650	11
12	10	1	232	257	19	3	15	2	580	584	10	8	2	2	190	192	24	0	18	3	553	562	10
12	12	1	479	484	13	3	21	2	252	254	13	8	4	2	361	351	10	0	20	3	288	290	12
12	16	1	444	437	14	3	23	2	467	461	11	8	10	2	157	163	16	0	22	3	460	466	11
13	5	1	210	215	20	3	25	2	551	564	12	8	12	2	972	952	30	0	24	3	234	231	15
13	9	1	195	199	25	3	27	2	416	433	13	8	14	2	266	260	23	0	26	3	215	216	30
14	6	1	864	829	35	4	0	2	2023	2051	12	8	20	2	192	191	22	1	1	3	353	353	6
0	0	2	198	199	8	4	2	2	633	629	16	8	22	2	281	286	28	1	3	3	349	341	6
0	2	2	404	417	7	4	4	2	1277	1277	15	9	1	2	564	558	12	1	5	3	716	726	12
0	4	2	120	175	9	4	10	2	202	196	10	9	3	2	122	124	19	1	9	3	502	486	8
0	6	2	460	460	7	4	12	2	1781	1802	31	9	5	2	266	247	21	1	11	3	356	357	8
0	8	2	967	962	15	4	14	2	572	573	10	9	7	2	325	307	17	1	15	3	292	280	9
0	10	2	191	183	8	4	16	2	380	370	9	9	11	2	704	704	12	1	17	3	694	687	16
0	12	2	672	700	14	4	20	2	330	329	12	9	13	2	146	140	18	1	19	3	326	332	13
0	14	2	424	432	8	4	22	2	595	590	11	9	17	2	192	206	17	1	21	3	404	410	11
0	16	2	903	907	15	4	24	2	324	300	16	9	19	2	256	261	30	1	27	3	508	508	14
0	18	2	283	293	10	5	1	2	2178	2238	23	10	2	2	120	120	19	2	0	3	242	236	9
0	20	2	263	243	19	5	3	2	984	1008	19	10	4	2	712	723	13	2	2	3	510	511	9
0	22	2	301	303	12	5	5	2	359	361	9	10	8	2	208	187	14	2	4	3	115	105	13
0	24	2	375	376	11	5	9	2	568	567	9	10	10	2	143	138	19	2	6	3	1956	1970	12
0	28	2	274	273	15	5	11	2	2158	2165	28	10	12	2	132	129	22	2	8	3	405	395	7
1	1	2	534	586	16	5	13	2	585	585	10	10	14	2	153	134	19	2	10	3	500	504	9
1	3	2	168	121	8	5	15	2	203	199	15	10	16	2	391	395	13	2	12	3	288	291	9
1	5	2	653	640	14	5	17	2	154	170	17	10	18	2	150	148	21	2	14	3	295	292	10
1	7	2	400	398	8	5	19	2	131	140	19	11	1	2	529	535	11	2	16	3	359	357	9
1	9	2	745	729	12	5	21	2	235	241	14	11	3	2	465	486	20	2	18	3	913	900	15
1	11	2	1557	1565	12	5	23	2	1426	1423	21	11	5	2	151	139	17	2	20	3	252	258	13

Table 6. continued  
 A. Grunerite (Natural)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	24	3	213	200	15	8	18	3	272	288	14	2	16	4	628	626	11	9	1	4	405	410	24
2	26	3	199	172	17	8	20	3	349	356	26	2	22	4	530	519	11	9	5	4	345	360	14
3	1	3	153	149	11	9	3	3	374	367	12	2	24	4	304	295	14	9	7	4	171	181	18
3	3	3	120	115	14	9	5	3	1198	1221	19	3	1	4	1533	1548	15	9	9	4	292	308	21
3	5	3	1016	1021	26	9	7	3	735	722	13	3	3	4	539	538	9	9	11	4	845	857	19
3	7	3	500	490	9	9	9	3	260	267	14	3	9	4	472	458	9	10	0	4	1475	1483	21
3	13	3	191	186	12	9	15	3	218	214	17	3	11	4	1699	1713	20	10	2	4	194	182	22
3	17	3	803	789	14	9	17	3	1063	1069	21	3	13	4	685	679	11	10	6	4	226	226	17
3	21	3	187	187	16	9	19	3	266	272	19	3	15	4	241	237	26	10	8	4	221	240	27
4	0	3	120	115	15	10	0	3	400	411	12	3	17	4	136	129	18	10	10	4	159	168	21
4	2	3	797	791	13	10	2	3	152	127	22	3	23	4	1022	1062	19	10	12	4	1214	1218	22
4	8	3	334	324	9	10	4	3	214	224	29	4	0	4	711	692	12	11	1	4	541	537	33
4	10	3	949	943	15	10	6	3	673	681	12	4	4	4	401	416	9	11	5	4	245	255	16
4	12	3	152	161	21	10	10	3	224	215	16	4	6	4	436	442	24	11	9	4	304	294	24
4	14	3	388	370	10	10	12	3	396	402	13	4	8	4	179	165	12	0	0	5	174	187	23
4	16	3	309	293	11	10	16	3	439	430	21	4	10	4	301	302	11	0	2	5	169	163	14
4	18	3	167	157	15	11	7	3	181	193	19	4	12	4	754	764	13	0	4	5	117	116	17
4	22	3	458	458	12	11	9	3	170	149	18	4	18	4	413	417	12	0	6	5	1330	1323	23
4	24	3	218	208	18	12	6	3	642	653	13	4	20	4	175	167	18	0	8	5	394	390	9
5	1	3	139	153	15	12	8	3	253	256	30	4	22	4	451	457	31	0	12	5	157	158	15
5	3	3	635	631	11	0	0	4	3123	3115	25	5	7	4	343	332	10	0	14	5	239	250	14
5	5	3	1000	988	15	0	2	4	388	393	13	5	9	4	499	491	10	0	16	5	175	184	16
5	7	3	367	365	10	0	6	4	339	349	8	5	13	4	567	557	10	0	18	5	755	731	19
5	9	3	357	370	16	0	10	4	318	318	9	5	15	4	460	470	12	0	20	5	162	163	19
5	15	3	214	214	14	0	12	4	2073	2053	16	5	17	4	252	234	26	1	3	5	403	396	9
5	17	3	802	803	24	0	14	4	462	461	9	5	21	4	273	267	15	1	5	5	1037	1016	16
5	19	3	265	262	13	0	16	4	184	190	14	6	0	4	1153	1153	17	1	7	5	476	474	9
6	0	3	356	343	9	0	18	4	263	249	12	6	2	4	244	242	17	1	11	5	135	133	16
6	6	3	2261	2290	16	0	22	4	558	567	11	6	4	4	130	114	18	1	13	5	170	170	25
6	8	3	455	457	20	0	24	4	888	881	15	6	8	4	207	203	15	1	15	5	236	236	17
6	12	3	273	281	12	1	1	4	308	293	8	6	12	4	972	960	17	1	17	5	932	940	16
6	14	3	248	245	13	1	3	4	345	354	8	6	14	4	257	250	13	1	23	5	245	261	22
6	16	3	457	446	11	1	5	4	311	332	9	7	1	4	608	591	10	2	0	5	222	228	11
6	18	3	1265	1243	20	1	9	4	138	154	13	7	3	4	213	212	26	2	2	5	682	682	12
6	20	3	239	249	15	1	11	4	1171	1176	15	7	7	4	300	297	12	2	6	5	682	659	11
6	24	3	261	246	17	1	13	4	187	189	13	7	9	4	389	380	12	2	8	5	372	375	10
7	5	3	815	816	13	1	15	4	266	272	19	7	11	4	949	951	18	2	10	5	677	691	16
7	9	3	349	346	11	1	17	4	230	219	12	7	13	4	282	266	14	2	12	5	215	237	14
7	15	3	166	160	18	1	21	4	369	372	12	7	17	4	225	254	19	2	14	5	518	517	12
7	17	3	907	889	15	1	23	4	612	617	12	7	19	4	147	177	23	2	16	5	412	391	11
7	19	3	287	281	14	1	25	4	581	580	13	8	0	4	758	752	13	2	20	5	255	251	15
7	21	3	382	386	19	2	0	4	1998	2003	14	8	2	4	229	220	14	2	22	5	593	589	12
8	2	3	293	305	12	2	2	4	383	371	9	8	4	4	311	298	29	3	1	5	168	154	13
8	4	3	195	171	13	2	4	4	239	234	15	8	6	4	234	229	15	3	3	5	354	345	17
8	6	3	996	986	16	2	6	4	178	179	11	8	8	4	543	531	11	3	5	5	964	982	28
8	8	3	478	473	11	2	8	4	595	590	11	8	10	4	179	175	16	3	7	5	278	270	11
8	10	3	328	326	12	2	10	4	311	298	9	8	14	4	308	320	24	3	9	5	157	146	16
8	14	3	258	268	20	2	12	4	794	799	14	8	16	4	623	623	21	3	15	5	219	232	14
8	16	3	314	302	13	2	14	4	500	501	10	8	18	4	182	181	20	3	17	5	974	966	17





Table 6. Structure Factors  
B. Grunerite (30 minutes)

Values of  $10 \times F_{obs}$  and  $10 \times F_{calc}$

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
1	1	-8	650	598	19	6	8	-7	141	148	18	6	8	-6	197	178	11	2	16	-5	324	317	10
1	3	-8	345	326	13	6	10	-7	355	346	11	6	12	-6	811	836	18	2	18	-5	341	336	12
1	9	-8	191	155	17	7	5	-7	397	395	11	6	14	-6	229	219	13	2	24	-5	235	235	14
2	2	-8	153	134	24	8	6	-7	1406	1402	17	6	18	-6	242	239	28	3	1	-5	187	178	10
2	4	-8	328	299	13	8	8	-7	251	247	22	7	3	-6	162	135	13	3	3	-5	666	659	15
2	8	-8	185	178	17	9	5	-7	745	767	13	7	7	-6	154	144	14	3	5	-5	1599	1605	31
3	3	-8	172	162	18	9	7	-7	327	335	12	7	9	-6	305	307	11	3	7	-5	957	962	18
4	0	-8	1458	1386	29	10	0	-7	210	218	14	7	11	-6	126	108	17	3	9	-5	497	505	9
4	4	-8	309	294	30	10	2	-7	324	329	11	7	13	-6	389	390	14	3	13	-5	221	219	12
4	10	-8	237	219	15	10	6	-7	325	328	12	7	15	-6	385	391	11	3	15	-5	342	353	9
5	1	-8	405	385	12	10	8	-7	251	244	14	7	17	-6	117	81	19	3	17	-5	1251	1267	26
6	0	-8	459	454	17	11	3	-7	135	163	19	8	0	-6	388	398	24	3	19	-5	316	311	16
6	4	-8	462	446	12	1	1	-6	576	569	19	8	2	-6	140	142	16	3	21	-5	143	130	19
6	8	-8	181	180	16	1	7	-6	169	171	12	8	4	-6	438	438	9	3	23	-5	199	192	15
7	1	-8	745	719	19	1	9	-6	276	287	19	8	12	-6	516	532	21	4	0	-5	168	165	11
7	3	-8	346	340	21	1	11	-6	545	547	10	9	1	-6	868	899	14	4	2	-5	344	342	8
8	0	-8	863	842	18	1	13	-6	233	242	12	9	3	-6	508	522	9	4	6	-5	1422	1422	33
8	2	-8	176	178	17	1	15	-6	320	318	11	9	9	-6	342	343	11	4	8	-5	291	288	9
1	3	-7	411	406	10	1	21	-6	180	183	18	9	11	-6	937	957	25	4	10	-5	404	415	8
1	5	-7	1023	1018	16	2	0	-6	2078	2074	30	9	13	-6	301	305	12	4	12	-5	215	227	16
1	7	-7	559	544	10	2	2	-6	171	169	12	9	15	-6	202	201	15	4	14	-5	261	270	14
1	9	-7	268	259	12	2	6	-6	154	157	13	10	0	-6	975	1017	23	4	16	-5	537	538	9
1	11	-7	198	185	14	2	8	-6	366	368	11	10	6	-6	212	243	14	4	18	-5	497	511	15
1	15	-7	161	181	23	2	10	-6	275	277	13	10	8	-6	131	147	18	4	20	-5	241	240	20
2	0	-7	146	138	15	2	12	-6	1749	1774	19	10	10	-6	255	257	13	4	22	-5	416	421	12
2	4	-7	122	128	20	2	14	-6	272	266	11	10	12	-6	606	607	10	5	1	-5	167	174	16
2	6	-7	1184	1159	40	2	18	-6	158	202	19	10	14	-6	210	213	15	5	5	-5	633	630	11
2	8	-7	296	300	18	3	1	-6	720	702	12	11	1	-6	137	131	17	5	9	-5	274	254	9
2	10	-7	134	145	18	3	3	-6	199	213	14	11	3	-6	194	193	17	5	11	-5	118	139	16
2	12	-7	177	175	29	3	9	-6	280	272	10	11	5	-6	260	270	12	5	17	-5	700	722	14
2	16	-7	239	219	15	3	11	-6	1051	1066	33	11	11	-6	582	592	11	5	19	-5	345	357	11
3	1	-7	154	149	15	4	0	-6	746	742	12	12	0	-6	1203	1245	18	5	21	-5	302	317	13
3	3	-7	224	233	13	4	2	-6	291	294	9	12	2	-6	243	245	21	6	0	-5	286	293	9
3	7	-7	289	286	12	4	4	-6	447	436	8	1	1	-5	239	253	8	6	2	-5	109	98	15
3	9	-7	360	350	16	4	6	-6	271	278	10	1	3	-5	327	322	9	6	4	-5	148	135	13
3	11	-7	164	148	16	4	8	-6	649	653	11	1	5	-5	145	146	22	6	6	-5	1944	1970	20
3	17	-7	234	235	25	4	14	-6	348	336	14	1	7	-5	216	209	9	6	8	-5	462	475	8
4	0	-7	189	165	13	4	16	-6	656	659	24	1	9	-5	413	404	8	6	12	-5	258	248	10
4	6	-7	573	554	15	4	18	-6	211	208	21	1	13	-5	162	163	12	6	14	-5	171	162	14
4	8	-7	212	208	32	4	20	-6	209	199	15	1	15	-5	441	452	19	6	16	-5	303	303	11
4	12	-7	200	200	15	5	1	-6	514	515	9	1	17	-5	141	146	16	6	18	-5	1028	1023	15
4	16	-7	166	165	26	5	5	-6	135	153	16	1	19	-5	472	478	10	6	20	-5	265	274	13
5	3	-7	338	347	11	5	9	-6	382	374	9	1	21	-5	470	491	12	7	3	-5	232	222	9
5	5	-7	321	321	30	5	11	-6	952	973	16	2	0	-5	182	181	11	7	5	-5	1051	1060	22
5	7	-7	533	527	17	5	13	-6	273	272	17	2	2	-5	165	165	11	7	7	-5	551	548	14
5	9	-7	219	218	13	5	17	-6	183	187	16	2	6	-5	714	705	14	7	11	-5	191	189	12
5	13	-7	140	144	19	6	0	-6	1200	1224	18	2	8	-5	251	239	9	7	17	-5	879	908	14
6	2	-7	210	220	13	6	2	-6	212	211	33	2	10	-5	366	358	10	7	21	-5	221	228	16
6	6	-7	412	415	15	6	6	-6	275	276	10	2	12	-5	204	210	18	8	0	-5	295	296	9

Table 6. continued  
 B. Grunerite (30 minutes)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
8	2	-5	506	520	13	3	7	-4	137	136	12	8	6	-4	522	513	9	1	19	-3	230	206	11
8	4	-5	122	94	15	3	11	-4	799	789	13	8	8	-4	134	116	14	1	21	-3	129	112	17
8	8	-5	288	285	10	3	15	-4	215	197	11	8	10	-4	219	228	11	1	23	-3	259	273	19
8	10	-5	621	619	11	3	23	-4	530	533	11	8	12	-4	1273	1248	15	2	0	-3	470	448	19
8	12	-5	255	248	16	4	0	-4	2212	2211	29	8	14	-4	324	329	10	2	2	-3	653	644	10
8	14	-5	227	232	12	4	2	-4	176	178	10	8	16	-4	168	149	15	2	4	-3	85	45	12
8	16	-5	162	156	15	4	4	-4	412	438	7	8	18	-4	407	415	11	2	6	-3	2494	2477	10
9	3	-5	215	224	12	4	6	-4	207	210	9	8	20	-4	141	132	19	2	8	-3	661	667	11
9	5	-5	448	454	9	4	8	-4	319	299	8	8	22	-4	497	494	13	2	10	-3	834	834	12
9	7	-5	158	134	12	4	10	-4	253	252	12	9	1	-4	318	315	9	2	12	-3	323	321	7
9	17	-5	381	403	16	4	12	-4	1339	1334	19	9	3	-4	160	168	13	2	16	-3	550	549	9
10	2	-5	209	197	11	4	14	-4	255	252	9	9	7	-4	371	373	10	2	18	-3	1066	1072	19
10	6	-5	1184	1219	16	4	18	-4	243	235	18	9	9	-4	374	381	20	2	20	-3	283	270	11
10	8	-5	122	124	19	4	20	-4	288	294	13	9	11	-4	383	390	14	2	22	-3	272	270	14
10	12	-5	127	135	20	4	22	-4	347	374	12	9	13	-4	465	453	22	2	24	-3	270	260	13
10	16	-5	294	307	20	4	24	-4	603	605	16	9	15	-4	567	542	10	2	26	-3	265	241	13
10	18	-5	624	647	12	5	3	-4	382	373	7	9	21	-4	199	202	19	3	1	-3	301	303	6
11	5	-5	310	321	11	5	5	-4	351	360	8	10	0	-4	1132	1164	18	3	3	-3	260	254	8
12	2	-5	179	179	15	5	7	-4	211	215	9	10	2	-4	298	304	20	3	5	-3	780	765	10
12	6	-5	578	599	17	5	11	-4	753	732	12	10	12	-4	884	876	26	3	7	-3	182	186	8
12	8	-5	301	306	12	5	15	-4	213	193	11	10	14	-4	281	277	12	3	9	-3	519	501	9
12	10	-5	264	265	13	5	21	-4	385	376	11	11	1	-4	460	467	15	3	11	-3	96	79	15
13	3	-5	369	361	13	5	23	-4	311	302	15	11	7	-4	276	291	12	3	13	-3	274	275	11
13	5	-5	933	957	16	5	25	-4	400	413	12	11	9	-4	283	301	12	3	15	-3	366	384	8
13	7	-5	567	573	11	6	0	-4	1620	1630	25	11	11	-4	807	789	13	3	17	-3	586	589	10
13	9	-5	254	251	13	6	2	-4	257	251	8	11	13	-4	243	259	14	3	19	-3	697	690	23
14	0	-5	373	385	12	6	4	-4	345	342	8	11	17	-4	272	253	21	3	21	-3	623	628	11
1	1	-4	1249	1226	46	6	8	-4	535	550	11	12	0	-4	320	327	12	3	25	-3	135	123	20
1	3	-4	570	588	20	6	10	-4	302	302	20	12	4	-4	233	226	13	3	27	-3	309	302	13
1	5	-4	216	215	8	6	12	-4	672	653	11	12	6	-4	157	135	16	4	0	-3	429	423	8
1	7	-4	166	162	10	6	14	-4	379	380	9	12	8	-4	423	434	26	4	2	-3	223	195	7
1	9	-4	239	237	11	6	16	-4	653	662	13	12	10	-4	171	193	18	4	4	-3	321	307	6
1	11	-4	1189	1178	13	6	20	-4	148	129	16	12	12	-4	131	133	21	4	6	-3	1928	1919	17
1	15	-4	126	110	15	6	22	-4	457	469	12	12	16	-4	504	507	15	4	8	-3	564	569	9
1	23	-4	801	820	14	6	24	-4	266	263	15	13	1	-4	144	144	16	4	12	-3	372	369	8
2	0	-4	451	459	8	7	1	-4	1516	1544	19	13	5	-4	263	259	13	4	14	-3	233	217	9
2	2	-4	414	420	11	7	3	-4	712	736	12	13	9	-4	228	225	13	4	16	-3	275	268	14
2	4	-4	1217	1222	11	7	5	-4	135	135	15	13	11	-4	400	414	12	4	18	-3	833	831	25
2	6	-4	337	336	20	7	7	-4	117	93	15	14	0	-4	1088	1110	18	4	20	-3	294	264	10
2	8	-4	212	193	16	7	9	-4	608	600	15	14	8	-4	300	303	14	4	24	-3	233	235	15
2	12	-4	101	77	15	7	11	-4	1721	1723	21	1	1	-3	269	259	17	5	1	-3	108	98	11
2	14	-4	304	304	10	7	13	-4	544	533	10	1	3	-3	1286	1256	12	5	3	-3	300	297	14
2	16	-4	469	466	9	7	15	-4	280	267	13	1	5	-3	2788	2773	14	5	5	-3	1267	1239	12
2	18	-4	317	314	10	7	17	-4	160	168	15	1	7	-3	1534	1540	10	5	7	-3	630	633	14
2	20	-4	453	449	11	7	21	-4	182	181	17	1	9	-3	754	783	11	5	13	-3	242	238	9
2	22	-4	293	291	12	7	23	-4	1107	1117	17	1	11	-3	367	384	7	5	15	-3	273	245	9
2	24	-4	456	458	14	8	0	-4	1331	1368	13	1	13	-3	206	194	9	5	17	-3	1041	1052	16
3	1	-4	841	830	11	8	2	-4	273	272	16	1	15	-3	519	525	15	5	19	-3	273	275	11
3	3	-4	229	243	8	8	4	-4	518	519	9	1	17	-3	1942	1927	35	5	23	-3	274	259	13

Table 6. continued  
 B. Grunerite (30 minutes)

Values of  $10 \times F_{obs}$  and  $10 \times F_{calc}$

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
6	0	-3	198	187	9	11	5	-3	1187	1187	16	3	27	-2	313	317	14	8	0	-2	1061	1053	12
6	2	-3	587	591	11	11	7	-3	673	644	18	4	0	-2	2416	2375	9	8	2	-2	282	275	10
6	8	-3	240	228	9	11	9	-3	201	207	13	4	2	-2	626	617	12	8	4	-2	270	267	9
6	10	-3	670	651	11	11	15	-3	297	285	17	4	4	-2	1319	1302	13	8	6	-2	128	132	13
6	12	-3	255	247	9	11	17	-3	1097	1096	17	4	6	-2	367	361	7	8	8	-2	189	179	11
6	14	-3	457	458	9	11	19	-3	183	191	20	4	8	-2	590	602	19	8	10	-2	106	73	15
6	16	-3	360	352	9	12	0	-3	463	464	9	4	10	-2	332	325	7	8	12	-2	886	882	15
6	18	-3	349	354	11	12	6	-3	1044	1004	57	4	12	-2	1268	1291	12	8	14	-2	261	251	10
6	22	-3	543	550	29	12	12	-3	459	429	11	4	14	-2	581	586	10	8	22	-2	231	255	32
6	24	-3	188	190	17	12	16	-3	372	357	13	4	16	-2	764	744	20	8	24	-2	250	235	15
6	26	-3	239	205	36	13	3	-3	187	180	15	4	18	-2	260	250	9	9	1	-2	1139	1154	13
7	1	-3	144	143	12	13	7	-3	268	264	13	4	20	-2	433	420	13	9	3	-2	721	745	16
7	3	-3	355	352	8	13	9	-3	292	277	18	4	22	-2	609	615	10	9	5	-2	405	411	14
7	5	-3	674	665	11	14	6	-3	530	534	16	4	26	-2	167	162	19	9	7	-2	140	136	13
7	7	-3	146	140	12	14	8	-3	208	213	16	4	28	-2	362	372	28	9	9	-2	284	270	10
7	9	-3	147	159	13	14	10	-3	192	184	22	5	1	-2	1776	1788	14	9	11	-2	933	946	16
7	11	-3	137	139	13	15	3	-3	267	266	13	5	3	-2	438	466	8	9	13	-2	197	192	16
7	17	-3	580	581	12	1	1	-2	1147	1108	10	5	5	-2	195	189	7	9	15	-2	121	101	19
7	19	-3	216	222	17	1	3	-2	160	152	6	5	7	-2	223	206	11	9	19	-2	369	364	14
8	0	-3	119	104	13	1	5	-2	126	120	10	5	9	-2	906	904	12	9	21	-2	199	194	16
8	2	-3	262	261	9	1	11	-2	1270	1269	11	5	11	-2	2340	2372	12	9	23	-2	700	703	12
8	6	-3	2274	2269	40	1	15	-2	261	213	9	5	13	-2	793	797	13	10	0	-3	441	452	8
8	8	-3	356	351	13	1	21	-2	207	186	12	5	15	-2	282	261	8	10	2	-2	120	124	15
8	12	-3	129	135	15	1	23	-2	658	659	11	5	17	-2	312	296	13	10	4	-2	719	703	12
8	14	-3	413	394	15	1	25	-2	171	161	16	5	21	-2	129	132	18	10	6	-2	220	213	11
8	16	-3	459	438	10	1	27	-2	238	279	18	5	23	-2	1226	1227	18	10	10	-3	279	268	10
8	18	-3	1325	1324	18	2	0	-2	3900	3840	8	6	0	-2	2380	2392	15	10	12	-2	501	509	24
8	20	-3	204	189	14	2	2	-2	352	344	6	6	2	-2	365	369	7	10	14	-2	219	206	24
8	24	-3	199	207	19	2	4	-2	639	575	9	6	4	-2	309	316	7	10	16	-2	380	386	12
9	5	-3	970	972	14	2	6	-2	231	218	6	6	6	-2	712	746	12	10	18	-2	249	259	14
9	7	-3	326	323	16	2	8	-2	892	886	10	6	8	-2	337	333	7	10	20	-2	279	283	29
9	9	-3	115	102	16	2	10	-2	490	471	8	6	10	-2	261	253	9	10	22	-2	445	440	13
9	11	-3	116	118	17	2	12	-2	3081	3086	21	6	12	-2	901	889	13	11	1	-2	426	419	9
9	15	-3	215	214	16	2	14	-2	430	429	7	6	14	-2	406	384	11	11	3	-2	147	144	14
9	17	-3	855	840	18	2	16	-2	169	156	10	6	16	-2	398	387	9	11	5	-2	327	320	25
9	19	-3	304	299	13	2	18	-2	291	289	13	6	18	-2	453	457	9	11	7	-2	224	231	12
9	21	-3	337	335	14	2	20	-2	128	136	17	6	20	-2	192	191	14	11	9	-2	174	153	17
10	0	-3	175	173	12	2	22	-3	671	661	11	6	22	-3	425	425	11	11	11	-3	723	734	13
10	2	-3	428	431	13	2	24	-3	951	950	16	6	24	-2	427	425	12	12	0	-2	1995	2014	16
10	4	-3	170	178	12	3	1	-3	1792	1711	25	7	1	-2	309	325	15	12	2	-2	299	301	11
10	6	-3	790	792	14	3	3	-2	726	686	9	7	3	-2	689	691	17	12	4	-2	307	309	11
10	8	-3	492	492	9	3	5	-2	500	475	15	7	5	-2	408	411	7	12	6	-2	312	311	13
10	10	-3	536	525	9	3	7	-2	368	362	8	7	7	-2	296	301	12	12	12	-2	1345	1332	19
10	12	-3	183	171	13	3	9	-2	175	201	8	7	11	-2	309	298	13	12	14	-2	415	463	12
10	14	-3	218	229	20	3	11	-2	1337	1333	11	7	13	-2	446	446	13	12	18	-2	201	191	31
10	16	-3	249	258	14	3	13	-2	498	506	23	7	15	-2	548	540	10	13	1	-2	471	470	11
10	18	-3	281	294	14	3	15	-2	464	453	12	7	19	-2	157	158	15	13	3	-2	229	213	13
10	20	-3	303	310	14	3	23	-2	888	878	15	7	21	-2	463	464	18	13	7	-2	219	218	15
11	3	-3	414	403	9	3	25	-3	392	396	14	7	25	-2	484	461	21	13	11	-2	953	939	16

Table 6. continued  
C. Grunerite (30 minutes)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
13	13	-2	224	199	18	4	12	-1	245	260	8	8	24	-1	214	201	18	0	22	0	820	786	15
13	15	-2	181	157	22	4	14	-1	402	430	7	9	3	-1	483	480	13	0	24	0	1370	1387	19
14	0	-2	413	408	19	4	16	-1	577	581	10	9	5	-1	1103	1108	17	0	26	0	155	137	18
14	4	-2	374	366	12	4	18	-1	243	241	11	9	7	-1	672	628	40	1	1	0	1320	1345	14
14	8	-2	349	346	18	4	20	-1	189	178	13	9	9	-1	311	301	9	1	3	0	134	134	5
14	12	-2	205	179	19	4	22	-1	578	566	10	9	15	-1	174	174	14	1	5	0	411	414	7
15	1	-2	439	421	20	4	24	-1	248	252	13	9	17	-1	855	830	15	1	7	0	289	265	5
15	3	-2	280	306	14	4	26	-1	381	379	13	10	0	-1	324	324	12	1	9	0	638	597	9
1	1	-1	631	604	8	4	28	-1	520	514	12	10	4	-1	168	172	23	1	11	0	2233	2225	22
1	3	-1	943	932	7	5	1	-1	216	215	6	10	6	-1	1064	1069	15	1	15	0	191	180	10
1	7	-1	598	621	8	5	3	-1	491	487	14	10	10	-1	182	164	21	1	17	0	265	284	10
1	9	-1	963	931	13	5	5	-1	1413	1430	18	10	12	-1	301	300	19	1	21	0	248	233	13
1	11	-1	412	402	7	5	7	-1	251	248	7	10	14	-1	190	189	15	1	23	0	933	913	15
1	13	-1	177	182	10	5	9	-1	89	79	13	10	16	-1	383	362	11	1	25	0	446	439	20
1	15	-1	559	584	15	5	11	-1	170	166	10	10	18	-1	660	641	30	1	27	0	388	390	13
1	17	-1	277	257	9	5	15	-1	150	152	12	11	3	-1	160	162	13	1	29	0	227	208	16
1	19	-1	635	637	17	5	17	-1	1114	1104	17	11	7	-1	315	311	11	2	0	0	1062	1049	7
1	21	-1	683	707	12	5	19	-1	376	362	19	11	9	-1	276	257	11	2	2	0	728	728	14
1	27	-1	499	504	12	5	21	-1	229	228	13	11	15	-1	252	226	20	2	4	0	1505	1529	11
2	0	-1	371	364	6	5	27	-1	239	210	16	11	19	-1	428	420	13	2	6	0	556	557	11
2	2	-1	429	401	22	6	0	-1	435	427	7	12	0	-1	257	264	20	2	8	0	452	500	8
2	4	-1	232	231	5	6	2	-1	263	257	6	12	4	-1	169	170	14	2	10	0	237	235	7
2	6	-1	1117	1217	10	6	4	-1	133	114	10	12	6	-1	775	788	13	2	12	0	680	666	11
2	8	-1	550	558	22	6	6	-1	3677	3740	51	12	8	-1	390	375	15	2	14	0	543	543	10
2	10	-1	184	169	7	6	8	-1	679	683	21	12	10	-1	170	191	18	2	16	0	775	752	12
2	12	-1	304	314	13	6	12	-1	363	374	8	12	16	-1	170	148	18	2	18	0	344	348	19
2	14	-1	421	418	7	6	14	-1	234	216	12	12	18	-1	310	303	15	2	20	0	448	441	9
2	16	-1	274	258	9	6	16	-1	594	593	10	13	3	-1	391	387	31	2	22	0	523	508	10
2	18	-1	772	746	12	6	18	-1	1587	1603	30	13	5	-1	1035	1013	17	2	24	0	212	216	15
2	20	-1	197	181	15	6	20	-1	424	403	10	13	7	-1	582	576	12	2	28	0	359	365	14
2	24	-1	298	298	13	6	24	-1	209	202	16	13	9	-1	251	243	14	3	1	0	2442	2472	13
2	28	-1	295	291	14	6	26	-1	206	207	28	13	15	-1	274	264	15	3	3	0	1072	1105	9
3	1	-1	250	253	5	7	5	-1	1476	1518	46	14	0	-1	367	372	11	3	5	0	483	475	12
3	3	-1	870	890	12	7	7	-1	522	526	9	14	6	-1	714	692	33	3	7	0	444	432	8
3	5	-1	1973	1996	17	7	9	-1	303	299	8	14	8	-1	192	211	19	3	11	0	1564	1559	17
3	7	-1	1189	1220	9	7	17	-1	1275	1265	16	14	10	-1	241	233	16	3	13	0	340	347	7
3	9	-1	584	579	10	7	21	-1	369	372	12	14	12	-1	374	366	16	3	15	0	140	83	12
3	11	-1	271	278	7	7	23	-1	301	281	19	15	1	-1	198	175	32	3	19	0	163	181	19
3	13	-1	234	229	8	8	0	-1	335	347	12	15	5	-1	463	428	12	3	21	0	188	185	13
3	15	-1	221	202	10	8	2	-1	624	637	11	0	2	0	631	644	4	3	23	0	1013	1027	16
3	17	-1	1314	1295	20	8	4	-1	177	181	10	0	4	0	795	811	6	3	25	0	224	225	16
3	19	-1	168	158	15	8	6	-1	508	501	8	0	6	0	493	503	7	3	29	0	192	199	23
3	25	-1	216	225	16	8	3	-1	490	489	8	0	8	0	631	588	8	4	0	0	820	930	8
4	0	-1	182	189	6	8	10	-1	709	701	12	0	10	0	715	712	9	4	2	0	250	269	5
4	2	-1	1007	1021	9	8	12	-1	289	285	10	0	12	0	3327	3321	10	4	4	0	470	457	12
4	4	-1	152	153	8	8	14	-1	359	356	9	0	14	0	724	706	12	4	6	0	469	490	11
4	6	-1	1203	1181	14	8	16	-1	278	277	11	0	16	0	446	455	8	4	8	0	828	803	10
4	8	-1	424	439	8	8	20	-1	258	239	14	0	18	0	251	267	10	4	10	0	241	219	7
4	10	-1	1157	1151	11	8	22	-1	372	373	13	0	20	0	411	403	9	4	12	0	1438	1436	12

Table 6. continued  
 B. Grunerite (30 minutes)

Values of  $10 \times F_{obs}$  and  $10 \times F_{calc}$

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
4	14	0	251	231	12	9	1	0	733	716	12	0	12	1	398	417	12	4	4	1	169	147	8
4	16	0	145	114	11	9	5	0	200	188	13	0	14	1	160	126	10	4	6	1	3229	3248	14
4	18	0	443	445	8	9	7	0	460	455	8	0	16	1	505	503	14	4	8	1	725	718	11
4	22	0	393	405	14	9	9	0	147	145	13	0	18	1	703	705	24	4	12	1	373	378	11
4	24	0	293	285	13	9	11	0	878	856	14	0	20	1	329	312	9	4	14	1	552	558	15
5	1	0	368	348	7	9	13	0	272	260	14	0	22	1	360	358	10	4	16	1	451	454	9
5	3	0	463	462	9	9	15	0	366	350	11	0	24	1	189	222	17	4	18	1	1622	1655	26
5	5	0	287	274	6	9	17	0	176	177	29	0	28	1	395	390	13	4	20	1	300	296	10
5	9	0	370	395	6	9	19	0	193	195	17	1	1	1	356	352	7	4	22	1	188	168	14
5	11	0	165	144	10	9	23	0	669	668	14	1	3	1	1463	1455	18	4	24	1	292	295	13
5	13	0	673	687	12	10	0	0	1748	1715	24	1	5	1	3021	3061	19	4	28	1	502	513	13
5	15	0	601	591	10	10	2	0	316	313	14	1	7	1	1414	1440	9	5	5	1	1374	1374	13
5	21	0	437	426	10	10	4	0	157	152	14	1	9	1	686	696	25	5	7	1	662	656	10
5	25	0	499	499	12	10	6	0	204	202	12	1	11	1	216	201	8	5	9	1	238	226	8
5	27	0	421	459	15	10	8	0	493	473	9	1	13	1	336	353	7	5	11	1	145	139	12
6	0	0	2385	2373	19	10	10	0	125	110	18	1	15	1	761	768	20	5	15	1	222	229	10
6	2	0	378	378	6	10	12	0	1625	1616	17	1	17	1	2072	2072	13	5	17	1	999	1005	39
6	6	0	165	169	9	10	14	0	348	327	28	1	19	1	366	357	9	5	21	1	348	360	12
6	8	0	439	443	9	10	16	0	168	171	18	1	21	1	155	142	14	5	27	1	255	262	26
6	10	0	240	223	15	10	18	0	200	210	17	1	23	1	432	434	15	6	0	1	190	200	8
6	12	0	928	932	14	10	22	0	376	379	15	1	29	1	873	872	14	6	2	1	624	638	10
6	14	0	448	444	8	11	1	0	706	678	13	2	0	1	534	522	9	6	6	1	133	120	12
6	16	0	599	593	10	11	5	0	343	325	13	2	2	1	1348	1337	20	6	8	1	310	297	18
6	22	0	377	379	12	11	7	0	137	135	17	2	6	1	2859	2829	9	6	10	1	693	688	12
6	24	0	421	415	13	11	11	0	725	707	12	2	8	1	696	710	9	6	12	1	200	212	11
7	1	0	1310	1339	20	11	15	0	271	258	14	2	10	1	1223	1228	13	6	14	1	483	478	9
7	3	0	550	569	16	11	17	0	199	189	16	2	12	1	422	430	9	6	16	1	292	297	11
7	7	0	500	502	9	11	19	0	155	197	25	2	14	1	546	570	9	6	18	1	417	413	12
7	9	0	981	988	16	12	0	0	153	155	16	2	16	1	775	763	34	6	20	1	157	130	17
7	11	0	2048	2042	30	12	4	0	423	414	12	2	18	1	680	678	27	6	22	1	509	520	12
7	13	0	752	732	12	12	8	0	428	421	11	2	20	1	328	318	12	6	24	1	142	174	24
7	15	0	431	425	9	12	10	0	182	172	17	2	22	1	647	628	11	6	26	1	280	247	22
7	17	0	365	362	15	12	16	0	461	462	43	2	24	1	245	246	14	7	3	1	546	531	9
7	19	0	143	150	18	13	1	0	171	161	17	2	26	1	344	326	13	7	5	1	831	796	13
7	21	0	140	128	19	13	3	0	215	196	14	2	28	1	668	653	12	7	7	1	332	318	8
7	23	0	1094	1060	17	13	5	0	300	286	17	3	1	1	301	303	11	7	9	1	290	289	9
8	0	0	1634	1672	12	13	9	0	424	416	20	3	3	1	295	269	8	7	11	1	188	185	11
8	2	0	311	312	8	13	11	0	498	508	12	3	5	1	1864	1858	14	7	13	1	133	119	16
8	4	0	517	498	9	14	0	0	1072	1053	33	3	7	1	455	432	8	7	15	1	375	375	18
8	6	0	544	547	9	14	4	0	177	192	19	3	9	1	124	92	10	7	17	1	726	735	13
8	8	0	424	432	8	14	6	0	160	160	20	3	13	1	295	292	8	8	0	1	228	195	9
8	10	0	338	333	9	14	10	0	165	163	24	3	15	1	179	185	16	8	2	1	150	159	12
8	12	0	840	827	17	15	1	0	213	192	20	3	17	1	1110	1126	39	8	6	1	1746	1725	14
8	14	0	406	403	9	0	0	1	501	493	10	3	19	1	589	584	32	8	8	1	186	181	12
8	16	0	591	584	10	0	2	1	176	138	5	3	21	1	464	468	10	8	12	1	278	270	10
8	18	0	415	412	10	0	4	1	221	205	5	3	25	1	126	106	20	8	14	1	174	159	14
8	20	0	169	156	20	0	6	1	2468	2486	30	3	27	1	217	217	15	8	16	1	434	440	11
8	22	0	560	568	22	0	8	1	676	677	11	4	0	1	583	569	9	8	18	1	842	822	14
8	24	0	217	210	27	0	10	1	286	284	6	4	2	1	365	354	6	8	22	1	185	175	19

Table 6. continued  
 B. Grunerite (30 minutes)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
8	24	1	215	222	34	1	1	2	571	592	8	5	1	2	2279	2285	43	11	3	2	468	479	11
9	3	1	113	112	16	1	3	2	205	125	7	5	3	2	1008	1022	26	11	7	2	310	291	12
9	5	1	434	430	9	1	5	2	678	640	9	5	5	2	363	367	7	11	9	2	190	196	17
9	7	1	149	135	17	1	7	2	459	429	8	5	9	2	579	573	29	11	11	2	511	505	19
9	9	1	255	234	11	1	9	2	759	755	16	5	11	2	2166	2149	18	11	17	2	236	237	17
9	15	1	222	221	14	1	11	2	1592	1594	31	5	13	2	600	587	13	12	0	2	1289	1314	24
9	17	1	463	450	11	1	13	2	656	645	11	5	15	2	189	178	21	12	2	2	235	207	14
9	19	1	467	451	12	1	15	2	201	190	10	5	17	2	159	160	14	12	6	2	224	220	15
9	21	1	379	387	17	1	17	2	207	195	10	5	19	2	150	167	17	12	8	2	286	284	20
10	0	1	122	94	15	1	23	2	654	661	14	5	21	2	252	260	27	12	12	2	1114	1090	18
10	2	1	226	222	12	1	27	2	184	198	20	5	23	2	1381	1386	53	12	14	2	297	287	15
10	4	1	260	259	10	2	0	2	2946	2923	14	6	0	2	1683	1691	12	13	1	2	302	305	14
10	6	1	1057	1038	17	2	2	2	347	348	9	6	2	2	247	241	8	13	3	2	173	193	28
10	8	1	573	562	9	2	4	2	234	232	6	6	4	2	339	341	8	0	0	3	426	416	7
10	10	1	428	422	22	2	6	2	372	384	6	6	6	2	664	678	19	0	2	3	614	608	10
10	16	1	202	179	17	2	8	2	132	90	10	6	8	2	313	317	9	0	4	3	142	127	11
10	18	1	584	564	12	2	10	2	310	290	7	6	10	2	383	375	8	0	6	3	1946	1923	10
10	20	1	347	340	14	2	12	2	1604	1601	13	6	12	2	858	853	13	0	8	3	500	494	8
11	3	1	480	467	9	2	14	2	357	354	9	6	14	2	355	349	10	0	10	3	701	693	12
11	5	1	1410	1383	17	2	16	2	212	210	12	6	16	2	452	434	11	0	12	3	345	346	7
11	7	1	853	841	16	2	18	2	330	334	9	6	18	2	461	456	18	0	14	3	343	348	10
11	9	1	320	301	12	2	20	2	226	232	13	6	22	2	545	546	11	0	16	3	611	619	11
11	11	1	131	113	20	2	22	2	461	460	10	6	24	2	214	217	18	0	18	3	542	542	11
11	17	1	1214	1191	20	2	24	2	650	642	11	7	3	2	519	514	9	0	20	3	290	258	10
12	0	1	530	520	11	3	1	2	509	473	17	7	5	2	540	534	9	0	22	3	457	466	11
12	2	1	181	186	17	3	3	2	93	61	11	7	11	2	712	699	14	0	24	3	232	233	14
12	6	1	861	822	15	3	5	2	112	111	11	7	15	2	319	309	11	0	26	3	203	200	17
12	8	1	144	138	19	3	7	2	269	268	9	7	19	2	242	247	14	1	1	3	351	350	17
12	10	1	246	247	29	3	9	2	294	309	7	7	21	2	421	413	12	1	3	3	330	323	6
12	12	1	448	443	12	3	11	2	632	615	11	7	23	2	325	313	14	1	5	3	714	710	11
12	16	1	429	402	19	3	13	2	760	772	24	8	0	2	1787	1795	27	1	9	3	497	492	9
13	5	1	207	209	18	3	15	2	595	591	14	8	2	2	166	177	12	1	11	3	349	354	7
13	9	1	173	187	20	3	21	2	229	239	12	8	4	2	366	363	9	1	15	3	245	254	9
14	6	1	821	798	20	3	23	2	429	436	11	8	10	2	163	161	14	1	17	3	656	668	13
14	8	1	156	122	20	3	25	2	540	539	14	8	12	2	936	927	15	1	19	3	321	317	12
0	0	2	193	166	5	3	27	2	418	434	14	8	14	2	235	230	13	1	21	3	406	421	11
0	2	2	412	410	7	4	0	2	2113	2104	20	8	20	2	215	233	24	1	25	3	152	129	19
0	4	2	122	171	9	4	2	2	609	600	23	8	22	2	262	282	17	1	27	3	469	467	13
0	6	2	442	437	8	4	4	2	1254	1254	18	9	1	2	514	522	15	2	0	3	229	222	7
0	8	2	922	924	10	4	6	2	93	45	13	9	3	2	112	102	16	2	2	3	568	535	9
0	10	2	181	166	8	4	8	2	97	68	15	9	5	2	221	212	16	2	4	3	135	107	10
0	12	2	698	715	17	4	10	2	212	201	9	9	7	2	317	300	10	2	6	3	1972	1990	11
0	14	2	398	393	7	4	12	2	1815	1821	33	9	11	2	675	660	12	2	8	3	383	380	8
0	16	2	906	904	14	4	14	2	548	548	9	9	17	2	504	195	16	2	10	3	280	295	14
0	18	2	311	299	12	4	16	2	366	365	9	9	19	2	246	250	16	2	12	3	274	284	11
0	20	2	225	207	11	4	20	2	311	303	10	10	4	2	692	698	13	2	14	3	351	334	11
0	22	2	278	294	24	4	22	2	544	555	11	10	8	2	184	186	15	2	16	3	342	342	9
0	24	2	371	378	12	4	24	2	305	314	14	10	16	2	401	399	13	2	18	3	882	882	28
0	28	2	266	268	22	4	26	2	182	175	19	11	1	2	516	539	10	2	20	3	242	229	12

Table 6. continued  
 B. Grunerite (30 minutes)

Values of 10×Fobs and 10×Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	24	3	207	202	15	8	14	3	240	226	14	2	6	4	177	168	10	8	8	4	509	513	11
2	26	3	198	208	19	8	16	3	267	281	15	2	8	4	551	568	13	8	10	4	150	158	18
3	1	3	123	136	11	8	18	3	252	286	16	2	10	4	282	278	9	8	14	4	298	293	13
3	3	3	118	118	12	8	20	3	335	326	14	2	12	4	790	783	12	8	16	4	605	607	18
3	5	3	1016	999	11	9	3	3	372	367	10	2	14	4	457	464	8	9	1	4	379	406	15
3	7	3	486	470	9	9	5	3	1172	1192	17	2	16	4	596	619	14	9	3	4	130	135	20
3	13	3	189	190	15	9	7	3	707	711	13	2	18	4	126	134	17	9	5	4	314	338	12
3	17	3	749	766	13	9	9	3	244	249	19	2	22	4	489	492	11	9	9	4	314	316	13
3	23	3	138	146	21	9	15	3	219	222	21	2	24	4	295	305	16	9	11	4	830	844	14
4	0	3	128	108	15	9	17	3	1020	1037	19	3	1	4	1520	1527	21	10	0	4	1379	1439	18
4	2	3	772	770	12	9	19	3	276	272	16	3	3	4	501	523	9	10	2	4	150	169	18
4	8	3	312	308	8	10	0	3	360	370	11	3	7	4	169	133	11	10	6	4	207	227	16
4	10	3	936	934	14	10	4	3	217	209	14	3	9	4	484	481	8	10	8	4	246	240	14
4	12	3	167	159	12	10	6	3	647	627	11	3	11	4	1686	1702	14	10	12	4	1142	1152	34
4	14	3	355	347	9	10	10	3	207	215	22	3	13	4	681	680	12	11	1	4	480	489	11
4	16	3	281	280	10	10	12	3	382	363	15	3	15	4	221	222	12	11	5	4	222	218	15
4	18	3	155	161	18	10	16	3	418	399	13	3	23	4	1005	1026	24	11	9	4	281	265	16
4	22	3	456	456	12	11	7	3	189	190	16	4	0	4	646	646	12	0	0	5	181	185	10
4	24	3	198	206	17	11	9	3	180	149	21	4	4	4	406	411	8	0	2	5	196	185	9
5	1	3	128	125	15	12	0	3	190	202	16	4	6	4	411	418	13	0	4	5	125	111	14
5	3	3	620	635	11	12	6	3	636	650	11	4	8	4	159	163	15	0	6	5	1317	1320	13
5	5	3	1018	997	24	12	8	3	237	226	15	4	10	4	274	285	10	0	8	5	365	375	8
5	7	3	402	385	8	0	0	4	3205	3231	13	4	12	4	683	708	29	0	12	5	163	157	12
5	9	3	356	363	9	0	2	4	364	372	7	4	18	4	392	392	11	0	14	5	294	279	10
5	15	3	235	232	14	0	6	4	340	341	7	4	22	4	408	422	25	0	16	5	175	174	14
5	17	3	788	793	13	0	8	4	127	90	12	5	3	4	150	112	12	0	18	5	714	721	12
5	19	3	236	231	15	0	10	4	327	309	8	5	7	4	333	335	12	0	20	5	171	143	18
6	0	3	356	336	14	0	12	4	2036	2058	13	5	9	4	451	466	9	1	1	5	120	111	13
6	2	3	148	138	12	0	14	4	425	429	8	5	13	4	532	541	10	1	3	5	382	387	8
6	6	3	2291	2286	34	0	16	4	197	191	11	5	15	4	474	485	18	1	5	5	1004	996	13
6	8	3	432	429	8	0	18	4	246	253	18	5	17	4	235	234	14	1	7	5	482	466	8
6	12	3	282	285	10	0	20	4	175	178	16	5	21	4	258	241	14	1	9	5	131	126	15
6	14	3	253	254	14	0	22	4	539	540	11	6	0	4	1107	1142	14	1	13	5	180	180	12
6	16	3	422	427	10	0	24	4	861	863	15	6	2	4	233	224	10	1	15	5	238	239	20
6	18	3	1213	1220	51	1	1	4	298	273	14	6	8	4	256	240	11	1	17	5	896	909	14
6	20	3	231	225	16	1	3	4	360	356	7	6	12	4	955	969	15	1	23	5	241	247	14
7	3	3	142	140	13	1	5	4	312	325	11	6	14	4	224	227	14	2	0	5	227	217	9
7	5	3	758	772	13	1	7	4	120	122	13	7	1	4	561	581	10	2	2	5	648	664	13
7	7	3	138	103	13	1	9	4	162	150	11	7	3	4	194	208	12	2	6	5	624	630	11
7	9	3	340	334	9	1	11	4	1113	1135	13	7	7	4	278	291	11	2	8	5	343	348	9
7	15	3	177	168	15	1	13	4	177	184	16	7	9	4	350	362	15	3	10	5	684	680	12
7	17	3	807	835	15	1	15	4	286	274	13	7	11	4	893	911	15	2	12	5	220	235	12
7	19	3	269	269	14	1	17	4	198	213	12	7	13	4	261	249	13	2	14	5	495	498	9
7	21	3	368	374	14	1	21	4	346	345	21	7	17	4	217	236	16	2	16	5	367	370	11
8	2	3	264	268	10	1	23	4	574	575	11	7	19	4	183	183	19	2	20	5	224	220	15
8	4	3	155	166	14	1	25	4	542	542	11	8	0	4	695	718	12	2	22	5	582	575	11
8	6	3	947	962	21	2	0	4	2015	2022	11	8	2	4	204	211	13	3	1	5	143	130	13
8	8	3	446	452	11	2	2	4	359	357	7	8	4	4	284	291	11	3	3	5	342	351	11
8	10	3	298	307	13	2	4	4	221	207	9	8	6	4	201	210	18	3	5	5	952	972	16





Table 6. Structure Factors  
C. Grunerite (2 hours, crystal A)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	0	-8	274	128	38	8	0	-6	410	384	57	6	18	-6	284	236	26	3	13	-5	251	249	32
4	0	-8	1239	1324	94	10	0	-6	918	964	93	2	0	-5	200	184	15	4	14	-5	264	259	22
6	0	-8	435	428	36	12	0	-6	1089	1183	55	4	0	-5	152	175	21	10	14	-5	224	207	32
8	0	-8	852	814	71	1	1	-6	568	541	12	6	0	-5	329	312	35	1	15	-5	399	404	40
1	1	-8	561	577	14	3	1	-6	762	688	13	14	0	-5	352	351	36	3	15	-5	398	398	18
5	1	-8	388	382	16	5	1	-6	544	519	13	1	1	-5	258	238	30	2	16	-5	278	294	23
7	1	-8	712	692	32	9	1	-6	905	871	131	3	1	-5	232	199	14	4	16	-5	492	489	27
1	3	-8	274	285	19	2	2	-6	166	151	21	5	1	-5	171	150	20	6	16	-5	292	275	23
3	3	-8	215	177	19	4	2	-6	291	263	15	2	2	-5	198	156	16	10	16	-5	299	293	28
7	3	-8	312	300	20	6	2	-6	190	180	24	4	2	-5	316	332	15	3	17	-5	1218	1242	34
2	4	-8	297	270	33	3	3	-6	215	192	18	8	2	-5	492	488	61	5	17	-5	677	675	17
4	4	-8	297	260	18	7	3	-6	184	147	26	1	3	-5	321	303	27	7	17	-5	861	881	38
6	4	-8	448	438	17	9	3	-6	542	493	76	3	3	-5	709	647	13	9	17	-5	383	383	23
6	6	-8	181	127	29	11	3	-6	224	205	27	7	3	-5	236	216	36	2	18	-5	345	316	24
6	8	-8	210	170	32	4	4	-6	454	424	20	13	3	-5	338	342	51	4	18	-5	511	512	21
1	9	-8	200	157	28	8	4	-6	472	435	28	1	5	-5	165	149	20	6	18	-5	1014	1016	18
4	10	-8	208	195	33	11	5	-6	237	244	29	3	5	-5	1748	1568	166	1	19	-5	417	455	37
2	0	-7	135	150	22	2	6	-6	178	176	23	5	5	-5	628	594	40	5	19	-5	335	313	23
4	0	-7	146	168	23	4	6	-6	282	276	19	7	5	-5	1093	1036	96	4	20	-5	231	194	29
10	2	-7	306	304	32	6	6	-6	279	258	21	9	5	-5	447	449	29	6	20	-5	243	211	31
1	3	-7	381	382	15	1	7	-6	183	156	22	11	5	-5	297	273	21	1	21	-5	517	561	26
5	3	-7	348	344	16	2	8	-6	392	360	20	13	5	-5	911	918	56	5	21	-5	328	349	28
1	5	-7	999	959	22	4	8	-6	647	620	24	2	6	-5	734	684	23	7	21	-5	282	267	30
5	5	-7	836	802	35	6	8	-6	243	217	22	4	6	-5	1476	1399	18	4	22	-5	412	432	26
7	5	-7	361	366	20	1	9	-6	288	246	17	6	6	-5	1996	1915	92	2	0	-4	513	474	38
9	5	-7	753	739	18	3	9	-6	309	278	18	10	6	-5	1192	1177	57	4	0	-4	2145	2172	23
2	6	-7	1197	1128	50	5	9	-6	395	366	19	12	6	-5	539	561	29	6	0	-4	1509	1584	167
4	6	-7	579	523	15	7	9	-6	276	277	23	1	7	-5	206	187	33	8	0	-4	1188	1308	87
6	6	-7	394	405	18	9	9	-6	369	356	20	3	7	-5	1033	950	18	10	0	-4	1014	1113	68
8	6	-7	1383	1362	48	2	10	-6	285	249	19	7	7	-5	599	560	15	12	0	-4	237	271	28
10	6	-7	302	292	47	10	10	-6	243	233	29	13	7	-5	578	584	21	14	0	-4	954	1051	17
1	7	-7	557	527	15	1	11	-6	513	501	15	2	8	-5	229	185	18	1	1	-4	1404	1232	46
3	7	-7	294	263	34	3	11	-6	1081	1034	18	4	8	-5	261	248	42	3	1	-4	878	812	35
5	7	-7	567	527	23	5	11	-6	967	944	17	6	8	-5	436	422	16	7	1	-4	1411	1524	127
9	7	-7	359	336	32	9	11	-6	916	917	17	8	8	-5	243	234	26	9	1	-4	314	314	45
2	8	-7	289	260	29	11	11	-6	570	548	36	12	8	-5	274	262	26	11	1	-4	431	452	22
10	8	-7	223	208	33	2	12	-6	1767	1721	84	1	9	-5	481	444	13	2	2	-4	404	369	25
1	9	-7	214	212	25	6	12	-6	813	814	16	3	9	-5	455	456	14	4	2	-4	150	150	22
3	9	-7	416	367	16	8	12	-6	487	509	19	5	9	-5	348	284	24	6	2	-4	218	216	20
5	9	-7	200	178	27	10	12	-6	586	582	20	11	9	-5	224	156	29	10	2	-4	254	252	22
6	10	-7	342	350	21	1	13	-6	217	217	25	2	10	-5	407	393	14	1	3	-4	611	567	33
4	12	-7	210	201	27	5	13	-6	327	283	24	4	10	-5	435	411	15	3	3	-4	212	191	19
5	13	-7	193	165	31	7	13	-6	354	373	27	8	10	-5	645	622	16	5	3	-4	398	386	14
5	15	-7	332	308	31	9	13	-6	341	322	24	12	10	-5	267	259	28	7	3	-4	651	707	13
2	16	-7	238	208	32	4	14	-6	274	279	23	1	11	-5	170	128	27	2	4	-4	1345	1198	149
3	17	-7	267	224	25	1	15	-6	393	368	18	2	12	-5	229	219	20	4	4	-4	382	426	13
2	0	-6	2107	2019	148	7	15	-6	425	432	33	4	12	-5	222	236	22	6	4	-4	332	351	22
4	0	-6	741	704	27	4	16	-6	669	667	17	6	12	-5	251	254	22	8	4	-4	473	493	15
6	0	-6	1214	1179	27	4	18	-6	227	213	31	8	12	-5	229	226	31	12	4	-4	234	244	25

Table 6. continued  
 C. Grunerite (2 hours, crystal A)

Values of 10×Fobs and 10×Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
1	5	-4	241	222	22	2	20	-4	402	400	19	5	7	-3	623	631	29	4	20	-3	236	187	28
5	5	-4	328	344	15	4	20	-4	354	357	22	9	7	-3	301	314	20	10	20	-3	269	258	32
13	5	-4	213	233	30	5	21	-4	339	330	24	11	7	-3	652	667	32	3	21	-3	688	694	30
2	6	-4	347	335	42	7	21	-4	238	211	35	2	8	-3	566	598	62	9	21	-3	353	362	28
4	6	-4	207	209	18	2	22	-4	263	267	29	4	8	-3	467	484	15	2	22	-3	302	287	25
8	6	-4	449	489	16	4	22	-4	342	363	25	8	8	-3	306	302	18	6	22	-3	556	593	22
5	7	-4	206	228	29	6	22	-4	381	420	26	10	8	-3	425	420	25	5	23	-3	235	238	31
9	7	-4	344	358	20	8	22	-4	447	456	26	1	9	-3	703	742	84	2	24	-3	263	262	31
11	7	-4	249	278	32	1	23	-4	750	806	20	3	9	-3	575	548	21	4	26	-3	244	177	35
4	8	-4	357	338	14	3	23	-4	490	523	23	13	9	-3	292	307	28	2	0	-2	3809	3686	107
6	8	-4	497	523	14	5	23	-4	282	273	29	2	10	-3	808	827	38	4	0	-2	2325	2304	219
12	8	-4	391	411	21	7	23	-4	1057	1084	22	6	10	-3	669	680	13	6	0	-2	2169	2289	194
1	9	-4	273	242	14	2	24	-4	457	479	31	10	10	-3	507	508	17	8	0	-2	970	1033	61
7	9	-4	603	602	14	4	24	-4	593	598	34	1	11	-3	326	369	38	10	0	-2	360	384	16
9	9	-4	364	373	27	6	24	-4	301	273	31	2	12	-3	303	326	41	12	0	-2	1793	1904	81
11	9	-4	264	306	26	5	25	-4	363	381	31	4	12	-3	363	372	16	14	0	-2	358	360	28
13	9	-4	224	232	33	2	0	-3	498	447	9	6	12	-3	212	229	23	1	1	-2	1271	1103	63
4	10	-4	230	242	19	4	0	-3	412	396	31	8	12	-3	172	143	28	3	1	-2	1854	1686	81
6	10	-4	267	267	20	6	0	-3	191	174	25	12	12	-3	390	365	23	5	1	-2	1779	1790	106
8	10	-4	215	216	25	12	0	-3	349	386	18	1	13	-3	239	225	17	7	1	-2	281	323	25
1	11	-4	1123	1146	47	1	1	-3	320	272	21	5	13	-3	238	272	22	9	1	-2	1055	1103	92
3	11	-4	733	777	51	3	1	-3	311	284	29	4	14	-3	292	291	19	11	1	-2	404	420	16
5	11	-4	664	698	13	7	1	-3	157	113	23	6	14	-3	404	403	17	13	1	-2	393	435	19
7	11	-4	1617	1672	55	2	2	-3	669	608	79	8	14	-3	405	418	20	15	1	-2	435	403	21
9	11	-4	351	358	21	4	2	-3	299	241	16	1	15	-3	535	547	14	2	2	-2	330	298	18
11	11	-4	704	750	33	6	2	-3	546	568	12	3	15	-3	335	347	30	4	2	-2	541	543	15
13	11	-4	377	380	55	8	2	-3	239	268	21	5	15	-3	277	284	20	6	2	-2	324	321	20
4	12	-4	1236	1308	19	10	2	-3	384	390	17	11	15	-3	301	286	27	8	2	-2	230	225	19
6	12	-4	596	642	19	1	3	-3	1466	1245	177	2	16	-3	500	509	17	12	2	-2	277	267	20
8	12	-4	1163	1203	46	3	3	-3	287	270	11	4	16	-3	291	267	23	1	3	-2	137	114	17
10	12	-4	810	847	49	5	3	-3	284	299	16	6	16	-3	300	318	37	3	3	-2	710	665	13
7	13	-4	570	570	16	7	3	-3	314	356	16	8	16	-3	423	403	19	5	3	-2	412	440	11
9	13	-4	405	410	20	11	3	-3	369	385	27	12	16	-3	331	338	50	7	3	-2	712	731	24
11	13	-4	264	254	33	15	3	-3	275	256	29	1	17	-3	1853	1874	23	9	3	-2	686	710	13
4	14	-4	206	191	23	4	4	-3	318	275	25	3	17	-3	533	540	16	15	3	-2	253	282	41
6	14	-4	317	307	30	1	5	-3	2879	2694	299	5	17	-3	1024	1044	17	2	4	-2	620	584	11
8	14	-4	257	284	26	3	5	-3	759	738	21	7	17	-3	556	560	18	4	4	-2	1243	1280	35
10	14	-4	228	217	30	5	5	-3	1229	1229	38	9	17	-3	762	765	17	6	4	-2	308	315	20
1	15	-4	185	162	24	7	5	-3	625	637	12	11	17	-3	1046	1059	19	8	4	-2	248	249	27
3	15	-4	359	291	16	9	5	-3	888	908	69	2	18	-3	1098	1075	45	10	4	-2	685	709	27
5	15	-4	280	238	21	11	5	-3	1176	1170	21	4	18	-3	815	808	32	12	4	-2	315	319	21
7	15	-4	213	236	33	2	6	-3	2474	2422	150	6	18	-3	386	384	20	14	4	-2	328	324	22
9	15	-4	587	579	18	4	6	-3	1777	1866	41	8	18	-3	1254	1313	51	3	5	-2	470	470	22
2	16	-4	474	497	17	8	6	-3	2107	2217	33	10	18	-3	246	268	33	5	5	-2	199	193	34
6	16	-4	656	682	25	10	6	-3	768	742	26	1	19	-3	332	256	22	7	5	-2	443	439	13
11	17	-4	250	207	34	12	6	-3	942	917	17	3	19	-3	641	636	21	9	5	-2	367	387	23
2	18	-4	293	311	21	14	6	-3	515	514	20	5	19	-3	274	280	24	11	5	-2	282	280	21
4	18	-4	223	245	27	1	7	-3	1555	1568	118	9	19	-3	299	259	26	2	6	-2	247	238	16
8	18	-4	410	400	22	3	7	-3	169	161	28	2	20	-3	268	221	24	4	6	-2	354	364	25

Table 6. continued  
 C. Grunerite (2 hours, crystal A)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
6	6	-2	644	676	23	4	18	-2	240	253	23	15	5	-1	427	398	48	4	16	-1	533	532	26
10	6	-2	183	199	28	6	18	-2	451	441	21	2	6	-1	1051	1170	42	6	16	-1	568	550	27
3	7	-2	332	344	13	9	19	-2	361	392	25	4	6	-1	1115	1123	40	8	16	-1	248	258	27
5	7	-2	249	245	16	2	20	-2	204	187	30	6	6	-1	3597	3627	55	10	16	-1	360	353	36
9	7	-2	172	151	27	4	20	-2	420	396	19	8	6	-1	482	458	14	1	17	-1	245	232	20
2	8	-2	927	931	62	6	20	-2	245	246	31	10	6	-1	985	985	43	3	17	-1	1273	1273	20
4	8	-2	516	566	35	10	20	-2	261	266	30	12	6	-1	775	759	16	5	17	-1	1059	1050	46
6	8	-2	279	271	18	1	21	-2	198	125	30	14	6	-1	647	593	19	7	17	-1	1216	1204	21
8	8	-2	245	230	20	7	21	-2	429	427	27	1	7	-1	551	613	47	9	17	-1	826	823	54
14	8	-2	309	301	29	2	22	-2	615	618	19	3	7	-1	1151	1205	47	2	18	-1	750	721	24
1	9	-2	141	95	20	4	22	-2	554	555	20	5	7	-1	325	294	18	4	18	-1	247	223	23
5	9	-2	871	907	27	6	22	-2	404	411	22	7	7	-1	498	532	13	6	18	-1	1619	1603	68
7	9	-2	246	280	19	8	22	-2	256	247	34	9	7	-1	683	645	14	10	18	-1	592	590	20
9	9	-2	297	298	19	10	22	-2	395	388	31	11	7	-1	304	315	22	12	18	-1	303	308	34
2	10	-2	470	450	25	1	23	-2	635	639	34	13	7	-1	573	554	19	1	19	-1	623	625	25
4	10	-2	304	302	14	3	23	-2	847	842	33	2	8	-1	487	475	8	5	19	-1	298	297	23
6	10	-2	260	246	19	5	23	-2	1179	1203	49	4	8	-1	383	364	11	11	19	-1	398	403	26
10	10	-2	210	246	29	9	23	-2	689	675	27	6	8	-1	578	610	14	6	20	-1	370	339	23
1	11	-2	1213	1234	38	2	24	-2	975	959	68	8	8	-1	421	415	15	8	20	-1	223	159	30
3	11	-2	1234	1255	53	6	24	-2	381	410	42	12	8	-1	326	309	49	1	21	-1	823	814	16
5	11	-2	2233	2324	31	3	25	-2	380	338	63	1	9	-1	1082	1031	63	5	21	-1	278	275	29
7	11	-2	280	284	19	7	25	-2	456	436	47	3	9	-1	502	494	10	7	21	-1	396	402	22
9	11	-2	913	898	34	3	27	-2	369	358	27	7	9	-1	320	332	16	4	22	-1	622	599	18
11	11	-2	689	677	24	2	0	-1	371	370	49	9	9	-1	234	245	32	8	22	-1	374	413	27
13	11	-2	861	867	19	4	0	-1	213	196	13	11	9	-1	295	285	32	7	23	-1	227	240	36
2	12	-2	3019	3048	84	6	0	-1	383	398	14	2	10	-1	243	227	14	2	24	-1	275	313	27
4	12	-2	1204	1276	33	8	0	-1	274	308	25	4	10	-1	1146	1175	32	4	24	-1	234	256	32
6	12	-2	845	838	28	10	0	-1	278	258	21	8	10	-1	672	690	17	3	25	-1	272	280	32
8	12	-2	839	850	15	12	0	-1	191	243	27	10	10	-1	222	203	26	4	26	-1	339	348	28
10	12	-2	462	464	19	14	0	-1	295	320	25	14	10	-1	245	218	34	1	27	-1	434	454	25
12	12	-2	1210	1184	43	1	1	-1	566	587	23	1	11	-1	423	411	11	2	28	-1	287	284	45
3	13	-2	424	440	13	3	1	-1	259	270	26	3	11	-1	240	250	15	4	28	-1	500	461	27
5	13	-2	816	840	14	5	1	-1	165	162	26	2	12	-1	310	327	21	2	0	0	1003	1017	24
7	13	-2	413	426	16	2	2	-1	474	457	8	4	12	-1	272	276	16	4	0	0	747	838	37
9	13	-2	203	194	27	4	2	-1	941	997	30	6	12	-1	351	354	16	6	0	0	2310	2304	71
2	14	-2	367	367	35	6	2	-1	309	284	13	8	12	-1	267	257	21	8	0	0	1538	1585	20
4	14	-2	508	503	13	8	2	-1	550	578	13	10	12	-1	278	264	25	10	0	0	1660	1634	32
6	14	-2	332	310	19	1	3	-1	841	914	67	3	13	-1	289	273	22	14	0	0	974	962	17
8	14	-2	217	177	30	3	3	-1	847	892	12	2	14	-1	520	520	21	1	1	0	1370	1324	7
12	14	-2	360	354	59	5	3	-1	481	460	19	4	14	-1	358	384	16	3	1	0	2456	2432	92
1	15	-2	352	315	16	9	3	-1	453	467	14	6	14	-1	270	257	21	5	1	0	346	339	12
3	15	-2	547	501	14	13	3	-1	374	377	32	8	14	-1	310	304	36	7	1	0	1295	1290	37
5	15	-2	227	213	21	2	4	-1	223	195	11	10	14	-1	274	235	25	9	1	0	704	704	13
7	15	-2	635	611	22	4	4	-1	153	135	15	1	15	-1	507	527	23	11	1	0	670	639	20
4	16	-2	736	765	18	3	5	-1	1874	1963	103	3	15	-1	278	266	18	0	2	0	573	576	7
6	16	-2	434	432	17	5	5	-1	1341	1388	56	5	15	-1	193	181	25	2	2	0	624	638	17
10	16	-2	388	405	22	7	5	-1	1370	1442	19	9	15	-1	210	200	28	4	2	0	221	216	13
5	17	-2	272	263	20	9	5	-1	1082	1102	26	13	15	-1	286	271	39	6	2	0	350	329	13
2	18	-2	274	296	21	13	5	-1	951	942	20	2	16	-1	286	258	20	8	2	0	247	274	36

Table 6. continued  
C. Grunerite (2 hours, crystal A)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
10	2	0	259	268	21	6	12	0	922	921	26	6	24	0	407	417	25	4	8	1	631	633	11
1	3	0	181	175	12	8	12	0	815	759	15	1	25	0	413	383	20	6	8	1	264	225	17
3	3	0	1014	1052	12	10	12	0	1693	1554	31	3	25	0	230	247	31	10	8	1	510	493	18
5	3	0	490	496	10	1	13	0	220	141	17	5	25	0	499	475	38	1	9	1	622	637	11
7	3	0	523	547	12	3	13	0	372	369	13	1	27	0	412	452	26	3	9	1	193	121	15
0	4	0	796	826	9	5	13	0	667	674	32	5	27	0	500	553	29	5	9	1	324	289	32
2	4	0	1445	1501	27	7	13	0	768	742	35	2	28	0	416	412	25	7	9	1	258	226	20
4	4	0	497	485	10	0	14	0	642	617	11	0	0	1	586	494	50	9	9	1	287	262	22
8	4	0	488	475	14	2	14	0	465	444	17	2	0	1	484	497	8	11	9	1	324	294	32
12	4	0	429	419	27	4	14	0	180	166	24	4	0	1	512	507	10	0	10	1	332	316	17
1	5	0	415	428	11	6	14	0	401	364	39	6	0	1	189	188	21	2	10	1	1215	1229	16
3	5	0	442	446	21	8	14	0	366	335	21	8	0	1	190	174	23	6	10	1	723	717	30
5	5	0	276	262	14	10	14	0	318	278	23	12	0	1	457	415	19	10	10	1	406	386	31
11	5	0	262	256	25	1	15	0	256	227	17	1	1	1	380	376	33	12	10	1	291	266	31
13	5	0	264	253	27	3	15	0	246	188	18	3	1	1	257	284	12	1	11	1	183	172	18
0	6	0	487	482	8	5	15	0	759	692	15	0	2	1	215	82	17	7	11	1	191	179	25
2	6	0	537	531	24	7	15	0	430	397	37	2	2	1	1275	1301	57	0	12	1	414	417	19
4	6	0	460	475	10	9	15	0	410	361	20	4	2	1	420	387	10	2	12	1	403	420	12
8	6	0	501	489	14	11	15	0	289	317	30	6	2	1	594	593	21	4	12	1	355	354	14
1	7	0	342	306	12	0	16	0	495	495	12	8	2	1	162	162	25	8	12	1	267	252	23
3	7	0	419	390	9	2	16	0	797	798	14	12	2	1	220	163	26	12	12	1	420	370	23
7	7	0	552	532	13	6	16	0	603	609	16	1	3	1	1383	1429	118	1	13	1	425	406	18
9	7	0	406	411	17	8	16	0	652	614	41	3	3	1	293	271	11	3	13	1	254	253	17
0	8	0	590	547	10	12	16	0	534	473	24	7	3	1	507	515	14	7	13	1	203	165	26
2	8	0	425	445	23	1	17	0	257	250	29	11	3	1	481	461	42	0	14	1	208	50	21
4	8	0	919	889	25	7	17	0	343	329	25	0	4	1	213	175	19	2	14	1	507	547	19
6	8	0	373	376	14	9	17	0	205	192	30	4	4	1	207	113	15	4	14	1	621	618	23
8	8	0	421	423	16	0	18	0	300	284	18	10	4	1	262	227	23	6	14	1	402	395	17
10	8	0	564	519	17	2	18	0	333	347	21	1	5	1	2904	2949	82	1	15	1	769	800	19
12	8	0	397	364	21	4	18	0	438	437	16	3	5	1	1813	1800	25	3	15	1	162	143	23
1	9	0	659	611	13	8	18	0	395	388	34	5	5	1	1338	1332	17	5	15	1	195	188	22
5	9	0	344	371	14	3	19	0	245	251	23	7	5	1	826	805	15	7	15	1	396	396	29
7	9	0	1006	995	24	0	20	0	431	454	17	9	5	1	375	360	29	9	15	1	217	184	28
13	9	0	404	406	46	2	20	0	385	394	42	11	5	1	1411	1307	33	0	16	1	496	471	28
0	10	0	672	658	12	1	21	0	219	193	33	0	6	1	2390	2403	165	2	16	1	677	692	31
2	10	0	265	227	12	3	21	0	248	240	24	2	6	1	2778	2740	45	4	16	1	481	442	24
4	10	0	295	227	14	5	21	0	418	380	20	4	6	1	3144	3160	15	6	16	1	271	282	40
6	10	0	232	206	20	0	22	0	756	739	17	6	6	1	189	153	21	8	16	1	421	405	21
8	10	0	309	295	33	2	22	0	473	471	61	8	6	1	1645	1634	22	12	16	1	413	360	44
10	10	0	216	119	30	4	22	0	396	389	21	10	6	1	1077	1009	19	1	17	1	2005	2035	50
1	11	0	2160	2153	15	6	22	0	363	348	40	12	6	1	769	701	18	3	17	1	1048	1083	19
3	11	0	1556	1544	30	8	22	0	520	512	70	14	6	1	835	746	21	5	17	1	955	953	17
7	11	0	1989	1965	36	10	22	0	371	356	39	1	7	1	1425	1470	38	7	17	1	740	736	31
9	11	0	862	815	22	1	23	0	891	868	16	3	7	1	507	484	35	9	17	1	425	388	31
11	11	0	702	640	18	3	23	0	1052	1029	17	5	7	1	646	644	11	11	17	1	1151	1108	25
13	11	0	527	486	21	7	23	0	1026	1009	74	7	7	1	430	341	49	0	18	1	705	691	14
0	12	0	3283	3265	16	9	23	0	689	622	46	11	7	1	850	818	21	2	18	1	688	664	14
2	12	0	627	642	18	0	24	0	1405	1419	25	0	8	1	593	596	28	4	18	1	1637	1653	23
4	12	0	1403	1371	68	4	24	0	280	247	26	2	8	1	627	623	11	6	18	1	451	428	18

Table 6. continued  
C. Grunerite (2 hours, crystal A)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
8	18	1	799	763	18	1	5	2	661	627	44	0	16	2	981	960	58	3	5	3	958	963	19
10	18	1	588	560	23	5	5	2	353	343	13	2	16	2	254	275	20	5	5	3	948	981	54
1	19	1	430	409	16	7	5	2	523	527	17	4	16	2	374	364	32	7	5	3	702	701	24
3	19	1	513	505	15	0	6	2	416	424	54	6	16	2	464	476	27	9	5	3	1199	1132	67
9	19	1	383	410	27	2	6	2	359	391	10	10	16	2	415	414	35	0	6	3	1925	1867	166
0	20	1	272	225	23	6	6	2	599	593	13	1	17	2	189	186	24	2	6	3	1897	1957	59
2	20	1	268	248	23	1	7	2	504	490	10	0	18	2	309	312	19	6	6	3	2121	2166	101
3	21	1	515	509	18	3	7	2	248	227	14	2	18	2	346	352	18	8	6	3	919	932	67
5	21	1	460	458	21	9	7	2	278	299	23	6	18	2	419	414	20	10	6	3	566	539	44
9	21	1	416	410	27	11	7	2	265	240	27	7	19	2	238	216	31	12	6	3	648	617	38
0	22	1	397	408	19	0	8	2	830	841	83	9	19	2	226	258	34	3	7	3	440	440	12
2	22	1	679	674	20	2	8	2	193	140	16	2	20	2	309	307	23	5	7	3	405	419	46
6	22	1	530	552	20	4	8	2	146	107	23	4	20	2	309	276	21	9	7	3	720	682	79
1	23	1	416	403	21	6	8	2	270	264	26	8	20	2	289	294	29	0	8	3	419	429	53
0	24	1	240	244	28	12	8	2	311	304	27	3	21	2	277	204	31	2	8	3	338	316	19
2	24	1	208	250	32	1	9	2	768	789	14	5	21	2	321	295	22	4	8	3	275	250	14
4	24	1	287	288	26	3	9	2	286	280	14	7	21	2	339	372	35	6	8	3	376	386	38
2	26	1	270	299	44	5	9	2	578	586	29	2	22	2	424	437	36	8	8	3	393	386	26
0	28	1	332	372	54	11	9	2	214	203	32	4	22	2	499	499	23	1	9	3	532	533	11
2	28	1	585	589	36	0	10	2	182	154	17	6	22	2	487	496	21	3	9	3	169	99	21
4	28	1	460	487	32	2	10	2	302	270	13	8	22	2	257	284	37	5	9	3	318	331	27
1	29	1	884	852	24	4	10	2	221	190	31	1	23	2	661	652	32	7	9	3	350	328	49
0	0	2	225	129	11	6	10	2	339	344	19	3	23	2	423	391	25	0	10	3	716	738	16
2	0	2	2803	2815	13	8	10	2	200	163	32	5	23	2	1322	1345	46	2	10	3	224	259	17
4	0	2	2011	2063	24	1	11	2	1591	1606	17	7	23	2	302	288	28	4	10	3	894	924	47
6	0	2	1541	1562	19	3	11	2	579	560	23	0	24	2	370	398	24	1	11	3	337	349	14
8	0	2	1789	1736	53	5	11	2	2052	2046	76	2	24	2	631	620	65	0	12	3	323	334	14
12	0	2	1215	1182	22	7	11	2	676	681	39	4	24	2	335	330	32	2	12	3	245	286	19
1	1	2	558	599	40	9	11	2	664	640	64	3	25	2	476	490	22	4	12	3	169	183	25
3	1	2	451	442	10	11	11	2	473	471	27	3	27	2	509	497	29	6	12	3	255	256	23
5	1	2	2169	2234	61	0	12	2	734	736	13	0	28	2	292	310	41	10	12	3	316	309	27
9	1	2	487	461	17	2	12	2	1536	1528	46	0	0	3	414	402	49	0	14	3	296	300	17
11	1	2	559	532	19	4	12	2	1787	1809	90	2	0	3	200	208	15	2	14	3	406	391	15
13	1	2	305	271	27	6	12	2	813	807	26	6	0	3	287	294	22	4	14	3	276	295	28
0	2	2	421	356	46	8	12	2	908	881	26	10	0	3	319	304	38	1	15	3	205	204	22
2	2	2	320	309	10	12	12	2	1099	1014	21	1	1	3	344	329	16	5	15	3	265	242	36
4	2	2	543	536	10	1	13	2	644	648	12	3	1	3	142	133	19	9	15	3	272	244	32
6	2	2	216	206	19	3	13	2	694	717	47	0	2	3	666	602	12	0	16	3	567	558	14
12	2	2	216	187	34	5	13	2	631	607	31	2	2	3	554	559	18	2	16	3	335	340	28
1	3	2	371	179	10	0	14	2	353	291	14	4	2	3	678	720	22	6	16	3	393	385	35
5	3	2	975	1021	21	2	14	2	306	280	15	6	2	3	149	141	25	8	16	3	262	255	40
7	3	2	531	516	14	4	14	2	471	485	34	1	3	3	311	301	23	10	16	3	341	363	31
11	3	2	461	464	19	5	14	2	302	233	34	5	3	3	588	624	12	1	17	3	626	647	22
0	4	2	165	197	14	8	14	2	197	167	30	9	3	3	311	354	23	3	17	3	760	747	45
2	4	2	251	248	12	12	14	2	368	259	30	0	4	3	171	125	17	5	17	3	763	765	53
4	4	2	1175	1207	17	1	15	2	164	106	25	2	4	3	144	88	19	7	17	3	751	740	44
6	4	2	376	376	14	3	15	2	684	649	33	8	4	3	170	150	27	9	17	3	988	996	80
8	4	2	393	371	40	5	15	2	178	141	26	10	4	3	212	200	30	0	18	3	531	543	16
10	4	2	717	663	16	7	15	2	376	355	20	1	5	3	697	703	80	2	18	3	869	859	32

Table 6. continued  
 C. Grunerite (2 hours, crystal A)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	
6	18	3	1200	1189	106	2	10	4	237	246	24	7	5	5	676	721	60	3	5	6	233	242	31	
8	18	3	278	290	44	4	10	4	238	266	20	0	6	5	1316	1282	109	5	5	6	200	205	22	
1	19	3	302	283	21	1	11	4	1012	1065	18	2	6	5	597	591	12	2	6	6	257	279	18	
9	19	3	355	288	33	3	11	4	1603	1662	21	4	6	5	1875	1917	163	6	6	6	177	211	29	
0	20	3	228	180	28	7	11	4	828	832	71	8	6	5	502	537	46	1	7	6	188	142	29	
1	21	3	481	481	49	9	11	4	778	804	96	1	7	5	476	463	13	1	9	6	348	366	17	
3	21	3	309	311	23	0	12	4	1969	2012	20	3	7	5	325	303	16	1	11	6	940	980	17	
7	21	3	402	400	42	2	12	4	762	783	13	5	7	5	212	233	23	3	11	6	185	214	25	
0	22	3	509	509	29	4	12	4	630	646	14	7	7	5	474	486	50	5	11	6	820	872	104	
4	22	3	480	486	62	6	12	4	936	949	82	0	8	5	351	330	16	0	12	6	339	356	19	
1	27	3	501	418	65	10	12	4	1099	1046	130	2	8	5	294	295	16	2	12	6	280	278	20	
0	0	4	3493	3090	153	3	13	4	681	684	21	4	8	5	263	279	19	4	12	6	802	872	67	
2	0	4	1948	2001	16	5	13	4	485	497	35	5	9	5	228	251	21	6	12	6	458	489	43	
4	0	4	566	604	13	0	14	4	368	373	18	7	9	5	214	189	24	1	13	6	446	470	17	
6	0	4	1048	1084	18	2	14	4	396	393	33	2	10	5	665	672	16	3	13	6	256	284	24	
8	0	4	651	656	42	6	14	4	203	183	26	6	10	5	347	381	33	4	14	6	250	254	24	
10	0	4	1288	1334	44	8	14	4	264	232	27	0	12	5	179	169	24	3	15	6	310	297	23	
1	1	4	288	269	13	1	15	4	342	309	49	2	12	5	205	241	23	0	16	6	284	281	24	
3	1	4	1345	1468	48	5	15	4	550	552	67	4	12	5	223	242	24	2	16	6	293	345	26	
7	1	4	521	547	22	0	16	4	202	221	24	0	14	5	363	335	17	2	18	6	242	247	30	
9	1	4	392	392	29	2	16	4	628	631	16	2	14	5	450	456	21	0	2	7	400	394	14	
11	1	4	426	421	22	8	16	4	573	604	73	1	15	5	241	244	23	2	2	7	224	240	20	
0	2	4	380	335	11	5	17	4	210	223	30	3	15	5	249	267	26	4	2	7	208	231	21	
2	2	4	325	322	26	0	18	4	236	263	25	2	16	5	308	324	23	5	3	7	256	277	23	
6	2	4	193	185	28	4	18	4	363	373	56	4	16	5	361	382	32	1	5	7	614	610	13	
8	2	4	186	179	26	1	21	4	298	303	25	1	17	5	836	863	16	3	5	7	330	350	29	
1	3	4	386	362	20	0	22	4	465	493	22	3	17	5	863	906	37	5	5	7	477	515	53	
3	3	4	472	483	12	2	22	4	417	454	24	5	17	5	569	575	56	0	6	7	543	537	14	
7	3	4	211	189	20	4	22	4	340	391	28	0	18	5	715	714	19	2	6	7	1086	1197	32	
2	4	4	208	188	18	1	23	4	527	519	30	4	18	5	1057	1093	49	1	7	7	280	279	19	
4	4	4	387	415	13	3	23	4	1011	996	54	2	22	5	588	591	23	5	7	7	291	267	46	
8	4	4	279	280	20	0	24	4	845	859	62	1	23	5	264	212	35	0	8	7	230	223	23	
1	5	4	317	319	13	2	24	4	339	331	49	0	0	6	365	363	25	3	9	7	221	224	24	
9	5	4	286	319	25	1	25	4	464	490	28	2	0	6	847	864	33	0	10	7	545	527	16	
0	6	4	326	345	38	0	0	5	198	205	24	4	0	6	1098	1168	34	0	16	7	307	273	26	
2	6	4	142	149	23	2	0	5	191	215	19	6	0	6	378	402	33	0	0	8	611	642	45	
4	6	4	360	385	14	4	0	5	218	211	26	8	0	6	984	1076	87	2	0	8	1007	1001	22	
8	6	4	186	186	27	1	1	5	132	120	20	1	1	6	809	796	22	1	1	8	157	100	26	
5	7	4	280	307	25	3	1	5	156	103	21	3	1	6	225	232	18	0	4	8	274	263	19	
7	7	4	250	279	20	0	2	5	268	207	13	5	1	6	785	850	45	0	6	8	217	199	23	
0	8	4	193	138	24	2	2	5	595	628	20	7	1	6	360	420	20							
2	8	4	502	541	38	4	2	5	181	215	22	0	2	6	155	127	22							
6	8	4	273	290	20	6	2	5	225	243	29	4	2	6	241	260	19							
8	8	4	472	468	45	1	3	5	396	365	20	1	3	6	246	270	18							
10	8	4	216	236	30	3	3	5	312	346	20	3	3	6	322	326	18							
3	9	4	494	515	13	7	3	5	296	329	19	5	3	6	363	395	41							
5	9	4	421	434	23	1	5	5	1001	960	46	0	4	6	467	443	18							
7	9	4	353	340	17	3	5	5	899	942	16	6	4	6	457	499	42							
0	10	4	316	282	20	5	5	5	603	641	41	8	4	6	221	190	29							

Table 6. Structure Factors  
D. Grunerite (2 hours, crystal B)

Values of  $10 \times F_{obs}$  and  $10 \times F_{calc}$

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
4	0	-8	863	915	49	5	1	-6	414	419	32	4	2	-5	290	276	10	4	16	-5	336	334	20
6	0	-8	280	287	20	9	1	-6	689	667	27	6	2	-5	137	115	17	6	16	-5	219	192	26
8	0	-8	505	543	28	2	2	-6	130	104	15	8	2	-5	379	388	37	10	16	-5	193	179	18
1	1	-8	400	407	26	4	2	-6	170	184	19	10	2	-5	147	158	23	3	17	-5	870	876	18
5	1	-8	264	263	20	7	3	-6	149	126	16	1	3	-5	263	267	22	5	17	-5	461	457	14
7	1	-8	469	478	38	9	3	-6	379	373	13	3	3	-5	579	568	11	7	17	-5	613	613	13
1	3	-8	188	194	15	11	3	-6	172	141	19	7	3	-5	207	184	14	9	17	-5	247	251	16
3	3	-8	142	129	17	4	4	-6	323	330	11	9	3	-5	162	168	17	2	18	-5	216	204	26
7	3	-8	186	205	21	8	4	-6	352	334	12	13	3	-5	249	249	29	4	18	-5	367	364	25
2	4	-8	171	190	16	11	5	-6	156	165	21	6	4	-5	140	81	22	6	18	-5	715	702	15
4	4	-8	179	181	18	4	6	-6	196	214	13	1	5	-5	129	117	15	8	18	-5	138	102	21
6	4	-8	272	287	40	6	6	-6	205	212	13	3	5	-5	1361	1321	18	1	19	-5	286	300	17
6	8	-8	120	106	19	10	6	-6	163	178	19	5	5	-5	531	495	17	3	19	-5	256	242	18
2	0	-7	139	119	22	2	8	-6	283	295	12	7	5	-5	909	854	63	5	19	-5	201	197	19
4	0	-7	138	126	16	4	8	-6	436	460	11	9	5	-5	376	354	12	8	20	-5	133	14	22
8	2	-7	123	104	20	6	8	-6	179	179	28	11	5	-5	223	206	22	1	21	-5	379	385	17
10	2	-7	234	203	15	1	9	-6	180	187	15	13	5	-5	641	634	34	5	21	-5	234	235	20
1	3	-7	263	282	14	3	9	-6	218	218	15	2	6	-5	552	557	9	7	21	-5	175	180	22
3	3	-7	172	178	15	5	9	-6	275	288	13	4	6	-5	1189	1169	51	4	22	-5	285	287	33
5	3	-7	258	259	12	7	9	-6	180	193	25	6	6	-5	1658	1590	71	2	0	-4	446	442	10
1	5	-7	683	700	20	9	9	-6	265	260	16	10	6	-5	875	892	26	4	0	-4	2010	1957	12
5	5	-7	571	588	22	2	10	-6	183	185	28	12	6	-5	401	413	14	6	0	-4	1485	1406	28
7	5	-7	248	255	14	10	10	-6	157	145	20	1	7	-5	165	164	14	8	0	-4	1233	1133	16
9	5	-7	513	520	39	1	11	-6	329	335	12	3	7	-5	800	807	12	10	0	-4	927	906	15
2	6	-7	790	831	31	3	11	-6	752	775	23	7	7	-5	454	456	11	12	0	-4	200	210	16
4	6	-7	350	369	12	5	11	-6	696	703	12	9	7	-5	136	118	21	14	0	-4	739	757	13
6	6	-7	256	291	34	9	11	-6	634	637	13	13	7	-5	400	397	15	1	1	-4	1152	1148	29
8	6	-7	948	965	46	11	11	-6	335	360	15	2	8	-5	153	146	23	3	1	-4	769	737	17
10	6	-7	221	203	34	2	12	-6	1249	1279	77	6	8	-5	323	310	24	7	1	-4	1421	1324	26
1	7	-7	403	399	29	6	12	-6	586	590	22	8	8	-5	180	164	26	9	1	-4	290	270	14
5	7	-7	381	380	30	8	12	-6	357	356	15	1	9	-5	400	388	11	11	1	-4	390	370	13
9	7	-7	233	245	16	10	12	-6	386	399	14	3	9	-5	343	369	25	2	2	-4	310	310	8
2	8	-7	152	161	17	5	13	-6	238	220	16	5	9	-5	289	242	12	4	2	-4	146	140	13
8	8	-7	160	132	16	7	13	-6	246	260	16	2	10	-5	344	326	11	6	2	-4	199	193	20
1	9	-7	141	148	18	9	13	-6	223	222	18	4	10	-5	341	349	17	8	2	-4	212	187	12
3	9	-7	288	280	33	2	14	-6	157	141	20	8	10	-5	484	477	15	10	2	-4	215	190	13
5	9	-7	149	134	17	4	14	-6	177	164	19	12	10	-5	166	180	21	1	3	-4	470	496	11
6	10	-7	344	350	16	1	15	-6	301	269	41	1	11	-5	154	125	20	3	3	-4	180	175	10
2	12	-7	157	129	17	7	15	-6	354	310	15	7	11	-5	139	117	18	5	3	-4	354	355	9
4	12	-7	137	130	21	4	16	-6	457	462	30	2	12	-5	142	157	19	7	3	-4	605	601	11
5	13	-7	150	116	19	2	0	-5	175	148	11	4	12	-5	165	173	16	9	3	-4	156	154	17
3	0	-6	1644	1628	93	4	0	-5	149	151	18	6	12	-5	186	189	29	2	4	-4	1061	1086	32
4	0	-6	572	559	36	6	0	-5	261	247	18	8	12	-5	188	175	18	4	4	-4	345	364	9
6	0	-6	981	953	64	8	0	-5	238	221	12	3	13	-5	172	196	19	6	4	-4	301	298	10
8	0	-6	281	290	13	14	0	-5	234	239	14	8	14	-5	162	120	18	8	4	-4	451	416	10
10	0	-6	730	712	48	1	1	-5	210	199	10	10	14	-5	172	159	19	12	4	-4	180	182	21
12	0	-6	892	844	32	3	1	-5	194	163	11	1	15	-5	282	278	14	1	5	-4	173	200	15
1	1	-6	419	421	12	5	1	-5	146	131	14	3	15	-5	324	310	27	5	5	-4	303	305	10
3	1	-6	610	582	32	2	2	-5	146	144	13	2	16	-5	195	194	26	7	5	-4	116	121	18



Table 6. continued  
D. Grunerite (2 hours, crystal B)

Values of 10×Fobs and 10×Fcalc

Page 2

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
13	5	-4	166	152	17	2	18	-4	189	218	21	4	6	-3	1670	1717	23	11	17	-3	706	709	14
2	6	-4	302	309	19	4	18	-4	187	179	18	6	6	-3	114	66	18	2	18	-3	819	825	14
4	6	-4	183	187	28	8	18	-4	238	265	18	8	6	-3	1934	1914	31	4	18	-3	603	617	12
8	6	-4	393	400	16	2	20	-4	263	253	19	10	6	-3	605	622	31	6	18	-3	278	289	16
1	7	-4	128	100	19	4	20	-4	292	275	29	12	6	-3	687	700	13	8	18	-3	914	934	15
5	7	-4	189	209	14	1	21	-4	162	122	23	14	6	-3	363	368	13	10	18	-3	206	200	24
7	7	-4	138	118	23	5	21	-4	209	200	24	1	7	-3	1395	1459	16	1	19	-3	245	227	21
9	7	-4	268	281	29	7	21	-4	170	155	25	3	7	-3	136	124	13	3	19	-3	444	453	13
11	7	-4	202	219	25	2	22	-4	162	163	25	5	7	-3	578	576	10	5	19	-3	203	198	19
2	8	-4	168	93	15	4	22	-4	238	231	18	7	7	-3	159	149	14	9	19	-3	166	166	24
4	8	-4	344	315	13	6	22	-4	260	247	18	9	7	-3	264	258	13	11	19	-3	174	153	22
6	8	-4	447	444	22	8	22	-4	253	273	24	11	7	-3	516	531	38	3	21	-3	537	516	14
8	8	-4	155	121	16	1	23	-4	512	527	15	13	7	-3	151	172	21	9	21	-3	240	244	19
10	8	-4	180	138	17	3	23	-4	339	332	20	2	8	-3	513	491	9	2	22	-3	233	223	20
12	8	-4	276	289	16	5	23	-4	174	152	21	4	8	-3	435	410	8	6	22	-3	423	413	15
14	8	-4	174	195	19	7	23	-4	626	662	14	6	8	-3	162	156	13	3	27	-3	166	148	23
1	9	-4	241	230	11	2	24	-4	310	318	37	8	8	-3	250	250	29	2	0	-2	3694	3699	33
7	9	-4	513	521	41	4	24	-4	345	373	31	10	8	-3	306	316	25	4	0	-2	2186	2224	30
9	9	-4	290	273	12	5	25	-4	207	229	18	1	9	-3	648	655	11	6	0	-2	2081	2158	41
11	9	-4	201	223	18	2	0	-3	408	416	7	3	9	-3	537	522	9	8	0	-2	978	947	22
13	9	-4	160	172	21	4	0	-3	363	371	8	7	9	-3	131	64	16	10	0	-2	351	323	12
4	10	-4	194	186	14	6	0	-3	182	179	21	13	9	-3	259	228	16	12	0	-2	1501	1509	23
6	10	-4	306	188	14	8	0	-3	153	134	23	2	10	-3	732	733	12	14	0	-2	269	275	15
1	11	-4	979	972	56	10	0	-3	155	142	16	6	10	-3	599	604	11	1	1	-2	1029	1053	25
3	11	-4	640	634	42	12	0	-3	296	302	12	10	10	-3	390	402	12	3	1	-2	1653	1651	27
5	11	-4	574	568	45	1	1	-3	253	258	8	1	11	-3	307	305	12	5	1	-2	1636	1726	12
7	11	-4	1339	1339	132	3	1	-3	262	266	15	2	12	-3	270	283	15	7	1	-2	278	294	9
9	11	-4	253	266	14	7	1	-3	111	92	17	4	12	-3	296	306	27	9	1	-2	984	962	14
11	11	-4	560	558	13	2	2	-3	533	548	9	6	12	-3	191	191	14	11	1	-2	341	351	25
13	11	-4	242	257	24	4	2	-3	264	236	9	12	12	-3	283	260	14	13	1	-2	324	323	15
4	12	-4	1081	1078	64	6	2	-3	512	513	12	1	13	-3	195	200	15	15	1	-2	278	289	17
6	12	-4	488	508	30	8	2	-3	237	239	12	5	13	-3	241	246	39	2	2	-2	282	283	18
8	12	-4	924	941	68	10	2	-3	326	325	11	4	14	-3	263	274	15	4	2	-2	481	497	8
10	12	-4	641	639	15	1	3	-3	1107	1177	36	6	14	-3	295	293	22	6	2	-2	277	284	8
7	13	-4	473	468	12	3	3	-3	235	247	9	8	14	-3	311	330	29	8	2	-2	200	195	11
9	13	-4	296	293	13	5	3	-3	283	289	9	10	14	-3	155	133	18	12	2	-2	190	199	22
11	13	-4	189	176	19	7	3	-3	306	315	10	1	15	-3	471	486	12	1	3	-2	109	98	12
2	14	-4	191	172	27	11	3	-3	297	314	13	3	15	-3	224	252	38	3	3	-2	637	634	11
4	14	-4	151	141	20	13	3	-3	149	133	18	5	15	-3	239	239	28	5	3	-2	363	413	20
6	14	-4	192	216	16	15	3	-3	177	173	17	11	15	-3	203	210	19	7	3	-2	669	680	12
8	14	-4	183	200	18	4	4	-3	246	241	9	2	16	-3	378	403	29	9	3	-2	601	595	11
10	14	-4	157	134	21	10	4	-3	150	135	21	6	16	-3	320	223	38	13	3	-2	162	163	18
1	15	-4	171	155	19	1	5	-3	2420	2526	48	3	16	-3	277	286	35	15	3	-2	176	174	18
3	15	-4	383	346	19	3	5	-3	681	685	11	12	16	-3	229	218	13	2	4	-2	555	567	13
5	15	-4	207	197	28	5	5	-3	1107	1128	13	1	17	-3	1435	1455	18	4	4	-2	1149	1235	14
7	15	-4	170	167	19	7	5	-3	580	561	10	3	17	-3	382	408	24	6	4	-2	275	278	10
9	15	-4	457	433	14	9	5	-3	758	750	45	5	17	-3	753	809	14	8	4	-2	212	207	16
2	16	-4	395	394	25	11	5	-3	919	932	34	7	17	-3	375	401	15	10	4	-2	630	603	11
6	16	-4	502	521	13	2	6	-3	2201	2276	11	9	17	-3	516	532	13	12	4	-2	252	234	13

Table 6. continued  
D. Grunerite (2 hours, crystal B)

Values of 10×Fobs and 10×Fcalc

Page 3

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
14	4	-2	247	223	14	4	14	-2	383	382	25	2	2	-1	464	469	11	14	10	-1	152	154	21
1	5	-2	136	136	11	6	14	-2	250	229	15	4	2	-1	917	958	36	1	11	-1	413	409	9
3	5	-2	456	431	8	8	14	-2	139	130	19	6	2	-1	288	263	22	3	11	-1	239	192	10
5	5	-2	165	163	12	12	14	-2	213	219	17	8	2	-1	517	516	31	5	11	-1	124	123	17
7	5	-2	406	406	10	1	15	-2	315	284	24	1	3	-1	885	893	8	2	12	-1	298	295	10
9	5	-2	326	329	10	3	15	-2	460	455	15	3	3	-1	793	874	13	4	12	-1	245	241	22
2	6	-2	244	229	8	7	15	-2	495	501	13	5	3	-1	449	466	8	6	12	-1	288	307	12
4	6	-2	324	327	8	4	16	-2	624	632	11	9	3	-1	412	403	12	8	12	-1	199	201	15
6	6	-2	603	592	24	6	16	-2	338	366	14	13	3	-1	287	280	14	10	12	-1	186	205	16
10	6	-2	171	182	14	8	16	-2	166	150	20	2	4	-1	214	198	8	3	13	-1	245	259	12
12	6	-2	176	167	20	10	16	-2	279	296	16	4	4	-1	110	99	12	13	13	-1	147	127	22
1	7	-2	110	4	14	5	17	-2	193	198	16	6	4	-1	122	93	14	2	14	-1	482	484	10
3	7	-2	323	332	11	2	18	-2	200	220	17	8	4	-1	131	126	15	4	14	-1	296	309	11
5	7	-2	239	236	16	4	18	-2	169	184	19	10	4	-1	147	138	15	6	14	-1	216	238	16
11	7	-2	136	138	19	6	18	-2	315	329	15	12	4	-1	132	119	19	8	14	-1	205	222	15
2	8	-2	910	886	23	10	18	-2	172	166	21	3	5	-1	1812	1898	49	10	14	-1	173	187	19
4	8	-2	487	493	30	3	19	-2	134	126	22	5	5	-1	1258	1306	11	1	15	-1	403	421	22
6	8	-2	245	222	11	9	19	-2	303	287	16	7	5	-1	1317	1295	12	3	15	-1	243	268	22
8	8	-2	236	204	12	2	20	-2	180	156	19	9	5	-1	1020	958	41	5	15	-1	171	178	17
14	8	-2	204	206	17	4	20	-2	273	279	15	13	5	-1	688	695	12	9	15	-1	148	171	22
1	9	-2	151	118	13	6	20	-2	216	215	19	15	5	-1	265	264	14	13	15	-1	206	186	18
3	9	-2	132	130	14	10	20	-2	155	166	24	2	6	-1	1061	1142	31	2	16	-1	210	208	15
5	9	-2	799	831	15	7	21	-2	280	275	17	4	6	-1	1043	1064	28	4	16	-1	396	408	11
7	9	-2	210	214	12	9	21	-2	194	164	19	6	6	-1	3308	3388	18	6	16	-1	402	411	22
9	9	-2	249	258	13	2	22	-2	398	421	15	8	6	-1	427	417	9	8	16	-1	173	179	19
11	9	-2	143	130	18	4	22	-2	362	362	16	10	6	-1	824	817	32	10	16	-1	246	247	35
2	10	-2	421	395	9	6	22	-2	304	278	20	12	6	-1	584	594	19	1	17	-1	204	180	15
4	10	-2	275	242	10	10	22	-2	217	219	20	14	6	-1	440	424	12	3	17	-1	962	1034	16
6	10	-2	240	204	12	1	23	-2	432	424	18	1	7	-1	570	579	10	5	17	-1	774	809	14
10	10	-2	155	167	17	3	23	-2	564	559	14	3	7	-1	1108	1140	26	7	17	-1	862	903	19
1	11	-2	1146	1088	13	5	23	-2	827	803	19	5	7	-1	295	303	10	9	17	-1	584	605	13
3	11	-2	1108	1088	14	9	23	-2	405	422	18	7	7	-1	485	476	9	2	18	-1	549	564	16
5	11	-2	2047	2046	14	2	24	-2	658	647	33	9	7	-1	572	564	10	6	18	-1	1204	1241	18
7	11	-2	256	244	12	6	24	-2	293	262	18	11	7	-1	237	241	13	10	18	-1	410	400	18
9	11	-2	691	722	29	3	25	-2	220	209	28	13	7	-1	407	403	12	12	18	-1	184	209	21
11	11	-2	477	497	12	7	25	-2	274	266	23	2	8	-1	448	429	17	1	19	-1	457	486	13
13	11	-2	585	604	12	1	27	-2	243	239	21	4	8	-1	350	322	29	3	19	-1	156	158	21
2	12	-2	2766	2737	45	3	27	-2	225	226	23	6	8	-1	549	520	10	5	19	-1	213	210	17
4	12	-2	1121	1125	14	5	27	-2	157	124	25	8	8	-1	353	335	9	11	19	-1	263	258	17
6	12	-2	723	711	13	2	0	-1	345	366	9	12	8	-1	207	214	16	4	20	-1	143	66	22
8	12	-2	667	694	23	4	0	-1	208	209	8	1	9	-1	1051	1005	12	6	20	-1	246	211	22
10	12	-2	356	362	17	6	0	-1	377	385	7	3	9	-1	474	431	19	1	21	-1	636	636	13
12	12	-2	835	864	28	8	0	-1	272	271	15	7	9	-1	301	297	14	3	21	-1	147	118	24
3	13	-2	368	359	14	10	0	-1	239	234	11	9	9	-1	183	177	15	5	21	-1	261	214	17
5	13	-2	708	731	23	12	0	-1	128	148	19	11	9	-1	250	236	14	7	21	-1	297	294	17
7	13	-2	310	337	33	14	0	-1	234	242	15	2	10	-1	237	216	15	4	22	-1	449	454	36
9	13	-2	175	162	26	1	1	-1	560	580	7	4	10	-1	1093	1087	41	8	22	-1	298	284	19
13	13	-2	162	135	20	3	1	-1	254	264	7	8	10	-1	568	591	37	2	24	-1	200	204	21
2	14	-2	308	297	14	5	1	-1	157	137	9	10	10	-1	178	166	16	3	25	-1	222	204	20

Table 6. continued  
 D. Grunerite (2 hours, crystal B)

Values of 10\*Fobs and 10\*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
1	27	-1	258	266	19	6	8	0	345	314	8	7	17	0	258	264	15	6	4	1	98	15	16
4	28	-1	249	252	19	8	8	0	362	372	20	0	18	0	229	228	15	10	4	1	164	173	26
2	0	0	1049	1027	16	10	8	0	421	425	12	2	18	0	249	258	14	1	5	1	2939	2934	78
4	0	0	693	801	8	12	8	0	259	257	14	4	18	0	307	327	18	3	5	1	1782	1703	13
6	0	0	2171	2179	33	1	9	0	649	613	12	8	18	0	245	274	22	5	5	1	1233	1223	51
8	0	0	1421	1423	31	5	9	0	335	323	13	3	19	0	206	218	21	7	5	1	772	742	36
10	0	0	1437	1385	55	7	9	0	891	880	19	0	20	0	320	375	16	9	5	1	286	280	22
14	0	0	695	690	13	13	9	0	255	280	33	2	20	0	282	271	18	11	5	1	983	1004	16
1	1	0	1325	1339	11	0	10	0	616	568	10	3	21	0	203	196	19	13	5	1	180	153	23
3	1	0	2481	2433	41	2	10	0	242	194	10	5	21	0	267	245	17	0	6	1	2403	2355	32
5	1	0	320	304	6	4	10	0	240	201	32	0	22	0	520	526	13	2	6	1	2711	2657	10
7	1	0	1178	1183	19	6	10	0	172	149	14	2	22	0	304	313	16	4	6	1	3076	3019	40
9	1	0	655	602	26	8	10	0	225	222	12	4	22	0	269	266	17	8	6	1	1440	1397	22
11	1	0	525	521	25	10	10	0	130	95	21	6	22	0	241	228	20	10	6	1	805	824	21
13	1	0	165	146	18	1	11	0	2042	1975	12	8	22	0	340	309	17	12	6	1	526	511	19
0	2	0	518	560	5	3	11	0	1432	1398	30	1	23	0	606	587	17	14	6	1	498	506	13
2	2	0	632	601	14	5	11	0	129	92	17	3	23	0	734	726	14	1	7	1	1454	1459	32
4	2	0	199	205	8	7	11	0	1646	1665	40	7	23	0	701	644	14	3	7	1	511	473	9
6	2	0	311	302	9	9	11	0	604	634	11	9	23	0	352	371	22	5	7	1	590	579	22
8	2	0	253	241	9	11	11	0	463	476	12	0	24	0	1007	995	18	7	7	1	355	330	19
10	2	0	209	208	23	13	11	0	329	343	24	4	24	0	201	153	22	11	7	1	626	631	14
1	3	0	205	196	21	0	12	0	3075	3016	12	6	24	0	275	278	20	0	8	1	556	538	12
3	3	0	999	1023	23	2	12	0	611	572	11	1	25	0	235	245	26	2	8	1	569	546	19
5	3	0	496	485	9	4	12	0	1258	1213	33	5	25	0	303	301	19	4	8	1	578	543	14
7	3	0	489	480	12	6	12	0	779	800	23	1	27	0	269	297	21	6	8	1	216	185	11
0	4	0	836	817	8	8	12	0	576	608	21	5	27	0	341	345	19	8	8	1	133	111	17
2	4	0	1475	1492	10	10	12	0	1140	1197	18	2	28	0	278	267	27	10	8	1	345	358	15
4	4	0	517	488	8	1	13	0	207	149	13	0	0	1	481	492	14	1	9	1	589	575	10
8	4	0	448	424	22	3	13	0	366	350	11	2	0	1	472	491	15	3	9	1	184	144	11
12	4	0	340	330	15	5	13	0	549	577	10	4	0	1	457	474	8	5	9	1	302	276	12
1	5	0	434	432	22	7	13	0	595	623	11	6	0	1	153	149	11	7	9	1	216	171	11
3	5	0	435	407	7	9	13	0	146	126	19	8	0	1	195	173	11	9	9	1	228	229	14
5	5	0	258	253	9	0	14	0	519	481	9	12	0	1	291	316	13	11	9	1	188	202	19
9	5	0	153	152	14	2	14	0	393	358	16	1	1	1	385	375	37	13	9	1	168	141	20
11	5	0	204	190	14	4	14	0	163	140	16	3	1	1	243	263	8	0	10	1	317	327	9
13	5	0	163	167	19	6	14	0	255	259	13	0	2	1	196	65	8	2	10	1	1150	1154	23
0	6	0	473	441	8	8	14	0	245	246	27	2	2	1	1269	1278	32	6	10	1	653	644	11
2	6	0	511	497	16	10	14	0	194	191	23	4	2	1	395	376	54	10	10	1	295	291	13
4	6	0	415	440	7	1	15	0	219	217	14	6	2	1	512	544	9	12	10	1	191	189	19
6	6	0	122	90	18	3	15	0	229	194	32	8	2	1	132	137	17	1	11	1	175	170	12
8	6	0	437	435	9	5	15	0	612	599	12	10	2	1	147	144	15	0	12	1	375	361	9
10	6	0	132	153	18	7	15	0	399	305	13	12	2	1	132	126	20	2	12	1	356	357	10
1	7	0	361	306	16	9	15	0	290	290	15	1	3	1	1452	1432	39	4	12	1	313	308	11
3	7	0	397	373	7	0	16	0	399	440	11	3	3	1	231	277	9	6	12	1	146	160	17
7	7	0	501	499	10	2	16	0	668	697	11	7	3	1	470	453	30	8	12	1	207	206	15
9	7	0	319	325	10	6	16	0	464	493	29	11	3	1	348	359	16	12	12	1	258	254	16
0	8	0	567	513	9	8	16	0	453	480	34	0	4	1	219	168	8	1	13	1	361	370	10
2	8	0	388	400	10	12	16	0	322	315	16	2	4	1	95	41	16	3	13	1	207	202	14
4	8	0	879	862	20	1	17	0	150	189	19	4	4	1	178	105	13	0	14	1	135	14	18

Table 6. continued  
D. Grunerite (2 hours, crystal B)

Values of 10×Fobs and 10×Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	14	1	442	456	19	3	1	2	444	423	8	11	11	2	327	324	15	0	2	3	540	575	23
4	14	1	517	536	28	5	1	2	2009	2061	61	0	12	2	682	676	12	2	2	3	540	523	24
6	14	1	291	290	22	9	1	2	358	376	19	2	12	2	1383	1336	14	4	2	3	653	643	16
8	14	1	156	159	21	11	1	2	399	414	42	4	12	2	1542	1561	21	6	2	3	131	123	16
1	15	1	696	703	12	0	2	2	330	343	6	6	12	2	634	644	11	8	2	3	161	175	17
5	15	1	138	128	19	2	2	2	279	285	7	8	12	2	672	686	12	1	3	3	271	274	8
7	15	1	315	318	17	4	2	2	460	460	12	12	12	2	712	682	13	3	3	3	108	97	15
11	15	1	169	148	27	6	2	2	189	179	12	1	13	2	599	580	11	5	3	3	548	541	10
0	16	1	358	370	11	1	3	2	276	198	17	3	13	2	559	589	31	9	3	3	266	274	22
2	16	1	516	540	21	5	3	2	909	928	41	5	13	2	530	520	11	0	4	3	129	97	12
4	16	1	328	348	18	7	3	2	453	462	26	0	14	2	279	226	12	2	4	3	129	79	12
6	16	1	200	197	17	11	3	2	320	334	13	2	14	2	219	213	13	10	4	3	136	142	22
8	16	1	284	288	15	0	4	2	156	202	10	4	14	2	344	356	17	1	5	3	619	633	10
12	16	1	218	214	19	2	4	2	252	236	9	6	14	2	203	201	16	3	5	3	890	859	45
1	17	1	1600	1661	44	4	4	2	1109	1115	13	1	15	2	153	72	16	5	5	3	897	863	13
3	17	1	794	843	30	6	4	2	356	351	27	3	15	2	570	565	47	7	5	3	540	554	36
5	17	1	710	734	15	8	4	2	313	316	12	7	15	2	307	281	14	9	5	3	854	878	61
7	17	1	529	555	21	10	4	2	506	527	17	0	16	2	807	827	16	0	6	3	1676	1705	24
9	17	1	231	253	19	1	5	2	618	606	17	2	16	2	237	237	37	2	6	3	1783	1778	20
11	17	1	722	721	24	5	5	2	335	339	19	4	16	2	293	291	14	6	6	3	1848	1832	23
0	18	1	542	564	11	7	5	2	447	456	34	6	16	2	365	369	14	8	6	3	706	734	47
2	18	1	539	526	24	0	6	2	383	381	23	10	16	2	289	292	17	10	6	3	381	384	43
4	18	1	1262	1284	19	2	6	2	351	360	15	1	17	2	133	122	21	12	6	3	417	432	24
6	18	1	291	327	30	4	6	2	139	95	18	0	18	2	251	238	15	3	7	3	420	399	17
8	18	1	564	551	21	6	6	2	505	498	29	2	18	2	230	264	22	5	7	3	407	384	10
10	18	1	383	376	16	12	6	2	177	155	18	6	18	2	276	292	16	9	7	3	552	539	45
1	19	1	348	331	25	1	7	2	530	485	36	0	20	2	145	62	22	0	8	3	379	356	20
3	19	1	347	358	27	3	7	2	217	205	10	4	20	2	168	184	23	2	8	3	300	273	9
9	19	1	268	268	18	9	7	2	220	222	14	8	20	2	267	221	18	4	8	3	215	194	12
2	20	1	190	150	19	11	7	2	149	156	21	5	21	2	245	227	19	6	8	3	282	279	17
4	20	1	156	156	24	0	8	2	811	762	25	2	22	2	296	297	17	8	8	3	277	271	12
3	21	1	417	395	14	2	8	2	203	153	22	4	22	2	331	321	17	1	9	3	538	495	39
5	21	1	346	339	30	4	8	2	174	119	14	6	22	2	323	306	18	3	9	3	195	108	13
9	21	1	286	273	41	6	8	2	234	226	15	1	23	2	446	450	17	5	9	3	247	248	13
0	22	1	317	309	15	10	8	2	143	137	20	3	23	2	261	244	28	7	9	3	280	273	32
2	22	1	503	503	15	12	8	2	212	207	18	5	23	2	901	867	17	11	9	3	173	144	22
6	22	1	395	393	17	1	9	2	736	744	12	0	24	2	289	283	47	0	10	3	669	671	12
1	23	1	289	271	18	3	9	2	234	225	11	2	24	2	429	414	50	2	10	3	228	204	12
2	24	1	183	155	23	5	9	2	530	526	10	4	24	2	245	217	22	4	10	3	798	792	13
8	24	1	169	136	22	11	9	2	165	151	20	3	25	2	317	306	19	6	10	3	131	96	22
2	28	1	297	330	22	0	10	2	151	111	24	3	27	2	311	303	29	8	10	3	232	221	14
1	29	1	437	479	16	2	10	2	269	228	11	0	28	2	189	203	37	10	10	3	155	173	32
0	0	2	178	122	9	4	10	2	189	164	14	0	0	3	353	345	7	1	11	3	335	316	16
2	0	2	2767	2742	34	6	10	2	362	260	12	2	0	3	187	184	9	0	12	3	257	264	13
4	0	2	1877	1952	18	1	11	2	1510	1468	14	4	0	3	151	134	16	2	12	3	223	223	14
6	0	2	1346	1374	21	3	11	2	510	463	18	6	0	3	286	275	11	4	12	3	148	142	19
8	0	2	1429	1489	34	5	11	2	1749	1716	50	10	0	3	202	217	16	6	12	3	228	217	15
12	0	2	861	860	36	7	11	2	520	545	14	1	1	3	300	307	7	10	12	3	211	192	31
1	1	2	546	604	21	9	11	2	458	485	17	5	1	3	111	46	17	3	13	3	176	178	20

Table 6. continued  
D. Grunerite (2 hours, crystal B)

Values of  $10 \times F_{obs}$  and  $10 \times F_{calc}$

Page 6

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	14	3	237	244	16	2	4	4	167	163	13	4	18	4	232	230	19	3	15	5	226	196	19
2	14	3	388	361	36	4	4	4	365	366	15	0	20	4	179	167	22	2	16	5	204	218	20
4	14	3	222	218	18	8	4	4	223	221	18	1	21	4	203	187	24	4	16	5	262	247	18
6	14	3	233	223	34	1	5	4	272	277	14	0	22	4	308	320	21	1	17	5	599	600	31
5	15	3	234	216	17	9	5	4	204	195	21	2	22	4	265	277	18	3	17	5	615	607	25
9	15	3	177	170	24	0	6	4	283	293	10	4	22	4	190	221	25	5	17	5	333	348	43
0	16	3	405	414	36	4	6	4	282	295	38	1	23	4	303	296	18	0	18	5	503	496	35
2	16	3	255	246	15	8	6	4	157	149	20	3	23	4	596	609	43	4	18	5	754	721	62
4	16	3	171	185	22	3	7	4	164	137	14	0	24	4	528	544	29	2	22	5	344	365	28
6	16	3	270	273	16	5	7	4	246	265	30	2	24	4	209	207	24	0	0	6	272	280	11
8	16	3	164	155	23	7	7	4	212	216	24	1	25	4	243	282	28	2	0	6	636	655	20
10	16	3	182	218	22	0	8	4	165	136	14	0	0	5	163	174	13	4	0	6	892	882	15
1	17	3	469	480	16	2	8	4	430	447	41	2	0	5	201	186	11	6	0	6	255	254	15
3	17	3	541	562	22	4	8	4	142	142	17	4	0	5	173	182	23	8	0	6	706	711	22
5	17	3	571	559	48	6	8	4	282	247	19	0	2	5	227	197	11	1	1	6	625	633	10
7	17	3	514	484	32	8	8	4	375	355	26	2	2	5	531	519	10	3	1	6	175	177	15
9	17	3	669	645	38	10	8	4	165	160	20	4	2	5	171	180	14	5	1	6	609	623	22
0	18	3	417	406	17	1	9	4	150	139	14	6	2	5	176	181	16	7	1	6	298	294	14
2	18	3	640	655	26	3	9	4	432	439	10	1	3	5	314	301	14	4	2	6	154	161	18
6	18	3	890	837	31	5	9	4	335	340	12	3	3	5	272	283	11	1	3	6	198	205	14
8	18	3	197	194	22	7	9	4	274	255	15	7	3	5	244	239	14	3	3	6	257	270	27
1	19	3	180	211	19	9	9	4	238	230	17	1	5	5	801	802	40	5	3	6	261	280	13
9	19	3	230	193	18	0	10	4	269	233	11	3	5	5	776	763	30	0	4	6	350	356	10
2	20	3	149	94	23	2	10	4	199	192	33	5	5	5	451	466	13	6	4	6	349	352	13
8	20	3	168	140	26	4	10	4	216	200	15	7	5	5	541	538	25	3	5	6	167	183	17
1	21	3	360	359	16	1	11	4	840	856	65	0	6	5	1066	1084	49	2	6	6	151	190	19
3	21	3	250	228	20	3	11	4	1352	1330	60	2	6	5	470	461	32	6	6	6	154	160	18
7	21	3	267	259	20	7	11	4	629	605	35	4	6	5	1492	1507	97	1	7	6	135	110	16
0	22	3	362	368	21	9	11	4	556	544	15	6	6	5	222	215	14	1	9	6	273	285	13
2	26	3	208	191	24	0	12	4	1650	1666	67	8	6	5	370	366	14	5	9	6	144	143	21
0	0	4	2831	2831	30	2	12	4	658	627	12	1	7	5	401	393	26	1	11	6	715	721	45
2	0	4	1789	1776	12	4	12	4	469	482	12	3	7	5	289	274	13	3	11	6	141	145	21
4	0	4	509	484	9	6	12	4	701	725	13	5	7	5	176	172	16	5	11	6	564	569	13
6	0	4	902	900	28	10	12	4	681	676	17	7	7	5	364	363	19	0	12	6	241	249	15
8	0	4	487	487	11	1	13	4	126	103	21	9	7	5	156	144	22	2	12	6	177	179	23
10	0	4	953	948	25	3	13	4	588	559	34	0	8	5	233	244	17	4	12	6	630	607	46
1	1	4	253	231	9	5	13	4	358	364	17	2	8	5	212	199	27	6	12	6	338	299	15
3	1	4	1322	1287	12	7	13	4	194	167	20	5	9	5	222	202	15	1	13	6	344	346	28
5	1	4	123	95	16	9	13	4	144	104	23	9	9	5	164	145	24	3	13	6	164	186	23
7	1	4	439	435	11	0	14	4	254	256	20	2	10	5	527	534	22	3	15	6	232	213	18
9	1	4	304	296	15	2	14	4	254	265	14	6	10	5	288	274	19	0	16	6	226	205	19
11	1	4	287	278	17	8	14	4	159	123	25	8	10	5	144	112	23	2	16	6	235	233	19
0	2	4	283	273	8	1	15	4	278	247	16	2	12	5	176	173	18	2	18	6	153	143	23
2	2	4	260	255	9	5	15	4	468	427	49	4	12	5	179	178	21	0	0	7	120	140	19
6	2	4	155	132	15	0	16	4	158	166	25	1	13	5	163	153	21	6	0	7	124	122	20
1	3	4	346	344	15	2	16	4	489	491	64	0	14	5	306	284	15	0	2	7	274	287	12
3	3	4	427	417	8	8	16	4	408	398	17	2	14	5	314	320	15	2	2	7	172	176	20
5	3	4	126	131	18	5	17	4	204	185	20	4	14	5	214	198	30	4	2	7	157	160	18
7	3	4	143	136	20	0	18	4	181	187	30	1	15	5	212	190	17	5	3	7	172	187	21

