

AM-94-568

Penkvilksite, a new kind of silicate structure: OD character, X-ray single-crystal (1M), and powder Rietveld (20) refinements of two MDO polytypes

Stefano Merlini, Marco Pasero, Gilberto Artioli, Alexander P. Khomyakov

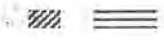
For deposit: Tables 5 & 6

American Mineralogist, 79, 11-12, 1185-1193.

TABLE 5A

Anisotropic displacement parameters for penkvilksite-1M

Atom	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{22}	U_{13}	U_{12}
Ti	0.0072(5)	0.0077(4)	0.0069(5)	-0.0001(4)	0.0029(4)	0.0009(4)
Si1	0.0082(5)	0.0084(5)	0.0081(5)	-0.0004(4)	0.0035(4)	0.0004(4)
Si2	0.0072(5)	0.0097(5)	0.0076(5)	0.0004(4)	0.0028(4)	-0.0004(4)
Na	0.0329(12)	0.0140(9)	0.0216(10)	0.0019(7)	-0.0020(9)	-0.0009(8)
O1	0.0066(14)	0.0108(14)	0.0177(15)	-0.0014(11)	0.0023(11)	0.0004(11)
O2	0.0113(14)	0.0137(15)	0.0122(14)	0.0009(11)	0.0066(12)	-0.0004(11)
O3	0.0107(14)	0.0095(14)	0.0134(14)	0.0022(11)	0.0025(11)	0.0005(11)
O4	0.0150(15)	0.0117(14)	0.0146(15)	-0.0013(11)	0.0095(12)	0.0000(12)
O5	0.0094(13)	0.0108(14)	0.0110(14)	-0.0003(10)	0.0024(11)	0.0009(11)
O6	0.0086(20)	0.0159(21)	0.0149(21)	-0.0019(17)	0.0010(16)	0.0016(16)
OW	0.0217(20)	0.0625(31)	0.0389(25)	0.0257(22)	-0.0017(18)	-0.0168(20)



OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PENKVIKLSITE - 1M

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
9	5	1	13	-14	-6	8	1	10	-8	3	11	1	11	-9	3	5	2	47	48	4	3	2	12	-11
-10	6	1	7	7	-5	8	1	8	23	-1	12	1	9	-9	5	6	49	-49	5	3	2	13	-13	
-9	6	1	18	-18	-3	8	1	23	21	12	0	1	20	23	5	1	49	-49	3	3	2	14	-14	
-8	6	1	27	-27	-2	8	1	13	-11	-12	0	1	21	21	7	1	17	-15	9	4	2	15	-15	
-7	6	1	21	22	-1	8	1	46	-45	-9	0	1	11	-11	7	1	21	-16	4	4	2	9	-19	
-6	6	1	23	23	0	8	1	36	-35	-8	0	1	9	61	9	9	9	20	20	-8	4	2	21	-20
-5	6	1	15	15	1	8	1	7	8	-6	0	1	62	61	-8	4	9	9	-8	-6	4	18	-20	
-4	6	1	12	-11	2	8	1	30	29	-5	0	1	72	69	-7	4	9	9	9	-7	4	18	65	
-3	6	1	39	-39	3	8	1	12	14	-4	0	1	19	18	-6	4	57	55	-5	4	2	46	46	
-2	6	1	25	24	4	8	1	11	-10	-3	0	1	31	18	-5	4	30	31	-4	4	2	20	20	
-1	6	1	31	16	5	8	1	18	-19	-2	0	1	117	115	-4	4	25	25	-3	4	2	11	11	
0	6	1	18	-31	6	8	1	14	-14	-1	0	1	161	158	-3	4	36	-34	-2	4	2	43	43	
1	6	1	29	-30	7	8	1	7	-6	0	0	1	25	-22	-2	4	21	-20	-1	4	2	9	9	
2	6	1	14	33	8	8	1	23	-15	1	0	1	9	9	0	4	8	-20	0	0	2	42	42	
3	6	1	8	8	-7	9	1	24	-24	2	0	1	27	26	1	4	51	-20	1	2	2	9	9	
4	6	1	16	16	-6	9	1	34	-37	3	0	1	109	112	2	4	23	-29	2	4	2	50	50	
5	6	1	31	33	-5	9	1	45	-42	4	0	1	118	110	3	4	12	12	3	4	2	38	38	
6	6	1	18	-31	-4	9	1	25	-35	5	0	1	34	34	4	4	42	43	4	4	2	16	16	
7	6	1	22	-23	-3	9	1	36	-42	6	0	1	110	110	5	4	37	36	5	4	2	31	31	
8	6	1	8	8	-2	9	1	44	-45	7	0	1	18	18	6	4	8	9	6	4	2	17	17	
9	6	1	22	-23	-1	9	1	45	-42	8	0	1	20	20	7	4	8	9	7	4	2	29	29	
-9	6	1	22	-23	0	9	1	45	-42	8	0	1	18	18	8	4	8	9	8	4	2	22	22	
-8	6	1	17	-17	1	9	1	34	-37	9	0	1	34	34	9	4	37	36	9	4	2	22	22	
-6	6	1	24	-24	2	9	1	44	-45	10	0	1	10	10	10	4	12	12	10	4	2	20	20	
-5	6	1	19	-20	3	9	1	21	-24	11	0	1	12	12	11	4	13	13	11	4	2	16	16	
-4	6	1	7	-6	4	9	1	31	-33	10	0	1	8	8	12	4	24	24	12	4	2	33	33	
-3	6	1	9	-31	5	9	1	23	-22	11	0	1	30	28	13	4	11	11	13	4	2	47	47	
-2	6	1	11	11	6	9	1	23	-22	12	0	1	9	9	14	4	11	11	14	4	2	50	50	
-1	6	1	11	11	7	9	1	18	-19	13	0	1	6	6	15	4	7	7	15	4	2	21	21	
0	6	1	25	-26	8	9	1	11	-10	14	0	1	2	2	16	4	7	7	16	4	2	47	47	
1	6	1	28	-26	9	9	1	8	-9	15	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	50	50	
2	6	1	12	-12	10	9	1	10	-11	16	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	21	21	
3	6	1	36	-36	11	9	1	10	-11	17	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	34	34	
4	6	1	25	-25	12	9	1	19	-11	18	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	54	54	
5	6	1	16	-16	13	9	1	19	-11	19	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	42	42	
6	6	1	31	-31	14	9	1	19	-11	20	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	37	37	
7	6	1	20	-20	15	9	1	10	-11	21	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	23	23	
8	6	1	12	-12	16	9	1	10	-11	22	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	9	9	
9	6	1	12	-12	17	9	1	10	-11	23	0	1	6	6	17	4	7	7	17	4	2	9	9	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PENKVIKLSITE - 1M

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
6	8	5	22	22	-5	8	2	22	22	-1	12	2	8	11	-8	3	3	8	6
8	5	2	34	-35	-4	8	2	43	42	-12	1	3	8	-7	3	3	16	-15	-7
-10	6	2	20	21	-3	8	2	7	7	-11	1	3	13	-6	3	3	35	-15	-5
-8	6	2	35	27	-2	8	2	8	4	-9	1	3	17	-4	3	3	15	-13	-3
-7	6	2	26	35	-1	8	2	8	7	-8	1	3	20	-3	3	3	93	-93	-2
-6	6	2	16	-16	0	8	2	25	23	-7	1	3	75	-4	3	3	85	-84	-1
-5	6	2	25	-24	1	8	2	30	28	-6	1	3	16	-3	3	3	8	-8	0
-4	6	2	33	31	2	8	2	33	33	-4	1	3	50	-2	3	3	34	32	1
-3	6	2	34	36	3	8	2	15	-15	-3	1	3	70	-1	3	3	8	58	2
-2	6	2	41	43	4	8	2	8	-4	-2	1	3	6	0	3	3	58	58	1
-1	6	2	32	30	5	8	2	28	-4	-1	1	3	4	1	3	3	45	-46	0
1	6	2	13	-11	6	8	2	7	29	0	1	3	21	2	3	3	71	-74	3
1	6	2	43	43	6	8	2	11	-5	1	1	3	5	3	3	3	18	-17	7
2	6	2	44	46	7	8	2	11	-9	1	1	3	25	4	3	3	22	-19	9
3	6	2	45	44	8	8	2	9	-13	1	1	3	18	-4	3	3	18	-21	7
4	6	2	22	46	9	8	2	17	-11	1	1	3	57	-2	3	3	29	-17	6
5	6	2	25	21	10	8	2	16	-9	1	1	3	8	-5	3	3	20	-24	6
6	6	2	12	11	11	8	2	9	16	1	1	3	8	-6	3	3	16	-17	6
7	6	2	15	11	12	8	2	9	-15	1	1	3	55	-7	3	3	15	-13	6
8	6	2	20	20	13	8	2	23	-9	1	1	3	8	-8	3	3	22	-17	6
-10	6	2	24	-20	14	8	2	10	25	-12	1	3	16	-9	3	3	16	-22	6
-8	6	2	18	18	15	8	2	8	9	-6	1	3	40	-10	3	3	15	-19	6
-6	6	2	9	9	16	8	2	27	8	-4	1	3	42	-11	3	3	27	-22	6
-5	6	2	7	7	17	8	2	7	4	-3	1	3	5	-11	3	3	6	-26	6
-5	6	2	7	7	17	8	2	23	29	-4	1	3	4	-10	3	3	5	-27	6
-5	6	2	7	7	17	8	2	27	28	-3	1	3	4	-9	3	3	4	-34	6
-3	6	2	7	7	17	8	2	8	20	-2	1	3	14	-1	3	3	24	-24	6
-1	6	2	11	10	18	8	2	8	10	-1	1	3	15	0	3	3	30	-29	6
0	6	2	9	10	19	8	2	36	10	0	1	3	9	1	3	3	20	-18	6
1	6	2	12	12	20	8	2	8	14	1	1	3	14	2	3	3	7	-18	6
2	6	2	15	15	21	8	2	20	14	2	1	3	9	2	3	3	7	-18	6
3	6	2	15	15	21	8	2	15	14	2	1	3	14	2	3	3	7	-18	6
4	6	2	15	15	21	8	2	15	14	2	1	3	14	2	3	3	7	-18	6
5	6	2	15	15	21	8	2	15	14	2	1	3	14	2	3	3	7	-18	6
6	6	2	15	15	21	8	2	15	14	2	1	3	14	2	3	3	7	-18	6
7	6	2	15	15	21	8	2	15	14	2	1	3	14	2	3	3	7	-18	6
8	6	2	15	15	21	8	2	15	14	2	1	3	14	2	3	3	7	-18	6



OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PENKVILKSITE - 4M

H	K	L	OBSERVED		CALCULATED		H	K	L	OBSERVED		CALCULATED	
			F0	FC	F0	FC				F0	FC		
-4	7	3	22	23	8	-7	1	4	11	-11	20	21	-2
-2	7	3	36	-34	12	-6	1	4	10	8	47	46	-1
-1	7	3	17	-18	7	-5	1	4	10	10	16	-15	0
0	7	3	15	-15	7	-4	1	4	4	4	43	-40	3
1	7	3	42	-41	7	-2	1	4	4	4	11	-11	4
1	7	3	27	-27	8	-1	1	4	4	4	11	-11	4
4	7	3	19	-20	8	3	0	1	2	3	6	7	5
5	7	3	9	-9	9	-7	0	1	2	3	8	-8	5
5	7	3	33	-34	23	4	1	2	3	3	20	-20	5
6	7	3	33	-34	14	-4	1	1	1	1	10	-10	5
7	7	3	10	-10	17	-4	1	1	1	1	21	-20	6
8	7	3	21	-22	17	-2	1	1	1	1	17	-17	6
8	7	3	11	-12	17	-1	1	1	1	1	17	-16	6
8	7	3	8	-8	30	0	1	1	1	1	22	-23	6
8	7	3	13	-12	17	-1	1	1	1	1	14	14	6
8	7	3	13	-11	43	-7	0	1	1	1	8	7	6
8	7	3	11	-11	30	-9	0	1	1	1	15	-16	6
8	7	3	11	-31	18	-10	0	1	1	1	22	-23	6
8	7	3	13	-12	15	-9	0	1	1	1	19	19	6
8	7	3	17	-15	50	-7	0	1	1	1	37	14	6
8	7	3	17	-11	31	-6	0	1	1	1	19	17	6
8	7	3	22	-22	117	-5	0	1	1	1	47	41	6
8	7	3	22	-33	7	-4	0	1	1	1	13	13	6
4	7	3	11	-13	11	-3	0	1	1	1	19	19	6
4	7	3	12	-13	31	-2	0	1	1	1	42	41	6
4	7	3	12	-11	7	-2	0	1	1	1	11	11	6
4	7	3	11	-13	11	-1	0	1	1	1	11	11	6
5	7	3	12	-18	35	0	1	1	1	1	22	23	6
5	7	3	17	-18	64	0	1	1	1	1	11	13	6
5	7	3	12	-34	49	0	1	1	1	1	26	29	6
5	7	3	12	-30	46	0	1	1	1	1	17	16	6
9	7	3	24	-23	17	-4	0	1	1	1	9	-8	7
9	7	3	7	-29	4	5	0	1	1	1	18	-20	7
9	7	3	29	-29	30	4	0	1	1	1	15	-14	7
9	7	3	11	-28	17	7	0	1	1	1	25	-27	7
9	7	3	28	-27	9	8	0	1	1	1	12	-12	7
9	7	3	26	-27	29	8	0	1	1	1	11	-11	7
9	7	3	8	-27	29	-10	0	1	1	1	52	-51	7

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PENKVILKSITE - 1M

PAGE 5

H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC
6	7	4	24	26	-4	1	5	32	-35	2	3	5	22	23	-3	6	5	7	7
-8	7	4	16	15	-3	1	5	73	-76	5	3	5	25	-25	-2	6	6	10	11
-6	8	4	40	43	-1	1	47	21	-21	6	6	5	18	-18	-1	6	6	18	-18
-5	8	4	17	11	0	1	8	42	-9	-8	6	5	19	-19	-1	6	6	35	36
-4	8	4	25	-25	1	1	17	42	-41	-7	6	5	12	-13	-5	9	9	12	11
-3	8	4	18	18	3	1	16	13	-12	-8	6	5	7	-8	-4	9	10	11	10
-2	8	4	16	14	4	1	16	14	-10	-7	6	5	17	-12	-1	10	10	9	9
-1	8	4	30	28	6	1	15	7	-9	-6	6	6	11	-8	-1	9	9	9	9
0	8	4	17	18	-1	1	15	15	-13	-4	6	5	5	-5	-10	6	6	21	14
1	8	4	13	13	-9	2	16	16	-14	-3	6	5	16	16	-8	6	6	8	46
2	8	4	19	19	-7	2	9	19	-21	-2	6	5	17	16	-5	6	6	17	29
3	8	4	32	30	-8	2	15	19	19	-1	6	5	10	9	-4	6	6	32	14
4	8	4	11	8	-5	2	21	21	-23	-1	6	5	10	9	-3	6	6	17	39
5	8	4	13	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	19	19	-2	6	6	25	13
6	8	4	9	8	-3	2	12	12	-16	-1	6	5	12	-12	-1	6	6	13	17
7	8	4	13	6	-2	2	22	12	-12	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
8	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0	6	6	13	13
9	8	4	13	11	-2	2	15	15	-13	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	9	8	-2	2	22	12	-16	-1	6	5	20	-20	0	6	6	22	22
9	8	4	13	13	-4	2	15	15	-16	-1	6	5	10	-16	0	6	6	17	17
9	8	4	13	13	-5	2	21	21	-34	-1	6	5	19	-33	0	6	6	39	24
9	8	4	9	11	-4	2	28	12	-14	-1	6	5	12	-12	0	6	6	24	24
9	8	4	13	11	-3	2	12	12	-29	-1	6	5	10	-29	0				

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PENKVIKLSITE - 4M

H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC
-6	2	6	7	6	2	4	6	29	29	2	7	6	20	-20	2	7	6	15	16	-2	6	7	16	16
-5	2	6	38	45	3	4	20	20	-8	4	7	6	7	-8	4	7	15	8	9	-0	6	7	16	16
-4	2	6	24	26	5	4	10	10	17	-9	7	6	15	9	-1	7	11	7	8	1	6	7	14	-14
-3	2	6	16	-15	11	4	13	13	18	-7	7	6	17	18	-9	7	12	11	9	3	6	7	9	-17
-2	2	6	40	44	-10	4	20	20	-29	-8	8	6	26	-29	-7	7	42	-41	-7	7	6	18	-17	
-1	2	6	25	25	-9	4	14	14	-14	-3	8	6	33	33	-5	7	35	25	-6	7	7	23	-14	
1	2	6	59	41	-7	4	15	15	-16	-1	8	6	16	-14	-5	7	47	7	-6	7	7	21	-20	
2	2	6	10	10	-6	4	11	11	12	0	8	6	34	33	-4	7	44	44	-4	7	7	21	-20	
3	2	6	12	11	-5	4	16	16	19	1	8	6	18	19	-2	7	43	43	-2	7	7	25	-26	
4	2	6	13	11	-4	4	22	22	-22	-6	9	6	15	-15	-3	7	35	-34	-1	7	7	21	-8	
5	2	6	22	8	-3	4	20	20	-19	-5	9	6	11	-10	-4	7	8	38	-38	0	7	7	19	-21
6	2	6	8	8	-2	4	9	9	8	-4	9	6	10	10	-10	7	9	8	-7	1	7	19	-21	
7	2	6	18	-19	1	4	31	31	-7	0	9	6	8	-8	-9	7	32	32	-7	7	7	27	-28	
8	2	6	9	9	2	4	7	7	36	-3	9	6	9	9	-8	7	10	8	-30	2	7	21	-22	
9	2	6	18	8	3	4	36	36	-25	-9	9	6	25	-25	-6	7	12	12	-10	8	7	10	-10	
0	2	6	12	12	-8	4	14	14	15	-7	9	6	27	26	-5	7	10	10	-7	8	7	9	11	
1	2	6	9	9	-7	4	29	29	-15	-4	9	6	15	-15	-4	7	12	12	-5	8	7	10	-10	
2	2	6	23	38	-6	4	25	25	-43	-6	9	6	42	-43	-2	7	15	15	-4	8	7	18	12	
3	2	6	18	38	-4	4	32	32	-26	-5	9	6	29	-26	-1	7	18	18	-3	8	7	12	12	
4	2	6	7	18	-3	4	12	12	5	-4	9	6	8	5	-1	7	8	8	-9	8	7	16	-16	
5	2	6	29	-29	-2	4	35	35	-17	-3	9	6	22	-17	0	7	26	26	0	8	7	12	-27	
6	2	6	14	-15	-1	4	30	30	7	-2	9	6	7	7	-4	7	30	-30	-3	7	7	8	-17	
7	2	6	18	-13	0	4	36	36	-34	-8	9	6	8	-7	-3	7	7	-5	-11	9	7	12	13	
8	2	6	31	32	4	4	9	9	40	-7	9	6	18	-17	-8	7	16	16	-10	8	7	26	-7	
9	2	6	21	32	-9	4	30	30	-10	-11	9	6	35	-10	-9	7	7	7	-11	8	7	11	13	
0	2	6	12	11	-7	4	16	16	16	-7	9	6	15	15	-6	7	16	16	-8	8	7	11	-9	
1	2	6	10	10	-6	4	23	23	-25	-7	9	6	19	-19	-4	7	13	13	-2	8	7	8	-8	
2	2	6	24	22	-5	4	16	16	18	-4	9	6	24	-15	-3	7	22	22	-1	8	7	20	-19	
3	2	6	11	10	-4	4	16	16	15	-5	9	6	19	-15	0	7	14	14	0	8	7	18	-17	
4	2	6	24	12	-3	4	23	23	-8	-7	9	6	17	-8	-2	7	13	13	-2	8	7	8	-8	
5	2	6	12	11	-2	4	33	33	-19	-7	9	6	9	8	-1	7	22	22	-1	8	7	20	-19	
6	2	6	31	32	-9	4	30	30	31	-11	9	6	11	11	0	7	11	11	-2	8	7	11	11	
7	2	6	21	32	4	4	9	9	31	-7	9	6	7	7	-3	7	7	7	-3	8	7	17	17	
8	2	6	14	-13	-7	4	16	16	18	-4	9	6	15	-15	-4	7	11	11	-4	8	7	18	18	
9	2	6	29	-29	-2	4	35	35	-17	-3	9	6	26	-17	0	7	26	26	-4	8	7	12	12	
0	2	6	14	-15	-1	4	30	30	7	-2	9	6	7	7	-4	7	30	-30	-3	7	7	8	-17	
1	2	6	18	-13	0	4	36	36	-34	-8	9	6	8	-7	-3	7	7	-5	-11	9	7	12	13	
2	2	6	31	32	4	4	9	9	40	-7	9	6	18	-17	-8	7	16	16	-10	8	7	26	-7	
3	2	6	21	32	-9	4	30	30	-10	-11	9	6	11	11	-6	7	16	16	-8	8	7	11	-9	
4	2	6	12	11	-7	4	16	16	16	-7	9	6	15	15	-4	7	16	16	-8	8	7	11	-9	
5	2	6	31	32	-9	4	30	30	7	-2	9	6	7	7	-4	7	30	-30	-3	7	7	8	-17	
6	2	6	14	-13	-7	4	16	16	18	-4	9	6	15	-15	-4	7	11	11	-4	8	7	18	18	
7	2	6	29	-29	-2	4	35	35	-17	-3	9	6	26	-17	0	7	26	26	-4	8	7	12	12	
8	2	6	14	-15	-1	4	30	30	7	-2	9	6	7	7	-4	7	30	-30	-3	7	7	8	-17	
9	2	6	18	-13	0	4	36	36	-34	-8	9	6	8	-7	-3	7	7	-5	-11	9	7	12	13	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PENKVILKSITE -14

H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC	H	K	L	F0	FC
-5	1	8	7	7	-8	3	8	26	27	-5	5	8	15	-16	-3	1	9	15	-15
-2	1	8	9	-9	-6	3	10	10	-13	-4	5	8	9	-8	-2	1	9	30	-29
-1	1	8	12	-10	-5	3	20	20	18	-2	5	8	19	18	-1	1	9	15	-15
1	1	8	15	12	-3	3	23	23	-22	0	5	8	18	-17	-1	1	9	15	-15
-10	2	8	15	16	-2	3	9	16	9	-8	5	8	16	-14	-9	1	9	17	-15
-9	2	8	15	14	1	3	16	16	16	-7	5	8	11	-11	-7	2	9	13	-12
-8	2	8	23	-23	3	3	12	20	13	-5	5	8	20	-20	-3	2	9	23	-22
-7	2	8	42	49	-8	4	16	16	-19	-4	6	8	32	30	-1	3	9	17	-16
-6	2	8	18	19	-7	4	20	20	16	-3	6	8	31	30	-9	3	9	11	-13
-5	2	8	10	9	-6	4	23	23	22	-2	6	8	16	15	-7	3	9	8	-9
-4	2	8	30	33	-5	4	8	8	6	-1	6	8	8	-8	-6	0	10	19	-18
-3	2	8	7	6	-2	4	11	11	12	0	6	8	15	5	-5	1	10	48	-53
-2	2	8	16	14	-1	4	9	9	8	-4	6	8	11	16	-7	2	10	27	-27
-1	2	8	33	33	0	4	16	16	15	-3	6	8	11	11	-8	3	9	17	-16
0	2	8	19	19	1	4	12	12	12	-1	6	8	11	11	-7	3	9	10	-10
2	2	8	26	26	-8	5	12	12	31	-9	7	8	28	-28	-6	2	10	11	-10
3	2	8	15	14	-7	5	8	8	7	-8	7	8	21	-21	-5	4	9	28	-27
-10	3	8	12	-12	-6	5	22	22	-22	-5	7	9	31	-29	-4	3	10	15	8