

AM-91-482

Ordering of divalent cations in the apatite structure: Crystal structure
refinements of natural Mn- and Sr-bearing apatite

John M. Hughes, Maryellen Cameron, Kevin D. Crowley

For deposit: Tables 3 & 6

American Mineralogist, 76, 11-12, 1857-1862.

Table 3. Anisotropic thermal parameters ($\text{\AA}^2, \times 10^4$) for atoms in Mn- and Sr-bearing apatites.

(For Deposit)

	β_{11}	β_{22}	β_{33}	β_{12}	β_{13}	β_{23}
Ca(1)						
Sr _{0.63}	37.1(4)	37.1	31(1)	31	0	0
Sr _{0.29}	32.5(4)	32.5	25(1)	32.5	0	0
Mn _{1.21}	37.6(5)	37.6	47(1)	37.6	0	0
Mn _{0.42}	35.5(4)	35.5	32.7(9)	35.5	0	0
Ca(2)						
Sr _{0.63}	30.5(4)	35.5(4)	37.4(7)	37.7(6)	0	0
Sr _{0.29}	25.2(4)	29.3(4)	33.7(8)	31.1(6)	0	0
Mn _{1.21}	32.8(5)	37.9(5)	44(1)	37.1(8)	0	0
Mn _{0.42}	27.6(4)	31.8(4)	37.9(7)	30.9(5)	0	0
P						
Sr _{0.63}	21.1(5)	23.9(5)	34(1)	24.8(7)	0	0
Sr _{0.29}	19.6(5)	20.4(5)	28(1)	23.6(7)	0	0
Mn _{1.21}	24.3(7)	25.2(7)	46(2)	26(1)	0	0
Mn _{0.42}	21.0(5)	21.6(5)	34(1)	23.2(7)	0	0
O(1)						
Sr _{0.63}	37(2)	44(2)	55(3)	59(2)	0	0
Sr _{0.29}	31(2)	44(2)	54(4)	56(2)	0	0
Mn _{1.21}	44(2)	56(2)	77(5)	78(3)	0	0
Mn _{0.42}	35(2)	51(2)	52(3)	62(2)	0	0

O(2)

Sr _{0.63}	35(2)	23(2)	93(4)	25(3)	0	0
Sr _{0.29}	31(2)	20(2)	80(4)	19(2)	0	0
Mn _{1.21}	41(2)	29(2)	224(9)	33(4)	0	0
Mn _{0.42}	33(2)	21(2)	125(4)	23(2)	0	0

O(3)

Sr _{0.63}	41(1)	76(1)	48(3)	70(2)	-37(3)	-53(4)
Sr _{0.29}	36(1)	69(1)	47(3)	63(2)	-28(3)	-46(4)
Mn _{1.21}	55(2)	133(2)	65(4)	123(2)	-43(5)	-79(5)
Mn _{0.42}	44(1)	93(1)	48(2)	89(2)	-37(3)	-58(3)

F

Sr _{0.63}	47(2)	47	186(8)	47	0	0
Sr _{0.29}	44(2)	44	182(9)	44	0	0
Mn _{1.21}	50(3)	50	230(10)	50	0	0
Mn _{0.42}	41(2)	41	184(7)	41	0	0

Note: The form of the anisotropic displacement parameter is:

$$\exp[-(\beta_{11}h^2 + \beta_{22}k^2 + \beta_{33}l^2 + \beta_{12}hk + \beta_{13}hl + \beta_{23}kl)]$$

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc (Mn_{0.42})

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	1	0	172	177	2	0	7	0	124	111	11	6	4	1	311	315	5
1	1	0	90	91	5	1	7	0	183	181	7	8	4	1	212	209	9
2	1	0	180	179	3	2	7	0	326	326	8	0	5	1	318	300	4
3	1	0	909	846	9	3	7	0	409	410	5	1	5	1	655	642	5
4	1	0	811	796	8	4	7	0	234	239	6	2	5	1	381	387	4
6	1	0	437	439	5	5	7	0	290	285	5	3	5	1	126	123	6
7	1	0	704	702	11	6	7	0	269	265	6	4	5	1	265	269	8
9	1	0	224	218	5	0	8	0	525	530	6	5	5	1	220	222	5
10	1	0	415	405	8	1	8	0	123	138	7	6	5	1	335	337	10
1	2	0	294	279	5	2	8	0	361	365	6	7	5	1	185	186	6
2	2	0	584	590	4	4	8	0	230	226	6	1	3	6	198	198	5
2	2	0	106	114	5	5	8	0	428	422	5	3	6	1	484	490	5
3	2	0	534	514	10	0	9	0	327	331	6	5	6	1	290	280	6
4	2	0	742	722	5	1	9	0	150	155	7	7	6	1	134	129	13
5	2	0	346	348	4	2	9	0	106	101	13	1	7	1	142	144	6
6	2	0	224	221	4	3	9	0	378	366	5	2	7	1	234	238	5
7	2	0	271	273	4	0	10	0	189	186	7	3	7	1	301	296	8
8	2	0	191	194	8	1	10	0	102	99	9	4	7	1	210	210	5
9	2	0	317	310	7	2	10	0	184	183	7	5	7	1	162	159	10
10	2	0	295	292	6	0	1	1	105	113	4	6	7	1	217	210	6
1	3	0	1230	1220	9	1	1	1	204	207	3	1	8	1	103	97	7
1	3	0	475	462	5	2	1	1	647	651	4	2	8	1	230	227	7
3	3	0	317	305	3	3	1	1	316	319	3	3	8	1	139	142	9
5	3	0	356	351	4	4	1	1	131	130	4	0	9	1	242	246	5
6	3	0	86	88	11	5	1	1	229	227	3	1	9	1	151	151	6
7	3	0	117	117	7	6	1	1	232	230	4	3	9	1	130	124	8
8	3	0	159	159	6	10	1	1	162	158	6	0	10	1	114	119	8
9	3	0	176	176	7	0	2	1	133	134	6	1	10	1	515	510	12
0	4	0	274	287	10	0	2	1	938	950	12	2	10	1	110	107	9
1	4	0	743	736	9	2	2	1	265	276	3	0	1	2	1215	1227	4
2	4	0	176	175	4	3	2	1	556	559	5	0	1	2	367	379	4
3	4	0	275	275	4	4	2	1	352	363	8	0	1	2	763	780	11
4	4	0	675	670	7	5	2	1	257	257	4	1	1	2	159	144	4
5	4	0	79	85	8	6	2	1	148	157	7	3	1	2	544	539	5
6	4	0	291	291	5	8	2	1	260	252	7	5	1	2	364	362	5
7	4	0	385	385	5	9	2	1	432	434	10	6	1	2	277	286	4
8	4	0	156	156	7	0	3	1	282	268	3	7	1	2	185	187	5
0	5	0	190	199	6	1	3	1	242	226	3	8	1	2	424	424	7
1	5	0	438	431	5	2	3	1	564	564	6	9	1	2	110	106	10
2	5	0	706	697	7	3	3	1	512	514	8	0	2	2	647	635	8
3	5	0	216	216	5	4	4	1	88	82	7	1	2	2	340	326	6
4	5	0	143	138	5	6	3	1	244	247	7	1	2	2	938	947	8
5	5	0	436	442	9	7	3	1	215	219	5	3	2	2	139	141	4
6	5	0	366	363	7	9	3	1	232	225	6	4	2	2	174	174	5
8	5	0	306	302	11	0	4	1	76	90	7	5	2	3	727	732	9
0	6	0	232	233	4	1	4	1	168	170	6	6	2	2	90	86	7
1	6	0	506	493	6	2	4	1	176	175	5	8	2	2	377	381	5
5	6	0	93	88	9	3	4	1	614	614	10	9	2	2	163	170	7
6	6	0	129	130	9	4	4	1	333	338	5	0	3	3	208	193	5
7	6	0	277	274	6	5	4	1	280	283	8	1	3	3	453	451	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	1	0	171	186	4	6	7	0	270	268	8	4	7	1	199	200	9	3	3	5	568	570	8	
0	2	0	307	289	4	7	1	0	721	715	7	5	1	1	229	225	5	3	3	6	425	432	6	
0	3	0	1344	1294	7	7	2	0	264	261	7	5	2	1	259	260	6	3	3	8	183	188	10	
0	4	0	262	292	9	7	3	0	119	116	12	5	4	1	267	269	7	3	3	9	119	125	13	
0	5	0	198	206	7	7	4	0	380	379	7	5	5	1	216	221	8	4	4	2	172	163	12	
0	6	0	232	243	8	7	6	0	252	240	9	5	6	1	274	276	7	4	4	3	488	488	7	
0	7	0	117	101	10	8	2	0	183	190	9	5	7	1	143	143	11	4	4	4	174	174	7	
0	8	0	509	511	7	8	3	0	121	128	12	6	1	1	224	228	6	4	5	2	257	259	7	
0	9	0	316	317	8	8	4	0	126	128	12	6	2	1	154	157	8	4	6	2	135	142	10	
0	10	0	180	180	11	8	5	0	306	301	9	6	3	1	224	230	8	4	7	2	148	148	11	
1	1	2	0	623	4	9	1	0	197	199	11	6	4	1	297	300	7	4	8	2	363	365	8	
1	3	0	454	455	5	9	2	0	309	306	10	6	5	1	327	318	9	5	1	2	347	351	5	
1	4	0	762	759	7	9	3	0	181	182	10	6	6	1	200	193	10	5	2	2	347	332	10	
1	5	0	460	460	7	10	1	0	408	400	7	7	7	1	224	224	10	5	3	3	642	651	11	
1	6	0	515	510	9	10	2	0	269	278	8	7	8	1	183	176	11	5	4	2	252	258	7	
1	7	0	201	196	7	0	1	1	94	106	9	7	5	1	120	128	14	5	5	5	264	264	7	
1	8	0	104	105	12	0	2	1	132	132	7	8	6	1	248	247	9	6	1	2	262	274	9	
1	9	0	157	157	12	0	3	1	266	256	4	8	4	1	209	206	9	6	3	3	494	502	8	
2	1	0	206	210	5	0	5	1	297	297	5	9	2	1	428	429	8	6	6	5	110	95	12	
2	2	0	107	117	8	0	9	1	231	235	8	9	3	1	214	208	10	6	5	2	268	264	8	
2	4	0	208	212	6	0	10	1	115	109	14	10	1	1	154	149	11	6	7	1	162	160	12	
2	5	0	708	714	6	1	1	1	191	196	5	0	0	2	1267	1280	4	7	5	2	207	203	9	
2	7	0	329	331	6	1	1	1	987	982	9	0	1	2	381	397	4	8	1	2	404	408	7	
2	8	0	366	371	7	1	3	1	220	205	5	0	2	2	651	638	6	8	2	2	375	378	9	
2	10	0	170	180	13	1	4	1	162	168	7	0	3	2	231	210	16	8	3	2	193	192	9	
3	1	0	896	848	9	1	5	1	654	645	6	0	4	2	765	763	9	8	4	2	376	376	8	
3	2	0	536	525	6	1	6	1	182	182	8	0	5	2	879	874	6	9	1	2	127	117	15	
3	3	0	321	318	5	1	7	1	166	159	8	0	6	2	318	314	7	9	2	2	165	159	10	
3	4	0	274	271	5	1	9	1	148	150	10	0	7	2	330	336	8	9	3	3	212	224	9	
3	5	0	217	221	12	1	10	1	496	491	7	0	8	2	710	716	7	9	3	2	224	101	10	
3	7	0	391	392	6	1	1	1	669	667	4	0	9	2	176	174	11	0	0	1	344	331	8	
3	9	0	348	344	8	2	2	1	261	269	4	0	9	2	806	813	9	0	2	3	344	331	4	
4	1	0	833	829	7	2	3	1	541	554	6	1	1	2	338	320	7	0	3	3	183	184	6	
4	2	0	730	719	9	2	4	1	168	167	6	1	3	2	458	459	8	0	5	3	127	132	6	
4	4	0	691	689	7	2	5	1	372	379	5	1	4	2	205	200	8	0	7	3	175	185	8	
4	4	0	124	124	12	2	7	1	218	227	7	1	5	2	235	239	8	0	9	3	224	224	10	
4	7	0	230	223	8	2	8	1	232	227	10	1	7	2	425	425	8	0	1	3	391	374	4	
4	8	0	218	214	9	3	1	1	311	318	4	1	1	3	425	425	8	1	2	3	954	937	7	
5	2	0	331	335	5	3	2	1	537	548	6	1	8	2	129	121	10	1	3	3	306	300	5	
5	3	0	312	314	5	3	3	1	512	514	5	1	10	2	407	405	8	1	4	3	226	232	6	
5	4	0	86	87	13	3	4	1	597	603	10	2	1	2	159	137	9	1	5	3	597	602	8	
5	5	0	422	432	8	3	5	1	124	120	10	2	2	2	980	972	11	1	9	3	208	210	9	
5	6	0	96	89	13	3	6	1	482	487	6	2	4	2	221	220	7	1	10	3	517	505	7	
5	7	0	273	273	8	3	7	1	286	287	7	2	5	2	221	220	7	2	1	3	682	671	8	
5	8	0	418	409	7	3	8	1	125	133	12	2	6	2	287	280	5	2	3	3	622	620	6	
6	1	0	451	450	5	3	9	1	117	126	13	2	8	2	364	364	8	2	4	3	111	118	13	
6	2	0	238	223	6	4	1	1	133	134	7	2	9	2	145	147	12	2	5	3	384	387	5	
6	4	0	236	290	7	4	2	1	343	352	7	2	9	2	142	141	11	2	6	3	170	177	8	
6	5	0	348	348	7	4	4	1	321	328	5	3	1	2	562	553	6	2	7	3	173	171	9	
6	6	0	149	151	18	4	5	1	252	256	10	3	3	2	151	146	6	2	8	3	237	236	9	
						4						3			366	367	5	2				148	148	11

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
3	1	3	302	296	5	3	2	4	297	300	7	5	5	5	162	163	13
3	2	3	186	192	8	3	3	4	294	294	6	5	6	5	213	220	10
3	3	3	232	227	9	3	4	4	252	254	11	5	6	5	121	127	11
3	4	3	634	644	6	3	5	4	191	191	8	6	1	5	234	229	13
3	5	3	166	167	14	3	7	4	265	266	8	6	4	5	227	228	9
3	6	3	305	303	9	3	4	4	658	660	12	6	5	5	296	285	8
3	7	3	365	368	7	4	1	4	487	481	8	6	3	8	204	210	14
4	1	3	254	253	7	4	4	4	644	655	7	7	2	8	192	186	10
4	2	3	531	541	6	4	7	4	228	227	12	8	0	8	945	961	7
4	4	3	196	199	8	4	3	4	260	266	7	0	1	6	264	261	8
4	7	3	168	160	10	5	3	4	248	243	9	0	2	6	148	140	9
5	1	3	97	99	11	5	6	4	138	136	11	0	4	6	437	438	7
5	2	3	270	272	6	6	1	4	476	482	6	0	5	6	435	432	7
5	4	3	224	227	8	6	2	4	325	332	7	0	6	6	340	344	11
5	5	3	178	171	10	6	4	4	230	225	8	0	7	6	124	127	12
5	6	3	304	304	8	6	5	4	303	302	9	0	8	6	542	525	11
6	1	3	170	175	7	7	1	4	601	608	8	1	1	6	668	671	6
6	2	3	148	146	9	7	2	4	205	201	8	1	4	6	198	205	11
6	4	3	242	242	8	7	4	4	362	364	14	1	6	6	110	110	11
6	5	3	206	212	9	8	1	4	114	107	15	1	7	6	291	292	13
7	1	3	124	129	11	9	2	4	317	320	8	1	8	6	233	235	10
7	3	3	107	106	12	0	2	5	143	147	9	2	1	6	151	154	8
8	2	3	238	244	8	0	4	5	117	122	10	2	2	6	540	544	6
8	4	3	150	152	12	0	5	5	217	218	9	2	3	6	274	273	7
9	2	3	381	373	7	0	9	5	165	164	10	2	5	6	101	97	15
10	1	3	184	187	10	1	1	5	154	157	10	2	6	6	168	171	10
0	0	4	1843	1885	5	1	2	5	597	589	7	3	1	6	477	491	12
0	1	4	158	154	8	1	3	5	111	124	10	3	3	6	377	378	6
0	2	4	92	89	10	1	5	5	495	495	7	3	5	6	356	350	10
0	3	4	776	769	10	1	6	5	154	151	9	3	6	6	369	370	8
0	4	4	188	192	7	1	7	5	148	153	10	4	2	6	179	183	14
0	5	4	328	328	8	2	1	5	417	415	5	4	3	6	225	224	10
0	6	4	279	281	6	2	2	5	205	209	9	4	4	6	239	233	9
0	8	4	400	404	7	2	3	5	312	311	6	4	6	6	161	164	12
0	9	4	260	259	15	2	5	5	265	260	8	5	1	6	185	182	9
0	10	4	110	125	14	2	7	5	192	196	15	5	2	6	320	321	7
1	1	4	175	170	11	2	8	5	155	155	12	5	3	6	410	411	12
1	2	4	313	316	9	3	1	5	208	206	7	5	4	6	154	149	11
1	3	4	157	157	14	3	2	5	432	439	7	6	3	6	437	442	10
1	4	4	524	525	9	3	3	5	389	389	6	8	1	6	225	223	9
1	5	4	471	478	5	3	4	5	352	357	6	1	2	7	402	415	9
1	6	4	360	361	6	3	6	5	382	382	7	1	5	7	357	359	7
1	7	4	162	164	9	3	7	5	208	202	11	2	1	7	365	370	6
1	9	4	183	189	10	4	2	5	247	240	7	2	2	7	118	117	17
2	1	4	386	384	5	4	4	5	253	254	7	2	3	7	275	277	10
2	3	4	91	96	11	4	4	5	204	210	9	2	5	7	230	238	10
2	4	4	410	406	8	4	7	5	159	157	12	3	1	7	197	194	8
2	5	4	365	360	8	5	1	5	177	178	10	3	2	7	196	207	14
2	7	4	286	296	11	5	2	5	210	215	8	3	3	7	245	242	8
2	8	4	283	279	8	5	4	5	206	205	9	3	4	7	342	346	7

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	1	0	153	153	5	6	6	0	122	121	15	2	4	1	161	158	4
1	1	0	128	124	3	7	6	0	300	296	5	3	4	1	596	607	7
2	1	0	179	175	3	0	7	0	133	118	5	4	4	1	340	343	7
3	1	0	779	779	6	1	7	0	176	167	6	5	4	1	298	300	6
4	1	0	718	744	9	2	7	0	338	339	5	6	4	1	340	339	4
6	1	0	423	434	4	3	7	0	420	423	5	8	4	1	214	210	4
7	1	0	672	691	9	4	7	0	244	241	4	0	5	1	316	302	8
8	1	0	73	68	9	5	7	0	313	303	9	1	5	1	631	638	17
9	1	0	227	224	5	6	7	0	271	273	5	2	5	1	392	395	5
10	1	0	405	402	8	0	8	0	533	551	5	3	5	1	127	121	10
0	2	0	300	279	11	1	8	0	148	149	5	4	5	1	283	277	8
1	2	0	526	553	5	2	8	0	350	347	8	5	5	1	231	230	6
2	2	0	98	98	6	4	8	0	250	246	5	6	5	1	353	345	10
3	2	0	501	494	6	5	8	0	420	418	8	7	5	1	196	189	6
4	2	0	686	696	9	0	9	0	340	349	9	1	6	1	239	233	4
5	2	0	331	331	5	1	9	0	165	173	9	3	6	1	488	499	9
6	2	0	234	233	7	2	9	0	104	104	7	5	6	1	315	315	6
7	2	0	276	278	9	3	9	0	401	399	4	7	6	1	139	138	7
8	2	0	190	196	5	0	10	0	215	214	6	1	7	1	131	135	5
9	2	0	322	324	8	1	10	0	116	118	7	2	7	1	263	264	8
10	2	0	305	311	5	2	10	0	180	181	6	3	7	1	307	309	4
0	3	0	895	927	10	0	1	1	112	115	9	5	7	1	165	228	9
1	3	0	449	448	14	1	1	1	184	184	12	6	7	1	236	233	8
2	3	0	63	45	5	2	1	1	605	616	12	6	7	1	100	89	10
3	3	0	293	281	6	3	1	1	318	313	7	1	8	1	163	161	5
5	3	0	361	359	9	4	1	1	134	130	4	2	9	1	87	79	8
6	3	0	116	115	11	5	1	1	252	244	10	3	8	1	140	124	6
7	3	0	127	129	8	6	1	1	244	237	7	0	9	1	150	140	10
8	3	0	164	170	5	0	1	1	0	0	10	0	9	1	243	244	5
9	3	0	169	161	10	10	1	1	165	163	6	1	9	1	163	161	5
0	4	0	311	314	10	0	2	1	125	123	4	2	9	1	87	79	8
1	4	0	664	684	11	0	2	1	794	812	11	3	9	1	134	124	6
2	4	0	171	171	4	2	2	1	276	279	7	0	10	1	140	140	6
3	4	0	270	264	3	3	2	1	553	554	12	2	10	1	528	531	9
4	4	0	650	662	14	4	2	1	368	367	6	0	0	2	117	115	8
5	4	0	78	82	7	5	2	1	294	287	6	0	1	2	913	866	3
6	4	0	305	310	7	6	2	1	165	167	4	1	1	2	670	695	6
7	4	0	395	396	4	8	2	1	252	249	4	2	1	2	182	162	5
8	4	0	186	182	7	9	2	1	442	452	14	3	1	2	545	533	7
0	5	0	205	206	6	10	2	1	108	108	8	4	1	2	76	69	7
1	5	0	435	425	12	0	3	1	280	258	11	5	1	2	365	360	10
2	5	0	651	663	16	1	3	1	260	234	9	6	1	2	290	299	3
3	5	0	234	231	6	2	3	1	573	575	13	7	1	2	221	215	8
4	5	0	160	160	4	3	3	1	510	521	16	0	9	2	450	449	4
5	5	0	437	440	7	4	3	1	105	99	5	9	1	2	112	104	6
6	5	0	377	380	8	6	3	1	266	269	9	0	2	2	589	581	5
8	5	0	322	323	11	7	3	1	237	233	8	1	2	2	325	301	13
0	6	0	216	217	7	9	3	1	250	249	5	2	2	2	822	846	3
1	6	0	497	499	10	0	4	1	78	90	6	3	2	2	137	134	3
5	6	0	99	106	7	1	4	1	185	179	7	4	2	2	196	185	4

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
2	3	1	608	618	5	0	9	3	255	253	6	1	7	4	143	140	6
3	4	1	294	285	11	1	2	3	221	219	7	2	7	4	300	301	4
4	1	3	278	273	5	2	9	3	167	172	6	3	7	5	302	302	10
5	1	3	90	82	7	3	9	3	115	106	16	4	7	5	261	259	12
6	1	3	226	226	8	0	10	3	15	20	31	4	7	5	435	442	8
7	1	3	156	151	5	1	10	3	583	592	9	0	8	4	75	75	9
8	1	3	83	84	9	0	0	4	1297	1254	4	1	8	4	282	281	14
9	1	3	101	108	7	0	1	4	158	147	7	2	8	4	273	279	5
10	1	3	224	221	8	1	1	4	160	148	4	1	9	5	193	204	9
0	2	3	361	344	10	2	1	4	411	398	7	2	9	4	72	61	10
1	2	3	826	862	3	3	1	4	134	130	6	0	10	4	147	142	7
2	2	3	58	66	6	4	1	4	658	661	12	0	1	5	155	154	7
3	2	3	209	209	5	6	1	4	490	499	10	1	1	6	433	419	4
4	2	3	557	563	6	7	1	4	620	643	6	2	1	6	232	225	4
5	2	3	286	279	7	8	1	4	149	148	7	3	1	6	73	74	9
6	2	3	151	151	5	9	1	4	139	138	8	4	1	6	213	207	5
7	2	3	110	110	6	0	2	4	62	64	6	5	1	6	151	145	6
8	2	3	257	258	6	1	2	4	308	305	5	6	1	6	74	70	9
9	2	3	410	413	4	2	2	4	298	299	3	8	1	6	136	135	7
0	3	3	223	215	6	4	2	4	499	500	12	0	2	6	592	604	14
1	3	3	331	317	17	6	2	4	342	345	6	1	2	6	235	237	3
2	3	3	620	623	11	7	2	4	196	196	8	2	2	6	453	459	6
3	3	3	211	208	7	8	2	4	105	101	8	3	2	6	261	257	7
7	3	3	121	123	6	9	2	4	359	354	8	4	2	6	225	229	8
9	3	3	228	229	5	0	3	4	702	719	6	5	2	6	127	125	6
1	4	3	253	251	8	1	3	4	144	141	5	6	2	6	200	197	6
2	4	3	128	131	5	2	3	4	94	94	5	8	2	6	107	104	6
3	4	3	646	665	18	4	3	4	307	306	7	0	3	6	155	161	6
5	4	3	237	239	4	4	3	4	79	71	7	1	3	6	374	369	5
6	4	3	249	248	12	5	3	4	295	296	16	6	3	6	442	448	10
7	4	3	104	110	11	7	3	4	135	135	6	2	4	6	201	191	10
8	4	3	157	150	6	0	4	4	235	229	8	4	4	6	72	70	8
0	5	3	140	136	7	1	4	4	521	523	15	1	4	6	92	86	11
1	5	3	592	605	15	2	4	4	423	421	5	5	4	6	263	263	4
2	5	3	396	399	11	3	4	4	252	250	7	7	0	6	218	217	7
3	5	3	162	158	4	4	4	4	652	677	15	1	4	6	111	116	5
4	5	3	227	223	9	6	4	4	210	210	11	2	4	6	104	111	7
5	5	3	197	199	11	7	4	4	385	385	11	4	5	6	89	87	6
6	5	3	212	206	12	0	5	4	349	345	5	3	4	6	413	414	9
3	6	3	308	312	6	1	5	4	490	499	21	4	4	6	291	290	8
5	6	3	353	348	12	2	5	4	363	360	10	5	4	6	244	249	6
0	7	3	203	207	6	3	5	4	239	236	9	6	4	6	285	280	5
1	7	3	66	60	4	5	5	4	237	233	7	0	5	6	238	239	13
2	7	3	191	188	7	6	5	4	318	314	5	1	5	6	501	505	10
4	7	3	412	418	10	0	6	4	267	269	7	2	5	6	284	286	11
7	7	3	190	185	5	3	6	4	367	366	10	3	5	6	77	76	9
0	8	3	95	91	6	4	6	4	89	88	7	4	5	6	235	231	5
1	8	3	68	72	10	5	6	4	79	91	9	5	5	6	189	186	6
2	8	3	279	279	6	6	6	4	152	148	13	6	5	6	322	320	11
									125	127	10	3	6	6	415	420	6

256 132 233 222 195 180 183 117 113 1000 261 655 157 544 222 102 87 83 258 171 160 558 216 336 82 275 373 240 463 491 73 448 191 70 65 149 445 86 375 204 94 368 125 118 176 397 194 135 329 74 129 566 266 370

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	1	0	134	143	2	7	6	0	295	294	6	4	4	1	338	341	3
1	1	0	126	127	3	0	7	0	130	115	6	5	4	1	295	301	8
2	1	0	188	191	4	1	7	0	158	158	10	6	4	1	350	350	4
3	1	0	959	900	4	2	7	0	343	347	8	8	4	1	209	203	6
4	1	0	851	843	4	3	7	0	420	425	10	0	5	1	309	299	4
6	1	0	441	444	13	4	7	0	224	226	5	1	5	1	674	672	7
7	1	0	723	721	12	5	7	0	302	305	5	2	3	2	397	402	5
8	1	0	91	82	8	6	7	0	267	264	11	3	5	1	125	123	6
9	1	0	209	212	8	0	8	0	552	558	5	4	5	1	275	277	5
10	1	0	396	393	10	1	8	0	141	143	6	5	5	1	226	228	7
0	2	0	319	303	5	2	8	0	337	336	9	6	5	1	335	336	6
1	2	0	621	622	5	4	8	0	245	242	7	7	5	1	171	177	7
2	2	0	86	92	5	5	8	0	412	400	12	0	6	1	66	66	8
3	2	0	523	515	4	4	0	0	344	353	7	1	6	1	253	251	3
4	2	0	759	741	4	1	9	0	167	172	6	3	6	1	501	503	10
5	2	0	317	320	3	2	9	0	104	101	8	5	6	1	315	322	6
6	2	0	240	237	4	3	9	0	399	395	9	7	6	1	127	128	8
7	2	0	265	265	4	0	10	0	211	212	7	1	7	1	140	138	5
8	2	0	197	196	5	1	10	0	115	117	8	2	7	1	269	273	7
9	2	0	323	319	9	2	10	0	176	170	7	3	7	1	312	307	5
10	2	0	298	304	5	0	1	1	106	115	4	4	7	1	224	230	5
0	3	0	1275	1277	11	1	1	1	153	165	6	5	7	1	151	146	7
1	3	0	475	465	3	2	1	1	699	701	4	6	7	1	230	226	6
2	3	0	72	62	8	3	1	1	309	313	4	0	8	1	63	66	9
3	3	0	270	273	3	4	1	1	120	126	4	1	8	1	81	78	9
5	3	0	346	350	6	5	1	1	254	251	5	2	8	1	251	248	5
6	3	0	120	119	6	6	1	1	244	244	4	3	8	1	143	139	6
7	3	0	130	132	6	10	1	1	159	155	8	0	9	1	237	239	5
8	3	0	159	155	6	0	1	1	112	114	5	2	6	2	154	156	9
9	3	0	149	147	7	0	2	1	1028	1026	11	2	9	1	80	69	10
0	4	0	328	343	4	1	2	1	276	287	3	3	9	1	115	120	8
1	4	0	746	737	4	3	2	1	594	588	8	0	10	1	143	150	7
2	4	0	181	183	3	4	2	1	365	373	4	1	10	1	534	528	5
3	4	0	257	260	5	5	2	1	305	304	7	2	10	1	111	108	9
4	4	0	705	700	7	6	2	1	175	181	8	0	0	2	1355	1364	3
6	4	0	309	310	5	8	2	1	243	241	8	0	1	2	391	406	5
7	4	0	390	382	5	9	2	1	454	453	9	1	1	2	794	810	8
8	4	0	184	178	6	10	2	1	111	111	11	2	1	2	186	167	3
0	5	0	211	220	6	0	3	1	274	257	4	3	1	2	583	574	6
1	5	0	400	404	7	1	3	1	255	237	5	4	1	2	144	90	9
2	5	0	685	688	7	2	3	1	629	621	5	5	1	2	359	358	10
3	5	0	253	249	8	3	3	1	553	550	6	6	1	2	292	301	6
4	5	0	164	170	5	4	3	1	107	103	5	7	1	2	212	219	4
5	5	0	430	438	4	6	3	1	268	273	4	8	1	2	458	459	5
6	5	0	369	371	5	7	3	1	241	242	5	9	1	2	105	107	11
8	5	0	324	322	6	9	3	1	248	248	6	0	2	2	628	618	5
0	6	0	209	210	4	0	4	1	74	86	6	1	2	2	308	293	3
1	6	0	525	518	6	1	4	1	187	184	5	2	1	3	977	977	5
5	6	0	110	111	11	2	4	1	142	140	4	3	2	2	136	137	5
6	6	0	121	121	9	3	4	1	636	635	8	4	4	2	186	187	4

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc (Sr_{0.63})

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
5	1	3	93	89	6	1	10	3	586	584	6	0	9	4	273	278	8
6	1	3	221	230	5	0	0	4	1948	1950	4	1	9	4	201	203	10
7	1	3	143	145	7	0	1	4	137	137	4	0	10	4	135	141	14
8	1	3	83	81	8	1	1	4	153	147	3	0	1	5	70	71	18
9	1	3	98	104	12	2	1	4	425	414	5	1	1	5	133	137	6
10	1	3	218	210	6	3	1	4	131	133	4	1	1	6	98	95	6
0	2	3	368	357	5	4	1	4	706	707	11	2	3	6	446	440	4
1	2	3	1004	1004	8	6	1	4	491	503	6	3	1	5	222	219	4
2	2	3	73	69	6	7	1	4	648	654	9	6	1	5	149	149	6
3	2	3	212	219	3	8	1	4	159	158	6	0	2	5	125	126	4
4	2	3	579	579	7	9	1	4	117	127	9	1	2	5	641	639	4
5	2	3	296	294	6	0	2	4	64	77	8	2	2	5	236	237	4
6	2	3	164	162	6	1	2	4	311	319	5	3	2	5	460	469	8
7	2	3	111	107	8	1	2	4	298	300	4	4	2	5	259	255	4
8	2	3	249	250	5	3	4	4	507	506	5	4	2	5	241	241	4
9	2	3	409	409	7	6	2	4	343	350	7	5	2	5	138	134	4
0	3	3	209	209	4	7	2	4	185	184	5	6	2	5	189	189	11
1	3	3	326	318	8	8	2	4	108	103	8	0	3	5	94	97	6
2	3	3	669	667	4	9	2	4	351	345	10	1	3	5	152	161	4
3	3	3	223	222	4	0	3	4	760	768	6	2	3	5	386	384	4
4	3	3	132	132	6	1	3	4	139	140	4	3	3	5	431	430	6
5	3	3	231	227	6	2	3	4	87	82	6	4	3	5	87	90	8
6	3	3	250	257	3	3	3	4	292	297	4	6	3	5	265	264	5
7	3	3	116	112	5	5	3	4	280	284	7	7	3	5	222	220	12
8	3	3	685	690	9	7	3	4	132	135	9	0	4	5	112	115	6
9	3	3	241	241	7	0	4	4	250	249	3	1	4	5	112	115	6
0	4	3	255	257	8	1	4	4	537	537	5	2	4	5	72	71	8
1	4	3	101	110	8	2	4	4	430	430	7	3	4	5	413	416	6
2	4	3	145	145	10	3	4	4	241	245	4	4	4	5	279	283	5
3	4	3	138	139	6	4	4	4	686	703	14	5	4	5	243	244	5
4	4	3	635	630	8	6	4	4	222	228	5	6	4	5	285	282	9
5	4	3	398	404	4	7	4	4	379	369	8	0	5	5	229	232	4
6	4	3	156	159	8	0	5	4	353	355	7	1	5	5	510	514	5
7	4	3	219	221	8	1	5	4	503	510	5	2	5	5	285	286	4
8	4	3	199	194	9	2	5	4	361	353	4	3	5	5	85	75	8
9	4	3	198	199	7	3	5	4	244	247	5	4	5	5	223	225	5
0	5	3	79	74	7	5	5	4	227	230	5	5	5	5	183	182	7
1	5	3	203	213	4	6	5	4	310	305	5	6	5	5	313	307	11
2	5	3	313	310	6	0	6	4	260	263	7	1	6	5	211	214	5
3	5	3	352	353	5	1	6	4	369	376	4	3	6	5	410	413	11
4	5	3	189	192	4	4	6	4	91	88	14	5	6	5	254	253	6
5	6	3	195	195	5	5	6	4	145	153	8	1	7	5	135	132	6
6	6	3	408	410	5	6	6	4	124	124	8	2	7	5	236	231	6
7	6	3	191	187	7	1	7	4	141	134	12	3	7	5	223	216	8
8	6	3	86	89	8	2	7	4	300	303	5	4	7	5	188	186	10
9	6	3	280	282	10	3	7	4	294	299	9	2	8	5	253	254	5
0	7	3	241	245	5	4	7	4	243	242	9	0	9	5	207	205	7
1	7	3	114	113	6	0	8	4	441	442	9	1	9	5	114	118	6
2	7	3	165	158	6	1	8	4	73	74	10	0	0	6	108	109	9
3	7	3	109	103	9	2	8	4	270	267	5	0	1	6	1098	1106	5
															271	270	6

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc (Sr_{0.63})

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
0	4	7	89	84	8	0	4	7	89	84	8	0	4	7	89	84	8
1	4	7	99	101	11	1	4	7	99	101	11	1	4	7	99	101	11
3	4	7	393	391	6	3	4	7	393	391	6	3	4	7	393	391	6
4	4	7	125	133	13	4	4	7	125	133	13	4	4	7	125	133	13
5	4	7	156	152	7	5	4	7	156	152	7	5	4	7	156	152	7
1	5	7	402	399	4	1	5	7	402	399	4	1	5	7	402	399	4
2	5	7	259	258	5	2	5	7	259	258	5	2	5	7	259	258	5
3	5	7	99	99	9	3	5	7	99	99	9	3	5	7	99	99	9
4	5	7	174	169	6	4	5	7	174	169	6	4	5	7	174	169	6
1	6	7	136	136	7	1	6	7	136	136	7	1	6	7	136	136	7
1	7	7	102	98	16	1	7	7	102	98	16	1	7	7	102	98	16
0	0	8	938	955	6	0	0	8	938	955	6	0	0	8	938	955	6
0	1	8	79	83	9	0	1	8	79	83	9	0	1	8	79	83	9
2	1	8	297	298	5	2	1	8	297	298	5	2	1	8	297	298	5
4	1	8	462	463	5	4	1	8	462	463	5	4	1	8	462	463	5
1	2	8	211	210	5	1	2	8	211	210	5	1	2	8	211	210	5
3	2	8	159	162	7	3	2	8	159	162	7	3	2	8	159	162	7
4	2	8	329	321	5	4	2	8	329	321	5	4	2	8	329	321	5
0	3	8	432	430	4	0	3	8	432	430	4	0	3	8	432	430	4
3	3	8	192	189	6	3	3	8	192	189	6	3	3	8	192	189	6
0	4	8	153	152	6	0	4	8	153	152	6	0	4	8	153	152	6
1	4	8	298	296	5	1	4	8	298	296	5	1	4	8	298	296	5
2	4	8	368	367	5	2	4	8	368	367	5	2	4	8	368	367	5
3	4	8	151	156	8	3	4	8	151	156	8	3	4	8	151	156	8
0	5	8	257	253	7	0	5	8	257	253	7	0	5	8	257	253	7
1	5	8	386	379	5	1	5	8	386	379	5	1	5	8	386	379	5
2	5	8	184	180	9	2	5	8	184	180	9	2	5	8	184	180	9
0	6	8	195	192	6	0	6	8	195	192	6	0	6	8	195	192	6
1	1	9	94	93	9	1	1	9	94	93	9	1	1	9	94	93	9
2	1	9	298	288	7	2	1	9	298	288	7	2	1	9	298	288	7
3	1	9	118	124	8	3	1	9	118	124	8	3	1	9	118	124	8
1	2	9	434	428	5	1	2	9	434	428	5	1	2	9	434	428	5
1	3	9	119	112	8	1	3	9	119	112	8	1	3	9	119	112	8