

AM-94-564

Fetiasite $(\text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Ti})_3\text{O}_2[\text{As}_2\text{O}_5]$, a new arsenite mineral: Its description
and structure determination

Stefan Graeser, Hans Schwander, Francesco Demartin, Carlo M. Gramaccioli,
Tullio Pilati, Eric Reusser

For deposit: Tables 9A - 9B

American Mineralogist, 79, 9-10, 996-1002.

**Fetiasite (Fe^{2+} , Fe^{3+} , Ti) $_3\text{O}_2[\text{As}_2\text{O}_5]$, a new Arsenite Mineral: its Description and Structure
Determination**

by S. Graeser et. al.

SUPPLEMENTARY MATERIAL

TABLES 9A and 9B

TABLE 9A

OBSERVED AND COMPUTED STRUCTURE FACTOR MODULI (FETIASITE SAMPLE A)

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
0	0	1	259	268	0	4	4	102	91	1	1	10	347	347
0	0	2	370	370	0	4	8	286	290	1	1	11	261	270
0	0	3	606	589	0	5	3	97	77	1	1	12	147	144
0	0	4	700	657	0	5	4	93	84	1	2	-12	195	212
0	0	5	165	161	1	0	-13	149	154	1	2	-11	281	284
0	0	6	84	93	1	0	-12	225	237	1	2	-9	248	251
0	0	7	197	201	1	0	-11	330	336	1	2	-7	184	187
0	0	8	677	682	1	0	-9	323	313	1	2	-6	555	537
0	0	9	253	250	1	0	-7	208	217	1	2	-5	558	564
0	0	10	242	237	1	0	-6	746	731	1	2	-4	472	468
0	0	11	292	303	1	0	-5	798	783	1	2	-3	1311	1289
0	0	12	190	193	1	0	-4	626	620	1	2	-2	212	210
0	1	2	263	239	1	0	-3	1907	1817	1	2	2	239	234
0	1	3	276	272	1	0	-2	396	393	1	2	4	253	246
0	1	4	266	263	1	0	-1	123	127	1	2	5	383	392
0	1	5	1129	1130	1	0	2	440	431	1	2	6	186	179
0	1	6	511	501	1	0	3	128	119	1	2	7	595	600
0	1	7	486	477	1	0	4	487	474	1	2	8	419	412
0	1	8	429	424	1	0	5	485	486	1	2	9	321	321
0	1	9	186	186	1	0	6	197	203	1	2	10	231	229
0	1	10	186	184	1	0	7	730	729	1	2	11	142	132
0	1	11	166	173	1	0	8	544	546	1	2	12	169	177
0	1	12	88	78	1	0	9	415	409	1	3	-11	131	104
0	1	13	281	285	1	0	10	270	275	1	3	-10	228	224
0	2	0	2116	2087	1	0	11	157	162	1	3	-9	364	352
0	2	1	192	184	1	0	12	229	222	1	3	-8	344	341
0	2	2	284	288	1	0	13	176	173	1	3	-7	163	177
0	2	3	439	433	1	1	-13	242	245	1	3	-6	265	268
0	2	4	320	315	1	1	-12	273	277	1	3	-5	144	131
0	2	6	101	98	1	1	-11	143	137	1	3	-1	241	236
0	2	7	128	142	1	1	-10	325	324	1	3	0	269	268
0	2	8	530	521	1	1	-9	513	509	1	3	2	994	981
0	2	9	216	220	1	1	-8	519	521	1	3	3	162	157
0	2	10	208	211	1	1	-7	269	269	1	3	4	189	177
0	2	11	245	250	1	1	-6	415	426	1	3	5	464	451
0	2	12	157	165	1	1	-5	240	235	1	3	6	100	90
0	3	3	164	163	1	1	-4	118	128	1	3	10	275	278
0	3	4	170	178	1	1	-3	140	138	1	4	-9	133	153
0	3	5	724	702	1	1	-2	174	162	1	4	-7	99	110
0	3	6	340	335	1	1	-1	390	401	1	4	-6	291	290
0	3	7	318	329	1	1	0	517	521	1	4	-5	284	281
0	3	8	292	305	1	1	1	154	132	1	4	-4	252	254
0	3	9	142	129	1	1	2	1532	1532	1	4	-3	673	662
0	3	10	132	129	1	1	3	336	320	1	4	-2	116	89
0	3	11	147	141	1	1	4	217	214	1	4	2	95	98
0	4	0	969	941	1	1	5	738	732	1	4	5	232	224
0	4	1	84	88	1	1	6	212	223	1	4	6	106	108
0	4	2	159	161	1	1	7	79	79	1	4	7	364	358
0	4	3	241	237	1	1	8	120	107	1	4	8	217	233

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
1	5	-1	121	118	2	2	-13	97	103	2	5	-4	188	196
1	5	0	115	116	2	2	-11	172	185	2	5	-3	171	166
1	5	2	502	501	2	2	-10	372	377	2	5	-2	215	207
2	0	-14	147	139	2	2	-9	220	223	2	5	-1	508	507
2	0	-13	109	113	2	2	-8	332	329	3	0	-14	140	143
2	0	-11	197	212	2	2	-7	584	581	3	0	-13	351	360
2	0	-10	456	451	2	2	-6	596	587	3	0	-11	231	237
2	0	-9	290	284	2	2	-5	167	161	3	0	-10	438	437
2	0	-8	403	398	2	2	-4	210	216	3	0	-9	271	269
2	0	-7	748	731	2	2	-3	202	197	3	0	-8	240	234
2	0	-6	756	755	2	2	-2	66	61	3	0	-7	289	290
2	0	-5	226	212	2	2	1	98	97	3	0	-6	243	239
2	0	-4	294	295	2	2	2	428	430	3	0	-5	71	67
2	0	-3	313	319	2	2	3	71	87	3	0	-4	234	211
2	0	-2	87	122	2	2	4	1183	1203	3	0	-3	403	367
2	0	-1	60	71	2	2	5	142	193	3	0	-2	634	640
2	0	2	573	549	2	2	6	247	252	3	0	-1	869	860
2	0	4	1596	1611	2	2	7	413	414	3	0	0	594	547
2	0	5	289	280	2	2	8	97	100	3	0	1	1936	1955
2	0	6	336	338	2	2	10	174	176	3	0	3	161	151
2	0	7	519	524	2	3	-11	117	121	3	0	4	434	436
2	0	8	99	143	2	3	-10	178	176	3	0	5	226	227
2	0	10	217	216	2	3	-9	318	316	3	0	6	279	282
2	0	12	460	473	2	3	-7	101	90	3	0	9	620	623
2	1	-13	98	96	2	3	-6	99	103	3	0	10	245	258
2	1	-12	237	237	2	3	-5	121	120	3	0	11	213	204
2	1	-11	166	171	2	3	-4	414	404	3	0	12	127	125
2	1	-10	242	243	2	3	-3	349	348	3	1	-13	296	313
2	1	-9	467	482	2	3	-2	432	426	3	1	-12	311	318
2	1	-8	151	149	2	3	-1	1056	1046	3	1	-11	246	237
2	1	-7	132	135	2	3	0	133	137	3	1	-10	224	229
2	1	-6	170	175	2	3	2	143	140	3	1	-9	419	418
2	1	-5	126	140	2	3	4	273	266	3	1	-8	368	366
2	1	-4	713	734	2	3	7	370	371	3	1	-7	264	260
2	1	-3	492	521	2	3	8	158	147	3	1	-6	741	758
2	1	-2	894	897	2	3	9	294	288	3	1	-5	1297	1299
2	1	-1	1800	1829	2	3	10	133	135	3	1	-4	1197	1222
2	1	0	292	297	2	4	-9	145	133	3	1	-2	294	302
2	1	1	95	75	2	4	-8	195	191	3	1	-1	568	594
2	1	2	150	139	2	4	-7	349	344	3	1	1	184	183
2	1	4	467	462	2	4	-6	336	332	3	1	2	174	181
2	1	5	71	66	2	4	-5	89	86	3	1	3	196	195
2	1	6	126	119	2	4	-4	100	106	3	1	4	542	545
2	1	7	546	540	2	4	-3	81	91	3	1	5	263	262
2	1	8	214	221	2	4	2	244	237	3	1	6	861	860
2	1	9	434	428	2	4	4	632	639	3	1	7	193	196
2	1	10	169	174	2	4	5	122	109	3	1	8	306	297
2	1	11	255	249	2	4	6	129	127	3	1	9	409	406
2	1	12	164	165	2	4	7	243	245	3	1	12	154	149

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
3	2	-13	304	316	3	4	6	142	151	4	2	-8	97	106
3	2	-11	185	185	3	5	-4	358	355	4	2	-7	145	141
3	2	-10	354	364	3	5	1	93	91	4	2	-6	486	486
3	2	-9	221	212	4	0	-13	215	224	4	2	-5	394	389
3	2	-8	161	173	4	0	-12	90	88	4	2	-4	575	586
3	2	-7	248	252	4	0	-11	202	206	4	2	-3	572	575
3	2	-6	180	177	4	0	-10	283	282	4	2	-2	898	917
3	2	-4	138	145	4	0	-9	287	289	4	2	-1	180	171
3	2	-3	225	224	4	0	-8	114	118	4	2	0	209	210
3	2	-2	470	460	4	0	-7	146	140	4	2	1	194	207
3	2	-1	607	617	4	0	-6	664	656	4	2	2	176	173
3	2	0	353	369	4	0	-5	504	507	4	2	3	392	399
3	2	1	1393	1425	4	0	-4	722	724	4	2	4	105	106
3	2	3	83	96	4	0	-3	618	635	4	2	6	452	448
3	2	4	326	328	4	0	-2	1174	1196	4	2	7	98	120
3	2	5	153	157	4	0	-1	226	232	4	2	8	412	423
3	2	6	240	237	4	0	0	275	264	4	2	10	179	184
3	2	9	508	512	4	0	1	487	464	4	2	11	173	166
3	2	10	203	218	4	0	2	293	274	4	3	-11	379	389
3	2	11	153	173	4	0	3	538	540	4	3	-9	165	180
3	3	-11	171	182	4	0	4	99	114	4	3	-8	486	500
3	3	-10	137	142	4	0	6	555	562	4	3	-7	252	254
3	3	-9	266	252	4	0	7	145	134	4	3	-5	191	192
3	3	-8	255	261	4	0	8	517	514	4	3	-4	242	248
3	3	-7	188	179	4	0	10	220	213	4	3	0	111	101
3	3	-6	438	435	4	0	11	178	185	4	3	1	410	415
3	3	-5	705	699	4	1	-14	225	239	4	3	2	114	114
3	3	-4	719	717	4	1	-12	205	213	4	3	3	937	917
3	3	-1	190	195	4	1	-11	580	572	4	3	6	256	252
3	3	1	168	164	4	1	-9	261	268	4	3	7	96	99
3	3	2	88	93	4	1	-8	781	774	4	3	8	202	182
3	3	3	78	57	4	1	-7	334	331	4	4	-9	137	133
3	3	4	383	371	4	1	-5	394	390	4	4	-8	88	79
3	3	5	138	140	4	1	-4	470	481	4	4	-7	96	97
3	3	6	567	570	4	1	-3	181	188	4	4	-6	264	257
3	3	7	105	131	4	1	-2	102	105	4	4	-5	205	217
3	3	8	197	195	4	1	-1	228	216	4	4	-4	319	322
3	3	9	281	282	4	1	0	123	114	4	4	-3	350	354
3	4	-9	130	124	4	1	1	607	613	4	4	-2	506	504
3	4	-8	102	92	4	1	2	118	120	4	4	-1	88	85
3	4	-7	156	159	4	1	3	1627	1585	4	4	0	106	118
3	4	-6	110	103	4	1	6	385	391	4	4	2	93	76
3	4	-3	97	108	4	1	7	171	179	4	4	3	215	213
3	4	-2	237	240	4	1	8	283	277	4	4	6	283	266
3	4	-1	324	319	4	1	11	456	454	4	5	1	204	205
3	4	0	191	185	4	2	-13	190	185	5	0	-14	266	270
3	4	1	734	738	4	2	-11	179	175	5	0	-13	241	239
3	4	4	181	185	4	2	-10	236	246	5	0	-12	271	278
3	4	5	91	78	4	2	-9	230	223	5	0	-10	322	314

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
5	0	-9	568	556	5	3	-11	218	220	6	0	11	125	135
5	0	-7	241	237	5	3	-10	102	123	6	1	-14	126	110
5	0	-6	1106	1089	5	3	-8	244	241	6	1	-12	155	147
5	0	-5	764	767	5	3	-7	183	187	6	1	-11	257	246
5	0	-3	138	133	5	3	-5	173	178	6	1	-10	329	344
5	0	-2	447	431	5	3	-4	247	259	6	1	-8	233	225
5	0	-1	108	117	5	3	-3	218	219	6	1	-7	688	688
5	0	0	376	365	5	3	-2	459	461	6	1	-5	581	578
5	0	1	260	255	5	3	-1	563	570	6	1	-4	1027	1087
5	0	3	780	804	5	3	0	795	801	6	1	-3	679	691
5	0	5	839	825	5	3	2	184	177	6	1	-2	235	237
5	0	8	278	279	5	3	3	83	88	6	1	-1	406	421
5	0	10	156	159	5	3	5	300	310	6	1	0	370	383
5	1	-14	296	301	5	3	7	198	187	6	1	1	272	274
5	1	-13	128	121	5	3	8	423	415	6	1	2	289	283
5	1	-11	307	301	5	4	-9	279	288	6	1	3	280	268
5	1	-10	167	173	5	4	-7	118	132	6	1	4	212	203
5	1	-9	93	98	5	4	-6	465	474	6	1	5	583	579
5	1	-8	388	381	5	4	-5	284	291	6	1	6	117	118
5	1	-7	258	259	5	4	-2	147	166	6	1	7	520	539
5	1	-5	269	272	5	4	-1	87	89	6	1	9	93	104
5	1	-4	312	331	5	4	0	121	136	6	1	10	201	223
5	1	-3	446	429	5	4	1	110	100	6	2	-12	365	371
5	1	-2	757	770	5	4	3	323	317	6	2	-11	211	199
5	1	-1	986	1042	5	4	5	417	415	6	2	-9	499	487
5	1	0	1417	1409	5	5	-2	221	213	6	2	-8	194	193
5	1	1	163	152	5	5	-1	284	278	6	2	-7	74	106
5	1	2	337	330	6	0	-14	172	184	6	2	-6	274	276
5	1	3	249	243	6	0	-13	87	92	6	2	-5	333	325
5	1	5	487	492	6	0	-12	435	439	6	2	-4	131	133
5	1	6	118	111	6	0	-11	257	254	6	2	-3	188	195
5	1	7	312	307	6	0	-9	606	589	6	2	-2	269	279
5	1	8	569	578	6	0	-8	242	247	6	2	-1	155	160
5	1	10	265	265	6	0	-7	165	158	6	2	0	597	621
5	1	11	152	145	6	0	-6	383	382	6	2	1	423	435
5	2	-13	213	207	6	0	-5	406	407	6	2	2	854	861
5	2	-12	233	237	6	0	-4	161	152	6	2	4	229	235
5	2	-10	253	256	6	0	-3	229	238	6	2	5	134	123
5	2	-9	461	463	6	0	-2	325	332	6	2	7	338	333
5	2	-7	210	220	6	0	-1	220	232	6	2	8	92	105
5	2	-6	854	842	6	0	0	869	820	6	2	10	392	405
5	2	-5	547	554	6	0	1	574	575	6	3	-11	173	181
5	2	-2	327	322	6	0	2	1074	1101	6	3	-10	247	245
5	2	-1	133	133	6	0	3	133	132	6	3	-8	172	160
5	2	0	253	262	6	0	4	300	304	6	3	-7	449	460
5	2	1	200	195	6	0	5	142	152	6	3	-5	346	347
5	2	3	574	599	6	0	7	396	388	6	3	-4	669	673
5	2	5	696	681	6	0	8	125	127	6	3	-3	429	427
5	2	8	245	246	6	0	10	462	463	6	3	-2	107	111

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
6	3	-1	221	210	7	1	-2	402	406	7	4	4	229	227
6	3	0	212	212	7	1	-1	366	380	8	0	-13	162	162
6	3	1	167	161	7	1	0	296	306	8	0	-12	252	246
6	3	2	221	207	7	1	2	585	598	8	0	-11	367	366
6	3	3	170	160	7	1	3	303	297	8	0	-10	198	187
6	3	4	123	116	7	1	4	761	749	8	0	-9	223	231
6	3	5	396	406	7	1	6	110	117	8	0	-8	661	654
6	3	7	385	380	7	1	9	233	251	8	0	-7	215	220
6	4	-9	294	302	7	2	-13	104	97	8	0	-5	1137	1124
6	4	-8	120	116	7	2	-12	187	176	8	0	-4	437	442
6	4	-6	147	145	7	2	-11	107	107	8	0	-3	478	480
6	4	-5	171	185	7	2	-10	101	86	8	0	-2	171	181
6	4	-4	93	74	7	2	-9	365	352	8	0	-1	639	631
6	4	-3	135	116	7	2	-8	312	305	8	0	0	395	375
6	4	-2	158	162	7	2	-6	281	288	8	0	1	167	156
6	4	0	339	334	7	2	-5	438	423	8	0	3	329	332
6	4	1	255	248	7	2	-4	75	80	8	0	4	576	600
6	4	2	493	488	7	2	-3	502	523	8	0	6	538	566
6	4	4	133	144	7	2	-2	853	876	8	1	-13	277	270
7	0	-14	144	132	7	2	-1	661	672	8	1	-12	149	149
7	0	-13	125	120	7	2	1	282	294	8	1	-11	90	91
7	0	-12	192	194	7	2	2	215	223	8	1	-10	392	388
7	0	-11	142	141	7	2	3	185	192	8	1	-9	178	190
7	0	-10	115	111	7	2	4	401	383	8	1	-8	107	115
7	0	-9	461	445	7	2	5	151	164	8	1	-7	271	275
7	0	-8	367	358	7	2	6	178	171	8	1	-6	388	397
7	0	-6	396	401	7	2	7	422	400	8	1	-5	197	208
7	0	-5	505	509	7	2	9	235	223	8	1	-4	110	127
7	0	-4	135	130	7	3	-10	439	448	8	1	-3	572	577
7	0	-3	711	712	7	3	-7	480	459	8	1	-1	522	538
7	0	-2	1126	1202	7	3	-6	146	143	8	1	0	567	569
7	0	-1	876	877	7	3	-5	86	76	8	1	1	545	545
7	0	1	414	397	7	3	-3	207	200	8	1	2	107	93
7	0	2	303	311	7	3	-2	236	235	8	1	3	298	290
7	0	3	256	259	7	3	-1	216	217	8	1	4	81	76
7	0	4	457	470	7	3	0	198	189	8	1	5	149	173
7	0	5	200	199	7	3	2	413	409	8	1	6	311	319
7	0	6	206	206	7	3	3	188	191	8	1	7	186	179
7	0	7	460	468	7	3	4	518	511	8	1	8	149	154
7	0	9	261	266	7	3	6	107	97	8	1	9	421	427
7	1	-14	182	168	7	4	-8	206	197	8	2	-13	148	133
7	1	-13	273	258	7	4	-6	137	148	8	2	-12	223	218
7	1	-12	157	162	7	4	-5	255	253	8	2	-11	322	309
7	1	-10	632	629	7	4	-3	259	268	8	2	-10	174	157
7	1	-8	129	133	7	4	-2	458	468	8	2	-9	161	168
7	1	-7	684	664	7	4	-1	372	373	8	2	-8	532	523
7	1	-6	213	203	7	4	1	175	165	8	2	-7	159	163
7	1	-5	70	62	7	4	2	104	111	8	2	-5	856	847
7	1	-3	306	302	7	4	3	119	106	8	2	-4	356	358

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
8	2	-3	326	331	9	0	3	601	587	9	3	-3	516	540
8	2	-2	105	99	9	0	5	283	280	9	3	-2	231	230
8	2	-1	436	453	9	0	6	183	180	9	3	-1	220	222
8	2	0	277	288	9	0	8	335	346	9	3	0	148	159
8	2	1	161	163	9	0	9	172	185	9	3	1	186	185
8	2	2	82	78	9	1	-13	97	82	9	3	2	266	284
8	2	3	248	257	9	1	-12	86	82	9	3	3	185	180
8	2	4	518	493	9	1	-10	349	352	9	3	4	198	197
8	2	6	466	456	9	1	-9	313	326	9	3	5	156	138
8	3	-11	94	84	9	1	-8	230	234	9	3	6	327	307
8	3	-10	265	262	9	1	-7	118	120	9	4	-6	189	179
8	3	-9	153	135	9	1	-6	564	577	9	4	-5	138	132
8	3	-7	211	205	9	1	-5	163	173	9	4	-4	130	138
8	3	-6	232	239	9	1	-4	222	221	9	4	-3	166	173
8	3	-5	113	128	9	1	-3	797	784	9	4	-2	99	88
8	3	-4	103	102	9	1	-2	355	362	9	4	-1	166	151
8	3	-3	352	353	9	1	-1	319	330	9	4	1	268	263
8	3	-1	365	370	9	1	0	254	242	9	4	2	247	243
8	3	0	395	402	9	1	1	248	241	10	0	-12	184	174
8	3	1	372	373	9	1	2	381	397	10	0	-11	135	140
8	3	3	215	218	9	1	3	283	268	10	0	-10	127	117
8	3	5	147	126	9	1	4	320	309	10	0	-9	92	94
8	3	6	260	237	9	1	5	166	161	10	0	-8	389	387
8	3	7	147	130	9	1	6	414	432	10	0	-7	296	302
8	4	-8	294	308	9	1	8	129	150	10	0	-6	289	290
8	4	-7	107	79	9	2	-12	131	115	10	0	-5	151	150
8	4	-5	466	468	9	2	-11	366	355	10	0	-4	465	485
8	4	-4	211	215	9	2	-10	243	229	10	0	-3	181	189
8	4	-3	183	172	9	2	-9	111	111	10	0	-2	361	357
8	4	-1	232	228	9	2	-8	305	316	10	0	-1	769	754
8	4	0	159	163	9	2	-7	184	176	10	0	0	399	383
8	4	1	119	118	9	2	-6	317	316	10	0	1	261	258
8	4	3	158	148	9	2	-5	255	243	10	0	2	231	238
9	0	-14	285	288	9	2	-4	201	203	10	0	3	356	345
9	0	-13	242	230	9	2	-3	285	298	10	0	4	297	298
9	0	-12	145	135	9	2	-2	104	138	10	0	5	253	243
9	0	-11	435	427	9	2	-1	227	241	10	0	6	160	166
9	0	-10	291	289	9	2	1	451	465	10	0	7	315	318
9	0	-9	117	133	9	2	2	410	404	10	0	8	359	346
9	0	-8	369	372	9	2	3	489	464	10	1	-13	306	281
9	0	-7	203	208	9	2	4	93	39	10	1	-12	316	304
9	0	-6	425	419	9	2	5	243	225	10	1	-11	300	282
9	0	-5	327	326	9	2	6	122	141	10	1	-9	476	480
9	0	-4	226	221	9	3	-10	239	254	10	1	-8	237	235
9	0	-3	354	370	9	3	-9	230	230	10	1	-7	178	177
9	0	-2	146	152	9	3	-8	132	150	10	1	-6	615	617
9	0	-1	263	260	9	3	-6	397	397	10	1	-5	195	198
9	0	1	603	589	9	3	-5	111	111	10	1	-4	364	370
9	0	2	504	499	9	3	-4	146	151	10	1	-3	222	217

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
10	1	-2	346	343	11	0	-13	103	82	11	2	1	355	360
10	1	-1	465	470	11	0	-11	322	331	11	2	2	95	92
10	1	0	227	220	11	0	-10	257	243	11	2	3	125	135
10	1	1	188	190	11	0	-9	270	259	11	2	4	226	225
10	1	2	235	226	11	0	-8	121	112	11	2	5	315	332
10	1	3	406	414	11	0	-7	468	482	11	3	-9	182	194
10	1	4	195	210	11	0	-6	196	200	11	3	-8	229	221
10	1	5	309	313	11	0	-4	462	500	11	3	-7	185	185
10	1	7	122	116	11	0	-3	260	261	11	3	-6	270	282
10	2	-12	133	151	11	0	-2	459	448	11	3	-5	172	185
10	2	-11	116	120	11	0	-1	75	19	11	3	-4	173	172
10	2	-10	112	107	11	0	0	228	229	11	3	-2	181	177
10	2	-8	320	314	11	0	1	437	432	11	3	-1	148	158
10	2	-7	243	252	11	0	2	115	111	11	3	0	235	255
10	2	-6	228	236	11	0	3	172	174	11	3	1	300	301
10	2	-5	124	121	11	0	4	269	268	11	3	2	197	205
10	2	-4	410	403	11	0	5	393	387	11	3	3	110	127
10	2	-3	141	161	11	0	7	192	186	11	4	-3	151	131
10	2	-2	271	279	11	1	-13	158	141	12	0	-13	169	157
10	2	-1	570	602	11	1	-12	161	150	12	0	-12	233	229
10	2	0	274	306	11	1	-11	146	156	12	0	-11	196	175
10	2	1	215	218	11	1	-10	277	282	12	0	-10	253	262
10	2	2	196	191	11	1	-9	258	252	12	0	-9	137	148
10	2	3	274	272	11	1	-8	340	334	12	0	-8	200	192
10	2	4	248	247	11	1	-7	258	260	12	0	-7	214	236
10	2	5	196	206	11	1	-6	411	426	12	0	-6	227	231
10	2	6	146	133	11	1	-5	259	262	12	0	-5	395	417
10	2	7	269	266	11	1	-4	224	215	12	0	-4	206	209
10	3	-9	332	338	11	1	-3	104	106	12	0	-3	120	116
10	3	-8	168	157	11	1	-2	259	253	12	0	-2	495	482
10	3	-7	114	119	11	1	-1	222	228	12	0	0	300	291
10	3	-6	428	424	11	1	0	409	396	12	0	1	202	198
10	3	-5	142	139	11	1	1	444	434	12	0	2	252	251
10	3	-4	250	259	11	1	2	269	275	12	0	3	194	191
10	3	-3	122	132	11	1	3	192	172	12	0	4	134	120
10	3	-2	217	227	11	1	4	211	213	12	0	6	96	99
10	3	-1	303	318	11	1	5	192	188	12	1	-11	191	193
10	3	0	135	140	11	1	6	222	224	12	1	-9	320	325
10	3	1	130	127	11	1	7	181	191	12	1	-8	183	182
10	3	2	142	156	11	2	-11	273	276	12	1	-7	288	283
10	3	3	283	293	11	2	-10	204	215	12	1	-6	106	95
10	3	4	158	142	11	2	-9	203	216	12	1	-5	389	387
10	3	5	235	237	11	2	-8	82	82	12	1	-4	260	262
10	4	-6	141	134	11	2	-7	405	408	12	1	-2	577	592
10	4	-4	241	241	11	2	-6	174	175	12	1	-1	181	175
10	4	-2	160	154	11	2	-4	439	417	12	1	0	460	436
10	4	-1	354	359	11	2	-3	195	207	12	1	2	332	322
10	4	0	211	191	11	2	-2	368	377	12	1	3	427	413
10	4	1	132	143	11	2	0	184	185	12	1	6	301	298

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
12	2	-11	157	153	13	1	-3	478	476	14	2	-6	200	200
12	2	-10	219	224	13	1	-2	299	288	14	2	-5	170	165
12	2	-9	131	129	13	1	-1	147	147	14	2	-4	110	110
12	2	-8	174	180	13	1	0	382	382	14	2	-3	192	224
12	2	-7	189	194	13	1	3	262	253	14	2	-2	197	176
12	2	-6	205	200	13	1	4	282	281	14	2	-1	344	354
12	2	-5	366	352	13	2	-9	207	217	14	2	0	114	109
12	2	-4	189	190	13	2	-8	146	132	14	2	2	352	331
12	2	-3	94	89	13	2	-7	375	372	15	0	-10	183	162
12	2	-2	378	386	13	2	-6	150	140	15	0	-7	310	310
12	2	0	220	225	13	2	-5	281	272	15	0	-5	390	371
12	2	1	141	161	13	2	-3	181	175	15	0	-4	329	330
12	2	2	238	224	13	2	-2	225	224	15	0	-3	358	363
12	2	3	157	170	13	2	-1	97	107	15	0	-1	283	288
12	2	4	113	109	13	2	0	252	267	15	0	2	218	201
12	3	-9	254	249	13	2	1	183	156	15	1	-10	240	232
12	3	-8	142	137	13	2	2	273	263	15	1	-8	283	289
12	3	-7	206	203	13	3	-7	169	154	15	1	-6	268	257
12	3	-5	268	255	13	3	-6	189	173	15	1	-4	162	159
12	3	-4	199	175	13	3	-5	197	212	15	1	-3	150	145
12	3	-2	387	398	13	3	-4	176	180	15	1	-1	180	168
12	3	-1	152	146	13	3	-3	342	334	15	1	0	158	142
12	3	0	272	303	13	3	-2	169	181	15	1	1	314	323
12	3	2	202	215	13	3	0	259	278	15	2	-8	104	52
13	0	-11	277	269	14	0	-10	336	333	15	2	-7	268	260
13	0	-10	103	103	14	0	-9	170	152	15	2	-5	312	313
13	0	-9	241	247	14	0	-8	252	239	15	2	-4	288	286
13	0	-8	153	157	14	0	-7	93	100	15	2	-3	296	300
13	0	-7	423	447	14	0	-6	237	236	15	2	-1	252	253
13	0	-6	156	176	14	0	-5	209	199	16	0	-8	367	391
13	0	-5	333	337	14	0	-4	139	128	16	0	-7	116	90
13	0	-3	205	202	14	0	-3	247	255	16	0	-6	334	332
13	0	-2	284	274	14	0	-2	208	207	16	0	-4	188	188
13	0	-1	132	121	14	0	-1	418	409	16	0	-1	257	236
13	0	0	311	298	14	0	0	133	129	16	1	-8	138	141
13	0	1	183	192	14	0	1	126	91	16	1	-3	254	256
13	0	2	312	305	14	0	2	384	381	16	1	-2	364	356
13	0	3	107	90	14	1	-9	196	193	16	1	-1	141	141
13	0	4	137	139	14	1	-7	329	322	17	0	-6	139	103
13	0	5	272	274	14	1	-6	272	289	17	0	-5	126	96
13	1	-12	324	319	14	1	-5	271	282	17	0	-4	129	122
13	1	-11	214	199	14	1	-3	266	261					
13	1	-10	240	247	14	1	-1	151	144					
13	1	-9	161	154	14	1	0	223	212					
13	1	-8	271	272	14	1	1	195	199					
13	1	-7	230	236	14	1	2	181	185					
13	1	-6	236	242	14	1	3	122	95					
13	1	-5	275	284	14	2	-9	137	128					
13	1	-4	248	236	14	2	-8	213	199					

TABLE 9B

OBSERVED AND COMPUTED STRUCTURE FACTOR MODULI (FETIASITE SAMPLE B)

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
0	0	1	276	253	0	4	1	84	85	1	1	6	206	211
0	0	2	367	365	0	4	2	143	150	1	1	7	91	77
0	0	3	583	582	0	4	3	232	226	1	1	8	99	98
0	0	4	695	656	0	4	4	111	104	1	1	10	342	343
0	0	5	170	168	0	4	7	60	83	1	1	11	249	249
0	0	6	80	87	0	4	8	299	290	1	1	12	153	137
0	0	7	196	197	1	0	-13	156	154	1	2	-12	198	196
0	0	8	656	666	1	0	-12	217	224	1	2	-11	285	282
0	0	9	226	230	1	0	-11	332	331	1	2	-9	241	246
0	0	10	228	234	1	0	-10	59	46	1	2	-8	60	47
0	0	11	288	295	1	0	-9	309	307	1	2	-7	165	174
0	0	12	186	182	1	0	-7	189	206	1	2	-6	530	538
0	1	1	71	62	1	0	-6	747	729	1	2	-5	552	558
0	1	2	255	231	1	0	-5	764	769	1	2	-4	461	462
0	1	3	261	265	1	0	-4	599	607	1	2	-3	1236	1245
0	1	4	261	257	1	0	-3	1596	1583	1	2	-2	223	216
0	1	5	1067	1094	1	0	-2	395	394	1	2	2	245	240
0	1	6	495	496	1	0	-1	141	135	1	2	4	265	258
0	1	7	451	468	1	0	2	448	428	1	2	5	375	378
0	1	8	420	423	1	0	3	138	132	1	2	6	166	164
0	1	9	175	178	1	0	4	491	476	1	2	7	576	580
0	1	10	182	183	1	0	5	476	470	1	2	8	407	413
0	1	11	171	168	1	0	6	186	190	1	2	9	312	313
0	1	12	80	71	1	0	7	696	708	1	2	10	220	223
0	1	13	288	275	1	0	8	534	540	1	2	11	124	130
0	2	0	1957	1903	1	0	9	389	399	1	2	12	182	172
0	2	1	179	173	1	0	10	265	270	1	3	-11	106	101
0	2	2	282	280	1	0	11	167	159	1	3	-10	210	208
0	2	3	426	428	1	0	12	218	213	1	3	-9	340	344
0	2	4	328	328	1	0	13	176	168	1	3	-8	328	329
0	2	5	98	95	1	1	-13	251	237	1	3	-7	155	159
0	2	6	91	86	1	1	-12	275	268	1	3	-6	270	269
0	2	7	137	141	1	1	-11	135	136	1	3	-5	136	135
0	2	8	502	514	1	1	-10	311	309	1	3	-4	47	39
0	2	9	187	198	1	1	-9	493	495	1	3	-3	72	66
0	2	10	197	203	1	1	-8	503	512	1	3	-1	228	227
0	2	11	239	243	1	1	-7	244	250	1	3	0	259	259
0	2	12	150	153	1	1	-6	415	428	1	3	1	60	64
0	3	2	60	58	1	1	-5	236	233	1	3	2	959	957
0	3	3	147	155	1	1	-4	111	117	1	3	3	161	156
0	3	4	168	168	1	1	-3	149	144	1	3	4	174	170
0	3	5	680	683	1	1	-2	168	154	1	3	5	436	444
0	3	6	328	330	1	1	-1	398	399	1	3	6	81	83
0	3	7	314	319	1	1	0	514	506	1	3	8	87	75
0	3	8	294	299	1	1	1	162	140	1	3	10	277	272
0	3	9	129	121	1	1	2	1401	1417	1	4	-9	144	148
0	3	10	137	126	1	1	3	325	316	1	4	-7	93	100
0	3	11	141	136	1	1	4	213	213	1	4	-6	293	288
0	4	0	936	929	1	1	5	731	723	1	4	-5	274	275

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
1	4	-4	252	252	2	1	1	103	71	2	4	-9	131	132
1	4	-3	653	647	2	1	2	144	133	2	4	-8	185	183
1	4	-2	99	90	2	1	4	473	459	2	4	-7	337	338
1	4	2	111	102	2	1	5	55	53	2	4	-6	331	319
1	4	5	214	212	2	1	6	119	119	2	4	-4	98	105
1	4	6	94	95	2	1	7	516	526	2	4	-3	103	100
1	4	7	343	340	2	1	8	202	201	2	4	2	223	218
1	4	8	235	237	2	1	9	416	412	2	4	4	618	623
1	5	0	92	104	2	1	10	158	170	2	4	5	110	115
1	5	2	500	486	2	1	11	235	231	2	4	6	124	125
1	5	3	89	86	2	1	12	155	157	2	4	7	230	239
2	0	-14	137	138	2	2	-11	183	184	2	5	-4	186	195
2	0	-13	94	104	2	2	-10	360	365	2	5	-3	161	157
2	0	-11	205	212	2	2	-9	218	225	2	5	-2	206	201
2	0	-10	436	439	2	2	-8	311	322	2	5	-1	502	497
2	0	-9	295	286	2	2	-7	559	571	3	0	-14	147	141
2	0	-8	396	392	2	2	-6	564	578	3	0	-13	350	351
2	0	-7	728	718	2	2	-5	149	151	3	0	-11	225	228
2	0	-6	757	742	2	2	-4	211	214	3	0	-10	422	425
2	0	-5	218	202	2	2	-3	205	205	3	0	-9	265	267
2	0	-4	294	293	2	2	-2	81	70	3	0	-8	224	223
2	0	-3	325	325	2	2	1	92	87	3	0	-7	294	292
2	0	-2	117	131	2	2	2	409	409	3	0	-6	237	233
2	0	-1	71	62	2	2	3	95	90	3	0	-4	226	206
2	0	1	60	63	2	2	4	1141	1165	3	0	-3	376	352
2	0	2	543	524	2	2	5	200	199	3	0	-2	625	639
2	0	3	111	123	2	2	6	250	252	3	0	-1	810	824
2	0	4	1522	1507	2	2	7	409	408	3	0	0	541	525
2	0	5	290	282	2	2	8	106	103	3	0	1	1692	1687
2	0	6	340	336	2	2	9	71	57	3	0	3	157	153
2	0	7	523	516	2	2	10	176	170	3	0	4	436	433
2	0	8	145	145	2	3	-11	126	121	3	0	5	235	234
2	0	9	66	67	2	3	-10	163	158	3	0	6	280	277
2	0	10	210	210	2	3	-9	315	321	3	0	9	615	600
2	0	12	469	455	2	3	-8	109	106	3	0	10	244	238
2	1	-13	104	83	2	3	-6	102	97	3	0	11	215	196
2	1	-12	220	223	2	3	-5	102	103	3	0	12	130	123
2	1	-11	170	173	2	3	-4	405	407	3	1	-13	294	298
2	1	-10	226	225	2	3	-3	342	342	3	1	-12	316	311
2	1	-9	472	484	2	3	-2	426	419	3	1	-11	225	226
2	1	-8	142	139	2	3	-1	1038	1026	3	1	-10	229	233
2	1	-7	126	134	2	3	0	132	138	3	1	-9	413	418
2	1	-6	165	173	2	3	2	129	130	3	1	-8	349	357
2	1	-5	121	124	2	3	4	255	264	3	1	-7	272	269
2	1	-4	719	733	2	3	6	78	75	3	1	-6	721	757
2	1	-3	485	520	2	3	7	354	357	3	1	-5	1191	1250
2	1	-2	855	867	2	3	8	125	130	3	1	-4	1154	1176
2	1	-1	1626	1613	2	3	9	286	271	3	1	-2	315	307
2	1	0	312	303	2	3	10	136	135	3	1	-1	610	599

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
3	1	1	175	176	3	4	-9	134	119	4	1	1	589	591
3	1	2	184	186	3	4	-8	95	79	4	1	2	106	109
3	1	3	196	198	3	4	-7	161	165	4	1	3	1481	1506
3	1	4	522	523	3	4	-6	99	96	4	1	6	381	387
3	1	5	254	255	3	4	-3	102	94	4	1	7	179	179
3	1	6	805	840	3	4	-2	244	237	4	1	8	272	274
3	1	7	200	199	3	4	-1	305	303	4	1	11	439	430
3	1	8	285	287	3	4	0	186	176	4	2	-13	173	175
3	1	9	395	397	3	4	1	728	725	4	2	-11	167	171
3	1	12	146	141	3	4	3	57	50	4	2	-10	240	245
3	2	-13	318	306	3	4	4	180	175	4	2	-9	208	213
3	2	-11	177	177	3	4	5	86	81	4	2	-8	102	108
3	2	-10	347	351	3	4	6	146	148	4	2	-7	141	141
3	2	-9	209	210	3	5	-1	95	84	4	2	-6	455	473
3	2	-8	159	163	4	0	-13	213	213	4	2	-5	397	399
3	2	-7	251	254	4	0	-12	92	97	4	2	-4	573	577
3	2	-6	174	172	4	0	-11	199	204	4	2	-3	573	558
3	2	-4	133	139	4	0	-10	279	280	4	2	-2	903	902
3	2	-3	209	213	4	0	-9	279	277	4	2	-1	178	172
3	2	-2	471	461	4	0	-8	131	122	4	2	0	220	207
3	2	-1	610	599	4	0	-7	155	147	4	2	1	202	204
3	2	0	360	355	4	0	-6	641	640	4	2	2	169	168
3	2	1	1386	1369	4	0	-5	525	524	4	2	3	398	391
3	2	3	102	95	4	0	-4	706	715	4	2	4	116	110
3	2	4	317	323	4	0	-3	588	617	4	2	6	422	429
3	2	5	163	162	4	0	-2	1097	1143	4	2	7	107	112
3	2	6	227	232	4	0	-1	236	240	4	2	8	393	404
3	2	8	70	59	4	0	0	262	262	4	2	10	179	173
3	2	9	493	494	4	0	1	486	454	4	2	11	159	160
3	2	10	191	198	4	0	2	292	264	4	3	-11	391	379
3	2	11	171	163	4	0	3	536	529	4	3	-9	164	172
3	3	-11	172	170	4	0	4	118	122	4	3	-8	492	492
3	3	-10	148	147	4	0	6	531	540	4	3	-7	240	247
3	3	-9	255	253	4	0	7	129	127	4	3	-5	206	203
3	3	-8	246	247	4	0	8	508	495	4	3	-4	250	253
3	3	-7	176	183	4	0	10	211	201	4	3	-3	61	69
3	3	-6	431	434	4	0	11	186	180	4	3	-2	113	116
3	3	-5	689	692	4	1	-14	231	229	4	3	0	109	98
3	3	-4	698	704	4	1	-12	214	217	4	3	1	398	395
3	3	-2	89	95	4	1	-11	552	559	4	3	2	101	102
3	3	-1	212	211	4	1	-9	262	266	4	3	3	899	905
3	3	1	151	153	4	1	-8	741	759	4	3	6	241	247
3	3	2	90	97	4	1	-7	324	332	4	3	7	100	103
3	3	4	342	347	4	1	-5	404	397	4	3	8	178	180
3	3	5	137	136	4	1	-4	490	483	4	4	-9	119	123
3	3	6	547	552	4	1	-3	199	192	4	4	-8	67	80
3	3	7	142	137	4	1	-2	91	96	4	4	-7	77	91
3	3	8	186	189	4	1	-1	255	227	4	4	-6	242	243
3	3	9	281	274	4	1	0	138	123	4	4	-5	213	221

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
4	4	-4	319	315	5	1	6	123	116	6	0	-14	183	178
4	4	-3	353	341	5	1	7	301	302	6	0	-12	429	435
4	4	-2	495	493	5	1	8	555	550	6	0	-11	240	245
4	4	-1	84	82	5	1	9	85	93	6	0	-9	577	577
4	4	0	115	118	5	1	10	258	248	6	0	-8	244	249
4	4	2	68	79	5	1	11	140	145	6	0	-7	162	161
4	4	3	206	206	5	2	-13	200	202	6	0	-6	383	387
4	4	6	259	246	5	2	-12	224	230	6	0	-5	411	402
4	4	7	78	74	5	2	-10	252	262	6	0	-4	159	146
4	5	1	199	187	5	2	-9	434	452	6	0	-3	235	239
5	0	-14	266	267	5	2	-8	83	78	6	0	-2	317	321
5	0	-13	242	232	5	2	-7	221	218	6	0	-1	247	251
5	0	-12	271	272	5	2	-6	817	826	6	0	0	793	802
5	0	-11	84	80	5	2	-5	551	555	6	0	1	556	560
5	0	-10	323	322	5	2	-2	340	322	6	0	2	1095	1077
5	0	-9	541	546	5	2	-1	136	128	6	0	3	127	130
5	0	-8	108	98	5	2	0	261	253	6	0	4	299	300
5	0	-7	236	239	5	2	1	193	190	6	0	5	160	154
5	0	-6	1051	1060	5	2	3	563	576	6	0	7	380	374
5	0	-5	761	763	5	2	5	655	665	6	0	8	131	125
5	0	-3	137	139	5	2	8	242	238	6	0	10	456	436
5	0	-2	439	433	5	2	10	83	130	6	0	11	134	121
5	0	-1	115	114	5	3	-11	219	207	6	1	-14	70	101
5	0	0	352	357	5	3	-10	130	127	6	1	-12	142	144
5	0	1	259	252	5	3	-8	248	246	6	1	-11	240	243
5	0	3	758	772	5	3	-7	173	176	6	1	-10	328	335
5	0	4	65	60	5	3	-5	172	173	6	1	-8	235	235
5	0	5	809	809	5	3	-4	235	241	6	1	-7	664	677
5	0	8	281	272	5	3	-3	237	232	6	1	-5	587	587
5	0	10	151	146	5	3	-2	459	455	6	1	-4	1045	1058
5	1	-14	294	292	5	3	-1	556	559	6	1	-3	690	688
5	1	-13	104	111	5	3	0	799	797	6	1	-2	230	232
5	1	-11	283	289	5	3	1	72	70	6	1	-1	436	424
5	1	-10	173	179	5	3	2	185	177	6	1	0	380	389
5	1	-9	87	90	5	3	3	101	96	6	1	1	261	269
5	1	-8	387	384	5	3	5	302	303	6	1	2	282	276
5	1	-7	247	251	5	3	6	76	63	6	1	3	267	269
5	1	-6	54	58	5	3	7	186	190	6	1	4	197	198
5	1	-5	262	272	5	3	8	390	390	6	1	5	534	552
5	1	-4	311	316	5	4	-9	288	276	6	1	6	115	114
5	1	-3	458	445	5	4	-7	132	127	6	1	7	517	523
5	1	-2	765	760	5	4	-6	459	466	6	1	9	107	98
5	1	-1	1004	1008	5	4	-5	291	287	6	1	10	221	218
5	1	0	1362	1354	5	4	-2	163	169	6	2	-13	74	81
5	1	1	162	156	5	4	-1	88	90	6	2	-12	363	365
5	1	2	331	328	5	4	0	125	122	6	2	-11	176	192
5	1	3	241	247	5	4	1	94	94	6	2	-9	464	474
5	1	4	52	77	5	4	3	304	296	6	2	-8	187	196
5	1	5	472	482	5	4	5	399	402	6	2	-7	101	111

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
6	2	-6	277	284	7	0	-6	410	414	7	2	6	157	167
6	2	-5	327	317	7	0	-5	500	500	7	2	7	372	371
6	2	-4	131	127	7	0	-4	157	152	7	2	9	225	215
6	2	-3	191	192	7	0	-3	711	712	7	3	-10	440	442
6	2	-2	262	263	7	0	-2	1158	1165	7	3	-8	80	76
6	2	-1	169	175	7	0	-1	870	869	7	3	-7	450	450
6	2	0	603	608	7	0	1	405	389	7	3	-6	140	142
6	2	1	419	423	7	0	2	314	313	7	3	-5	73	73
6	2	2	843	850	7	0	3	251	250	7	3	-3	198	201
6	2	3	99	104	7	0	4	464	463	7	3	-2	229	232
6	2	4	223	232	7	0	5	201	192	7	3	-1	207	210
6	2	5	124	122	7	0	6	203	199	7	3	0	180	179
6	2	7	314	319	7	0	7	437	439	7	3	2	390	390
6	2	8	98	104	7	0	9	264	258	7	3	3	182	180
6	2	10	398	379	7	1	-14	174	160	7	3	4	494	505
6	3	-11	184	179	7	1	-13	244	254	7	3	6	60	91
6	3	-10	243	234	7	1	-12	155	155	7	3	7	67	61
6	3	-8	169	165	7	1	-10	617	625	7	4	-8	183	189
6	3	-7	440	448	7	1	-9	53	40	7	4	-6	150	151
6	3	-5	353	350	7	1	-8	138	143	7	4	-5	245	235
6	3	-4	661	662	7	1	-7	659	660	7	4	-3	265	267
6	3	-3	432	425	7	1	-6	204	205	7	4	-2	458	460
6	3	-2	100	112	7	1	-4	46	37	7	4	-1	378	372
6	3	-1	221	209	7	1	-3	307	311	7	4	1	156	162
6	3	0	219	217	7	1	-2	395	399	7	4	2	119	115
6	3	1	158	161	7	1	-1	378	380	7	4	3	111	104
6	3	2	202	194	7	1	0	300	302	7	4	4	222	216
6	3	3	156	158	7	1	2	563	578	8	0	-13	160	162
6	3	4	126	119	7	1	3	279	287	8	0	-12	233	236
6	3	5	372	379	7	1	4	710	741	8	0	-11	362	365
6	3	7	360	367	7	1	6	114	111	8	0	-10	180	178
6	4	-8	124	117	7	1	7	73	80	8	0	-9	247	247
6	4	-7	62	57	7	1	9	238	239	8	0	-8	650	651
6	4	-6	160	156	7	2	-12	176	172	8	0	-7	221	208
6	4	-5	167	177	7	2	-11	111	117	8	0	-6	80	66
6	4	-3	116	106	7	2	-10	82	87	8	0	-5	1103	1104
6	4	-2	145	142	7	2	-9	347	353	8	0	-4	444	448
6	4	0	321	319	7	2	-8	299	300	8	0	-3	474	479
6	4	1	239	234	7	2	-6	291	299	8	0	-2	179	183
6	4	2	491	484	7	2	-5	405	411	8	0	-1	637	631
6	4	4	139	140	7	2	-4	92	98	8	0	0	366	361
6	4	5	72	70	7	2	-3	520	526	8	0	1	150	150
7	0	-14	128	123	7	2	-2	849	863	8	0	3	318	315
7	0	-13	107	116	7	2	-1	670	669	8	0	4	566	572
7	0	-12	197	192	7	2	1	284	290	8	0	6	560	554
7	0	-11	152	149	7	2	2	221	227	8	0	9	107	107
7	0	-10	110	112	7	2	3	183	187	8	1	-13	260	267
7	0	-9	443	442	7	2	4	369	373	8	1	-12	135	138
7	0	-8	359	358	7	2	5	153	158	8	1	-11	59	82

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
8	1	-10	377	384	8	3	5	112	114	9	1	5	160	150
8	1	-9	194	195	8	3	6	214	222	9	1	6	399	407
8	1	-8	119	112	8	4	-8	313	301	9	1	8	149	146
8	1	-7	276	268	8	4	-7	75	72	9	2	-12	104	104
8	1	-6	397	400	8	4	-5	465	465	9	2	-11	362	360
8	1	-5	195	199	8	4	-4	224	214	9	2	-10	224	223
8	1	-4	128	134	8	4	-3	177	174	9	2	-9	99	106
8	1	-3	562	573	8	4	-1	229	231	9	2	-8	301	311
8	1	-1	521	532	8	4	0	155	156	9	2	-7	165	172
8	1	0	546	555	8	4	1	111	105	9	2	-6	317	318
8	1	1	555	551	8	4	3	136	143	9	2	-5	249	247
8	1	2	85	95	9	0	-14	301	289	9	2	-4	192	202
8	1	3	285	286	9	0	-13	222	225	9	2	-3	282	288
8	1	4	84	73	9	0	-12	126	123	9	2	-2	134	137
8	1	5	152	154	9	0	-11	433	434	9	2	-1	222	228
8	1	6	307	302	9	0	-10	276	283	9	2	1	453	455
8	1	7	175	176	9	0	-9	131	126	9	2	2	385	392
8	1	8	149	148	9	0	-8	372	368	9	2	3	452	464
8	1	9	416	403	9	0	-7	202	203	9	2	5	220	222
8	2	-13	128	135	9	0	-6	425	421	9	2	6	125	133
8	2	-12	207	208	9	0	-5	326	327	9	3	-10	245	250
8	2	-11	303	306	9	0	-4	229	225	9	3	-9	234	229
8	2	-10	148	147	9	0	-3	364	362	9	3	-8	148	141
8	2	-9	177	184	9	0	-2	152	154	9	3	-6	385	391
8	2	-8	507	520	9	0	-1	254	255	9	3	-5	107	98
8	2	-7	151	153	9	0	1	571	578	9	3	-4	160	155
8	2	-5	818	841	9	0	2	478	487	9	3	-3	526	532
8	2	-4	353	359	9	0	3	583	581	9	3	-2	237	231
8	2	-3	339	333	9	0	5	270	276	9	3	-1	218	216
8	2	-2	110	105	9	0	6	175	168	9	3	0	158	158
8	2	-1	452	457	9	0	8	346	333	9	3	1	180	182
8	2	0	276	279	9	0	9	175	175	9	3	2	271	273
8	2	1	146	152	9	1	-13	95	81	9	3	3	175	172
8	2	3	236	245	9	1	-12	61	83	9	3	4	197	190
8	2	4	463	466	9	1	-10	343	346	9	3	5	125	129
8	2	6	448	448	9	1	-9	326	332	9	3	6	283	284
8	3	-10	257	256	9	1	-8	231	229	9	4	-7	75	115
8	3	-9	141	140	9	1	-7	141	137	9	4	-6	191	179
8	3	-8	68	80	9	1	-6	573	579	9	4	-5	147	137
8	3	-7	201	201	9	1	-5	150	158	9	4	-4	102	130
8	3	-6	231	237	9	1	-4	235	229	9	4	-3	156	161
8	3	-5	116	119	9	1	-3	766	774	9	4	-1	129	134
8	3	-4	105	102	9	1	-2	357	362	9	4	1	258	254
8	3	-3	345	346	9	1	-1	315	321	9	4	2	231	232
8	3	-1	365	363	9	1	0	245	245	10	0	-12	177	172
8	3	0	385	388	9	1	1	243	240	10	0	-11	147	143
8	3	1	377	374	9	1	2	378	383	10	0	-10	103	111
8	3	2	60	49	9	1	3	265	266	10	0	-9	68	99
8	3	3	208	212	9	1	4	299	304	10	0	-8	391	387

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
10	0	-7	312	312	10	2	4	229	230	11	1	-5	276	274
10	0	-6	292	284	10	2	5	196	199	11	1	-4	202	201
10	0	-5	152	159	10	2	6	125	125	11	1	-3	123	118
10	0	-4	480	480	10	2	7	256	254	11	1	-2	259	258
10	0	-3	170	170	10	3	-9	332	340	11	1	-1	208	212
10	0	-2	357	361	10	3	-8	141	149	11	1	0	383	393
10	0	-1	725	747	10	3	-7	119	115	11	1	1	417	429
10	0	0	390	390	10	3	-6	411	425	11	1	2	268	275
10	0	1	251	247	10	3	-5	158	138	11	1	3	163	165
10	0	2	242	239	10	3	-4	249	253	11	1	4	208	210
10	0	3	342	344	10	3	-3	131	134	11	1	5	183	179
10	0	4	269	278	10	3	-2	230	230	11	1	6	213	207
10	0	5	240	238	10	3	-1	300	306	11	1	7	181	181
10	0	6	159	157	10	3	0	152	139	11	2	-11	265	268
10	0	7	308	302	10	3	1	101	118	11	2	-10	222	218
10	0	8	349	321	10	3	2	147	143	11	2	-9	210	212
10	1	-13	277	272	10	3	3	275	277	11	2	-8	79	73
10	1	-12	308	314	10	3	4	148	136	11	2	-7	410	411
10	1	-11	280	280	10	3	5	223	237	11	2	-6	164	161
10	1	-9	482	485	10	4	-6	80	121	11	2	-4	410	416
10	1	-8	228	227	10	4	-4	231	230	11	2	-3	206	210
10	1	-7	165	171	10	4	-2	162	156	11	2	-2	366	368
10	1	-6	619	621	10	4	-1	361	353	11	2	0	192	190
10	1	-5	199	197	10	4	0	197	194	11	2	1	341	340
10	1	-4	361	360	11	0	-11	321	323	11	2	2	77	87
10	1	-3	212	215	11	0	-10	260	249	11	2	3	135	134
10	1	-2	350	355	11	0	-9	267	257	11	2	4	211	211
10	1	-1	446	456	11	0	-8	107	101	11	2	5	310	313
10	1	0	219	227	11	0	-7	499	487	11	3	-9	191	195
10	1	1	182	186	11	0	-6	195	185	11	3	-8	225	225
10	1	2	211	212	11	0	-5	64	4	11	3	-7	170	181
10	1	3	383	397	11	0	-4	497	500	11	3	-6	263	279
10	1	4	202	207	11	0	-3	263	265	11	3	-5	187	189
10	1	5	304	313	11	0	-2	442	439	11	3	-4	151	156
10	2	-12	144	149	11	0	0	234	236	11	3	-2	179	173
10	2	-11	123	121	11	0	1	405	410	11	3	-1	147	142
10	2	-10	105	103	11	0	2	123	107	11	3	0	249	254
10	2	-8	314	313	11	0	3	174	175	11	3	1	301	296
10	2	-7	255	256	11	0	4	258	253	11	3	2	202	206
10	2	-6	214	226	11	0	5	377	368	11	3	3	119	120
10	2	-5	126	128	11	0	7	186	182	11	4	-3	133	131
10	2	-4	395	396	11	1	-13	136	128	12	0	-12	236	231
10	2	-3	137	143	11	1	-12	146	154	12	0	-11	177	164
10	2	-2	281	283	11	1	-11	142	152	12	0	-10	271	270
10	2	-1	583	595	11	1	-10	276	275	12	0	-9	145	143
10	2	0	307	312	11	1	-9	266	256	12	0	-8	196	186
10	2	1	206	208	11	1	-8	344	337	12	0	-7	236	237
10	2	2	194	192	11	1	-7	257	257	12	0	-6	232	220
10	2	3	267	271	11	1	-6	409	418	12	0	-5	417	415

H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc	H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----	-	-	-	----	-----
12	0	-4	206	203	13	0	-9	250	237	13	3	0	252	262
12	0	-3	131	129	13	0	-8	164	163	14	0	-10	342	332
12	0	-2	479	478	13	0	-7	464	449	14	0	-9	184	168
12	0	0	287	290	13	0	-6	208	197	14	0	-8	262	246
12	0	1	182	185	13	0	-5	343	337	14	0	-7	110	95
12	0	2	236	236	13	0	-3	208	203	14	0	-6	252	244
12	0	3	190	188	13	0	-2	267	263	14	0	-5	206	192
12	0	4	118	126	13	0	-1	116	119	14	0	-4	128	128
12	0	6	107	97	13	0	0	300	297	14	0	-3	257	254
12	1	-11	190	191	13	0	1	193	197	14	0	-2	203	203
12	1	-9	316	321	13	0	2	304	294	14	0	-1	407	398
12	1	-8	196	193	13	0	3	95	94	14	0	0	128	117
12	1	-7	283	279	13	0	4	151	139	14	0	2	364	363
12	1	-6	109	115	13	0	5	248	247	14	0	4	73	84
12	1	-5	390	395	13	1	-12	316	313	14	1	-11	116	116
12	1	-4	253	253	13	1	-11	212	212	14	1	-9	190	189
12	1	-2	581	595	13	1	-10	247	245	14	1	-8	67	83
12	1	-1	163	169	13	1	-9	141	141	14	1	-7	321	310
12	1	0	425	426	13	1	-8	286	285	14	1	-6	280	297
12	1	2	318	319	13	1	-7	247	236	14	1	-5	267	274
12	1	3	395	399	13	1	-6	236	236	14	1	-3	247	254
12	1	4	60	79	13	1	-5	287	295	14	1	-1	151	149
12	1	5	76	72	13	1	-4	228	227	14	1	0	197	198
12	1	6	280	275	13	1	-3	465	476	14	1	1	190	195
12	2	-11	151	142	13	1	-2	279	282	14	1	2	187	183
12	2	-10	239	230	13	1	-1	164	164	14	1	3	102	96
12	2	-8	172	173	13	1	0	355	366	14	2	-9	146	142
12	2	-7	186	195	13	1	3	244	239	14	2	-8	216	202
12	2	-6	198	192	13	1	4	268	270	14	2	-6	199	206
12	2	-5	346	348	13	2	-10	105	90	14	2	-5	164	158
12	2	-4	180	183	13	2	-9	206	209	14	2	-4	103	109
12	2	-3	95	97	13	2	-8	127	135	14	2	-3	210	224
12	2	-2	374	379	13	2	-7	365	372	14	2	-2	187	171
12	2	0	216	223	13	2	-6	167	155	14	2	-1	338	343
12	2	1	150	148	13	2	-5	270	268	14	2	0	74	98
12	2	2	206	211	13	2	-3	173	173	14	2	1	79	82
12	2	3	156	165	13	2	-2	204	213	14	2	2	301	313
12	2	4	122	114	13	2	-1	97	106	15	0	-10	171	157
12	3	-9	233	242	13	2	0	248	264	15	0	-7	337	317
12	3	-8	155	143	13	2	1	171	161	15	0	-6	111	112
12	3	-7	194	195	13	2	2	257	253	15	0	-5	379	365
12	3	-5	262	257	13	2	3	93	86	15	0	-4	337	326
12	3	-4	179	166	13	3	-7	161	152	15	0	-3	367	361
12	3	-2	388	402	13	3	-6	165	168	15	0	-1	273	281
12	3	-1	142	143	13	3	-5	213	217	15	0	2	180	187
12	3	0	295	295	13	3	-4	179	175	15	1	-10	229	222
12	3	2	209	214	13	3	-3	327	331	15	1	-8	288	291
13	0	-11	273	272	13	3	-2	181	178	15	1	-6	262	258
13	0	-10	116	109	13	3	-1	123	116	15	1	-4	173	161

H	K	L	Fobs	Fcalc
-	-	-	----	-----
15	1	-3	132	134
15	1	-1	176	174
15	1	0	142	142
15	1	1	313	313
15	2	-7	277	265
15	2	-6	106	107
15	2	-5	307	308
15	2	-4	265	282
15	2	-3	295	298
15	2	-1	241	244
16	0	-8	406	386
16	0	-6	341	336
16	0	-4	197	182
16	0	-1	240	231
16	1	-8	144	136
16	1	-7	71	77
16	1	-6	69	88
16	1	-5	81	102
16	1	-4	92	80
16	1	-3	250	243
16	1	-2	356	356
17	0	-6	113	102
17	0	-5	109	104
17	0	-4	123	119