

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

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
2 0 0 0 10 -1	1 11 0 170 168 5	-3 -3 1 2264 2264 9	2 8 1 154 158 2	-2 -6 2 1290 1304 4
4 0 0 1296 1311 10	3 11 0 137 141 4	-1 -3 1 0 17 -1	4 8 1 39 45 -9	0 -6 2 1028 1025 4
6 0 0 540 530 5	0 12 0 1110 1098 5	3 -3 1 1023 1008 8	-1 9 1 39 12 -17	2 -6 2 1209 1194 6
-5 1 0 120 115 5	2 12 0 54 54 -10	-6 -2 1 13 27 -13	1 9 1 797 782 8	-5 -5 2 161 170 3
-3 1 0 249 252 2	4 12 0 543 533 4	-4 -2 1 379 388 2	3 9 1 492 486 2	-3 -5 2 309 318 1
3 1 0 477 470 3	-1 13 0 146 157 6	-2 -2 1 234 213 1	5 9 1 477 471 3	-1 -5 2 482 479 1
5 1 0 268 271 4	1 13 0 143 139 6	4 -2 1 311 323 3	-2 10 1 81 87 6	1 -5 2 413 415 1
7 1 0 155 159 7	0 -14 1 84 96 10	-7 -1 1 27 26 -26	0 10 1 201 199 2	3 -5 2 355 358 2
-4 2 0 179 183 3	-1 -13 1 151 164 5	-5 -1 1 60 52 -9	2 10 1 74 81 5	-6 -4 2 192 191 5
2 2 0 90 69 2	1 -13 1 104 112 6	-3 -1 1 126 126 4	4 10 1 137 136 4	-4 -4 2 59 50 5
4 2 0 190 191 1	-4 -12 1 58 23 -18	3 -1 1 450 445 2	-1 11 1 77 78 7	-2 -4 2 443 437 1
6 2 0 100 99 7	0 -12 1 213 188 3	5 -1 1 272 268 3	1 11 1 256 251 4	0 -4 2 51 32 2
-3 3 0 272 239 2	2 -12 1 387 363 4	-4 0 1 60 41 -9	3 11 1 105 114 5	2 -4 2 326 323 2
1 3 0 329 327 2	-3 -11 1 61 56 -8	2 0 1 1379 1371 7	2 12 1 341 347 2	-7 -3 2 34 12 -34
3 3 0 286 230 6	-1 -11 1 145 147 3	4 0 1 979 976 7	4 12 1 373 370 4	-3 -3 2 266 243 10
5 3 0 417 415 3	1 -11 1 70 70 7	6 0 1 403 403 4	-1 13 1 26 11 -26	-1 -3 2 1391 1366 11
7 3 0 408 396 4	-4 -10 1 146 146 3	-5 1 1 219 218 3	1 13 1 85 74 11	1 -3 2 1432 1420 6
-2 4 0 213 210 1	-2 -10 1 46 43 -8	-3 1 1 326 319 2	0 -14 2 49 50 -24	3 -3 2 517 510 2
0 4 0 148 134 1	0 -10 1 112 115 3	3 1 1 126 120 1	-1 -13 2 45 33 -18	-6 -2 2 62 60 -8
2 4 0 272 272 1	2 -10 1 28 6 -16	5 1 1 143 145 4	1 -13 2 87 88 6	-4 -2 2 69 35 4
4 4 0 68 68 4	-5 -9 1 69 51 8	7 1 1 125 125 8	-4 -12 2 120 80 7	-2 -2 2 204 195 1
6 4 0 71 67 -10	-3 -9 1 1202 1177 5	-4 2 1 281 291 2	-2 -12 2 590 575 3	2 -2 2 284 280 2
-3 5 0 425 428 3	-1 -9 1 73 13 4	2 2 1 276 255 2	0 -12 2 292 290 2	4 -2 2 32 15 -12
-1 5 0 361 353 1	1 -9 1 782 761 3	4 2 1 218 225 2	2 -12 2 458 454 2	-7 -1 2 179 182 6
1 5 0 442 442 1	3 -9 1 506 504 4	6 2 1 95 104 8	-3 -11 2 172 178 3	-5 -1 2 228 230 3
3 5 0 199 201 1	-4 -8 1 72 75 6	-3 3 1 2278 2265 13	-1 -11 2 203 206 5	-3 -1 2 372 364 2
5 5 0 95 99 4	-2 -8 1 245 250 1	1 3 1 1038 1069 12	1 -11 2 261 254 2	3 -1 2 39 20 3
-2 6 0 343 337 2	0 -8 1 79 45 8	3 3 1 1001 990 4	3 -11 2 129 129 5	5 -1 2 96 96 5
0 6 0 2257 2273 12	2 -8 1 237 244 2	5 3 1 712 695 4	-4 -10 2 147 152 4	-6 0 2 1198 1174 9
2 6 0 338 340 2	-5 -7 1 52 18 -17	7 3 1 284 292 4	-2 -10 2 98 103 5	-4 0 2 345 336 3
4 6 0 779 777 4	-3 -7 1 163 166 2	-2 4 1 467 454 2	0 -10 2 195 200 3	2 0 2 1033 1072 5
6 6 0 261 263 3	-1 -7 1 139 140 2	0 4 1 185 165 1	2 -10 2 82 83 9	4 0 2 382 367 3
-3 7 0 198 190 3	1 -7 1 426 429 5	2 4 1 395 393 1	-5 -9 2 117 19 -28	-5 1 2 208 205 3
-1 7 0 222 219 2	3 -7 1 201 205 2	4 4 1 39 32 -8	-3 -9 2 308 292 3	-3 1 2 411 402 2
1 7 0 423 435 1	-4 -6 1 72 71 4	6 4 1 194 190 5	-1 -9 2 448 433 3	1 1 2 634 648 4
3 7 0 226 230 1	-2 -6 1 127 8 6	-1 5 1 386 380 1	1 -9 2 756 737 3	3 1 2 418 423 2
5 7 0 259 262 2	0 -6 1 253 246 2	1 5 1 251 247 1	3 -9 2 223 215 4	5 1 2 170 179 4
-2 8 0 117 114 2	2 -6 1 798 787 4	3 5 1 407 413 2	-6 -8 2 59 43 -14	-4 2 2 369 371 2
0 8 0 43 34 5	-5 -5 1 132 135 3	5 5 1 191 198 3	-4 -8 2 41 22 -10	2 2 2 50 27 3
2 8 0 130 131 2	-3 -5 1 321 326 1	-2 6 1 49 43 -7	-2 -8 2 67 41 5	4 2 2 245 255 4
4 8 0 75 81 5	-1 -5 1 47 36 4	0 6 1 269 229 1	0 -8 2 122 125 2	6 2 2 112 104 8
-1 9 0 136 105 3	1 -5 1 155 151 1	2 6 1 755 760 4	2 -8 2 51 57 5	-1 3 2 1350 1369 10
1 9 0 69 70 3	3 -5 1 167 159 2	4 6 1 734 723 4	4 -8 2 110 121 4	1 3 2 1423 1411 9
3 9 0 203 56 11	-6 -4 1 178 184 5	6 6 1 291 282 2	-5 -7 2 230 236 3	3 3 2 509 506 2
5 9 0 336 342 7	-4 -4 1 75 65 8	-1 7 1 256 256 1	-3 -7 2 138 135 3	5 3 2 107 18 9
-2 10 0 58 59 6	-2 -4 1 299 300 1	1 7 1 81 59 2	-1 -7 2 271 281 1	7 3 2 64 42 -16
0 10 0 92 98 3	0 -4 1 268 243 1	3 7 1 28 8 -10	1 -7 2 54 43 5	0 4 2 238 230 1

2 10 0 35 26 -13 2 -4 1 325 324 2 5 7 1 158 152 4 3 -7 2 35 23 -8 2 4 2 39 16 -5
 4 10 0 69 52 6 -7 -3 1 576 576 5 -2 8 1 197 199 5 -6 -6 2 1085 1079 8 4 4 2 179 187 2
 -1 11 0 251 257 2 -5 -3 1 35 14 -7 0 8 1 51 5 -9 -4 -6 2 62 12 6 6 4 2 39 42 -25

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

Page 2

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

-1 5 2 172 173 1 1 -9 3 573 571 3 4 0 3 132 105 5 1 11 3 278 274 4 2 -4 4 290 286 1
 1 5 2 219 217 1 3 -9 3 411 413 2 -5 1 3 54 55 -9 3 11 3 111 122 5 4 -4 4 37 39 -9
 3 5 2 54 37 5 -6 -8 3 174 184 4 -3 1 3 93 86 3 0 12 3 285 289 3 -7 -3 4 366 354 4
 5 5 2 58 59 6 -4 -8 3 87 86 6 1 1 3 211 213 1 2 12 3 114 93 7 -5 -3 4 741 730 6
 -2 6 2 1334 1322 8 -2 -8 3 266 268 2 3 1 3 329 325 2 -1 13 3 107 102 8 -3 -3 4 518 518 2
 0 6 2 1002 991 3 0 -8 3 24 2 -11 5 1 3 227 229 3 1 13 3 21 29 -20 -1 -3 4 265 241 1
 2 6 2 1236 1218 5 2 -8 3 167 164 1 -6 2 3 37 42 -19 -1 -13 4 82 71 -12 1 -3 4 495 456 1
 4 6 2 551 542 6 4 -8 3 42 29 -8 -4 2 3 101 101 3 1 -13 4 41 20 -15 3 -3 4 456 452 2
 6 6 2 421 430 3 -5 -7 3 121 122 4 0 2 3 162 155 3 -2 -12 4 305 315 3 -6 -2 4 50 61 -13
 -1 7 2 320 333 2 -3 -7 3 288 291 2 2 2 3 414 410 1 0 -12 4 420 417 3 -4 -2 4 214 210 3
 1 7 2 381 392 2 -1 -7 3 247 257 3 4 2 3 58 51 -17 2 -12 4 471 463 4 -2 -2 4 300 304 1
 3 7 2 221 223 2 1 -7 3 407 419 3 6 2 3 174 175 4 -3 -11 4 142 136 7 0 -2 4 302 308 2
 5 7 2 184 182 3 3 -7 3 219 213 2 -5 3 3 772 763 6 -1 -11 4 162 155 4 2 -2 4 305 314 1
 -2 8 2 242 241 2 -6 -6 3 195 183 3 -1 3 3 1021 1078 8 1 -11 4 129 123 4 4 -2 4 124 128 2
 0 8 2 94 93 3 -4 -6 3 446 428 3 1 3 3 999 996 5 3 -11 4 49 49 -15 -7 -1 4 82 88 -11
 2 8 2 226 227 2 -2 -6 3 1005 1008 3 3 3 3 620 636 2 -4 -10 4 184 188 5 -5 -1 4 95 97 7
 4 8 2 87 92 4 0 -6 3 521 518 2 5 3 3 730 722 4 -2 -10 4 95 96 5 -3 -1 4 144 144 1
 -1 9 2 426 419 2 2 -6 3 149 128 2 7 3 3 390 384 5 0 -10 4 156 166 3 1 -1 4 80 83 3
 1 9 2 735 726 10 4 -6 3 112 105 3 -2 4 3 455 441 3 2 -10 4 48 39 -7 3 -1 4 224 218 1
 3 9 2 226 207 2 -5 -5 3 34 7 -12 0 4 3 241 215 1 4 -10 4 68 71 -12 -6 0 4 504 495 4
 5 9 2 132 90 6 -3 -5 3 97 93 2 2 4 3 321 321 1 -5 -9 4 421 411 3 -4 0 4 1194 1190 7
 -2 10 2 30 43 -25 -1 -5 3 204 199 1 4 4 3 75 78 4 -3 -9 4 411 410 4 -2 0 4 1018 990 4
 0 10 2 39 31 -9 1 -5 3 92 80 2 6 4 3 103 88 7 -1 -9 4 80 17 -13 2 0 4 1699 1702 8
 2 10 2 97 106 5 3 -5 3 331 338 2 -5 5 3 164 168 3 1 -9 4 109 101 3 4 0 4 942 944 3
 4 10 2 52 48 -8 -6 -4 3 104 102 9 -1 5 3 494 488 4 3 -9 4 169 178 3 -7 1 4 154 162 6
 -1 11 2 181 184 4 -4 -4 3 65 68 5 1 5 3 343 343 1 -4 -8 4 109 112 4 -5 1 4 230 231 3
 1 11 2 33 11 -20 -2 -4 3 87 88 1 3 5 3 401 405 2 -2 -8 4 184 189 1 -3 1 4 345 341 2
 3 11 2 34 33 -17 0 -4 3 376 360 1 5 5 3 123 127 5 0 -8 4 211 212 1 -1 1 4 497 503 4
 0 12 2 259 261 4 2 -4 3 57 39 -8 -2 6 3 1010 982 6 2 -8 4 166 169 2 1 1 4 391 396 2
 2 12 2 476 476 4 4 -4 3 223 223 2 0 6 3 519 511 2 4 -8 4 145 147 3 3 1 4 170 171 2
 4 12 2 213 227 4 -7 -3 3 76 43 -13 2 6 3 131 113 7 -5 -7 4 137 135 3 5 1 4 40 33 -7
 -1 13 2 199 193 5 -5 -3 3 771 755 6 4 6 3 125 110 3 -3 -7 4 44 35 -6 -6 2 4 99 102 7
 1 13 2 133 136 7 -3 -3 3 1021 1021 4 6 6 3 279 273 6 -1 -7 4 79 82 3 -4 2 4 433 439 3
 -1 -13 3 189 192 5 -1 -3 3 1024 1056 4 -1 7 3 47 45 5 1 -7 4 199 202 1 -2 2 4 79 59 3
 1 -13 3 115 120 5 1 -3 3 1020 1000 6 1 7 3 279 281 1 3 -7 4 98 90 4 0 2 4 540 538 4
 -4 -12 3 303 283 5 3 -3 3 632 631 2 3 7 3 128 127 2 -6 -6 4 285 287 4 2 2 4 169 155 1
 -2 -12 3 434 413 3 -6 -2 3 90 85 9 5 7 3 218 219 6 -4 -6 4 694 678 4 4 2 4 172 175 2
 0 -12 3 322 308 6 -4 -2 3 422 430 2 -2 8 3 31 29 -15 -2 -6 4 400 385 1 6 2 4 42 27 -16
 2 -12 3 134 97 5 -2 -2 3 198 179 1 0 8 3 142 147 4 0 -6 4 616 628 2 -5 3 4 735 730 5
 -3 -11 3 88 87 6 0 -2 3 581 590 4 2 8 3 35 8 -7 2 -6 4 798 783 3 -3 3 4 513 512 3
 -1 -11 3 47 18 -8 2 -2 3 292 269 1 4 8 3 117 126 3 4 -6 4 454 455 2 -1 3 4 258 230 3
 1 -11 3 190 191 5 -7 -1 3 90 91 9 -1 9 3 725 702 5 -5 -5 4 184 190 2 1 3 4 476 444 2
 3 -11 3 87 88 9 -5 -1 3 171 178 4 1 9 3 549 545 2 -3 -5 4 284 293 1 3 3 4 452 454 2

-4-10 3 46 27 -11	-3 -1 3 330 334 1	3 9 3 416 419 2	-1 -5 4 324 325 1	5 3 4 397 394 2
-2-10 3 47 50 -8	1 -1 3 586 585 4	5 9 3 435 438 3	1 -5 4 242 243 1	7 3 4 268 269 5
0-10 3 39 26 -9	3 -1 3 448 449 1	-2 10 3 67 65 8	3 -5 4 152 155 2	-4 4 4 140 143 3
2-10 3 124 121 6	-6 0 3 116 72 8	0 10 3 162 166 3	-6 -4 4 284 284 4	-2 4 4 298 296 2
-5 -9 3 567 568 3	-4 0 3 788 779 6	2 10 3 35 16 -11	-4 -4 4 92 94 3	0 4 4 319 321 1
-3 -9 3 576 562 3	-2 0 3 1418 1422 10	4 10 3 78 81 6	-2 -4 4 456 455 1	2 4 4 166 166 2
-1 -9 3 695 679 2	2 0 3 258 229 2	-1 11 3 166 161 5	0 -4 4 122 102 1	4 4 4 227 227 2

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

Page 3

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

6 4 4 77 75 6	-1 -9 5 755 746 3	0 0 5 1044 1081 5	1 9 5 468 473 2	-1 -5 6 94 95 1
-5 5 4 30 37 -25	1 -9 5 448 449 2	2 0 5 931 936 3	3 9 5 357 355 3	1 -5 6 57 56 3
-1 5 4 97 87 4	3 -9 5 373 372 2	4 0 5 609 629 2	-2 10 5 27 10 -27	3 -5 6 50 42 6
1 5 4 44 3 5	-4 -8 5 39 1 -12	-7 1 5 31 15 -31	0 10 5 37 37 -13	-6 -4 6 229 228 5
3 5 4 231 231 1	-2 -8 5 109 109 2	-3 1 5 159 153 2	2 10 5 87 89 5	-4 -4 6 32 17 -8
5 5 4 146 147 3	0 -8 5 127 134 2	-1 1 5 340 346 3	4 10 5 43 3 -12	-2 -4 6 302 305 1
-2 6 4 373 362 2	2 -8 5 43 30 -7	1 1 5 355 365 1	-1 11 5 125 125 5	0 -4 6 289 284 1
0 6 4 632 636 2	4 -8 5 129 134 6	3 1 5 362 364 1	1 11 5 184 191 4	2 -4 6 121 122 2
2 6 4 761 755 3	-5 -7 5 156 162 3	5 1 5 216 227 2	3 11 5 62 58 7	4 -4 6 159 156 3
4 6 4 466 472 3	-3 -7 5 228 228 1	-6 2 5 66 75 -12	0 12 5 278 278 3	-7 -3 6 129 94 10
6 6 4 221 231 3	-1 -7 5 221 232 2	-4 2 5 124 121 3	2 12 5 342 338 4	-5 -3 6 113 99 6
-1 7 4 263 272 2	1 -7 5 280 283 1	-2 2 5 440 442 3	-1 13 5 154 157 6	-3 -3 6 442 452 1
1 7 4 238 242 2	3 -7 5 72 71 6	0 2 5 159 164 1	1 13 5 66 70 -12	-1 -3 6 940 936 3
3 7 4 64 69 5	-6 -6 5 307 301 5	2 2 5 434 444 2	-1 -13 6 130 138 5	1 -3 6 478 476 1
5 7 4 63 66 -8	-2 -6 5 129 113 1	4 2 5 85 85 3	1 -13 6 67 57 -10	3 -3 6 245 246 1
-6 8 4 185 192 5	0 -6 5 446 450 1	6 2 5 200 196 4	-2 -12 6 375 372 3	-6 -2 6 138 143 6
-2 8 4 277 274 2	2 -6 5 781 786 5	-5 3 5 544 552 3	0 -12 6 250 262 3	-4 -2 6 367 371 1
0 8 4 65 59 5	4 -6 5 417 419 2	-3 3 5 622 629 4	2 -12 6 279 279 3	-2 -2 6 252 259 1
2 8 4 154 152 2	-5 -5 5 128 137 4	-1 3 5 1706 1707 12	-3 -11 6 50 45 -11	0 -2 6 342 352 1
4 8 4 33 12 -12	-3 -5 5 80 82 2	1 3 5 1026 1037 4	-1 -11 6 60 69 -8	2 -2 6 182 190 1
-1 9 4 50 19 -10	-1 -5 5 387 386 1	3 3 5 555 546 2	1 -11 6 33 3 -18	4 -2 6 97 106 2
1 9 4 122 113 3	1 -5 5 205 206 1	5 3 5 453 462 3	3 -11 6 46 43 -17	-7 -1 6 35 9 -34
3 9 4 180 181 3	3 -5 5 356 357 2	-4 4 5 28 38 -16	-4 -10 6 143 139 6	-5 -1 6 84 82 9
-2 10 4 167 167 4	-6 -4 5 57 48 -14	-2 4 5 266 275 2	-2 -10 6 26 9 -15	-3 -1 6 79 76 1
0 10 4 142 151 3	-4 -4 5 185 189 3	0 4 5 395 385 1	0 -10 6 61 57 6	-1 -1 6 204 210 1
2 10 4 143 145 3	-2 -4 5 203 203 1	2 4 5 120 127 2	2 -10 6 67 75 4	1 -1 6 244 257 1
4 10 4 100 103 5	0 -4 5 435 436 1	4 4 5 209 212 2	4 -10 6 41 7 -21	3 -1 6 306 308 1
-1 11 4 80 60 9	2 -4 5 107 111 1	6 4 5 27 18 -27	-5 -9 6 112 43 -35	-6 0 6 409 408 4
1 11 4 99 110 7	4 -4 5 291 280 2	-5 5 5 175 192 3	-3 -9 6 352 339 2	-4 0 6 782 782 5
3 11 4 63 62 -8	-7 -3 5 451 447 5	-1 5 5 368 366 2	-1 -9 6 395 393 2	-2 0 6 1026 1026 4
0 12 4 430 436 4	-5 -3 5 561 561 5	1 5 5 231 232 1	1 -9 6 408 413 2	0 0 6 183 114 4
2 12 4 431 440 4	-3 -3 5 616 624 2	3 5 5 223 231 1	3 -9 6 87 91 6	2 0 6 789 791 4
-1 13 4 115 132 6	-1 -3 5 1720 1723 6	5 5 5 47 53 -10	-4 -8 6 188 190 4	4 0 6 1102 1103 4
1 13 4 94 96 8	1 -3 5 1032 1030 3	-2 6 5 131 112 4	-2 -8 6 239 246 2	-7 1 6 92 97 8
-1 -13 5 154 151 4	3 -3 5 565 557 2	0 6 5 454 458 2	0 -8 6 181 180 1	-5 1 6 129 132 3
1 -13 5 83 79 -13	-6 -2 5 43 22 -13	2 6 5 762 776 3	2 -8 6 145 148 2	-3 1 6 193 194 1
-2 -12 5 97 43 -17	-4 -2 5 276 281 2	4 6 5 414 426 3	4 -8 6 94 96 6	-1 1 6 187 184 1
0 -12 5 287 282 3	-2 -2 5 349 329 1	6 6 5 224 232 3	-5 -7 6 37 7 -13	1 1 6 113 108 1
2 -12 5 339 333 2	0 -2 5 296 296 1	-5 7 5 42 35 -13	-3 -7 6 176 176 1	3 1 6 36 30 -5

-3-11 5 155 158 4	2-2 5 428 421 1	-1 7 5 88 91 4	-1-7 6 56 53 3	5 1 6 110 112 3
-1-11 5 93 85 5	4-2 5 64 66 3	1 7 5 361 367 2	1-7 6 299 301 1	-6 2 6 44 58-15
1-11 5 245 246 2	-7-1 5 126 133 7	3 7 5 159 163 2	3-7 6 165 162 2	-4 2 6 337 349 3
3-11 5 81 96 10	-5-1 5 217 215 4	5 7 5 230 229 3	-6-6 6 419 409 5	-2 2 6 217 207 2
-4-10 5 47 72-16	-3-1 5 300 305 1	-6 8 5 0 31-1	-4-6 6 755 740 4	0 2 6 309 307 1
-2-10 5 178 181 2	-1-1 5 477 479 3	-2 8 5 121 127 3	-2-6 6 922 924 3	2 2 6 303 296 1
0-10 5 127 130 3	1-1 5 384 385 3	0 8 5 263 266 2	0-6 6 580 564 2	4 2 6 65 61-11
2-10 5 163 168 2	3-1 5 222 219 1	2 8 5 129 124 3	2-6 6 777 777 3	6 2 6 112 118 7
4-10 5 98 97 6	-6 0 5 229 213 3	4 8 5 173 181 3	4-6 6 1070 1068 6	-5 3 6 108 106 5
-5-9 5 304 313 3	-4 0 5 152 126 3	-5 9 5 285 297 3	-5-5 6 68 74 4	-3 3 6 451 455 3
-3-9 5 306 313 2	-2 0 5 493 454 3	-1 9 5 739 727 5	-3-5 6 172 176 1	-1 3 6 939 941 4

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

Page 4

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

1 3 6 477 478 2	2-12 7 189 187 9	0-2 7 40 15 3	2 6 7 468 478 2	-5-7 8 41 38-13
3 3 6 253 257 1	-3-11 7 165 165 5	2-2 7 514 516 1	4 6 7 237 230 2	-3-7 8 234 231 1
5 3 6 176 177 3	-1-11 7 71 68 6	4-2 7 47 54 -6	-5 7 7 63 54-10	-1-7 8 97 99 3
-4 4 6 210 216 2	1-11 7 209 219 3	-7-1 7 107 106 9	-3 7 7 250 245 3	1-7 8 283 289 1
-2 4 6 355 353 1	3-11 7 74 69 7	-5-1 7 119 127 5	-1 7 7 117 127 5	3-7 8 114 117 4
0 4 6 240 252 1	-4-10 7 150 149 6	-3-1 7 178 179 1	1 7 7 301 315 2	-6-6 8 250 257 5
2 4 6 186 189 1	-2-10 7 186 190 2	-1-1 7 216 213 1	3 7 7 107 116 3	-4-6 8 441 452 3
4 4 6 131 133 5	0-10 7 169 180 3	1-1 7 153 151 1	5 7 7 170 169 4	-2-6 8 1131 1128 3
6 4 6 59 58-14	2-10 7 151 155 2	3-1 7 44 41 -6	-6 8 7 113 111 7	0-6 8 284 301 2
-5 5 6 97 104 5	4-10 7 58 74 -7	5-1 7 89 85 5	-4 8 7 194 199 4	2-6 8 1191 1176 4
-3 5 6 27 17-26	-3-9 7 502 497 3	-6 0 7 176 179 5	-2 8 7 208 211 3	4-6 8 82 72 8
-1 5 6 269 269 2	-1-9 7 447 454 2	-4 0 7 763 783 5	0 8 7 258 252 2	-5-5 8 53 51 -7
1 5 6 131 138 2	1-9 7 1073 1078 4	-2 0 7 479 470 2	2 8 7 145 149 2	-3-5 8 26 5 -8
3 5 6 282 290 3	3-9 7 121 124 4	0 0 7 752 731 2	4 8 7 150 155 3	-1-5 8 100 102 2
5 5 6 155 158 3	-4-8 7 106 105 6	2 0 7 406 408 2	-5 9 7 374 381 3	1-5 8 89 94 4
-6 6 6 405 420 3	-2-8 7 44 34 -7	4 0 7 437 436 2	-1 9 7 454 463 3	3-5 8 171 174 2
-4 6 6 742 730 5	0-8 7 269 274 2	-7 1 7 100 98 11	1 9 7 1059 1058 5	-6-4 8 150 143 7
-2 6 6 949 948 4	2-8 7 92 91 4	-5 1 7 143 143 3	3 9 7 118 121 3	-4-4 8 143 142 4
0 6 6 561 547 2	4-8 7 202 204 3	-3 1 7 190 199 2	-4 10 7 54 2-13	-2-4 8 97 97 2
2 6 6 789 794 3	-5-7 7 113 111 6	-1 1 7 333 340 1	0 10 7 66 58 -9	0-4 8 400 405 1
4 6 6 1062 1053 5	-3-7 7 105 116 2	1 1 7 304 305 1	2 10 7 178 186 5	2-4 8 66 60 4
6 6 6 73 71-12	-1-7 7 80 87 3	3 1 7 282 287 1	4 10 7 69 77-15	4-4 8 290 292 2
-5 7 6 149 143 5	1-7 7 105 108 2	5 1 7 130 138 4	-1 11 7 71 66-10	-5-3 8 412 406 4
-1 7 6 103 110 3	3-7 7 24 26-23	-4 2 7 269 271 2	1 11 7 88 70 9	-3-3 8 237 236 1
1 7 6 49 34 6	-6-6 7 283 277 5	-2 2 7 398 410 2	3 11 7 32 23-31	-1-3 8 382 392 1
3 7 6 38 36 -8	-4-6 7 391 390 2	0 2 7 252 261 1	0 12 7 239 240 4	1-3 8 284 287 1
5 7 6 71 68 8	-2-6 7 616 632 2	2 2 7 350 356 1	2 12 7 210 212 5	3-3 8 54 46 -8
-6 8 6 164 170 5	0-6 7 236 239 1	4 2 7 78 84 4	-1 13 7 172 170 6	-6-2 8 130 129 7
-2 8 6 171 168 3	2-6 7 472 466 2	-5 3 7 449 452 3	-1-13 8 162 155 6	-4-2 8 336 340 2
0 8 6 73 66 5	4-6 7 215 208 3	-3 3 7 559 552 4	-2-12 8 641 643 5	-2-2 8 143 146 2
2 8 6 69 65 5	-5-5 7 155 162 2	-1 3 7 790 788 2	0-12 8 82 86 6	0-2 8 276 272 1
4 8 6 98 96 4	-3-5 7 121 125 2	1 3 7 1747 1763 7	2-12 8 710 708 4	2-2 8 43 19 4
-5 9 6 44 46-15	-1-5 7 336 337 1	3 3 7 278 293 1	-3-11 8 71 71 8	4-2 8 0 17 -1
-1 9 6 399 397 3	1-5 7 174 179 1	5 3 7 965 975 5	-1-11 8 28 20-27	-7-1 8 76 79-14
1 9 6 422 427 4	3-5 7 284 289 2	-4 4 7 190 194 3	1-11 8 96 100 5	-3-1 8 161 167 2

3	9	6	107	107	4	-6	-4	7	165	161	6	-2	4	7	39	21	-5	3	-11	8	80	93	-14	-1	-1	8	273	279	1
0	10	6	170	175	3	-4	-4	7	260	260	2	0	4	7	472	478	1	-4	-10	8	52	31	-18	1	-1	8	259	262	1
2	10	6	122	128	3	-2	-4	7	288	289	1	2	4	7	57	53	4	-2	-10	8	99	101	4	3	-1	8	270	273	2
4	10	6	77	75	10	0	-4	7	387	397	1	4	4	7	303	305	2	0	-10	8	53	46	-7	5	-1	8	154	161	3
-1	11	6	44	31	-11	2	-4	7	159	157	1	6	4	7	59	62	-11	2	-10	8	175	179	3	-6	0	8	358	364	4
1	11	6	183	194	4	4	-4	7	201	199	3	-5	5	7	101	104	5	4	-10	8	84	89	6	-4	0	8	770	769	5
3	11	6	70	80	7	-7	-3	7	464	456	5	-3	5	7	137	146	3	-3	-9	8	209	213	2	-2	0	8	1757	1773	14
0	12	6	229	232	4	-5	-3	7	447	445	4	-1	5	7	176	176	1	-1	-9	8	156	153	3	0	0	8	179	168	1
2	12	6	295	294	3	-3	-3	7	577	561	2	1	5	7	67	64	4	1	-9	8	206	196	8	2	0	8	1852	1852	7
-1	13	6	43	33	-24	-1	-3	7	789	785	2	3	5	7	57	54	5	3	-9	8	127	127	4	4	0	8	323	322	2
1	13	6	63	18	-16	1	-3	7	1761	1774	6	5	5	7	91	92	6	-4	-8	8	127	128	5	-7	1	8	31	6	-31
-1	-13	7	63	54	-11	3	-3	7	282	296	2	-6	6	7	282	279	3	-2	-8	8	209	211	2	-5	1	8	37	26	-12
1	-13	7	38	19	-37	-6	-2	7	62	53	-14	-4	6	7	387	395	3	0	-8	8	94	89	3	-3	1	8	14	1	-14
-2	-12	7	278	265	3	-4	-2	7	70	73	5	-2	6	7	610	629	2	2	-8	8	71	74	5	-1	1	8	40	39	4
0	-12	7	220	228	5	-2	-2	7	471	472	2	0	6	7	253	259	1	4	-8	8	52	14	-12	1	1	8	101	111	1

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

Page 5

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

3	1	8	185	192	1	0	10	8	115	114	4	-2	-4	9	295	301	1	0	4	9	534	538	2	2	-10	10	215	221	2
5	1	8	169	179	3	2	10	8	51	47	-8	0	-4	9	231	234	1	2	4	9	149	146	2	-3	-9	10	48	47	-7
-4	2	8	145	158	3	4	10	8	0	20	-1	2	-4	9	108	109	2	4	4	9	318	320	3	-1	-9	10	470	474	2
-2	2	8	360	361	2	-3	11	8	153	156	6	4	-4	9	71	71	7	6	4	9	62	49	-15	1	-9	10	524	526	2
0	2	8	81	72	4	-1	11	8	63	62	-12	-5	-3	9	1084	1064	8	-5	5	9	33	0	-29	3	-9	10	390	380	2
2	2	8	450	456	2	1	11	8	204	209	4	-3	-3	9	286	300	1	-3	5	9	23	14	-22	-4	-8	10	39	47	-22
4	2	8	62	66	-9	3	11	8	64	83	-16	-1	-3	9	1852	1851	5	-1	5	9	37	28	-7	-2	-8	10	76	70	4
-5	3	8	414	413	3	-2	12	8	653	630	4	1	-3	9	360	365	1	1	5	9	91	89	3	0	-8	10	80	85	4
-3	3	8	244	244	3	0	12	8	67	72	-11	3	-3	9	958	945	4	3	5	9	111	113	3	2	-8	10	55	61	6
-1	3	8	404	410	1	2	12	8	706	699	5	-6	-2	9	155	165	5	5	5	9	152	147	7	4	-8	10	144	139	5
1	3	8	294	300	1	-1	13	8	49	49	-18	-4	-2	9	80	82	3	-6	6	9	230	227	4	-5	-7	10	70	67	7
3	3	8	46	33	5	-2	-12	9	131	120	4	-2	-2	9	515	521	2	-4	6	9	174	169	4	-3	-7	10	164	169	2
5	3	8	451	451	3	0	-12	9	36	20	-17	0	-2	9	161	161	4	-2	6	9	442	443	2	-1	-7	10	50	49	4
-6	4	8	226	238	3	2	-12	9	259	266	4	2	-2	9	516	521	1	0	6	9	41	36	-5	1	-7	10	178	180	2
-4	4	8	180	172	3	-3	-11	9	114	127	10	4	-2	9	98	105	3	2	6	9	332	337	2	3	-7	10	33	16	-12
-2	4	8	321	325	1	-1	-11	9	29	32	-29	-7	-1	9	41	20	-30	4	6	9	505	499	3	5	-7	10	45	39	-17
0	4	8	87	87	2	1	-11	9	116	115	4	-5	-1	9	28	10	-22	-5	7	9	73	76	-10	-6	-6	10	87	85	-12
2	4	8	107	112	3	3	-11	9	23	23	-23	-3	-1	9	23	14	-9	-3	7	9	156	162	4	-4	-6	10	984	975	4
4	4	8	40	3	-10	-2	-10	9	168	171	3	-1	-1	9	23	10	-6	-1	7	9	52	58	5	-2	-6	10	323	322	2
6	4	8	41	37	-14	0	-10	9	116	123	3	1	-1	9	81	91	3	1	7	9	188	195	2	0	-6	10	946	942	3
-5	5	8	162	160	4	2	-10	9	84	90	7	3	-1	9	141	144	1	3	7	9	27	17	-15	2	-6	10	290	293	1
-3	5	8	78	88	6	4	-10	9	50	19	-16	5	-1	9	144	143	4	-6	8	9	150	155	6	4	-6	10	572	573	4
-1	5	8	306	313	1	-3	-9	9	263	266	2	-4	0	9	461	463	3	-4	8	9	185	193	4	-5	-5	10	131	131	3
1	5	8	156	160	2	-1	-9	9	979	985	3	-2	0	9	290	288	4	-2	8	9	211	212	3	-3	-5	10	75	79	3
3	5	8	274	283	2	1	-9	9	85	74	4	0	0	9	410	383	3	0	8	9	188	193	3	-1	-5	10	222	228	1
5	5	8	101	106	5	3	-9	9	549	553	3	2	0	9	737	755	3	2	8	9	78	83	5	1	-5	10	161	162	1
-6	6	8	233	244	4	-4	-8	9	191	194	4	4	0	9	478	483	2	4	8	9	57	49	-8	3	-5	10	187	191	3
-4	6	8	453	457	3	-2	-8	9	143	144	2	-7	1	9	93	93	11	-5	9	9	638	629	4	5	-5	10	113	114	6
-2	6	8	1120	1106	4	0	-8	9	313	316	1	-5	1	9	139	150	3	-3	9	9	267	261	3	-6	-4	10	29	21	-28
0	6	8	281	295	1	2	-8	9	149	159	3	-3	1	9	127	131	3	-1	9	9	989	980	4	-4	-4	10	239	243	1
2	6	8	1151	1159	4	4	-8	9	211	218	4	-1	1	9	217	218	1	1	9	9	67	62	-9	-2	-4	10	105	109	3

4	6	8	85	65	11	-5	-7	9	42	30	-11	1	1	9	151	145	1	3	9	9	565	567	2	0	-4	10	513	519	1
-5	7	8	24	26	-24	-3	-7	9	37	25	-8	3	1	9	85	88	3	-4	10	9	58	66	-13	2	-4	10	147	148	1
-3	7	8	47	56	-10	-1	-7	9	35	28	-6	5	1	9	22	13	-22	-2	10	9	211	216	3	4	-4	10	322	322	2
-1	7	8	30	10	-9	1	-7	9	83	85	3	-4	2	9	298	308	3	0	10	9	158	161	4	-5	-3	10	199	197	4
1	7	8	130	131	2	3	-7	9	137	138	4	-2	2	9	303	312	1	2	10	9	206	218	3	-3	-3	10	68	58	3
3	7	8	137	143	3	-6	-6	9	216	221	6	0	2	9	246	242	1	4	10	9	90	106	-12	-1	-3	10	746	772	2
5	7	8	128	127	8	-4	-6	9	147	153	4	2	2	9	183	183	2	-3	11	9	38	11	-30	1	-3	10	990	1004	3
-6	8	8	85	97	9	-2	-6	9	428	425	2	4	2	9	34	2	-12	-1	11	9	26	25	-26	3	-3	10	480	481	2
-4	8	8	45	54	-14	0	-6	9	69	58	3	6	2	9	47	10	-16	1	11	9	60	36	-11	5	-3	10	155	150	4
-2	8	8	35	28	-8	2	-6	9	341	351	2	-7	3	9	267	278	5	3	11	9	91	101	10	-6	-2	10	53	51	-17
0	8	8	202	205	2	4	-6	9	518	515	3	-5	3	9	1071	1060	7	-2	12	9	156	147	6	-4	-2	10	229	229	2
2	8	8	77	74	5	-5	-5	9	143	151	3	-3	3	9	281	296	3	0	12	9	55	39	-16	-2	-2	10	77	79	3
4	8	8	179	180	4	-3	-5	9	78	88	3	-1	3	9	1857	1848	7	-2	-12	10	95	105	7	0	-2	10	69	62	2
-5	9	8	265	267	4	-1	-5	9	223	226	1	1	3	9	351	358	2	0	-12	10	460	473	3	2	-2	10	217	221	1
-3	9	8	239	238	3	1	-5	9	50	46	4	3	3	9	965	951	4	-3	-11	10	97	119	9	4	-2	10	114	122	4
-1	9	8	179	177	3	3	-5	9	107	114	4	5	3	9	199	212	3	-1	-11	10	78	72	-20	-5	-1	10	140	145	4
1	9	8	242	233	3	5	-5	9	56	43	-10	-6	4	9	44	29	-15	1	-11	10	141	152	4	-3	-1	10	127	130	1
3	9	8	110	108	4	-6	-4	9	219	215	6	-4	4	9	268	267	3	-2	-10	10	202	209	2	-1	-1	10	192	192	1
-4	10	8	166	170	5	-4	-4	9	237	236	1	-2	4	9	143	147	1	0	-10	10	141	151	3	1	-1	10	132	129	1

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

Page 6

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

3	-1	10	77	78	3	0	8	10	318	317	2	-4	-4	11	120	121	2	2	4	11	99	99	3	2	-8	12	153	148	6
5	-1	10	20	1	-20	2	8	10	146	152	3	-2	-4	11	156	160	2	4	4	11	171	178	4	4	-8	12	172	175	5
-4	0	10	1159	1164	5	4	8	10	228	231	3	0	-4	11	28	11	-6	-5	5	11	124	120	5	-5	-7	12	37	9	-24
-2	0	10	358	363	2	-5	9	10	135	139	7	2	-4	11	82	85	3	-3	5	11	104	108	5	-3	-7	12	53	59	6
0	0	10	1005	1016	4	-3	9	10	44	18	-17	4	-4	11	100	99	4	-1	5	11	177	178	2	-1	-7	12	107	106	2
2	0	10	187	188	1	-1	9	10	455	453	2	-5	-3	11	89	75	5	1	5	11	164	167	2	1	-7	12	21	12	-20
4	0	10	589	581	3	1	9	10	494	501	3	-3	-3	11	943	938	3	3	5	11	130	133	3	3	-7	12	97	104	7
-5	1	10	120	114	4	3	9	10	374	368	2	-1	-3	11	196	201	2	5	5	11	110	113	11	-4	-6	12	221	233	2
-3	1	10	136	139	3	-4	10	10	91	100	9	1	-3	11	813	800	2	-6	6	11	40	31	-16	-2	-6	12	578	577	2
-1	1	10	202	204	1	-2	10	10	32	27	-31	3	-3	11	673	677	3	-4	6	11	467	456	4	0	-6	12	676	685	2
1	1	10	206	210	1	0	10	10	38	6	-16	5	-3	11	170	178	3	-2	6	11	482	483	2	2	-6	12	236	241	1
3	1	10	199	203	2	2	10	10	85	94	8	-6	-2	11	212	219	5	0	6	11	471	472	3	4	-6	12	282	283	4
5	1	10	137	139	6	-3	11	10	130	144	7	-4	-2	11	208	211	4	2	6	11	35	40	-10	-5	-5	12	162	160	3
-4	2	10	21	9	-21	-1	11	10	0	19	-1	-2	-2	11	479	487	4	4	6	11	142	144	3	-3	-5	12	75	78	4
-2	2	10	480	488	2	1	11	10	116	130	6	0	-2	11	184	185	1	-5	7	11	40	3	-17	-1	-5	12	146	152	3
0	2	10	144	150	1	-2	12	10	98	93	9	2	-2	11	357	356	1	-3	7	11	75	56	9	1	-5	12	43	38	5
2	2	10	494	504	2	0	12	10	482	479	4	4	-2	11	30	1	-16	-1	7	11	87	86	3	3	-5	12	77	80	8
4	2	10	126	129	4	-3	-11	11	19	25	-18	-5	-1	11	122	119	4	1	7	11	10	3	-10	5	-5	12	0	12	-1
6	2	10	200	207	4	-1	-11	11	39	61	-14	-3	-1	11	147	146	2	3	7	11	124	121	4	-6	-4	12	90	90	10
-5	3	10	216	211	3	1	-11	11	44	10	-13	-1	-1	11	181	183	1	-4	8	11	119	116	7	-4	-4	12	326	332	1
-3	3	10	83	49	5	-2	-10	11	63	58	7	1	-1	11	183	185	1	-2	8	11	102	106	7	-2	-4	12	168	174	2
-1	3	10	729	754	4	0	-10	11	33	15	-11	3	-1	11	162	167	2	0	8	11	37	12	-21	0	-4	12	435	442	1
1	3	10	989	995	4	2	-10	11	56	68	-9	5	-1	11	118	123	4	2	8	11	43	43	-10	2	-4	12	106	103	3
3	3	10	468	471	2	-3	-9	11	707	694	3	-4	0	11	344	348	2	4	8	11	85	75	9	4	-4	12	196	189	3
5	3	10	152	149	4	-1	-9	11	228	236	2	-2	0	11	996	1002	4	-5	9	11	89	96	9	-5	-3	12	526	518	4
-6	4	10	170	174	4	1	-9	11	567	567	2	0	0	11	269	269	1	-3	9	11	728	710	5	-3	-3	12	488	482	3
-4	4	10	43	37	-13	3	-9	11	507	512	2	2	0	11	160	157	2	-1	9	11	195	211	2	-1	-3	12	165	164	1

-2	4	10	163	167	3	-4	-8	11	242	243	4	4	0	11	33	6	-13	1	9	11	576	581	4	1	-3	12	243	243	1
0	4	10	130	132	2	-2	-8	11	186	192	2	-5	1	11	40	26	-15	3	9	11	488	493	3	3	-3	12	350	345	2
2	4	10	70	69	4	0	-8	11	280	282	3	-3	1	11	34	7	-8	-4	10	11	127	137	7	5	-3	12	300	299	2
4	4	10	168	174	3	2	-8	11	84	89	5	-1	1	11	20	16	-17	-2	10	11	226	227	4	-6	-2	12	40	46	-30
-5	5	10	160	158	5	4	-8	11	114	117	7	1	1	11	77	82	3	0	10	11	139	143	9	-4	-2	12	58	51	6
-3	5	10	67	76	6	-5	-7	11	60	59	-11	3	1	11	76	79	4	2	10	11	169	172	5	-2	-2	12	278	289	2
-1	5	10	215	222	1	-3	-7	11	153	153	3	5	1	11	103	106	5	-3	11	11	105	101	8	0	-2	12	133	135	1
1	5	10	47	47	5	-1	-7	11	120	120	2	-6	2	11	125	114	5	-1	11	11	81	85	9	2	-2	12	361	355	2
3	5	10	111	113	3	1	-7	11	148	151	2	-4	2	11	223	232	3	1	11	11	87	108	11	4	-2	12	143	147	3
5	5	10	26	21	-25	3	-7	11	136	137	3	-2	2	11	87	88	3	0	12	11	182	188	6	-5	-1	12	56	41	-9
-6	6	10	88	79	9	5	-7	11	87	86	10	0	2	11	55	47	3	-3	-11	12	108	124	9	-3	-1	12	36	3	-7
-4	6	10	967	974	6	-4	-6	11	473	470	2	2	2	11	86	85	3	-1	-11	12	17	10	-16	-1	-1	12	30	33	-6
-2	6	10	318	319	1	-2	-6	11	498	494	2	4	2	11	121	124	4	1	-11	12	85	84	5	1	-1	12	75	82	3
0	6	10	954	955	3	0	-6	11	483	487	1	-5	3	11	87	69	8	-2	-10	12	219	220	3	3	-1	12	58	53	5
2	6	10	280	281	2	2	-6	11	39	39	-7	-3	3	11	952	943	6	0	-10	12	139	142	4	5	-1	12	82	80	6
4	6	10	578	579	6	4	-6	11	164	148	5	-1	3	11	192	185	5	2	-10	12	167	178	4	-4	0	12	285	285	3
-5	7	10	51	38	-14	-5	-5	11	34	23	-16	1	3	11	817	806	3	-3	-9	12	327	332	2	-2	0	12	805	797	3
-3	7	10	187	181	4	-3	-5	11	34	28	-7	3	3	11	660	666	3	-1	-9	12	153	157	2	0	0	12	975	1009	3
-1	7	10	93	98	3	-1	-5	11	29	19	-7	5	3	11	175	182	4	1	-9	12	148	151	3	2	0	12	402	389	2
1	7	10	196	203	2	1	-5	11	108	111	2	-6	4	11	134	135	5	3	-9	12	254	251	5	4	0	12	429	432	2
3	7	10	130	132	3	3	-5	11	39	42	-13	-4	4	11	329	333	3	-4	-8	12	82	87	9	-5	1	12	133	141	4
-4	8	10	155	162	5	5	-5	11	119	123	6	-2	4	11	208	215	1	-2	-8	12	46	53	-7	-3	1	12	124	125	5
-2	8	10	98	104	3	-6	-4	11	178	177	6	0	4	11	431	435	1	0	-8	12	226	230	2	-1	1	12	137	138	2

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

Page 7

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

1	1	12	82	78	4	1	11	12	0	22	-1	5	-1	13	36	41	-35	-3	9	13	345	350	3	1	-1	14	133	134	2
3	1	12	67	68	6	-1	-11	13	102	117	7	-6	0	13	376	371	3	-1	9	13	173	181	4	3	-1	14	88	88	5
5	1	12	26	26	-25	-2	-10	13	78	78	-10	-4	0	13	36	37	-12	1	9	13	267	266	3	5	-1	14	84	72	11
-6	2	12	217	217	4	0	-10	13	79	89	6	-2	0	13	246	244	2	3	9	13	366	373	4	-6	0	14	508	502	4
-4	2	12	146	150	4	2	-10	13	118	126	6	0	0	13	149	148	3	-2	10	13	153	145	6	-4	0	14	235	239	2
-2	2	12	478	485	2	-3	-9	13	365	371	3	2	0	13	499	490	3	0	10	13	53	43	-12	-2	0	14	564	565	3
0	2	12	155	156	1	-1	-9	13	159	169	2	4	0	13	60	54	8	2	10	13	55	50	-19	0	0	14	846	843	3
2	2	12	377	383	2	1	-9	13	284	291	2	-5	1	13	100	103	6	-1	11	13	58	39	-17	2	0	14	405	403	2
4	2	12	27	9	-27	3	-9	13	364	363	4	-3	1	13	160	166	2	-2	-10	14	151	154	6	4	0	14	84	98	5
-5	3	12	507	510	4	-4	-8	13	152	158	5	-1	1	13	142	144	2	0	-10	14	41	48	-12	-5	1	14	73	66	8
-3	3	12	478	477	3	-2	-8	13	87	93	4	1	1	13	145	151	2	-3	-9	14	237	237	3	-3	1	14	26	6	-15
-1	3	12	158	158	3	0	-8	13	129	126	3	3	1	13	97	101	5	-1	-9	14	297	298	2	-1	1	14	31	21	-10
1	3	12	243	244	2	2	-8	13	15	13	-15	5	1	13	85	89	6	1	-9	14	185	189	3	1	1	14	49	50	-7
3	3	12	349	344	2	-3	-7	13	142	145	3	-6	2	13	16	2	-15	-4	-8	14	162	168	6	3	1	14	24	28	-24
5	3	12	299	298	4	-1	-7	13	62	63	5	-4	2	13	69	56	8	-2	-8	14	115	114	4	5	1	14	24	32	-24
-6	4	12	101	101	7	1	-7	13	80	80	4	-2	2	13	164	166	2	0	-8	14	218	220	2	-6	2	14	201	201	4
-4	4	12	126	136	4	3	-7	13	0	29	-1	0	2	13	111	117	2	2	-8	14	108	111	5	-4	2	14	113	117	6
-2	4	12	47	45	-6	-4	-6	13	156	154	3	2	2	13	225	228	2	-3	-7	14	77	76	5	-2	2	14	316	317	2
0	4	12	324	329	1	-2	-6	13	38	5	-8	4	2	13	149	156	5	-1	-7	14	143	147	2	0	2	14	38	34	-6
2	4	12	155	163	2	0	-6	13	349	345	3	-5	3	13	569	568	4	1	-7	14	42	48	-9	2	2	14	203	201	3
4	4	12	224	230	3	2	-6	13	199	197	4	-3	3	13	664	673	4	3	-7	14	112	124	8	4	2	14	43	46	-17
-5	5	12	39	65	-22	4	-6	13	187	186	5	-1	3	13	394	389	2	-4	-6	14	161	166	3	-5	3	14	152	148	6
-3	5	12	42	44	-13	-5	-5	13	84	82	7	1	3	13	553	558	2	-2	-6	14	436	439	2	-3	3	14	352	348	3

-1 5 12 31 31 -8	-3 -5 13 154 157 2	3 3 13 646 653 3	0 -6 14 640 642 2	-1 3 14 500 487 2
1 5 12 110 118 3	-1 -5 13 106 114 3	-6 4 13 117 122 7	2 -6 14 364 364 2	1 3 14 291 281 4
3 5 12 29 10 -15	1 -5 13 159 162 2	-4 4 13 234 236 3	4 -6 14 105 125 7	3 3 14 232 218 6
-6 6 12 467 470 4	3 -5 13 50 59 -13	-2 4 13 115 121 2	-5 -5 14 73 78 6	-6 4 14 27 34 -26
-4 6 12 212 215 4	5 -5 13 97 103 8	0 4 13 201 200 2	-3 -5 14 45 38 -7	-4 4 14 211 221 4
-2 6 12 584 581 2	-4 -4 13 70 72 4	2 4 13 43 47 -8	-1 -5 14 39 30 -6	-2 4 14 112 108 3
0 6 12 663 666 4	-2 -4 13 41 36 -6	4 4 13 66 59 -10	1 -5 14 82 81 3	0 4 14 329 331 2
2 6 12 240 243 2	0 -4 13 205 211 1	-5 5 13 149 152 5	3 -5 14 20 6 -19	2 4 14 120 123 3
4 6 12 258 267 8	2 -4 13 148 153 2	-3 5 13 86 94 6	-4 -4 14 244 248 2	4 4 14 197 198 4
-5 7 12 51 53 -12	4 -4 13 179 177 3	-1 5 13 127 133 2	-2 -4 14 98 99 5	-5 5 14 60 60 -14
-3 7 12 158 160 4	-5 -3 13 563 559 4	1 5 13 52 52 6	0 -4 14 240 244 1	-3 5 14 156 153 5
-1 7 12 58 55 6	-3 -3 13 680 680 2	3 5 13 61 64 6	2 -4 14 25 18 -18	-1 5 14 73 75 4
1 7 12 117 116 4	-1 -3 13 384 380 1	-6 6 13 194 191 6	4 -4 14 121 115 4	1 5 14 146 150 2
3 7 12 39 20 -12	1 -3 13 569 569 2	-4 6 13 156 154 4	-5 -3 14 147 150 5	3 5 14 47 39 -9
-4 8 12 227 232 3	3 -3 13 651 647 3	-2 6 13 36 6 -8	-3 -3 14 349 344 2	-4 6 14 157 176 5
-2 8 12 161 164 3	5 -3 13 344 348 3	0 6 13 353 348 6	-1 -3 14 495 490 2	-2 6 14 424 429 2
0 8 12 282 285 4	-6 -2 13 168 178 6	2 6 13 192 196 3	1 -3 14 297 279 3	0 6 14 655 652 5
2 8 12 101 102 5	-4 -2 13 150 150 2	-5 7 13 90 99 9	3 -3 14 230 217 3	2 6 14 354 358 2
4 8 12 126 134 8	-2 -2 13 269 274 3	-3 7 13 95 95 7	5 -3 14 275 267 4	-5 7 14 36 4 -35
-3 9 12 314 313 3	0 -2 13 40 27 -5	-1 7 13 144 147 3	-4 -2 14 56 58 6	-3 7 14 55 59 -11
-1 9 12 156 155 7	2 -2 13 131 132 3	1 7 13 67 64 7	-2 -2 14 339 353 4	-1 7 14 72 81 6
1 9 12 139 145 4	4 -2 13 97 96 5	3 7 13 130 130 4	0 -2 14 124 125 2	1 7 14 42 27 -11
3 9 12 258 255 4	-5 -1 13 141 142 5	-4 8 13 48 26 -19	2 -2 14 310 309 2	3 7 14 47 57 -13
-2 10 12 120 121 7	-3 -1 13 128 133 2	-2 8 13 43 37 -9	4 -2 14 93 97 5	-4 8 14 182 183 6
0 10 12 96 106 -13	-1 -1 13 125 125 2	0 8 13 127 134 5	-5 -1 14 84 95 7	-2 8 14 87 90 6
2 10 12 148 165 6	1 -1 13 70 68 4	2 8 13 127 125 4	-3 -1 14 140 149 3	0 8 14 170 177 3
-1 11 12 64 69 -14	3 -1 13 55 57 6	4 8 13 112 120 10	-1 -1 14 125 125 2	2 8 14 28 14 -27

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

Page 8

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

-3 9 14 247 236 5	0 0 15 42 8 -6	2 -8 16 62 68 -9	-3 3 16 226 215 4	2 -2 17 122 117 4
-1 9 14 308 299 2	2 0 15 427 420 2	-3 -7 16 87 85 7	-1 3 16 429 419 2	4 -2 17 171 180 6
1 9 14 186 186 5	4 0 15 236 239 4	-1 -7 16 142 143 3	1 3 16 474 474 4	-5 -1 17 27 12 -26
-2 10 14 150 159 7	-5 1 15 134 131 6	1 -7 16 42 40 -11	3 3 16 122 123 9	-3 -1 17 45 53 -13
0 10 14 118 117 7	-3 1 15 134 138 3	-4 -6 16 360 357 2	-4 4 16 224 227 4	-1 -1 17 70 72 6
0 -10 15 87 103 4	-1 1 15 112 118 3	-2 -6 16 74 96 6	-2 4 16 66 73 6	1 -1 17 107 113 3
-3 -9 15 486 488 3	1 1 15 102 98 3	0 -6 16 824 815 2	0 4 16 268 270 3	3 -1 17 84 86 5
-1 -9 15 355 360 2	3 1 15 59 71 -9	2 -6 16 51 40 -9	2 4 16 72 74 6	-4 0 17 171 173 3
1 -9 15 97 120 6	5 1 15 58 67 -14	-5 -5 16 22 24 -21	-5 5 16 104 97 9	-2 0 17 471 466 2
-4 -8 15 69 62 -11	-6 2 15 115 115 8	-3 -5 16 124 124 5	-3 5 16 141 148 5	0 0 17 70 41 5
-2 -8 15 33 9 -15	-4 2 15 40 27 -13	-1 -5 16 53 52 -7	-1 5 16 85 86 5	2 0 17 196 193 3
0 -8 15 36 0 -11	-2 2 15 235 238 3	1 -5 16 119 127 3	1 5 16 148 141 5	4 0 17 435 418 3
2 -8 15 77 80 6	0 2 15 123 130 2	3 -5 16 64 53 -12	3 5 16 56 51 -11	-5 1 17 95 95 8
-3 -7 15 54 53 -7	2 2 15 238 238 2	-4 -4 16 122 120 4	-4 6 16 355 347 4	-3 1 17 78 89 -11
-1 -7 15 44 48 -8	4 2 15 132 132 7	-2 -4 16 24 4 -16	-2 6 16 90 97 5	-1 1 17 63 57 7
1 -7 15 24 21 -24	-5 3 15 275 277 3	0 -4 16 113 114 3	0 6 16 799 798 4	1 1 17 31 40 -16
3 -7 15 25 31 -25	-3 3 15 635 640 4	2 -4 16 88 91 4	2 6 16 42 39 -11	3 1 17 0 0 -1
-4 -6 15 291 295 2	-1 3 15 399 401 2	4 -4 16 47 3 -16	-3 7 16 39 9 -19	-4 2 17 43 53 -20
-2 -6 15 54 53 -7	1 3 15 91 58 -14	-5 -3 16 191 185 4	-1 7 16 124 126 5	-2 2 17 242 245 2

0-6 15 221 215 2	3 3 15 817 798 3	-3-3 16 221 212 2	1 7 16 44 39-15	0 2 17 116 112 4
2-6 15 172 173 7	-6 4 15 60 60-16	-1-3 16 417 414 2	-2 8 16 5 22 -5	2 2 17 222 228 3
-5-5 15 119 123 5	-4 4 15 77 70-11	1-3 16 473 467 2	0 8 16 80 74 9	4 2 17 61 70-15
-3-5 15 108 116 3	-2 4 15 30 9-14	3-3 16 109 117 5	2 8 16 44 42-23	-5 3 17 107 122 9
-1-5 15 96 90 3	0 4 15 37 36-13	-4-2 16 56 63 -8	-1 9 16 282 277 4	-3 3 17 812 804 5
1-5 15 108 106 4	2 4 15 117 113 4	-2-2 16 285 290 2	-2-8 17 42 47-16	-1 3 17 55 51 7
3-5 15 55 46 -9	-5 5 15 88 86 11	0-2 16 92 88 3	0-8 17 66 70 7	1 3 17 748 726 7
-4-4 15 151 153 3	-3 5 15 0 10 -1	2-2 16 242 245 3	-3-7 17 38 6-15	3 3 17 43 26-24
-2-4 15 84 85 4	-1 5 15 30 28-12	4-2 16 30 31-30	-1-7 17 104 104 4	-4 4 17 41 7-20
0-4 15 249 251 1	1 5 15 38 31-11	-5-1 16 116 123 7	1-7 17 53 54 -8	-2 4 17 75 70 6
2-4 15 134 137 3	3 5 15 20 6-20	-3-1 16 142 146 3	-4-6 17 264 259 3	0 4 17 84 79 6
4-4 15 149 169 4	-4 6 15 300 298 4	-1-1 16 126 131 3	-2-6 17 217 227 2	2 4 17 170 167 3
-5-3 15 283 286 3	-2 6 15 62 56 6	1-1 16 113 116 3	0-6 17 116 112 4	-3 5 17 76 76 9
-3-3 15 638 638 3	0 6 15 227 220 3	3-1 16 77 87 6	2-6 17 305 304 2	-1 5 17 34 31-33
-1-3 15 410 413 2	2 6 15 189 185 3	-6 0 16 355 355 4	-5-5 17 79 94 9	1 5 17 113 117 5
1-3 15 50 55 6	-3 7 15 94 100 8	-4 0 16 361 359 2	-3-5 17 72 79 6	3 5 17 73 62-14
3-3 15 828 809 4	-1 7 15 119 121 5	-2 0 16 59 54 6	-1-5 17 48 46-10	-4 6 17 261 270 4
-4-2 15 38 40-12	1 7 15 45 42-12	0 0 16 1003 972 3	1-5 17 40 35 -9	-2 6 17 237 237 6
-2-2 15 63 62 6	3 7 15 78 93 10	2 0 16 40 51 -8	3-5 17 40 12-24	0 6 17 129 126 5
0-2 15 84 82 3	-4 8 15 87 103 11	4 0 16 566 545 4	-4-4 17 195 188 3	2 6 17 290 294 4
2-2 15 39 9-18	-2 8 15 69 78 8	-5 1 16 48 51-15	-2-4 17 79 79 6	-3 7 17 54 68-13
4-2 15 144 146 7	0 8 15 162 167 5	-3 1 16 97 97 4	0-4 17 236 240 2	-1 7 17 57 59-13
-5-1 15 63 74-12	2 8 15 119 117 7	-1 1 16 90 92 5	2-4 17 112 111 4	1 7 17 36 21-35
-3-1 15 27 12-14	-3 9 15 513 502 4	1 1 16 111 116 3	-5-3 17 114 116 8	-2 8 17 85 88 10
-1-1 15 29 7 -9	-1 9 15 350 345 4	3 1 16 94 83-13	-3-3 17 817 808 3	0 8 17 167 173 6
1-1 15 25 17-14	1 9 15 112 133 6	-6 2 16 101 104 9	-1-3 17 50 44 -7	0-8 18 111 110 8
3-1 15 13 19-13	0 10 15 29 22-28	-4 2 16 40 30-13	1-3 17 756 727 3	-3-7 18 78 79-13
5-1 15 16 24-15	-1-9 16 268 261 3	-2 2 16 153 155 4	3-3 17 43 24-15	-1-7 18 100 96 6
-6 0 15 263 249 4	1-9 16 328 320 5	0 2 16 47 48 -8	-4-2 17 40 16-13	1-7 18 42 23-12
-4 0 15 196 195 2	-2-8 16 70 84-14	2 2 16 68 74 6	-2-2 17 51 45 -8	-4-6 18 64 46-17
-2 0 15 295 280 2	0-8 16 193 197 3	-5 3 16 188 185 5	0-2 17 132 136 3	-2-6 18 558 541 3

Table 3a. Observed and calculated structure factors for chlorite at room conditions

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

0-6 18 33 21-15	-3 1 18 150 157 6	-1-5 19 26 29-26	-3 3 19 39 28-22	-3 1 20 160 160 6
-3-5 18 159 161 4	-1 1 18 152 154 3	1-5 19 82 78 8	-1 3 19 698 690 5	-1 1 20 125 126 4
-1-5 18 109 110 5	1 1 18 158 164 4	-2-4 19 45 53 -8	1 3 19 121 119 7	1 1 20 80 92 7
1-5 18 175 177 3	3 1 18 109 113 6	0-4 19 151 152 3	-2 4 19 115 110 5	-2 2 20 75 78 7
-4-4 18 41 39-29	-4 2 18 47 18-15	2-4 19 30 16-29	0 4 19 145 141 5	0 2 20 164 162 7
-2-4 18 76 74 5	-2 2 18 0 17 -1	-3-3 19 35 22-15	2 4 19 155 141 6	2 2 20 63 67-11
0-4 18 34 28 -9	0 2 18 130 138 4	-1-3 19 696 691 3	-3 5 19 166 156 6	-3 3 20 187 186 6
2-4 18 162 164 4	2 2 18 52 62-11	1-3 19 126 126 5	-1 5 19 104 118 9	-1 3 20 102 75 9
-5-3 18 317 315 4	-3 3 18 115 118 6	-4-2 19 72 74-11	1 5 19 167 169 6	1 3 20 152 150 8
-3-3 18 107 111 4	-1 3 18 192 195 2	-2-2 19 141 140 3	-2 6 19 431 415 4	-2 4 20 80 81 7
-1-3 18 191 201 3	1 3 18 373 368 3	0-2 19 145 153 3	0 6 19 187 181 6	0 4 20 55 37-21
1-3 18 387 377 5	3 3 18 191 181 6	2-2 19 129 124 9	-1 7 19 46 39-26	-1 5 20 14 33-14
3-3 18 187 186 5	-4 4 18 161 160 6	-3-1 19 142 150 4	-1-5 20 67 83 8	0-4 21 58 40-15
-4-2 18 37 17-16	-2 4 18 57 39 -8	-1-1 19 156 160 4	-2-4 20 117 119 5	-1-3 21 421 424 3
-2-2 18 207 211 5	0 4 18 173 169 5	1-1 19 166 164 3	0-4 20 91 92 5	-2-2 21 97 104 9

0-2 18 35 6-10	2 4 18 49 35-10	-4 0 19 300 301 4	-3-3 20 188 190 9	0-2 21 70 52-14
2-2 18 115 124 5	-3 5 18 113 121 8	-2 0 19 381 373 2	-1-3 20 93 78 6	-3-1 21 154 161 6
-5-1 18 107 111 8	-1 5 18 54 69-11	0 0 19 367 360 4	1-3 20 154 150 5	-1-1 21 130 135 5
-3-1 18 114 118 4	1 5 18 75 78 7	2 0 19 88 74 7	-2-2 20 63 66 7	1-1 21 96 96 10
-1-1 18 100 95 4	-2 6 18 551 542 4	-3 1 19 0 5 -1	0-2 20 123 122 5	-2 0 21 157 150 4
1-1 18 61 66 6	0 6 18 47 28-24	-1 1 19 37 41-16	2-2 20 0 2 -1	0 0 21 362 351 3
3-1 18 39 3-31	-3 7 18 59 76-14	1 1 19 87 87 5	-3-1 20 39 34-12	-1 1 21 155 142 7
-4 0 18 17 40-17	-1 7 18 179 174 5	3 1 19 88 99 11	-1-1 20 28 29-27	1 1 21 123 136 8
-2 0 18 750 724 3	1 7 18 64 75-14	-4 2 19 33 37-33	1-1 20 76 70 6	-2 2 21 63 61-10
0 0 18 27 43-17	-2-6 19 430 427 5	-2 2 19 197 203 4	-2 0 20 113 123 5	0 2 21 96 96 6
2 0 18 718 692 3	0-6 19 189 191 3	0 2 19 33 22-21	0 0 20 109 96 5	-1 3 21 417 421 4
-5 1 18 96 91 9	-3-5 19 0 11 -1	2 2 19 97 105 9	2 0 20 428 422 3	-2 4 21 58 61-18

Table 3b. Observed and calculated structure factors for chlorite at 1.83 GPa

Page 1

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				
2 0 0	9	28	-9		4 8 0	56	81	15		-4-2 1	387	384	2		2 6 1	748	736	18		4-4 2	98	113	14	
4 0 0	1251	1238	10		-3 9 0	74	4	20		-2-2 1	173	147	3		4 6 1	694	738	9		-5-3 2	101	109	11	
6 0 0	456	493	3		-1 9 0	162	110	10		0-2 1	627	661	4		-5 7 1	231	210	6		-3-3 2	240	229	6	
-5 1 0	57	67	15		1 9 0	60	74	15		2-2 1	169	151	5		-3 7 1	71	66	16		-1-3 2	1467	1469	16	
-3 1 0	184	184	3		-2 10 0	70	58	-37		4-2 1	280	276	3		-1 7 1	290	274	3		1-3 2	1418	1337	2	
-1 1 0	538	568	3		0 10 0	51	77	-18		6-2 1	91	108	-29		1 7 1	76	82	7		3-3 2	526	519	8	
1 1 0	595	634	4		2 10 0	19	24	-19		-5-1 1	48	8	-15		3 7 1	18	13	-17		-6-2 2	47	79	-29	
3 1 0	445	451	3		-1 11 0	240	221	7		-3-1 1	81	71	4		5 7 1	121	105	22		-4-2 2	55	74	10	
5 1 0	208	209	4		1 11 0	109	127	11		-1-1 1	405	457	3		-4 8 1	86	83	15		-2-2 2	185	197	4	
-6 2 0	63	72	15		0-12 1	50	114	-50		1-1 1	519	551	2		-2 8 1	127	152	8		2-2 2	287	267	14	
-4 2 0	217	232	2		-1-11 1	91	132	12		3-1 1	457	438	3		2 8 1	127	147	8		4-2 2	14	69	-14	
-2 2 0	126	162	5		1-11 1	50	87	-50		5-1 1	199	221	5		4 8 1	19	37	-18		-5-1 2	210	192	9	
0 2 0	339	347	4		-4-10 1	92	87	-38		-6 0 1	337	236	26		-3 9 1	1195	1143	4		-3-1 2	370	389	2	
2 2 0	35	10	5		-2-10 1	43	62	-27		-4 0 1	12	73	-12		1 9 1	765	768	10		3-1 2	35	29	-17	
4 2 0	96	117	5		0-10 1	176	85	15		-2 0 1	413	368	1		3 9 1	448	469	11		5-1 2	88	66	-88	
6 2 0	116	117	9		-3-9 1	1156	1129	7		2 0 1	1561	1471	12		-2 10 1	96	108	15		-6 0 2	1161	1144	9	
-5 3 0	411	404	7		1-9 1	763	741	6		4 0 1	896	919	8		0 10 1	135	154	13		-4 0 2	246	230	6	
-3 3 0	188	203	5		3-9 1	453	473	4		6 0 1	451	441	5		2 10 1	90	117	12		-2 0 2	1040	1098	8	
-1 3 0	388	361	1		-4-8 1	89	92	18		-5 1 1	173	191	3		-3 11 1	93	75	25		2 0 2	1174	1128	35	
1 3 0	413	382	2		-2-8 1	279	210	36		-3 1 1	343	346	3		-1 11 1	27	21	-26		4 0 2	420	434	17	
3 3 0	191	195	16		0-8 1	84	88	11		-1 1 1	221	233	1		1 11 1	221	227	5		-5 1 2	173	166	5	
5 3 0	383	393	13		2-8 1	148	179	6		1 1 1	141	113	3		-1-11 2	169	171	12		-3 1 2	363	367	3	
-6 4 0	86	61	11		4-8 1	86	102	15		3 1 1	142	138	3		1-11 2	235	225	15		-1 1 2	685	668	5	
-4 4 0	133	130	5		-3-7 1	137	146	6		5 1 1	97	113	9		-2-10 2	131	134	7		3 1 2	431	401	7	
-2 4 0	149	158	2		-1-7 1	72	79	8		-6 2 1	117	119	10		0-10 2	94	122	10		5 1 2	124	169	29	
0 4 0	139	90	10		1-7 1	463	449	8		-4 2 1	219	225	4		2-10 2	85	110	-26		-6 2 2	19	12	-18	
2 4 0	279	272	2		3-7 1	149	124	14		-2 2 1	203	157	5		-3-9 2	242	261	15		-4 2 2	404	377	3	
4 4 0	40	44	-24		5-7 1	243	244	12		0 2 1	488	498	2		-1-9 2	444	421	11		-2 2 2	48	24	6	
6 4 0	51	95	-32		-4-6 1	65	73	15		2 2 1	279	281	9		1-9 2	712	759	13		2 2 2	13	3	-13	
-5 5 0	106	128	8		-2-6 1	9	13	-9		4 2 1	255	274	4		-4-8 2	31	21	-30		4 2 2	93	157	22	
-3 5 0	438	412	3		0-6 1	222	227	7		6 2 1	98	35	19		-2-8 2	37	60	-36		-5 3 2	76	95	10	
-1 5 0	306	305	2		2-6 1	780	770	10		-3 3 1	2337	2241	11		0-8 2	88	95	20		-3 3 2	251	222	5	
1 5 0	422	415	4		4-6 1	737	755	7		-1 3 1	7	38	-7		2-8 2	57	27	-22		-1 3 2	1493	1451	15	

3	5	0	140	162	6	-5	-5	1	75	90	13	1	3	1	1064	1102	4	-5	-7	2	215	222	6	1	3	2	1391	1319	12
5	5	0	44	58	-43	-3	-5	1	323	341	5	3	3	1	877	869	7	-3	-7	2	92	97	11	3	3	2	503	509	4
-4	6	0	798	747	3	-1	-5	1	13	24	-13	5	3	1	762	754	15	-1	-7	2	338	320	13	-6	4	2	42	15	-41
-2	6	0	248	250	2	1	-5	1	177	170	4	-6	4	1	188	198	5	1	-7	2	16	24	-15	-4	4	2	54	16	13
0	6	0	2288	2240	12	3	-5	1	179	173	5	-2	4	1	465	459	2	-4	-6	2	11	32	-10	-2	4	2	47	55	8
2	6	0	236	245	3	5	-5	1	80	74	-30	0	4	1	127	121	6	-2	-6	2	1237	1223	13	0	4	2	237	245	5
4	6	0	788	763	6	-6	-4	1	123	140	20	2	4	1	311	330	4	0	-6	2	937	914	13	2	4	2	21	101	-21
-5	7	0	48	66	-43	-4	-4	1	83	79	10	6	4	1	173	154	21	2	-6	2	1182	1191	13	-5	5	2	91	118	10
-3	7	0	133	153	7	-2	-4	1	333	249	24	-5	5	1	51	9	-15	4	-6	2	530	544	15	-3	5	2	396	375	3
-1	7	0	153	172	4	0	-4	1	216	221	4	-3	5	1	41	2	10	-5	-5	2	100	118	10	-1	5	2	117	145	6
1	7	0	425	424	2	2	-4	1	318	308	5	-1	5	1	401	392	3	-3	-5	2	288	298	6	1	5	2	239	231	3
3	7	0	167	166	9	4	-4	1	34	49	-21	1	5	1	179	188	6	-1	-5	2	435	456	7	3	5	2	51	19	-31
5	7	0	227	249	10	-3	-3	1	2265	2252	15	3	5	1	430	430	4	1	-5	2	355	337	3	-4	6	2	30	41	-30
-4	8	0	25	12	-25	-1	-3	1	8	46	-8	5	5	1	124	124	11	3	-5	2	323	357	3	-2	6	2	1271	1237	9
-2	8	0	36	87	-36	1	-3	1	1096	1110	12	-4	6	1	101	98	17	-6	-4	2	195	181	33	0	6	2	927	891	9
0	8	0	27	23	-27	3	-3	1	925	888	9	-2	6	1	37	57	-11	-2	-4	2	436	456	4	2	6	2	1187	1220	15
2	8	0	77	85	10	5	-3	1	737	752	8	0	6	1	218	208	12	2	-4	2	264	234	8	4	6	2	527	514	12

Table 3b. Observed and calculated structure factors for chlorite at 1.83 GPa

Page 2

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

-5	7	2	122	137	7	-1	-9	3	746	737	36	-3	-1	3	223	252	6	-5	7	3	91	135	12	-4	0	4	1129	1194	7
-3	7	2	275	252	7	-4	-8	3	132	131	9	-6	0	3	51	4	-16	-3	7	3	97	90	27	-5	1	4	222	189	24
-1	7	2	321	288	9	-2	-8	3	278	212	27	-4	0	3	775	788	4	1	7	3	316	309	33	-3	1	4	312	297	3
1	7	2	429	423	8	-5	-7	3	60	94	-32	-2	0	3	1357	1344	18	0	8	3	84	88	12	-6	2	4	81	93	14
3	7	2	139	154	13	-3	-7	3	275	225	22	-5	1	3	66	64	15	-3	9	3	500	498	15	-4	2	4	465	473	5
-4	8	2	87	74	20	-1	-7	3	201	200	4	-3	1	3	113	110	4	-1	9	3	768	753	23	-5	3	4	776	738	19
-2	8	2	216	203	14	1	-7	3	391	428	24	-6	2	3	13	99	-12	1	9	3	566	501	47	-3	3	4	512	501	8
0	8	2	111	113	13	-4	-6	3	434	427	10	-4	2	3	105	103	8	0	10	3	162	125	20	-6	4	4	63	110	-23
2	8	2	150	148	9	-2	-6	3	994	969	13	-2	2	3	312	310	8	-1	11	3	174	104	27	-4	4	4	146	137	18
4	8	2	94	114	-35	0	-6	3	535	534	16	-5	3	3	766	739	8	-4	-6	4	741	734	21	-5	5	4	19	39	-18
-3	9	2	231	243	6	-3	-5	3	149	159	10	-3	3	3	927	902	5	-5	-5	4	109	131	21	-3	5	4	178	208	3
-1	9	2	381	393	7	-1	-5	3	242	235	6	-6	4	3	270	266	4	-3	-5	4	240	252	8	-4	6	4	792	746	4
1	9	2	736	732	12	-6	-4	3	16	94	-15	-2	4	3	427	444	4	-6	-4	4	219	245	16	-2	6	4	388	424	4
3	9	2	199	182	11	-4	-4	3	35	5	-35	-5	5	3	129	115	9	-4	-4	4	119	144	10	-5	7	4	186	171	45
-2	10	2	35	11	-35	-2	-4	3	49	59	10	-3	5	3	211	163	15	-5	-3	4	765	750	13	-3	7	4	174	193	15
0	10	2	31	39	-31	-5	-3	3	710	724	10	-1	5	3	504	483	4	-3	-3	4	483	509	4	-1	7	4	207	240	4
2	10	2	19	44	-19	-3	-3	3	901	905	6	1	5	3	281	245	4	-6	-2	4	46	31	-46	-4	8	4	141	148	17
-3	11	2	43	76	-43	-6	-2	3	142	124	18	-4	6	3	384	406	5	-4	-2	4	227	254	3						
-1	11	2	233	199	7	-4	-2	3	474	440	10	-2	6	3	960	930	9	-5	-1	4	93	96	-28						
-2	-10	3	37	6	-36	-2	-2	3	171	157	21	0	6	3	514	512	8	-3	-1	4	191	178	11						
-3	-9	3	493	537	16	-5	-1	3	171	128	14	2	6	3	52	69	11	-6	0	4	470	475	5						

Table 3c. Observed and calculated structure factors for chlorite at 3.14 GPa

Page 1

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

2	0	0	9	12	-9	2	8	0	113	129	5	-6	-4	1	199	177	12	0	4	1	175	127	6	0	-8	2	151	129	14
4	0	0	1323	1312	14	4	8	0	87	109	7	-4	-4	1	87	72	8	2	4	1	345	368	4	2	-8	2	49	37	-17
6	0	0	553	581	7	-3	9	0	92	44	14	-2	-4	1	266	277	4	6	4	1	182	187	7	4	-8	2	49	104	-26
-5	1	0	87	97	5	-1	9	0	146	128	4	0	-4	1	234	230	2	-5	5	1	66	54	9	-5	-7	2	264	249	6
-3	1	0	272	236	11	1	9	0	83	88	7	2	-4	1	340	335	6	-3	5	1	45	42	5	-3	-7	2	116	99	11
-1	1	0	524	577	5	3	9	0	65	21	-16	4	-4	1	54	70	5	-1	5	1	400	403	3	-1	-7	2	312	318	9
1	1	0	582	658	5	-4	10	0	112	115	-62	6	-4	1	76	93	-21	1	5	1	226	231	5	1	-7	2	22	19	-21
3	1	0	481	481	4	-2	10	0	61	87	8	-3	-3	1	2327	2303	20	3	5	1	452	454	5	3	-7	2	23	22	-23
5	1	0	243	245	4	0	10	0	61	84	8	-1	-3	1	13	19	-12	5	5	1	165	179	7	5	-7	2	79	108	8
-6	2	0	90	87	8	2	10	0	18	40	-17	1	-3	1	1077	1117	11	-6	6	1	136	166	10	-6	-6	2	1240	1152	6
-4	2	0	230	224	3	4	10	0	48	65	-48	3	-3	1	954	998	6	-4	6	1	99	121	9	-2	-6	2	1299	1300	11
-2	2	0	128	125	4	-3	11	0	124	132	-24	5	-3	1	751	743	7	-2	6	1	37	61	-8	0	-6	2	980	996	7
0	2	0	330	372	5	-1	11	0	283	274	7	-4	-2	1	401	404	3	0	6	1	280	228	19	2	-6	2	1201	1202	10
2	2	0	45	33	2	1	11	0	159	159	4	-2	-2	1	189	162	2	2	6	1	780	769	10	4	-6	2	566	575	6
4	2	0	167	177	9	3	11	0	119	157	-25	0	-2	1	669	679	6	4	6	1	766	776	5	-5	-5	2	164	172	15
6	2	0	113	119	16	0	12	0	1119	1149	30	2	-2	1	195	172	3	6	6	1	264	284	9	-3	-5	2	295	315	6
-5	3	0	437	422	13	0	-12	1	173	182	-40	4	-2	1	330	318	10	-5	7	1	296	273	4	-1	-5	2	471	497	5
-3	3	0	255	241	7	-1	-11	1	143	155	6	6	-2	1	75	86	12	-3	7	1	71	73	9	1	-5	2	387	389	5
-1	3	0	367	317	5	1	-11	1	49	98	-17	-5	-1	1	79	42	12	-1	7	1	310	292	4	3	-5	2	378	376	11
1	3	0	391	344	4	-4	-10	1	111	117	11	-3	-1	1	99	98	3	1	7	1	82	83	7	5	-5	2	85	112	8
3	3	0	215	237	10	-2	-10	1	47	56	-20	-1	-1	1	429	463	5	3	7	1	17	33	-16	-6	-4	2	209	213	11
5	3	0	429	411	11	0	-10	1	97	92	-29	1	-1	1	535	553	6	5	7	1	143	163	8	-2	-4	2	438	453	5
-6	4	0	147	117	8	2	-10	1	16	37	-15	3	-1	1	462	469	4	-4	8	1	92	96	9	0	-4	2	15	10	-15
-4	4	0	136	119	4	4	-10	1	17	72	-16	5	-1	1	258	264	5	-2	8	1	172	191	7	2	-4	2	284	280	4
-2	4	0	190	205	3	-3	-9	1	1266	1251	13	-6	0	1	360	295	17	2	8	1	137	153	4	4	-4	2	115	109	4
0	4	0	149	115	4	1	-9	1	786	779	7	-2	0	1	369	333	4	4	8	1	44	13	-16	6	-4	2	147	167	11
2	4	0	308	285	5	3	-9	1	547	535	3	2	0	1	1473	1380	11	-3	9	1	1222	1262	17	-5	-3	2	125	117	11
4	4	0	49	42	-9	-4	-8	1	57	100	-42	4	0	1	963	984	7	-1	9	1	12	7	-11	-3	-3	2	264	248	5
6	4	0	79	92	-30	-2	-8	1	238	249	8	6	0	1	445	432	16	1	9	1	830	804	9	-1	-3	2	1522	1418	17
-5	5	0	150	171	5	0	-8	1	75	77	5	-7	1	1	195	192	17	3	9	1	525	519	3	1	-3	2	1444	1335	12
-3	5	0	440	432	2	2	-8	1	217	222	4	-5	1	1	249	246	13	-2	10	1	100	112	10	3	-3	2	548	514	6
-1	5	0	341	349	2	4	-8	1	91	97	8	-3	1	1	344	342	4	0	10	1	166	190	5	-6	-2	2	72	72	-14
1	5	0	459	460	3	-3	-7	1	171	175	7	-1	1	1	234	236	2	2	10	1	101	108	8	-4	-2	2	60	65	8
3	5	0	200	195	6	-1	-7	1	136	115	8	1	1	1	151	135	3	-3	11	1	99	134	-49	-2	-2	2	209	214	5
5	5	0	54	93	-20	1	-7	1	462	463	4	3	1	1	142	156	3	-1	11	1	53	58	-10	2	-2	2	268	278	11
-6	6	0	340	347	11	3	-7	1	178	182	4	5	1	1	165	144	6	1	11	1	261	281	6	4	-2	2	12	37	-11
-4	6	0	822	782	12	5	-7	1	262	273	6	-6	2	1	115	105	17	3	11	1	45	97	-23	6	-2	2	149	153	6
-2	6	0	313	309	4	-6	-6	1	158	151	14	-4	2	1	254	280	4	0	12	1	208	144	18	-5	-1	2	233	227	5
0	6	0	2316	2305	14	-4	-6	1	48	88	-23	-2	2	1	190	167	2	-1	-11	2	233	212	7	-3	-1	2	380	379	8
2	6	0	334	312	10	-2	-6	1	14	6	-14	0	2	1	534	516	8	1	-11	2	248	258	7	1	-1	2	297	281	3
4	6	0	837	805	13	0	-6	1	291	258	9	2	2	1	279	247	6	-4	-10	2	152	149	14	3	-1	2	38	48	4
-5	7	0	65	61	9	2	-6	1	798	797	5	4	2	1	262	258	3	-2	-10	2	149	133	8	5	-1	2	104	100	9
-3	7	0	170	188	5	4	-6	1	799	785	8	6	2	1	92	96	9	0	-10	2	159	176	7	-6	0	2	1275	1254	25
-1	7	0	201	186	3	6	-6	1	235	293	20	-3	3	1	2350	2298	20	2	-10	2	78	94	-14	-4	0	2	296	310	2
1	7	0	451	444	2	-5	-5	1	124	143	16	-1	3	1	21	13	-21	-3	-9	2	339	324	17	-2	0	2	1079	1121	25
3	7	0	204	216	4	-3	-5	1	350	369	4	1	3	1	1040	1120	8	-1	-9	2	446	443	11	2	0	2	1101	1081	19
5	7	0	280	270	7	-1	-5	1	12	12	-11	3	3	1	936	983	10	1	-9	2	783	799	13	4	0	2	408	396	7
-4	8	0	34	13	-34	1	-5	1	173	173	3	5	3	1	761	749	11	3	-9	2	202	193	10	6	0	2	312	339	4
-2	8	0	117	115	5	3	-5	1	192	211	3	-6	4	1	239	237	5	-4	-8	2	42	29	-42	-7	1	2	87	87	-25
0	8	0	40	56	-11	5	-5	1	85	87	6	-2	4	1	464	471	3	-2	-8	2	31	62	-30	-5	1	2	213	201	6

Table 3c. Observed and calculated structure factors for chlorite at 3.14 GPa

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

-3 1 2 391 396 7	-3 9 2 347 303 22	1 -3 3 1094 1017 24	3 5 3 469 451 37	4 -2 4 153 98 -61
-1 1 2 765 696 7	-1 9 2 457 433 13	3 -3 3 656 641 6	5 5 3 100 138 11	6 -2 4 176 182 12
1 1 2 655 646 1	1 9 2 780 790 11	5 -3 3 752 752 9	-6 6 3 138 164 16	-5 -1 4 74 84 -13
3 1 2 447 427 4	3 9 2 193 181 6	-6 -2 3 146 123 8	-4 6 3 443 444 5	-3 -1 4 193 184 8
5 1 2 164 185 5	-2 10 2 19 32 -18	-4 -2 3 472 469 4	-2 6 3 937 989 9	3 -1 4 205 219 2
-6 2 2 18 41 -17	0 10 2 25 29 -25	-2 -2 3 212 162 8	0 6 3 507 506 7	5 -1 4 206 228 23
-4 2 2 387 391 4	2 10 2 62 86 9	2 -2 3 251 251 8	2 6 3 114 74 9	-6 0 4 534 522 8
-2 2 2 57 32 2	-3 11 2 39 89 -39	4 -2 3 210 207 17	4 6 3 130 132 5	-4 0 4 1144 1222 22
2 2 2 39 20 5	-1 11 2 230 196 8	6 -2 3 16 30 -15	-5 7 3 132 135 8	4 0 4 1023 1015 15
4 2 2 235 241 14	3 11 2 18 21 -17	-5 -1 3 182 160 14	-3 7 3 82 73 -20	6 0 4 460 461 4
6 2 2 129 139 8	0 12 2 303 322 11	-3 -1 3 263 296 5	-1 7 3 30 92 -15	-5 1 4 267 214 24
-5 3 2 82 95 13	-2 -10 3 16 27 -15	3 -1 3 457 474 4	1 7 3 296 307 4	-3 1 4 338 321 8
-3 3 2 320 249 15	2 -10 3 116 99 10	5 -1 3 193 229 32	3 7 3 53 106 -27	3 1 4 185 192 5
-1 3 2 1524 1407 18	-3 -9 3 628 596 4	-6 0 3 58 51 -12	5 7 3 226 243 18	-6 2 4 112 122 9
1 3 2 1439 1337 22	-1 -9 3 795 731 20	-4 0 3 777 808 6	-2 8 3 45 12 -20	-4 2 4 457 483 5
3 3 2 518 510 4	1 -9 3 681 592 56	-2 0 3 1457 1360 20	0 8 3 170 140 14	4 2 4 142 162 14
-6 4 2 36 30 -36	3 -9 3 425 422 15	2 0 3 229 179 11	2 8 3 18 7 -17	6 2 4 29 18 -29
-4 4 2 52 39 7	-4 -8 3 136 142 9	4 0 3 74 98 -18	4 8 3 71 105 -13	-5 3 4 803 805 11
-2 4 2 39 54 4	-2 -8 3 321 245 31	6 0 3 386 396 9	-3 9 3 600 551 5	-3 3 4 527 525 7
0 4 2 247 236 3	2 -8 3 147 141 -66	-7 1 3 16 59 -16	-1 9 3 827 757 9	3 3 4 469 490 6
2 4 2 24 20 -8	4 -8 3 46 1 -45	-5 1 3 68 63 11	1 9 3 559 562 12	5 3 4 444 393 10
4 4 2 183 179 6	-5 -7 3 125 104 17	-3 1 3 117 105 4	3 9 3 416 424 12	-6 4 4 79 110 10
6 4 2 27 7 -27	-3 -7 3 297 288 7	3 1 3 315 324 3	0 10 3 138 144 10	-4 4 4 145 150 4
-5 5 2 139 160 8	-1 -7 3 201 207 6	5 1 3 210 247 13	2 10 3 17 57 -17	2 4 4 152 142 18
-3 5 2 372 376 5	1 -7 3 420 454 7	-6 2 3 44 52 -43	-1 11 3 189 146 10	4 4 4 223 233 5
-1 5 2 140 150 3	3 -7 3 205 204 22	-4 2 3 110 83 5	1 11 3 268 297 45	6 4 4 90 66 14
1 5 2 231 241 2	5 -7 3 235 255 10	-2 2 3 350 326 7	2 -8 4 115 167 -22	-3 5 4 192 194 3
3 5 2 60 69 10	-6 -6 3 133 177 14	2 2 3 412 412 8	4 -8 4 164 152 11	3 5 4 214 229 7
5 5 2 64 60 8	-4 -6 3 484 461 21	4 2 3 41 84 -22	5 -7 4 213 214 10	5 5 4 167 173 24
-6 6 2 1216 1152 77	-2 -6 3 1042 1017 10	6 2 3 154 153 13	-4 -6 4 793 737 7	-4 6 4 762 747 23
-4 6 2 27 9 -26	0 -6 3 537 526 7	-5 3 3 824 802 12	2 -6 4 821 833 17	-2 6 4 387 412 1
-2 6 2 1320 1320 11	2 -6 3 108 93 7	-3 3 3 910 970 7	4 -6 4 477 526 27	2 6 4 770 801 3
0 6 2 973 963 10	4 -6 3 114 124 9	1 3 3 1026 1014 20	-5 -5 4 230 172 8	4 6 4 513 555 19
2 6 2 1236 1239 8	-3 -5 3 135 140 5	3 3 3 663 646 9	-3 -5 4 258 277 2	-5 7 4 203 180 27
4 6 2 535 551 9	-1 -5 3 239 231 2	5 3 3 722 748 7	3 -5 4 155 182 5	-3 7 4 270 207 37
-5 7 2 162 159 5	1 -5 3 11 32 -10	-6 4 3 311 304 4	-6 -4 4 311 299 9	-1 7 4 253 260 4
-3 7 2 332 288 19	3 -5 3 341 344 12	-4 4 3 113 107 9	-4 -4 4 121 120 5	1 7 4 232 267 2
-1 7 2 320 319 6	5 -5 3 157 181 13	-2 4 3 432 452 9	2 -4 4 283 286 15	-4 8 4 166 158 11
1 7 2 427 411 5	-6 -4 3 92 80 13	0 4 3 288 201 13	4 -4 4 14 5 -13	-2 8 4 303 280 49
3 7 2 214 199 9	-4 -4 3 79 50 -26	2 4 3 289 314 2	6 -4 4 50 76 -50	-3 9 4 498 447 5
5 7 2 195 212 5	-2 -4 3 74 65 4	4 4 3 64 51 -21	-5 -3 4 790 818 3	3 9 4 203 179 10
-4 8 2 101 97 14	2 -4 3 30 63 -15	6 4 3 74 96 -13	-3 -3 4 518 517 5	5 -1 5 86 101 13
-2 8 2 281 249 13	4 -4 3 183 203 12	-5 5 3 159 155 6	3 -3 4 482 486 7	4 0 5 601 582 21
0 8 2 115 119 6	6 -4 3 8 29 -8	-3 5 3 215 200 5	5 -3 4 440 393 5	5 1 5 216 230 12
2 8 2 195 207 6	-5 -3 3 830 785 15	-1 5 3 528 508 4	-6 -2 4 52 57 -25	
4 8 2 103 121 8	-3 -3 3 918 982 17	1 5 3 312 316 7	-4 -2 4 222 239 3	

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
4	0	0	1240	1233	10	0	-6	1	236	232	6	-6	6	1	145	129	24	-2	0	2	1037	1094	8	-6	-2	3	132	135	8
6	0	0	510	512	8	2	-6	1	774	779	4	-2	6	1	47	69	32	4	0	2	438	426	10	-4	-2	3	469	453	7
-1	1	0	544	560	1	-3	-5	1	345	357	3	0	6	1	213	223	10	-7	1	2	59	58	41	-3	-1	3	248	250	3
1	1	0	619	639	2	3	-5	1	188	194	3	2	6	1	738	762	5	3	1	2	436	411	3	-6	0	3	46	6	17
-6	2	0	81	73	8	-4	-4	1	97	71	8	-1	7	1	299	283	4	-6	2	2	17	18	16	-4	0	3	778	763	4
-4	2	0	228	216	2	0	-4	1	232	228	3	1	7	1	74	77	5	-4	2	2	400	399	4	-2	0	3	1280	1326	39
-2	2	0	150	140	6	2	-4	1	331	325	2	3	7	1	16	14	15	-2	2	2	46	31	4	-7	1	3	44	53	43
0	2	0	340	354	3	4	-4	1	35	46	19	-4	8	1	98	88	17	-3	3	2	241	235	2	-3	1	3	128	116	2
4	2	0	123	140	3	-3	-3	1	2271	2274	9	4	8	1	40	22	39	-1	3	2	1485	1444	21	-4	2	3	106	99	6
6	2	0	136	132	12	-1	-3	1	17	25	17	-3	9	1	1174	1173	8	1	3	2	1400	1337	9	-3	3	3	914	927	7
-3	3	0	213	221	3	1	-3	1	1074	1100	6	3	9	1	479	481	5	3	3	2	518	512	4	-4	4	3	105	120	11
-1	3	0	387	357	2	3	-3	1	934	922	5	-2	10	1	114	108	10	-4	4	2	53	23	9	-2	4	3	434	450	4
1	3	0	419	381	2	-6	-2	1	27	60	27	2	10	1	105	104	7	2	4	2	36	52	8	-3	5	3	207	178	12
3	3	0	208	223	6	-4	-2	1	391	392	1	-3	11	1	79	80	50	4	4	2	162	182	7	-1	5	3	505	489	4
-4	4	0	132	140	4	-2	-2	1	48	132	10	-4	-10	2	122	114	17	-3	5	2	388	383	3	1	5	3	291	276	2
4	4	0	33	48	33	0	-2	1	648	674	3	-2	-10	2	156	137	10	-1	5	2	132	146	3	-6	6	3	122	122	21
-3	5	0	435	427	3	2	-2	1	177	164	3	2	-10	2	93	104	28	1	5	2	245	236	2	-2	6	3	949	954	16
3	5	0	173	175	2	4	-2	1	299	295	2	-3	-9	2	281	278	7	3	5	2	13	53	13	0	6	3	522	502	11
-2	6	0	272	286	5	6	-2	1	16	98	16	-4	-8	2	18	16	18	-2	6	2	1257	1235	8	2	6	3	59	72	8
0	6	0	2254	2269	9	-1	-1	1	416	452	3	0	-8	2	98	115	8	0	6	2	943	908	9	0	8	3	145	119	15
2	6	0	264	273	2	3	-1	1	452	449	3	2	-8	2	73	49	19	2	6	2	1211	1203	9	-3	9	3	526	512	11
-1	7	0	173	173	3	5	-1	1	224	249	6	-1	-7	2	332	342	8	-1	7	2	307	296	5	-3	-5	4	265	269	5
1	7	0	431	428	3	-6	0	1	311	281	5	1	-7	2	24	37	24	1	7	2	432	433	6	-4	-4	4	141	141	3
-4	8	0	25	25	25	-2	0	1	403	367	1	-2	-6	2	1246	1229	14	0	8	2	133	136	8	-3	-3	4	506	525	5
0	8	0	46	28	17	2	0	1	1524	1463	12	0	-6	2	958	934	9	2	8	2	165	168	6	-6	-2	4	53	33	20
4	8	0	84	93	10	4	0	1	931	975	3	2	-6	2	1201	1180	12	-3	9	2	285	271	5	-4	-2	4	233	265	3
-3	9	0	18	15	17	6	0	1	439	443	5	-3	-5	2	303	299	8	3	9	2	180	172	10	-3	-1	4	188	181	8
3	9	0	70	5	23	-1	1	1	227	240	1	-1	-5	2	461	459	4	-2	10	2	18	8	17	-6	0	4	479	487	5
-2	10	0	54	60	29	3	1	1	148	160	3	1	-5	2	386	362	6	2	10	2	53	61	27	-4	0	4	1129	1177	13
2	10	0	18	34	18	5	1	1	143	148	10	3	-5	2	371	364	7	-3	11	2	65	85	64	-5	1	4	227	186	6
4	10	0	39	60	39	-6	2	1	134	126	9	2	-4	2	274	246	4	0	12	2	265	295	11	-3	1	4	316	309	7
-3	11	0	120	113	24	-4	2	1	245	233	2	4	-4	2	114	113	6	-3	-9	3	549	548	5	-6	2	4	91	121	8
-4	-10	1	83	83	15	0	2	1	501	506	3	-3	-3	2	243	234	1	-4	-8	3	133	137	7	-4	2	4	461	482	4
-2	-10	1	62	60	12	2	2	1	264	270	3	-1	-3	2	1438	1445	27	-1	-7	3	203	195	3	-3	3	4	507	514	7
-3	-9	1	1180	1161	6	4	2	1	266	273	2	1	-3	2	1349	1355	21	-6	-6	3	61	125	45	-4	4	4	146	144	5
3	-9	1	484	486	4	-3	3	1	2252	2264	9	3	-3	2	531	516	7	-2	-6	3	1018	984	11	-3	5	4	188	206	4
0	-8	1	77	86	10	1	3	1	1061	1089	1	-6	-2	2	69	81	12	0	-6	3	551	528	7	-2	6	4	394	402	2
4	-8	1	101	108	10	3	3	1	919	903	10	-4	-2	2	79	74	6	-3	-5	3	144	158	4	-3	7	4	157	198	67
-1	-7	1	98	83	5	0	4	1	133	110	2	-2	-2	2	196	199	2	-1	-5	3	236	244	3	-4	8	4	182	160	10
1	-7	1	462	462	10	2	4	1	334	329	4	3	-1	2	52	51	7	-4	-4	3	72	6	27	-3	9	4	430	422	5
-6	-6	1	165	124	16	-3	5	1	26	1	19	-6	0	2	1151	1174	19	-2	-4	3	60	53	6						
-2	-6	1	17	31	16	3	5	1	437	461	4	-4	0	2	269	271	4	-3	-3	3	926	931	12						

*****+

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
---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----	---	---	---	------	------	-----

```

2 0 0 9 28 -9 4 8 0 56 81 15 -4 -2 1 387 384 2 2 6 1 748 736 18 4 -4 2 98 113 14
4 0 0 1251 1238 10 -3 9 0 74 4 20 -2 -2 1 173 147 3 4 6 1 694 738 9 -5 -3 2 101 109 11
6 0 0 456 493 3 -1 9 0 162 110 10 0 -2 1 627 661 4 -5 7 1 231 210 6 -3 -3 2 240 229 6
-5 1 0 57 67 15 1 9 0 60 74 15 2 -2 1 169 151 5 -3 7 1 71 66 16 -1 -3 2 1467 1469 16
-3 1 0 184 184 3 -2 10 0 70 58 -37 4 -2 1 280 276 3 -1 7 1 290 274 3 1 -3 2 1418 1337 2
-1 1 0 538 568 3 0 10 0 51 77 -18 6 -2 1 91 108 -29 1 7 1 76 82 7 3 -3 2 526 519 8
1 1 0 595 634 4 2 10 0 19 24 -19 -5 -1 1 48 8 -15 3 7 1 18 13 -17 -6 -2 2 47 79 -29
3 1 0 445 451 3 -1 11 0 240 221 7 -3 -1 1 81 71 4 5 7 1 121 105 22 -4 -2 2 55 74 10
5 1 0 208 209 4 1 11 0 109 127 11 -1 -1 1 405 457 3 -4 8 1 86 83 15 -2 -2 2 185 197 4
-6 2 0 63 72 15 0 -12 1 50 114 -50 1 -1 1 519 551 2 -2 8 1 127 152 8 2 -2 2 287 267 14
-4 2 0 217 232 2 -1 -11 1 91 132 12 3 -1 1 457 438 3 2 8 1 127 147 8 4 -2 2 14 69 -14
-2 2 0 126 162 5 1 -11 1 50 87 -50 5 -1 1 199 221 5 4 8 1 19 37 -18 -5 -1 2 210 192 9
0 2 0 339 347 4 -4 -10 1 92 87 -38 -6 0 1 337 236 26 -3 9 1 1195 1143 4 -3 -1 2 370 389 2
2 2 0 35 10 5 -2 -10 1 43 62 -27 -4 0 1 12 73 -12 1 9 1 765 768 10 3 -1 2 35 29 -17
4 2 0 96 117 5 0 -10 1 176 85 15 -2 0 1 413 368 1 3 9 1 448 469 11 5 -1 2 88 66 -88
6 2 0 116 117 9 -3 -9 1 1156 1129 7 2 0 1 1561 1471 12 -2 10 1 96 108 15 -6 0 2 1161 1144 9
-5 3 0 411 404 7 1 -9 1 763 741 6 4 0 1 896 919 8 0 10 1 135 154 13 -4 0 2 246 230 6
-3 3 0 188 203 5 3 -9 1 453 473 4 6 0 1 451 441 5 2 10 1 90 117 12 -2 0 2 1040 1098 8
-1 3 0 388 361 1 -4 -8 1 89 92 18 -5 1 1 173 191 3 -3 11 1 93 75 25 2 0 2 1174 1128 35
1 3 0 413 382 2 -2 -8 1 279 210 36 -3 1 1 343 346 3 -1 11 1 27 21 -26 4 0 2 420 434 17
3 3 0 191 195 16 0 -8 1 84 88 11 -1 1 1 221 233 1 1 11 1 221 227 5 -5 1 2 173 166 5
5 3 0 383 393 13 2 -8 1 148 179 6 1 1 1 141 113 3 -1 -11 2 169 171 12 -3 1 2 363 367 3
-6 4 0 86 61 11 4 -8 1 86 102 15 3 1 1 142 138 3 1 -11 2 235 225 15 -1 1 2 685 668 5
-4 4 0 133 130 5 -3 -7 1 137 146 6 5 1 1 97 113 9 -2 -10 2 131 134 7 3 1 2 431 401 7
-2 4 0 149 158 2 -1 -7 1 72 79 8 -6 2 1 117 119 10 0 -10 2 94 122 10 5 1 2 124 169 29
0 4 0 139 90 10 1 -7 1 463 449 8 -4 2 1 219 225 4 2 -10 2 85 110 -26 -6 2 2 19 12 -18
2 4 0 279 272 2 3 -7 1 149 124 14 -2 2 1 203 157 5 -3 -9 2 242 261 15 -4 2 2 404 377 3
4 4 0 40 44 -24 5 -7 1 243 244 12 0 2 1 488 498 2 -1 -9 2 444 421 11 -2 2 2 48 24 6
6 4 0 51 95 -32 -4 -6 1 65 73 15 2 2 1 279 281 9 1 -9 2 712 759 13 2 2 2 13 3 -13
-5 5 0 106 128 8 -2 -6 1 9 13 -9 4 2 1 255 274 4 -4 -8 2 31 21 -30 4 2 2 93 157 22
-3 5 0 438 412 3 0 -6 1 222 227 7 6 2 1 98 35 19 -2 -8 2 37 60 -36 -5 3 2 76 95 10
-1 5 0 306 305 2 2 -6 1 780 770 10 -3 3 1 2337 2241 11 0 -8 2 88 95 20 -3 3 2 251 222 5
1 5 0 422 415 4 4 -6 1 737 755 7 -1 3 1 7 38 -7 2 -8 2 57 27 -22 -1 3 2 1493 1451 15
3 5 0 140 162 6 -5 -5 1 75 90 13 1 3 1 1064 1102 4 -5 -7 2 215 222 6 1 3 2 1391 1319 12
5 5 0 44 58 -43 -3 -5 1 323 341 5 3 3 1 877 869 7 -3 -7 2 92 97 11 3 3 2 503 509 4
-4 6 0 798 747 3 -1 -5 1 13 24 -13 5 3 1 762 754 15 -1 -7 2 338 320 13 -6 4 2 42 15 -41
-2 6 0 248 250 2 1 -5 1 177 170 4 -6 4 1 188 198 5 1 -7 2 16 24 -15 -4 4 2 54 16 13
0 6 0 2288 2240 12 3 -5 1 179 173 5 -2 4 1 465 459 2 -4 -6 2 11 32 -10 -2 4 2 47 55 8
2 6 0 236 245 3 5 -5 1 80 74 -30 0 4 1 127 121 6 -2 -6 2 1237 1223 13 0 4 2 237 245 5
4 6 0 788 763 6 -6 -4 1 123 140 20 2 4 1 311 330 4 0 -6 2 937 914 13 2 4 2 21 101 -21
-5 7 0 48 66 -43 -4 -4 1 83 79 10 6 4 1 173 154 21 2 -6 2 1182 1191 13 -5 5 2 91 118 10
-3 7 0 133 153 7 -2 -4 1 333 249 24 -5 5 1 51 9 -15 4 -6 2 530 544 15 -3 5 2 396 375 3
-1 7 0 153 172 4 0 -4 1 216 221 4 -3 5 1 41 2 10 -5 -5 2 100 118 10 -1 5 2 117 145 6
1 7 0 425 424 2 2 -4 1 318 308 5 -1 5 1 401 392 3 -3 -5 2 288 298 6 1 5 2 239 231 3
3 7 0 167 166 9 4 -4 1 34 49 -21 1 5 1 179 188 6 -1 -5 2 435 456 7 3 5 2 51 19 -31
5 7 0 227 249 10 -3 -3 1 2265 2252 15 3 5 1 430 430 4 1 -5 2 355 337 3 -4 6 2 30 41 -30
-4 8 0 25 12 -25 -1 -3 1 8 46 -8 5 5 1 124 124 11 3 -5 2 323 357 3 -2 6 2 1271 1237 9
-2 8 0 36 87 -36 1 -3 1 1096 1110 12 -4 6 1 101 98 17 -6 -4 2 195 181 33 0 6 2 927 891 9
0 8 0 27 23 -27 3 -3 1 925 888 9 -2 6 1 37 57 -11 -2 -4 2 436 456 4 2 6 2 1187 1220 15
2 8 0 77 85 10 5 -3 1 737 752 8 0 6 1 218 208 12 2 -4 2 264 234 8 4 6 2 527 514 12

```

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
-5 7 2 122 137 7	-1 -9 3 746 737 36	-3 -1 3 223 252 6	-5 7 3 91 135 12	-4 0 4 1129 1194 7
-3 7 2 275 252 7	-4 -8 3 132 131 9	-6 0 3 51 4 -16	-3 7 3 97 90 27	-5 1 4 222 189 24
-1 7 2 321 288 9	-2 -8 3 278 212 27	-4 0 3 775 788 4	1 7 3 316 309 33	-3 1 4 312 297 3
1 7 2 429 423 8	-5 -7 3 60 94 -32	-2 0 3 1357 1344 18	0 8 3 84 88 12	-6 2 4 81 93 14
3 7 2 139 154 13	-3 -7 3 275 225 22	-5 1 3 66 64 15	-3 9 3 500 498 15	-4 2 4 465 473 5
-4 8 2 87 74 20	-1 -7 3 201 200 4	-3 1 3 113 110 4	-1 9 3 768 753 23	-5 3 4 776 738 19
-2 8 2 216 203 14	1 -7 3 391 428 24	-6 2 3 13 99 -12	1 9 3 566 501 47	-3 3 4 512 501 8
0 8 2 111 113 13	-4 -6 3 434 427 10	-4 2 3 105 103 8	0 10 3 162 125 20	-6 4 4 63 110 -23
2 8 2 150 148 9	-2 -6 3 994 969 13	-2 2 3 312 310 8	-1 11 3 174 104 27	-4 4 4 146 137 18
4 8 2 94 114 -35	0 -6 3 535 534 16	-5 3 3 766 739 8	-4 -6 4 741 734 21	-5 5 4 19 39 -18
-3 9 2 231 243 6	-3 -5 3 149 159 10	-3 3 3 927 902 5	-5 -5 4 109 131 21	-3 5 4 178 208 3
-1 9 2 381 393 7	-1 -5 3 242 235 6	-6 4 3 270 266 4	-3 -5 4 240 252 8	-4 6 4 792 746 4
1 9 2 736 732 12	-6 -4 3 16 94 -15	-2 4 3 427 444 4	-6 -4 4 219 245 16	-2 6 4 388 424 4
3 9 2 199 182 11	-4 -4 3 35 5 -35	-5 5 3 129 115 9	-4 -4 4 119 144 10	-5 7 4 186 171 45
-2 10 2 35 11 -35	-2 -4 3 49 59 10	-3 5 3 211 163 15	-5 -3 4 765 750 13	-3 7 4 174 193 15
0 10 2 31 39 -31	-5 -3 3 710 724 10	-1 5 3 504 483 4	-3 -3 4 483 509 4	-1 7 4 207 240 4
2 10 2 19 44 -19	-3 -3 3 901 905 6	1 5 3 281 245 4	-6 -2 4 46 31 -46	-4 8 4 141 148 17
-3 11 2 43 76 -43	-6 -2 3 142 124 18	-4 6 3 384 406 5	-4 -2 4 227 254 3	
-1 11 2 233 199 7	-4 -2 3 474 440 10	-2 6 3 960 930 9	-5 -1 4 93 96 -28	
-2 -10 3 37 6 -36	-2 -2 3 171 157 21	0 6 3 514 512 8	-3 -1 4 191 178 11	
-3 -9 3 493 537 16	-5 -1 3 171 128 14	2 6 3 52 69 11	-6 0 4 470 475 5	