

TABLE 6. Positional and Thermal Parameters for LUKECHANGITE-(Ce) in P6(3)/mmc

	x	y	z	K	U11	U22	U33	U23	U13	U12	Ueq
Ce	0.66670(0)	0.33330(0)	0.35447(2)	0.157(1)	92(3)	92(3)	47(4)	0	0	46(2)	77(3)
NA1	0.33330(0)	0.66670(0)	0.4777(2)	0.16670(0)	265(18)	265(18)	239(21)	0	0	132(9)	256(14)
NA2	0	0	1/4	0.089(2)	276(23)	276(23)	83(26)	0	0	138(12)	212(18)
C1	0	0	0.4358(4)	1/6	123(24)	123(24)	121(42)	0	0	61(12)	122(21)
C2	0.33330(0)	0.66670(0)	0.3239(4)	1/6	98(26)	98(26)	74(37)	0	0	49(13)	90(21)
O1	0.290(1)	0.1448(7)	0.4376(2)	1/2	127(21)	783(47)	116(18)	1(8)	2(16)	63(10)	415(24)
O2	0.1870(5)	0.374(1)	0.3242(2)	1/2	159(15)	105(19)	198(18)	-9(14)	-5(7)	52(9)	160(13)
F	0.66670(0)	0.33330(0)	1/4	0.08330(0)	277(37)	277(37)	117(40)	0	0	139(19)	224(28)

4

All U values are x 10

TABLE 7. Observed and calculated structure factors for LUKECHANGITE-(Ce) in P6(3)/mmc

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	1	0	670	-667	28	-2	5	4	434	436	10	-1	4	9	827	832	18	-2	5	14	278	-268	4	-2	5	20	205	-212	4
-1	2	0	2005	2158	10	-1	5	4	605	-645	19	0	4	9	727	-724	13	-1	5	14	712	707	5	-1	5	20	574	584	10
0	2	0	1284	-1303	55	0	5	4	328	321	9	-2	5	9	771	-778	9	0	5	14	460	-460	6	0	1	21	523	-511	8
-1	3	0	530	-566	11	-3	6	4	597	-595	18	-1	5	9	79	-63	3	-3	6	14	598	606	3	0	2	21	104	98	3
0	3	0	1600	1645	71	-2	6	4	362	352	5	0	5	9	624	612	11	-2	6	14	285	-280	4	-1	3	21	394	-414	7
-2	4	0	1901	2001	17	-1	6	4	313	308	4	-2	6	9	554	561	5	0	1	15	962	-966	23	0	3	21	33	6	5
-1	4	0	478	-496	12	0	6	4	538	-530	11	-1	6	9	543	-540	4	0	2	15	755	729	3	-1	4	21	325	339	7
0	4	0	596	-606	23	-3	7	4	275	258	5	0	0	10	2393	-2297	6	-1	3	15	771	-760	3	0	4	21	148	-149	6
-2	5	0	453	-470	4	0	1	5	1277	1197	43	0	1	10	474	437	8	0	3	15	115	119	2	-2	5	21	290	-307	4
-1	5	0	1086	1139	11	-1	2	5	1918	-1925	48	-1	2	10	1589	-1517	28	-1	4	15	713	712	5	-1	5	21	33	-3	5
0	5	0	328	-325	11	-1	3	5	982	1003	18	0	2	10	628	620	16	0	4	15	591	-595	4	0	0	22	90	41	4
-3	6	0	983	1004	9	0	3	5	35	-13	7	-1	3	10	530	513	11	-2	5	15	688	-693	10	0	1	22	262	-270	4
-2	6	0	461	-459	7	-1	4	5	845	-884	13	0	3	10	1237	-1257	21	-1	5	15	90	-69	3	-1	2	22	126	99	15
-1	6	0	345	-358	9	0	4	5	1054	1068	21	-2	4	10	1230	-1233	14	0	5	15	533	537	7	0	2	22	194	-203	6
0	6	0	926	880	21	-2	5	5	755	754	18	-1	4	10	364	361	6	-2	6	15	480	482	7	-1	3	22	124	-126	4
-3	7	0	280	-263	2	-1	5	5	53	7	5	0	4	10	385	382	9	0	0	16	87	66	2	0	3	22	100	85	6
0	1	1	1015	-1038	33	-2	0	5	694	-663	20	-2	5	10	307	307	3	-1	1	16	584	602	15	-2	4	22	129	134	3
0	2	1	1272	1333	52	-2	6	5	711	-709	9	-1	5	10	903	-898	10	0	2	16	534	-546	4	-1	4	22	189	-202	7
-1	3	1	892	-943	22	-1	6	5	592	600	12	0	5	10	361	366	7	0	2	16	274	267	3	0	4	22	185	-186	7
0	3	1	215	-220	12	0	6	5	61	-39	7	-3	6	10	780	-776	12	-1	3	16	384	391	2	-2	5	22	195	-211	3
-1	4	1	679	704	9	-3	7	5	561	530	7	-2	6	10	319	321	3	0	3	16	435	-422	2	0	1	23	681	-673	10
0	4	1	787	-797	29	0	0	6	1402	1421	6	-1	6	10	308	309	5	-2	4	16	202	-196	7	0	2	23	596	621	20
-2	5	1	503	-509	10	0	1	6	1194	-1148	49	0	1	11	1093	1060	13	-1	4	16	365	368	3	-1	3	23	573	-613	12
-1	5	1	119	105	5	-1	2	6	1061	1023	15	0	2	11	795	-792	18	-1	4	16	270	271	3	0	3	23	44	-44	5
0	5	1	577	567	17	0	2	6	888	-904	16	-1	3	11	892	883	18	-2	5	16	308	308	5	-1	4	23	491	524	12
-2	6	1	459	577	9	-1	3	6	495	-504	13	-1	4	11	164	156	3	-1	5	16	309	-311	2	0	4	23	469	-493	16
-1	6	1	488	-506	19	0	3	6	775	754	22	-1	4	11	640	-640	11	0	5	16	233	228	3	0	0	24	1296	-1203	7
0	6	1	34	-9	5	-2	4	6	867	896	32	0	4	11	564	561	8	-3	6	16	276	-266	2	0	1	24	467	475	12
-3	7	1	452	-442	3	-1	4	6	581	-619	9	-2	5	11	466	465	4	-2	6	16	183	180	2	-1	2	24	920	-910	25
0	0	2	384	-411	3	0	4	6	566	-580	12	-1	5	11	102	-86	9	0	1	17	156	-162	4	0	2	24	514	552	14
0	1	2	322	297	15	-2	5	6	562	-581	11	0	5	11	494	-486	10	-1	3	17	50	44	4	-1	3	24	453	488	12
-1	2	2	435	-439	26	-1	5	6	575	598	10	-2	6	11	450	-441	4	-1	3	17	153	-151	2	0	3	24	807	-835	36
0	0	2	89	78	4	0	5	6	229	-223	6	-1	6	11	438	416	4	0	3	17	46	-28	6	-2	4	24	801	-839	18
-1	3	2	115	-85	5	-3	6	6	573	559	14	0	0	12	686	671	4	-1	4	17	136	118	5	-1	4	24	329	353	8
0	3	2	260	-255	12	-2	6	6	383	-384	4	0	1	12	101	106	3	0	4	17	67	-69	3	0	4	24	347	356	14
-2	4	2	301	-324	11	-1	6	6	288	-285	7	-1	2	12	185	137	11	-2	5	17	103	-93	3	0	1	25	652	646	5
-1	4	2	133	144	2	0	6	6	528	508	6	0	2	12	86	-47	14	-1	5	17	47	17	3	0	2	25	421	-454	13
0	0	4	117	137	5	0	1	7	484	491	18	-1	3	12	190	165	6	0	5	17	97	100	6	-1	3	25	521	561	16
-2	5	2	177	190	4	0	2	7	81	64	5	0	3	12	68	74	3	0	0	18	814	-768	5	0	3	25	13	-12	-7
-1	5	2	202	-210	4	-1	3	7	136	133	5	-2	4	12	252	264	5	0	1	18	526	520	5	-1	4	25	450	-497	11
0	5	2	43	-36	3	0	3	7	206	-209	6	-1	4	12	55	39	3	-1	2	18	1090	-1116	14	0	0	26	291	-303	3
-3	6	2	218	-207	5	-1	4	7	151	-129	6	0	4	12	19	-15	-6	0	2	18	302	284	5	0	1	26	150	-148	6
-2	6	2	94	97	2	0	4	7	58	-50	2	-2	5	12	38	-14	4	-1	3	18	408	403	6	-1	2	26	72	49	4
-1	6	2	60	47	2	-2	5	7	176	175	5	-1	5	12	89	56	4	0	3	18	890	-882	15	0	2	26	32	5	-7
0	6	2	210	-196	6	-1	5	7	121	106	3	0	5	12	124	112	4	-2	4	18	605	-630	17	-1	3	26	119	-121	3
-3	7	2	56	13	2	0	5	7	24	-10	4	-3	6	12	85	64	3	-1	4	18	363	364	6	0	3	26	57	45	7
0	0	3	615	-575	17	-2	6	7	59	47	2	-2	6	12	47	-12	9	0	4	18	285	283	3	-2	4	26	128	-116	2
0	2	3	86	-68	8	-1	6	7	37	-12	4	-1	6	12	71	37	5	-2	5	18	308	309	3	-1	4	26	94	-99	3
-1	3	3	449	-467	14	0	6	7	39	-8	5	0	1	13	1200	1185	14	-1	5	18	617	-618	5	0	1	27	253	256	3
0	3	3	103	-103	4	0	0	8	205	-202	1	0	2	13	402	-375	5	0	5	18	286	277	4	0	2	27	271	-269	10
-1	4	3	311	330	3	0	1	8	687	-662	23	-1	3	13	894	884	10	0	1	19	1217	1192	29	-1	3	27	262	279	6
0	4	3	169	-164	6	-1	2	8	1250	1221	9	0	3	13	31	-21	4	0	2	19	1053	-1055	27	0	3	27	100	101	4
-2	5	3	251	-258	6	0	2	8	44	-12	2	-1	4	13	704	-706	9	-1	3	19	887	923	14	0	0	28	1016	992	5
-1	5	3	60	51	3	-1	3	8	411	-415	6	0	4	13	399	404	4	0	3	19	147	-141	4	0	1	28	334	-331	3
0	5	3	270	278	8	0	3	8	849	845	20	-2	5	13	612	619	6	-1	4	19	821	-849	11	-1	2	28	765	794	17
-2	6	3	215	210	4	-2	4	8	338	331	9	-1	5	13	40	11	3	0	4	19	741	757	11	0	2	28	356	-364	6
-1	6	3	241	-236	3	-1	4	8	325	-344	5	0	5	13	501	-505	7	-2	5	19	780	810	8	-1	3	28	250	-262	3
0	6	3	56	-36	3	-2	6	13	382	-380	5	-2	6	13	382	-380	5	-1	5	19									

TABLE 7. Observed and calculated structure factors for LUKECHANGITE-(Ce) in P6(3)/mmc

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	1	0	670	-667	28	-2	5	4	434	436	10	-1	4	9	827	832	18	-2	5	14	278	-268	4
-1	2	0	2005	2158	10	-1	5	4	605	-645	19	0	4	9	727	-724	13	-1	5	14	712	707	5
0	2	0	1284	-1303	55	0	5	4	328	321	9	-2	5	9	771	-778	9	0	5	14	460	-460	6
-1	3	0	530	-566	11	-3	6	4	597	-595	18	-1	5	9	79	-63	3	-3	6	14	598	606	3
0	3	0	1600	1645	71	-2	6	4	362	352	5	0	5	9	624	612	11	-2	6	14	285	-280	4
-2	4	0	1901	2001	17	-1	6	4	313	308	4	-2	6	9	554	561	5	0	1	15	962	-966	23
-1	4	0	478	-496	12	0	6	4	538	-530	11	-1	6	9	543	-540	4	0	2	15	755	729	3
0	4	0	596	-606	23	-3	7	4	275	258	5	0	0	10	2393	-2297	6	-1	3	15	771	-760	3
-2	5	0	453	-470	4	0	1	5	1277	1197	43	0	3	15	115	119	2	0	3	15	115	119	2
-1	5	0	1086	1139	11	0	2	5	1918	-1925	48	-1	2	10	1589	-1517	28	-1	4	15	713	712	5
0	5	0	328	-325	11	-1	3	5	982	1003	18	0	2	10	628	620	16	0	4	15	591	-595	4
-3	6	0	983	1004	9	0	3	5	35	-13	7	-1	3	10	530	513	11	-2	5	15	688	-693	10
-2	6	0	461	-459	7	-1	4	5	845	-884	13	0	3	10	1237	-1257	21	-1	5	15	90	-69	3
-1	6	0	345	-358	9	0	4	5	1054	1068	21	-2	4	10	1230	-1233	14	0	5	15	533	537	7
0	6	0	926	880	21	-2	5	5	755	754	18	-1	4	10	364	361	6	-2	6	15	480	482	7
-3	7	0	280	-263	2	-1	5	5	53	7	5	0	4	10	385	382	9	0	0	16	87	66	2
0	1	1	1015	-1038	33	0	5	5	694	-663	20	-2	5	10	307	307	3	0	1	16	584	602	15
0	2	1	1272	1333	52	-2	6	5	711	-709	9	-1	5	10	903	-898	10	-1	2	16	534	-546	4
-1	3	1	892	-943	22	-1	6	5	592	600	12	0	5	10	361	366	7	0	2	16	274	267	3
0	3	1	215	-220	12	0	6	5	61	-39	7	-3	6	10	780	-776	12	-1	3	16	384	391	2
-1	4	1	679	704	9	-3	7	5	561	530	7	-2	6	10	319	321	3	0	3	16	435	-422	2
0	4	1	787	-797	29	0	0	6	1402	1421	6	-1	6	10	308	309	5	-2	4	16	202	-196	7
-2	5	1	503	-509	10	0	1	6	1194	-1148	49	0	1	11	1093	1060	13	-1	4	16	365	368	3
-1	5	1	119	105	5	-1	2	6	1061	1023	15	0	2	11	795	-792	18	0	4	16	270	271	3
0	5	1	577	567	17	0	2	6	888	-904	16	-1	3	11	892	883	18	-2	5	16	308	308	5
-2	6	1	579	577	9	-1	3	6	495	-504	13	0	3	11	164	156	3	-1	5	16	309	-311	2
0	6	1	488	-506	19	0	3	6	775	754	22	-1	4	11	640	-640	11	0	5	16	233	228	3
0	6	1	34	-9	5	-2	4	6	867	896	32	0	4	11	564	561	8	-3	6	16	276	-266	2
-3	7	1	452	-442	3	-1	4	6	581	-619	9	-2	5	11	466	465	4	-2	6	16	183	180	2
0	0	2	384	-411	3	0	4	6	566	-580	12	-1	5	11	102	-86	9	0	1	17	156	-162	4
0	1	2	322	297	15	-2	5	6	562	-581	11	0	5	11	494	-486	10	0	2	17	50	44	4
-1	2	2	435	-439	26	-1	5	6	575	598	10	-2	6	11	450	-441	4	-1	3	17	153	-151	2
0	2	2	89	78	4	0	5	6	229	-223	6	-1	6	11	438	416	4	0	3	17	46	-28	6
-1	3	2	115	-85	5	-3	6	6	573	559	14	0	0	12	686	671	4	-1	4	17	136	118	5
0	3	2	260	-255	12	-2	6	6	383	-384	4	0	1	12	101	106	3	0	4	17	67	-69	3
-2	4	2	301	-324	11	-1	6	6	288	-285	7	-1	2	12	185	137	11	-2	5	17	103	-93	3
-1	4	2	133	144	2	0	6	6	528	508	6	0	2	12	86	-47	14	-1	5	17	47	17	3
0	4	2	117	137	5	0	1	7	484	491	18	-1	3	12	190	165	6	0	5	17	97	100	6
-2	5	2	177	190	4	0	2	7	81	64	5	0	3	12	68	74	3	0	0	18	814	-768	5
-1	5	2	202	-210	4	-1	3	7	136	133	5	-2	4	12	252	264	5	-1	1	18	526	520	5
0	5	2	43	-36	3	0	3	7	206	-209	6	-1	4	12	55	39	3	-1	2	18	1090	-1116	14
-3	6	2	218	-207	5	-1	4	7	151	-129	6	0	4	12	19	-15	-6	0	2	18	302	284	5
-2	6	2	94	97	2	0	4	7	58	-50	2	-2	5	12	38	-14	4	-1	3	18	408	403	6
-1	6	2	60	47	2	-2	5	7	176	175	5	0	3	18	890	-882	15	0	3	18	890	-882	15
0	6	2	210	-196	6	-1	5	7	121	106	3	-2	4	18	605	-630	17	-2	4	18	605	-630	17
-3	7	2	56	13	2	0	5	7	24	-10	4	-3	6	12	85	64	3	-1	4	18	363	364	6
0	1	3	615	-575	17	-2	6	7	59	47	2	0	4	18	285	283	3	0	4	18	285	283	3
0	2	3	86	-68	8	-1	6	7	37	-12	4	-2	5	18	308	309	3	-2	4	18	308	309	3
-1	3	3	449	-467	14	0	6	7	39	-8	5	0	1	13	1200	1185	14	-1	5	18	617	-618	5
0	3	3	103	-103	4	0	0	8	205	-202	1	0	2	13	402	-375	5	0	5	18	286	277	4
-1	4	3	311	330	3	0	1	8	687	-662	23	-1	3	13	894	884	10	0	1	19	1217	1192	29
-2	4	3	169	-164	6	-1	2	8	1250	1221	9	0	3	13	31	-21	4	0	2	19	1053	-1055	27
0	5	3	251	-258	6	0	2	8	44	-12	2	-1	4	13	704	-706	9	-1	3	19	887	923	14
-1	5	3	60	51	3	-1	3	8	411	-415	6	0	4	13	399	404	4	0	3	19	147	-141	4
0	5	3	270	278	8	0	3	8	849	845	20	-2	5	13	612	619	6	-1	4	19	821	-849	11
-2	6	3	215	210	4	-2	4	8	338	331	9	-1	5	13	40	11	3	0	4	19	741	757	11
-1	6	3	241	-236	3	-1	4	8	325	-344	5	0	5	13	501	-505	7	-2	5	19	780	810	8
0	6	3	56	-36	3	0	4	8	202	-198	6	-2	6	13	382	-380	5	-1	5	19	91	89	2
-3	7	3	212	-212	2	-2	5	8	264	-265	5	-1	6	13	430	422	2	0	0	20	710	683	4
0	0	4	1309	-1360	5	-1	5	8	506	513	6	0	0	14	1035	960	12	0	1	20	344	-338	12
0	1	4	821	777	19	0	5	8	277	-274	5	0	1	14	519	-525	8	-1	2	20	887	909	12
-1	2	4	924	-883	55	-3	6	8	427	405	10	-1	2	14	1023	992	19	0	2	20	220	-227	5
0	2	4	747	739	27	-2	6	8	140	-143	3	0	2	14	518	-505	6	-1	3	20	372	-382	7
-1	3	4	520	535	11	-1	6	8	191	-188	3	-1	3	14	644	-643	7	0	3	20	778	789	20
0	3	4	762	-763	27	0	1	9	1356	-1290	41	0	3	14	922	926	15	-2	4	20	542	563	3
-2	4	4	791	-829	31	0	2	9	1037	1001	26	-2	4	14	729	726	11	-1	4	20	260	-273	6
-1	4	4	468	489	7	-1	3	9	939	-930	15	-1	4	14	385	-378	3	0	4	20	217	-220	4
0	4	4	460	473	17	0	3	9	124	121	1	0	4	14	340	-335	2	0	4	20	217	-220	4