

TABLE 6

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc in Coskrenite-(Ce)

Page 1

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	-2	-12	267	263	5	1	-2	-11	206	211	5
3	-2	-12	270	265	5	2	-2	-11	239	235	4
4	-2	-12	362	355	6	3	-2	-11	175	177	5
1	-1	-12	188	194	5	4	-2	-11	226	218	4
2	-1	-12	261	268	4	5	-2	-11	165	178	6
3	-1	-12	287	297	4	6	-2	-11	133	130	6
4	-1	-12	216	219	5	1	-1	-11	302	304	4
1	0	-12	254	262	4	2	-1	-11	191	189	5
2	0	-12	328	329	5	3	-1	-11	229	235	4
3	0	-12	258	256	4	4	-1	-11	226	224	4
4	0	-12	393	397	6	5	-1	-11	197	202	5
5	0	-12	97	101	7	6	-1	-11	208	202	5
0	1	-12	232	245	5	1	0	-11	138	140	5
1	1	-12	294	290	5	2	0	-11	296	311	5
2	1	-12	347	358	6	3	0	-11	223	217	4
3	1	-12	413	436	6	4	0	-11	283	287	4
4	1	-12	241	249	5	5	0	-11	235	231	4
5	1	-12	411	433	6	6	0	-11	213	217	5
0	2	-12	220	226	5	0	1	-11	142	150	5
1	2	-12	306	313	5	1	1	-11	278	290	4
2	2	-12	334	343	4	2	1	-11	163	169	5
3	2	-12	345	367	5	3	1	-11	275	278	4
4	2	-12	394	407	6	4	1	-11	144	132	5
0	3	-12	430	423	6	5	1	-11	306	297	5
1	3	-12	234	249	5	6	1	-11	205	214	5
2	3	-12	390	415	5	0	2	-11	426	446	6
3	3	-12	493	520	7	1	2	-11	151	158	5
4	3	-12	126	139	6	2	2	-11	294	308	4
0	4	-12	202	198	5	3	2	-11	245	247	4
1	4	-12	346	349	5	4	2	-11	312	314	4
2	4	-12	345	368	5	5	2	-11	213	224	5
3	4	-12	236	258	5	0	3	-11	80	74	7
0	5	-12	410	428	6	1	3	-11	282	277	5
1	5	-12	339	343	5	2	3	-11	128	134	6
2	5	-12	318	337	5	3	3	-11	386	401	6
3	5	-12	385	427	6	4	3	-11	210	229	5
1	6	-12	339	375	5	5	3	-11	421	453	6
3	-4	-11	227	222	5	0	4	-11	350	340	4
4	-4	-11	161	156	5	1	4	-11	53	63	10
1	-3	-11	332	322	6	2	4	-11	348	351	5
2	-3	-11	277	272	4	3	4	-11	125	124	5
3	-3	-11	227	226	5	4	4	-11	448	488	7
4	-3	-11	205	208	5	5	4	-11	211	235	5
5	-3	-11	100	99	7	0	5	-11	32*	13	37

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

Values of 10*Fobs and 10*Fcalc

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	5-11		417	423	6	6	0-10		216	210	4
2	5-11		102	106	6	0	1-10		490	498	7
3	5-11		372	402	6	1	1-10		144	144	4
4	5-11		198	224	5	2	1-10		565	582	9
0	6-11		352	371	5	3	1-10		163	156	4
1	6-11		32*	78	41	4	1-10		334	347	5
2	6-11		380	410	6	5	1-10		233	239	4
3	6-11		155	166	5	6	1-10		176	178	5
0	7-11		-59*	28	23	0	2-10		200	201	4
1	7-11		407	427	6	1	2-10		528	553	7
2	7-11		80	85	9	2	2-10		0*	37	47
2	-5-10		310	291	4	3	2-10		510	517	8
3	-5-10		111	100	6	4	2-10		225	230	4
4	-5-10		392	377	6	5	2-10		311	325	4
5	-5-10		245	227	5	6	2-10		230	242	4
1	-4-10		287	280	4	0	3-10		637	604	10
2	-4-10		22*	17	40	1	3-10		160	147	4
3	-4-10		432	415	7	2	3-10		594	602	9
4	-4-10		165	157	5	3	3-10		148	150	5
5	-4-10		405	387	6	4	3-10		396	420	6
6	-4-10		260	243	5	5	3-10		130	136	5
1	-3-10		71	66	7	6	3-10		255	268	4
2	-3-10		417	402	6	0	4-10		287	280	4
3	-3-10		114	103	5	1	4-10		696	676	10
4	-3-10		435	424	6	2	4-10		17*	15	19
5	-3-10		231	226	4	3	4-10		358	361	5
6	-3-10		241	229	5	4	4-10		108	109	6
1	-2-10		369	362	6	5	4-10		293	308	5
2	-2-10		70	74	8	0	5-10		579	575	9
3	-2-10		469	461	7	1	5-10		110	108	6
4	-2-10		245	237	4	2	5-10		408	408	6
5	-2-10		368	357	6	3	5-10		39*	55	12
6	-2-10		277	268	4	4	5-10		262	281	4
1	-1-10		120	115	5	5	5-10		138	147	6
2	-1-10		587	581	9	0	6-10		126	121	6
3	-1-10		257	256	4	1	6-10		506	520	7
4	-1-10		508	499	8	2	6-10		39*	11	12
5	-1-10		270	270	4	3	6-10		389	417	6
6	-1-10		259	258	4	4	6-10		105	119	6
1	0-10		465	468	7	0	7-10		569	567	8
2	0-10		-23*	27	29	1	7-10		73	60	8
3	0-10		471	471	7	2	7-10		430	460	6
4	0-10		98	91	6	3	7-10		30*	47	16
5	0-10		447	454	6	0	8-10		210	221	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	8-10		427	470	7	5	0	-9	22*	34	17
2	8-10		-22*	20	15	6	0	-9	498	489	8
2	-6	-9	294	280	5	7	0	-9	50*	50	31
3	-6	-9	34*	14	13	0	1	-9	275	282	5
4	-6	-9	309	298	5	1	1	-9	312	311	5
5	-6	-9	58*	22	29	2	1	-9	271	270	4
1	-5	-9	346	340	5	3	1	-9	421	411	6
2	-5	-9	76	73	7	4	1	-9	-57*	48	19
3	-5	-9	366	372	5	5	1	-9	507	515	7
4	-5	-9	-26*	12	26	6	1	-9	0*	42	51
5	-5	-9	350	335	5	7	1	-9	438	432	7
6	-5	-9	-27*	19	34	0	2	-9	311	304	5
1	-4	-9	136	140	5	1	2	-9	142	147	4
2	-4	-9	354	349	5	2	2	-9	336	334	5
3	-4	-9	88	90	6	3	2	-9	288	278	4
4	-4	-9	311	310	4	4	2	-9	537	534	8
5	-4	-9	47*	64	11	5	2	-9	76	75	7
6	-4	-9	383	362	6	6	2	-9	533	538	8
7	-4	-9	46*	44	13	0	3	-9	368	355	6
1	-3	-9	301	306	5	1	3	-9	417	374	6
2	-3	-9	109	110	5	2	3	-9	370	370	6
3	-3	-9	248	253	4	3	3	-9	569	579	9
4	-3	-9	88	86	6	4	3	-9	129	127	5
5	-3	-9	360	353	5	5	3	-9	494	504	7
6	-3	-9	17*	6	20	6	3	-9	36*	57	14
7	-3	-9	407	396	6	0	4	-9	273	265	5
1	-2	-9	139	142	4	1	4	-9	460	428	7
2	-2	-9	348	355	5	2	4	-9	399	385	6
3	-2	-9	45*	42	29	3	4	-9	289	295	5
4	-2	-9	442	429	7	4	4	-9	551	553	9
5	-2	-9	-43*	12	22	5	4	-9	61*	33	26
6	-2	-9	413	414	6	6	4	-9	430	445	6
7	-2	-9	23*	80	50	0	5	-9	421	410	6
1	-1	-9	276	281	4	1	5	-9	416	384	6
2	-1	-9	242	247	4	2	5	-9	469	471	6
3	-1	-9	414	410	7	3	5	-9	553	564	8
4	-1	-9	130	131	5	4	5	-9	85	86	6
5	-1	-9	580	564	9	5	5	-9	420	459	6
6	-1	-9	-18*	14	35	0	6	-9	399	387	6
7	-1	-9	408	407	6	1	6	-9	315	322	5
1	0	-9	324	329	5	2	6	-9	458	471	6
2	0	-9	346	348	5	3	6	-9	300	321	4
3	0	-9	148	148	4	4	6	-9	358	390	6
4	0	-9	424	425	6	0	7	-9	480	479	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
1	7	-9	421	424	6	3	-2	-8	460	464	7
2	7	-9	378	397	6	4	-2	-8	290	290	4
3	7	-9	461	516	7	5	-2	-8	390	395	6
4	7	-9	96	118	7	6	-2	-8	91	93	6
0	8	-9	235	233	5	7	-2	-8	296	289	5
1	8	-9	475	483	7	1	-1	-8	529	540	7
2	8	-9	403	438	6	2	-1	-8	543	543	9
3	8	-9	249	273	5	3	-1	-8	282	282	5
0	9	-9	441	444	6	4	-1	-8	372	386	6
1	9	-9	356	378	5	5	-1	-8	144	141	5
2	-7	-8	228	215	4	6	-1	-8	282	276	5
3	-7	-8	178	173	5	7	-1	-8	83	87	7
4	-7	-8	325	326	4	1	0	-8	565	554	8
5	-7	-8	28*	23	17	2	0	-8	477	472	7
6	-7	-8	311	293	5	3	0	-8	446	443	6
1	-6	-8	181	179	5	4	0	-8	208	201	4
2	-6	-8	237	244	4	5	0	-8	420	429	7
3	-6	-8	346	340	5	6	0	-8	94	96	6
4	-6	-8	127	134	5	7	0	-8	310	308	5
5	-6	-8	409	396	6	0	1	-8	398	396	6
6	-6	-8	-27*	26	32	1	1	-8	490	485	8
1	-5	-8	398	392	6	2	1	-8	457	440	7
2	-5	-8	339	343	5	3	1	-8	483	473	7
3	-5	-8	224	230	4	4	1	-8	388	382	6
4	-5	-8	443	442	6	5	1	-8	189	190	4
5	-5	-8	22*	67	51	6	1	-8	358	359	5
6	-5	-8	343	322	5	7	1	-8	174	171	5
7	-5	-8	46*	3	11	0	2	-8	647	596	9
1	-4	-8	256	254	4	1	2	-8	630	603	8
2	-4	-8	376	382	6	2	2	-8	479	463	7
3	-4	-8	336	337	5	3	2	-8	409	391	6
4	-4	-8	195	202	4	4	2	-8	234	238	4
5	-4	-8	448	457	7	5	2	-8	212	212	4
6	-4	-8	22*	39	45	6	2	-8	133	141	5
7	-4	-8	323	314	4	7	2	-8	300	299	4
1	-3	-8	498	519	7	0	3	-8	451	419	7
2	-3	-8	495	513	7	1	3	-8	477	421	7
3	-3	-8	255	259	4	2	3	-8	462	427	7
4	-3	-8	470	476	6	3	3	-8	268	256	4
5	-3	-8	38*	17	11	4	3	-8	248	249	4
6	-3	-8	293	290	4	5	3	-8	180	191	4
7	-3	-8	124	121	6	6	3	-8	311	303	5
1	-2	-8	440	439	7	0	4	-8	577	526	9
2	-2	-8	380	386	6	1	4	-8	415	386	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	4	-8	342	324	5	5	-6	-7	303	286	4
3	4	-8	338	329	5	6	-6	-7	243	236	5
4	4	-8	288	300	4	7	-6	-7	170	160	5
5	4	-8	381	386	6	1	-5	-7	61	49	6
6	4	-8	183	188	5	2	-5	-7	353	365	5
0	5	-8	339	310	5	3	-5	-7	77	60	6
1	5	-8	400	370	6	4	-5	-7	334	335	5
2	5	-8	226	217	4	5	-5	-7	233	238	4
3	5	-8	381	400	6	6	-5	-7	247	238	4
4	5	-8	257	262	4	7	-5	-7	372	343	6
5	5	-8	301	309	4	1	-4	-7	442	463	7
0	6	-8	379	359	5	2	-4	-7	109	125	5
1	6	-8	263	245	4	3	-4	-7	354	355	5
2	6	-8	329	338	5	4	-4	-7	190	186	4
3	6	-8	170	170	4	5	-4	-7	318	304	5
4	6	-8	274	287	4	6	-4	-7	387	376	6
5	6	-8	222	227	4	7	-4	-7	232	222	4
0	7	-8	39*	13	11	1	-3	-7	-14*	19	32
1	7	-8	348	342	5	2	-3	-7	568	570	8
2	7	-8	274	275	4	3	-3	-7	36*	37	25
3	7	-8	305	325	4	4	-3	-7	563	561	8
4	7	-8	266	287	4	5	-3	-7	365	346	5
0	8	-8	332	328	4	6	-3	-7	305	299	4
1	8	-8	178	178	5	7	-3	-7	420	391	7
2	8	-8	211	226	4	8	-3	-7	138	124	5
3	8	-8	160	175	5	1	-2	-7	413	411	6
0	9	-8	23*	34	43	2	-2	-7	34*	54	27
1	9	-8	376	392	5	3	-2	-7	613	608	8
2	9	-8	90	102	7	4	-2	-7	90	86	6
0	10	-8	262	287	5	5	-2	-7	441	435	7
2	-8	-7	174	165	5	6	-2	-7	366	358	5
3	-8	-7	188	185	5	7	-2	-7	181	167	4
4	-8	-7	132	133	6	8	-2	-7	345	320	5
5	-8	-7	210	197	5	1	-1	-7	169	168	3
1	-7	-7	98	104	6	2	-1	-7	692	666	9
2	-7	-7	276	276	4	3	-1	-7	317	307	5
3	-7	-7	120	124	6	4	-1	-7	440	422	6
4	-7	-7	313	304	5	5	-1	-7	355	349	5
5	-7	-7	246	234	4	6	-1	-7	198	196	4
6	-7	-7	229	218	5	7	-1	-7	318	315	5
1	-6	-7	303	304	4	1	0	-7	585	578	8
2	-6	-7	130	132	5	2	0	-7	17*	57	40
3	-6	-7	325	330	5	3	0	-7	679	670	9
4	-6	-7	154	140	5	4	0	-7	349	331	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	-----	-----	-----	-	-	-	-----	-----	-----
5	0	-7	547	552	8	4	6	-7	210	218	4
6	0	-7	467	457	7	5	6	-7	252	264	4
7	0	-7	199	194	4	0	7	-7	589	535	9
0	1	-7	665	647	9	1	7	-7	109	90	5
1	1	-7	-35*	10	20	2	7	-7	524	520	8
2	1	-7	941	916	9	3	7	-7	189	192	4
3	1	-7	267	248	4	4	7	-7	370	402	5
4	1	-7	630	625	8	0	8	-7	88	79	7
5	1	-7	332	321	5	1	8	-7	664	650	10
6	1	-7	329	331	5	2	8	-7	204	209	4
7	1	-7	284	276	4	3	8	-7	390	419	5
0	2	-7	211	196	3	0	9	-7	678	671	10
1	2	-7	643	591	9	1	9	-7	0*	41	51
2	2	-7	89	81	5	2	9	-7	431	452	6
3	2	-7	773	756	9	0	10	-7	-19*	20	37
4	2	-7	175	171	4	1	10	-7	368	397	6
5	2	-7	446	448	7	2	-9	-6	31*	6	34
6	2	-7	338	340	5	3	-9	-6	331	320	5
7	2	-7	142	146	5	4	-9	-6	161	162	5
0	3	-7	588	516	8	5	-9	-6	194	196	5
1	3	-7	130	117	4	1	-8	-6	-47*	51	24
2	3	-7	900	822	9	2	-8	-6	428	429	6
3	3	-7	451	443	7	3	-8	-6	131	129	5
4	3	-7	579	578	9	4	-8	-6	335	337	5
5	3	-7	340	347	5	5	-8	-6	267	245	4
6	3	-7	166	176	5	6	-8	-6	258	237	5
0	4	-7	151	143	4	1	-7	-6	506	496	7
1	4	-7	969	848	9	2	-7	-6	107	113	5
2	4	-7	324	314	4	3	-7	-6	480	484	7
3	4	-7	722	715	10	4	-7	-6	188	187	5
4	4	-7	355	356	5	5	-7	-6	286	275	5
5	4	-7	427	452	7	6	-7	-6	164	152	5
6	4	-7	229	237	4	7	-7	-6	255	244	5
0	5	-7	985	862	10	1	-6	-6	-16*	9	33
1	5	-7	81	70	6	2	-6	-6	429	419	6
2	5	-7	814	782	10	3	-6	-6	27*	68	38
3	5	-7	234	241	4	4	-6	-6	418	421	6
4	5	-7	453	458	7	5	-6	-6	111	108	6
5	5	-7	164	180	5	6	-6	-6	298	282	5
6	5	-7	266	275	4	7	-6	-6	223	214	5
0	6	-7	194	176	4	1	-5	-6	443	463	7
1	6	-7	807	756	10	2	-5	-6	146	154	4
2	6	-7	167	164	4	3	-5	-6	421	436	6
3	6	-7	537	547	8	4	-5	-6	251	255	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
5	-5	-6	282	277	4	1	1	-6	651	608	8
6	-5	-6	115	119	6	2	1	-6	315	283	4
7	-5	-6	266	250	4	3	1	-6	563	542	8
8	-5	-6	173	158	5	4	1	-6	85	76	5
1	-4	-6	85	100	5	5	1	-6	430	425	6
2	-4	-6	589	611	8	6	1	-6	-54*	46	22
3	-4	-6	222	236	4	7	1	-6	373	376	5
4	-4	-6	515	496	8	0	2	-6	536	459	7
5	-4	-6	221	216	4	1	2	-6	330	274	5
6	-4	-6	343	334	5	2	2	-6	456	413	7
7	-4	-6	152	149	5	3	2	-6	199	186	3
8	-4	-6	224	214	5	4	2	-6	457	440	7
1	-3	-6	568	578	8	5	2	-6	61	55	6
2	-3	-6	86	93	5	6	2	-6	452	453	7
3	-3	-6	623	639	8	7	2	-6	175	155	4
4	-3	-6	28*	27	13	0	3	-6	434	381	6
5	-3	-6	395	395	6	1	3	-6	356	288	5
6	-3	-6	79	80	6	2	3	-6	220	200	3
7	-3	-6	364	351	6	3	3	-6	534	523	8
8	-3	-6	216	198	5	4	3	-6	122	122	4
1	-2	-6	102	111	4	5	3	-6	520	526	8
2	-2	-6	564	568	8	6	3	-6	45*	51	24
3	-2	-6	142	155	4	7	3	-6	363	347	5
4	-2	-6	357	353	5	0	4	-6	706	611	9
5	-2	-6	48*	61	24	1	4	-6	313	275	5
6	-2	-6	309	309	5	2	4	-6	252	229	4
7	-2	-6	149	143	5	3	4	-6	258	258	4
8	-2	-6	329	306	5	4	4	-6	552	570	9
1	-1	-6	258	251	4	5	4	-6	43*	75	27
2	-1	-6	0*	28	40	6	4	-6	465	471	7
3	-1	-6	537	539	8	0	5	-6	751	642	9
4	-1	-6	27*	4	12	1	5	-6	539	468	8
5	-1	-6	503	498	8	2	5	-6	490	470	7
6	-1	-6	53*	91	27	3	5	-6	607	595	8
7	-1	-6	315	305	5	4	5	-6	68	69	6
8	-1	-6	211	203	5	5	5	-6	463	474	7
1	0	-6	26*	17	28	6	5	-6	74	86	8
2	0	-6	566	552	8	0	6	-6	358	303	6
3	0	-6	16*	24	37	1	6	-6	443	399	6
4	0	-6	543	536	8	2	6	-6	424	410	6
5	0	-6	25*	10	12	3	6	-6	262	263	4
6	0	-6	401	411	6	4	6	-6	536	549	8
7	0	-6	123	112	5	5	6	-6	26*	3	16
0	1	-6	265	244	4	0	7	-6	468	421	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
1	7	-6	443	412	7	2	-5	-5	471	497	7
2	7	-6	262	259	4	3	-5	-5	197	198	3
3	7	-6	504	531	8	4	-5	-5	650	634	9
4	7	-6	108	108	5	5	-5	-5	62	44	7
0	8	-6	449	429	7	6	-5	-5	421	419	6
1	8	-6	360	356	5	7	-5	-5	67	56	8
2	8	-6	431	432	6	8	-5	-5	287	266	4
3	8	-6	151	158	5	1	-4	-5	395	416	6
4	8	-6	468	494	7	2	-4	-5	408	428	6
0	9	-6	406	390	6	3	-4	-5	525	539	8
1	9	-6	356	350	5	4	-4	-5	291	284	4
2	9	-6	310	330	4	5	-4	-5	728	707	10
3	9	-6	482	508	8	6	-4	-5	0*	51	49
0	10	-6	336	342	5	7	-4	-5	371	367	5
1	10	-6	362	363	5	8	-4	-5	186	169	5
1	-9	-5	153	142	5	1	-3	-5	642	659	8
2	-9	-5	214	217	4	2	-3	-5	718	727	8
3	-9	-5	157	157	5	3	-3	-5	256	266	4
4	-9	-5	333	336	5	4	-3	-5	664	667	9
5	-9	-5	-55*	54	22	5	-3	-5	56*	76	26
6	-9	-5	343	329	5	6	-3	-5	415	424	6
1	-8	-5	278	281	4	7	-3	-5	72	63	7
2	-8	-5	162	169	4	8	-3	-5	315	303	5
3	-8	-5	357	368	5	1	-2	-5	312	329	5
4	-8	-5	167	166	5	2	-2	-5	470	465	7
5	-8	-5	409	414	5	3	-2	-5	819	809	8
6	-8	-5	53*	11	25	4	-2	-5	162	166	3
7	-8	-5	335	313	5	5	-2	-5	717	728	9
1	-7	-5	271	288	4	6	-2	-5	95	108	5
2	-7	-5	374	383	6	7	-2	-5	399	388	6
3	-7	-5	353	359	5	8	-2	-5	53*	79	30
4	-7	-5	525	523	8	1	-1	-5	679	697	7
5	-7	-5	86	81	7	2	-1	-5	803	778	8
6	-7	-5	426	381	6	3	-1	-5	67	54	5
7	-7	-5	149	128	6	4	-1	-5	805	828	9
1	-6	-5	297	303	4	5	-1	-5	41	51	9
2	-6	-5	323	329	5	6	-1	-5	405	404	6
3	-6	-5	479	476	7	7	-1	-5	30*	28	13
4	-6	-5	224	229	4	8	-1	-5	281	272	5
5	-6	-5	466	462	7	1	0	-5	861	816	7
6	-6	-5	48*	2	29	2	0	-5	175	181	3
7	-6	-5	406	373	6	3	0	-5	635	601	8
8	-6	-5	168	156	5	4	0	-5	60	56	6
1	-5	-5	468	477	7	5	0	-5	592	597	8

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
6	0	-5	-23*	32	34	3	6	-5	267	267	4
7	0	-5	306	291	5	4	6	-5	245	256	4
8	0	-5	101	81	6	5	6	-5	289	305	4
0	1	-5	623	572	7	0	7	-5	330	296	5
1	1	-5	633	593	7	1	7	-5	540	501	8
2	1	-5	718	656	8	2	7	-5	353	354	5
3	1	-5	156	152	3	3	7	-5	302	308	5
4	1	-5	687	700	9	4	7	-5	201	203	4
5	1	-5	74	85	6	0	8	-5	489	445	7
6	1	-5	436	441	6	1	8	-5	255	241	4
7	1	-5	-88*	8	17	2	8	-5	229	236	4
0	2	-5	825	731	7	3	8	-5	160	161	4
1	2	-5	907	754	7	4	8	-5	182	197	5
2	2	-5	367	345	5	0	9	-5	291	282	5
3	2	-5	855	810	8	1	9	-5	357	350	5
4	2	-5	85	85	5	2	9	-5	193	207	4
5	2	-5	530	542	7	3	9	-5	198	205	5
6	2	-5	43*	15	25	0	10	-5	340	337	5
7	2	-5	301	298	4	1	10	-5	234	239	4
0	3	-5	593	487	8	2	10	-5	259	282	4
1	3	-5	489	437	7	0	11	-5	38*	40	38
2	3	-5	661	612	8	2-10	-4		229	226	4
3	3	-5	273	256	4	3-10	-4		136	138	5
4	3	-5	481	482	7	4-10	-4		286	292	4
5	3	-5	181	177	3	5-10	-4		66	80	10
6	3	-5	288	284	4	1	-9	-4	206	204	4
7	3	-5	86	81	7	2	-9	-4	216	213	4
0	4	-5	1085	876	8	3	-9	-4	312	319	5
1	4	-5	889	757	8	4	-9	-4	70	74	8
2	4	-5	219	202	3	5	-9	-4	256	265	5
3	4	-5	478	452	7	6	-9	-4	131	125	6
4	4	-5	46*	29	22	1	-8	-4	297	289	5
5	4	-5	264	258	4	2	-8	-4	283	292	4
6	4	-5	93	95	6	3	-8	-4	134	142	5
0	5	-5	748	624	9	4	-8	-4	238	245	4
1	5	-5	501	433	8	5	-8	-4	148	155	6
2	5	-5	413	393	6	6	-8	-4	277	263	5
3	5	-5	197	200	3	7	-8	-4	102	93	6
4	5	-5	362	376	5	1	-7	-4	239	251	3
5	5	-5	93	104	6	2	-7	-4	199	206	3
6	5	-5	349	347	4	3	-7	-4	253	269	4
0	6	-5	472	405	7	4	-7	-4	172	177	4
1	6	-5	611	560	9	5	-7	-4	260	263	4
2	6	-5	373	362	6	6	-7	-4	157	156	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	-----	-----	-----	-	-	-	-----	-----	-----
7	-7	-4	333	312	5	4	-1	-4	683	710	8
1	-6	-4	306	329	5	5	-1	-4	374	375	6
2	-6	-4	303	337	5	6	-1	-4	347	348	5
3	-6	-4	178	187	3	7	-1	-4	359	350	6
4	-6	-4	337	350	5	8	-1	-4	87	89	7
5	-6	-4	278	281	4	1	0	-4	1075	1014	6
6	-6	-4	323	319	5	2	0	-4	161	158	3
7	-6	-4	167	159	5	3	0	-4	661	667	7
8	-6	-4	302	293	5	4	0	-4	304	310	4
1	-5	-4	35*	49	23	5	0	-4	426	436	7
2	-5	-4	384	415	6	6	0	-4	460	462	7
3	-5	-4	274	292	4	7	0	-4	158	157	4
4	-5	-4	434	465	6	8	0	-4	344	327	5
5	-5	-4	406	413	6	0	1	-4	1072	910	6
6	-5	-4	303	319	4	1	1	-4	336	302	5
7	-5	-4	284	279	4	2	1	-4	1189	1123	7
8	-5	-4	76	75	8	3	1	-4	469	448	6
1	-4	-4	527	573	8	4	1	-4	340	349	5
2	-4	-4	288	311	4	5	1	-4	530	534	8
3	-4	-4	205	217	4	6	1	-4	259	254	4
4	-4	-4	181	182	3	7	1	-4	408	395	6
5	-4	-4	341	361	5	0	2	-4	555	453	7
6	-4	-4	285	280	4	1	2	-4	1044	850	7
7	-4	-4	256	253	4	2	2	-4	208	196	3
8	-4	-4	324	305	5	3	2	-4	873	848	7
1	-3	-4	234	259	3	4	2	-4	286	281	4
2	-3	-4	570	612	8	5	2	-4	517	532	8
3	-3	-4	265	271	3	6	2	-4	581	574	9
4	-3	-4	392	410	6	7	2	-4	164	154	4
5	-3	-4	410	435	6	0	3	-4	1184	945	7
6	-3	-4	265	273	4	1	3	-4	13*	46	33
7	-3	-4	421	411	6	2	3	-4	1065	988	7
8	-3	-4	105	98	6	3	3	-4	338	320	5
1	-2	-4	554	582	7	4	3	-4	508	517	8
2	-2	-4	307	320	5	5	3	-4	390	391	6
3	-2	-4	699	721	8	6	3	-4	195	182	4
4	-2	-4	321	325	5	7	3	-4	337	321	5
5	-2	-4	553	591	8	0	4	-4	201	161	4
6	-2	-4	489	512	8	1	4	-4	865	754	7
7	-2	-4	214	210	4	2	4	-4	81	75	4
8	-2	-4	372	352	6	3	4	-4	590	595	8
1	-1	-4	51	49	5	4	4	-4	474	468	7
2	-1	-4	947	935	7	5	4	-4	315	303	5
3	-1	-4	243	246	4	6	4	-4	454	422	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
0	5	-4	703	566	8	3	-8	-3	83	82	5
1	5	-4	126	123	4	4	-8	-3	403	404	7
2	5	-4	756	730	8	5	-8	-3	324	326	5
3	5	-4	420	411	6	6	-8	-3	251	237	4
4	5	-4	358	374	5	7	-8	-3	312	296	4
5	5	-4	434	431	7	1	-7	-3	602	623	8
6	5	-4	219	216	4	2	-7	-3	184	194	3
0	6	-4	-30*	35	23	3	-7	-3	478	504	7
1	6	-4	1003	902	8	4	-7	-3	388	404	6
2	6	-4	414	407	6	5	-7	-3	169	169	4
3	6	-4	520	514	7	6	-7	-3	317	315	4
4	6	-4	326	327	5	7	-7	-3	194	185	4
5	6	-4	233	237	4	1	-6	-3	35*	9	20
0	7	-4	612	541	9	2	-6	-3	666	694	8
1	7	-4	82	78	5	3	-6	-3	255	271	3
2	7	-4	606	594	8	4	-6	-3	539	555	8
3	7	-4	241	244	4	5	-6	-3	389	404	6
4	7	-4	368	378	5	6	-6	-3	271	265	4
0	8	-4	95	81	5	7	-6	-3	338	341	5
1	8	-4	515	490	8	8	-6	-3	88	88	7
2	8	-4	237	238	4	1	-5	-3	799	849	8
3	8	-4	396	424	6	2	-5	-3	65	62	5
4	8	-4	281	289	4	3	-5	-3	491	517	8
0	9	-4	543	523	8	4	-5	-3	274	280	4
1	9	-4	141	143	4	5	-5	-3	329	330	5
2	9	-4	439	461	7	6	-5	-3	229	231	3
3	9	-4	267	270	4	7	-5	-3	222	224	4
0	10	-4	-56*	6	21	8	-5	-3	244	235	4
1	10	-4	585	584	9	1	-4	-3	80	84	4
2	10	-4	198	211	5	2	-4	-3	572	610	8
0	11	-4	429	431	6	3	-4	-3	96	106	4
1-10	-3		51*	32	26	4	-4	-3	297	300	5
2-10	-3		349	357	6	5	-4	-3	393	410	6
3-10	-3		193	195	4	6	-4	-3	238	243	3
4-10	-3		374	372	6	7	-4	-3	255	247	4
5-10	-3		291	277	4	8	-4	-3	158	147	5
1	-9	-3	414	419	6	1	-3	-3	671	732	7
2	-9	-3	36*	33	10	2	-3	-3	27*	33	26
3	-9	-3	497	488	7	3	-3	-3	655	681	8
4	-9	-3	269	268	4	4	-3	-3	456	471	7
5	-9	-3	375	364	6	5	-3	-3	214	226	3
6	-9	-3	303	286	5	6	-3	-3	337	345	5
1	-8	-3	-24*	28	29	7	-3	-3	268	265	4
2	-8	-3	498	513	7	8	-3	-3	160	156	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	-2	-3	331	369	5	5	3	-3	373	377	6
2	-2	-3	928	965	7	6	3	-3	108	93	5
3	-2	-3	351	366	5	7	3	-3	321	295	5
4	-2	-3	386	386	6	0	4	-3	890	673	7
5	-2	-3	172	178	3	1	4	-3	164	147	3
6	-2	-3	296	303	5	2	4	-3	413	412	6
7	-2	-3	222	218	4	3	4	-3	154	151	3
8	-2	-3	250	231	4	4	4	-3	570	584	8
1	-1	-3	810	826	6	5	4	-3	59	54	7
2	-1	-3	73	53	4	6	4	-3	454	437	7
3	-1	-3	648	659	7	0	5	-3	80	71	4
4	-1	-3	140	142	3	1	5	-3	801	705	7
5	-1	-3	373	393	5	2	5	-3	88	90	4
6	-1	-3	162	166	4	3	5	-3	544	553	8
7	-1	-3	300	287	5	4	5	-3	-23*	29	32
8	-1	-3	235	222	4	5	5	-3	388	381	6
1	0	-3	141	126	3	6	5	-3	53*	49	26
2	0	-3	587	577	6	0	6	-3	678	578	8
3	0	-3	215	234	3	1	6	-3	120	108	3
4	0	-3	368	379	5	2	6	-3	550	544	7
5	0	-3	160	163	3	3	6	-3	184	188	3
6	0	-3	362	365	5	4	6	-3	454	450	7
7	0	-3	152	142	4	5	6	-3	76	66	7
0	1	-3	674	562	5	0	7	-3	357	322	5
1	1	-3	677	583	6	1	7	-3	511	474	8
2	1	-3	88	71	3	2	7	-3	146	149	4
3	1	-3	759	769	7	3	7	-3	542	544	9
4	1	-3	102	102	3	4	7	-3	40*	11	27
5	1	-3	466	473	7	0	8	-3	478	440	7
6	1	-3	172	166	4	1	8	-3	125	121	4
7	1	-3	336	310	5	2	8	-3	358	355	5
0	2	-3	1380	1068	6	3	8	-3	110	105	5
1	2	-3	481	410	6	4	8	-3	396	409	6
2	2	-3	1113	1055	6	0	9	-3	232	231	4
3	2	-3	68	59	4	1	9	-3	327	332	5
4	2	-3	450	447	6	2	9	-3	179	175	4
5	2	-3	-21*	17	31	3	9	-3	360	363	5
6	2	-3	349	337	5	0	10	-3	289	283	4
7	2	-3	146	135	5	1	10	-3	243	247	4
0	3	-3	599	456	6	0	11	-3	207	208	4
1	3	-3	1032	866	6	3	-11	-2	-34*	12	35
2	3	-3	71	70	4	4	-11	-2	260	259	4
3	3	-3	746	755	7	1	-10	-2	354	354	5
4	3	-3	-29*	13	24	2	-10	-2	-85*	5	18

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	-10	-2	322	324	5	4	-4	-2	138	144	3
4	-10	-2	-32*	21	29	5	-4	-2	692	729	8
5	-10	-2	340	336	5	6	-4	-2	146	154	4
6	-10	-2	35*	54	40	7	-4	-2	444	448	7
1	-9	-2	151	154	4	8	-4	-2	209	206	4
2	-9	-2	347	353	5	1	-3	-2	51	24	5
3	-9	-2	113	111	5	2	-3	-2	931	986	7
4	-9	-2	390	384	6	3	-3	-2	294	310	5
5	-9	-2	-17*	20	35	4	-3	-2	634	672	7
6	-9	-2	402	385	6	5	-3	-2	34*	13	24
7	-9	-2	100	104	7	6	-3	-2	483	487	7
1	-8	-2	425	447	6	7	-3	-2	168	158	4
2	-8	-2	22*	28	12	8	-3	-2	289	276	4
3	-8	-2	250	250	4	1	-2	-2	650	684	5
4	-8	-2	66	64	7	2	-2	-2	415	443	6
5	-8	-2	390	384	6	3	-2	-2	867	935	6
6	-8	-2	-25*	50	32	4	-2	-2	330	365	5
7	-8	-2	434	433	6	5	-2	-2	587	634	8
1	-7	-2	60	68	6	6	-2	-2	254	267	4
2	-7	-2	420	435	6	7	-2	-2	338	333	5
3	-7	-2	185	188	3	8	-2	-2	253	240	4
4	-7	-2	572	588	8	1	-1	-2	881	924	5
5	-7	-2	105	99	5	2	-1	-2	1170	1216	5
6	-7	-2	457	457	7	3	-1	-2	112	119	3
7	-7	-2	166	167	4	4	-1	-2	766	838	7
1	-6	-2	479	479	7	5	-1	-2	150	159	3
2	-6	-2	78	87	5	6	-1	-2	338	344	5
3	-6	-2	597	622	8	7	-1	-2	189	182	4
4	-6	-2	182	191	4	8	-1	-2	322	302	5
5	-6	-2	566	579	9	1	0	-2	779	723	5
6	-6	-2	91	96	5	2	0	-2	478	480	5
7	-6	-2	413	412	6	3	0	-2	782	830	6
8	-6	-2	225	224	4	4	0	-2	141	142	3
1	-5	-2	339	370	5	5	0	-2	655	681	8
2	-5	-2	673	716	8	6	0	-2	122	122	4
3	-5	-2	143	145	4	7	0	-2	331	318	5
4	-5	-2	678	691	9	0	1	-2	846	675	5
5	-5	-2	50	48	7	1	1	-2	729	671	5
6	-5	-2	437	451	6	2	1	-2	838	845	5
7	-5	-2	161	162	4	3	1	-2	287	304	4
8	-5	-2	348	332	5	4	1	-2	506	537	6
1	-4	-2	546	582	7	5	1	-2	16*	17	14
2	-4	-2	302	322	5	6	1	-2	350	357	5
3	-4	-2	650	668	8	7	1	-2	98	89	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
0	2	-2	1507	1145	5	1	9	-2	358	361	6
1	2	-2	1093	965	5	2	9	-2	333	344	4
2	2	-2	253	254	4	0	10	-2	225	217	4
3	2	-2	638	666	7	1	10	-2	333	336	5
4	2	-2	21*	9	27	0	11	-2	336	343	5
5	2	-2	406	412	6	2	-11	-1	186	189	4
6	2	-2	194	188	4	3	-11	-1	408	406	7
7	2	-2	252	236	4	4	-11	-1	85	80	6
0	3	-2	71	66	4	5	-11	-1	290	289	4
1	3	-2	652	594	6	1	-10	-1	282	286	4
2	3	-2	632	632	6	2	-10	-1	386	395	6
3	3	-2	242	236	4	3	-10	-1	203	206	4
4	3	-2	748	747	8	4	-10	-1	408	401	6
5	3	-2	90	84	5	5	-10	-1	81	65	7
6	3	-2	364	355	5	6	-10	-1	298	288	4
0	4	-2	1445	1204	6	1	-9	-1	406	416	5
1	4	-2	803	731	6	2	-9	-1	294	298	4
2	4	-2	185	183	3	3	-9	-1	449	453	7
3	4	-2	683	690	8	4	-9	-1	-38*	62	29
4	4	-2	-38*	14	22	5	-9	-1	347	331	5
5	4	-2	381	370	6	6	-9	-1	0*	7	53
6	4	-2	65	56	7	7	-9	-1	237	244	4
0	5	-2	577	509	7	1	-8	-1	461	468	7
1	5	-2	606	580	7	2	-8	-1	535	553	8
2	5	-2	539	519	8	3	-8	-1	261	262	4
3	5	-2	96	92	4	4	-8	-1	470	459	7
4	5	-2	414	408	6	5	-8	-1	-56*	19	18
5	5	-2	28*	30	34	6	-8	-1	336	335	5
0	6	-2	658	596	7	7	-8	-1	34*	8	12
1	6	-2	623	605	8	1	-7	-1	481	514	7
2	6	-2	125	114	4	2	-7	-1	393	400	6
3	6	-2	409	418	6	3	-7	-1	508	521	7
4	6	-2	12*	22	20	4	-7	-1	219	218	4
5	6	-2	326	322	5	5	-7	-1	283	282	4
0	7	-2	485	462	7	6	-7	-1	52*	69	23
1	7	-2	240	234	3	7	-7	-1	283	294	4
2	7	-2	506	512	7	1	-6	-1	404	415	6
3	7	-2	134	134	4	2	-6	-1	672	683	8
4	7	-2	398	396	6	3	-6	-1	141	137	4
0	8	-2	488	471	7	4	-6	-1	284	285	4
1	8	-2	453	447	7	5	-6	-1	171	173	3
2	8	-2	181	179	4	6	-6	-1	254	266	4
3	8	-2	374	372	5	7	-6	-1	-18*	3	37
0	9	-2	337	330	5	8	-6	-1	322	310	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
1	-5	-1	314	337	5	6	0	-1	473	463	7
2	-5	-1	438	443	6	7	0	-1	139	131	5
3	-5	-1	641	657	9	0	1	-1	1082	802	4
4	-5	-1	223	237	3	1	1	-1	333	334	4
5	-5	-1	498	531	7	2	1	-1	680	712	5
6	-5	-1	38*	49	24	3	1	-1	519	555	6
7	-5	-1	309	324	4	4	1	-1	265	279	4
8	-5	-1	14*	7	20	5	1	-1	374	378	5
1	-4	-1	579	609	6	6	1	-1	225	224	3
2	-4	-1	668	675	7	7	1	-1	302	282	4
3	-4	-1	223	232	3	0	2	-1	179	149	3
4	-4	-1	474	496	6	1	2	-1	217	219	3
5	-4	-1	276	300	5	2	2	-1	340	336	5
6	-4	-1	382	410	6	3	2	-1	451	476	6
7	-4	-1	156	164	4	4	2	-1	413	421	6
8	-4	-1	329	316	4	5	2	-1	341	335	5
1	-3	-1	376	418	5	6	2	-1	486	471	7
2	-3	-1	683	683	7	7	2	-1	51	56	10
3	-3	-1	511	542	6	0	3	-1	762	655	5
4	-3	-1	316	355	5	1	3	-1	542	520	6
5	-3	-1	363	393	6	2	3	-1	424	440	6
6	-3	-1	189	197	3	3	3	-1	529	530	7
7	-3	-1	340	344	5	4	3	-1	408	425	6
8	-3	-1	51*	53	28	5	3	-1	375	373	6
1	-2	-1	289	299	4	6	3	-1	230	219	4
2	-2	-1	879	945	5	0	4	-1	368	313	5
3	-2	-1	46	53	4	1	4	-1	677	700	6
4	-2	-1	336	356	5	2	4	-1	149	146	3
5	-2	-1	263	276	4	3	4	-1	570	575	8
6	-2	-1	359	383	5	4	4	-1	363	366	5
7	-2	-1	109	109	5	5	4	-1	358	354	5
8	-2	-1	394	372	6	6	4	-1	375	349	6
1	-1	-1	362	369	5	0	5	-1	624	582	6
2	-1	-1	66	73	4	1	5	-1	159	163	3
3	-1	-1	776	832	6	2	5	-1	677	696	8
4	-1	-1	416	457	6	3	5	-1	248	252	4
5	-1	-1	566	603	8	4	5	-1	320	320	4
6	-1	-1	220	221	3	5	5	-1	385	377	6
7	-1	-1	406	394	6	0	6	-1	69	65	4
1	0	-1	405	422	4	1	6	-1	624	640	8
2	0	-1	323	332	4	2	6	-1	200	202	3
3	0	-1	501	536	6	3	6	-1	380	386	5
4	0	-1	557	587	7	4	6	-1	309	310	4
5	0	-1	523	542	7	5	6	-1	198	178	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
0	7	-1	600	586	8	6	-7	0	310	317	5
1	7	-1	148	155	3	7	-7	0	138	137	4
2	7	-1	514	527	8	1	-6	0	151	150	3
3	7	-1	254	249	4	2	-6	0	641	612	7
4	7	-1	273	274	4	3	-6	0	423	428	6
0	8	-1	46	50	7	4	-6	0	492	536	7
1	8	-1	626	640	8	5	-6	0	411	440	6
2	8	-1	179	181	4	6	-6	0	152	158	4
3	8	-1	346	346	5	7	-6	0	333	336	5
0	9	-1	437	445	6	8	-6	0	30*	25	36
1	9	-1	57	44	7	1	-5	0	773	739	6
2	9	-1	375	383	6	2	-5	0	434	419	6
0	10	-1	27*	34	28	3	-5	0	582	620	7
1	10	-1	446	456	7	4	-5	0	569	610	12
1-11	0		229	233	5	5	-5	0	403	425	6
2-11	0		42*	78	48	6	-5	0	298	317	4
3-11	0		390	398	6	7	-5	0	145	147	4
4-11	0		237	233	6	8	-5	0	277	263	5
5-11	0		243	244	5	1	-4	0	180	168	2
1-10	0		85	86	6	2	-4	0	955	928	12
2-10	0		248	249	4	3	-4	0	270	296	7
3-10	0		179	188	4	4	-4	0	662	710	14
4-10	0		281	283	4	5	-4	0	420	447	6
5-10	0		222	216	5	6	-4	0	326	337	5
6-10	0		201	209	4	7	-4	0	301	297	6
1	-9	0	362	365	5	8	-4	0	-42*	13	28
2	-9	0	149	152	4	1	-3	0	1305	1264	10
3	-9	0	365	361	5	2	-3	0	66	52	3
4	-9	0	402	406	6	3	-3	0	817	894	6
5	-9	0	285	279	5	4	-3	0	377	419	7
6	-9	0	346	357	12	5	-3	0	290	303	5
7	-9	0	102	105	11	6	-3	0	308	326	5
1	-8	0	60	63	5	7	-3	0	154	156	5
2	-8	0	497	487	9	8	-3	0	220	210	4
3	-8	0	201	201	3	1	-2	0	116	114	8
4	-8	0	562	548	9	2	-2	0	895	994	5
5	-8	0	426	442	6	3	-2	0	424	490	6
6	-8	0	283	298	4	4	-2	0	459	507	8
7	-8	0	366	378	6	5	-2	0	396	418	6
1	-7	0	484	469	7	6	-2	0	186	187	3
2	-7	0	127	124	3	7	-2	0	252	253	4
3	-7	0	617	621	15	1	-1	0	1159	1294	3
4	-7	0	299	308	9	2	-1	0	233	270	4
5	-7	0	310	333	7	3	-1	0	837	936	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
4	-1	0	500	537	7	4	5	0	176	177	5
5	-1	0	367	390	8	5	5	0	330	312	5
6	-1	0	257	270	4	0	6	0	477	475	7
7	-1	0	171	167	4	1	6	0	238	254	10
1	0	0	367	421	4	2	6	0	317	329	5
2	0	0	926	1023	5	3	6	0	32*	10	16
3	0	0	438	493	6	4	6	0	341	340	5
4	0	0	272	281	4	0	7	0	39	46	8
5	0	0	238	247	6	1	7	0	462	474	7
6	0	0	280	279	6	2	7	0	82	83	5
7	0	0	195	185	4	3	7	0	369	376	6
0	1	0	13*	3	20	4	7	0	94	97	6
1	1	0	1129	1192	4	0	8	0	349	353	5
2	1	0	288	289	4	1	8	0	36*	23	16
3	1	0	589	634	6	2	8	0	305	316	5
4	1	0	369	394	6	3	8	0	-27*	14	40
5	1	0	322	330	5	0	9	0	-24*	9	34
6	1	0	339	335	6	1	9	0	323	330	4
7	1	0	201	185	4	2	9	0	-15*	12	18
0	2	0	1210	1187	14	0	10	0	326	337	5
1	2	0	422	454	6	1	10	0	53*	39	25
2	2	0	605	636	6	1-11	1		95	84	5
3	2	0	259	277	4	2-11	1		389	379	6
4	2	0	313	325	5	3-11	1		115	116	5
5	2	0	255	259	8	4-11	1		313	317	5
6	2	0	299	287	4	5-11	1		99	96	6
0	3	0	162	168	2	1-10	1		429	430	6
1	3	0	892	926	6	2-10	1		181	179	4
2	3	0	299	308	5	3-10	1		314	314	5
3	3	0	508	523	11	4-10	1		165	171	4
4	3	0	295	292	5	5-10	1		276	278	4
5	3	0	237	236	4	6-10	1		117	120	5
6	3	0	161	151	4	1 -9	1		-41*	7	22
0	4	0	1176	1176	8	2 -9	1		468	465	7
1	4	0	109	116	3	3 -9	1		186	188	3
2	4	0	483	507	9	4 -9	1		433	440	7
3	4	0	251	257	4	5 -9	1		221	231	4
4	4	0	298	301	5	6 -9	1		261	281	4
5	4	0	184	178	4	1 -8	1		735	716	8
6	4	0	276	253	4	2 -8	1		191	182	3
0	5	0	94	101	5	3 -8	1		316	315	4
1	5	0	582	594	7	4 -8	1		79	79	5
2	5	0	158	159	3	5 -8	1		332	360	5
3	5	0	314	320	6	6 -8	1		86	87	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
7	-8	1	333	336	5	2	-1	1	652	689	5
1	-7	1	86	76	4	3	-1	1	106	110	3
2	-7	1	540	520	8	4	-1	1	552	609	7
3	-7	1	41*	6	22	5	-1	1	16*	42	34
4	-7	1	369	390	5	6	-1	1	382	378	6
5	-7	1	158	172	3	7	-1	1	135	140	5
6	-7	1	324	340	4	0	0	1	753	750	3
7	-7	1	180	184	4	1	0	1	723	751	4
1	-6	1	463	422	6	2	0	1	550	597	5
2	-6	1	130	126	3	3	0	1	713	774	6
3	-6	1	318	307	4	4	0	1	42*	50	18
4	-6	1	44*	14	19	5	0	1	576	601	8
5	-6	1	426	481	6	6	0	1	239	241	4
6	-6	1	149	159	4	7	0	1	264	252	4
7	-6	1	347	364	5	0	1	1	496	527	4
1	-5	1	175	169	3	1	1	1	677	745	4
2	-5	1	404	378	6	2	1	1	961	1017	6
3	-5	1	23*	9	25	3	1	1	201	209	3
4	-5	1	563	607	8	4	1	1	638	668	8
5	-5	1	148	163	3	5	1	1	125	122	4
6	-5	1	388	412	6	6	1	1	453	437	7
7	-5	1	160	157	4	7	1	1	144	134	5
1	-4	1	947	829	6	0	2	1	425	452	5
2	-4	1	269	255	4	1	2	1	1182	1239	5
3	-4	1	366	383	6	2	2	1	256	273	4
4	-4	1	90	108	4	3	2	1	668	695	7
5	-4	1	492	518	7	4	2	1	155	168	3
6	-4	1	149	165	4	5	2	1	451	451	7
7	-4	1	367	369	6	6	2	1	110	100	5
1	-3	1	504	444	6	0	3	1	524	534	5
2	-3	1	629	633	5	1	3	1	422	458	6
3	-3	1	50	55	5	2	3	1	741	782	7
4	-3	1	405	449	6	3	3	1	289	304	5
5	-3	1	188	200	3	4	3	1	566	564	8
6	-3	1	487	497	7	5	3	1	93	96	5
7	-3	1	172	171	4	6	3	1	270	251	4
1	-2	1	300	248	5	0	4	1	597	642	6
2	-2	1	314	347	5	1	4	1	791	838	7
3	-2	1	556	606	6	2	4	1	211	222	3
4	-2	1	200	209	3	3	4	1	621	651	9
5	-2	1	658	708	8	4	4	1	-16*	48	36
6	-2	1	213	220	3	5	4	1	381	363	5
7	-2	1	381	379	5	0	5	1	576	596	7
1	-1	1	252	257	4	1	5	1	442	461	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
2	5	1	672	698	8	7	-8	2	107	112	6
3	5	1	146	151	3	1	-7	2	675	620	8
4	5	1	489	492	7	2	-7	2	444	409	7
5	5	1	88	70	6	3	-7	2	836	793	10
0	6	1	562	592	8	4	-7	2	45	46	7
1	6	1	798	823	8	5	-7	2	486	507	7
2	6	1	177	182	3	6	-7	2	132	135	4
3	6	1	449	457	7	7	-7	2	320	329	4
4	6	1	-27*	23	29	1	-6	2	440	397	7
0	7	1	410	435	6	2	-6	2	1019	927	9
1	7	1	237	252	4	3	-6	2	148	132	3
2	7	1	431	448	7	4	-6	2	568	573	8
3	7	1	81	74	6	5	-6	2	44*	47	21
0	8	1	262	274	4	6	-6	2	369	391	5
1	8	1	411	419	6	7	-6	2	54	46	8
2	8	1	-32*	35	30	1	-5	2	962	811	7
3	8	1	345	329	5	2	-5	2	368	327	5
0	9	1	390	408	6	3	-5	2	724	715	7
1	9	1	213	221	4	4	-5	2	33*	52	28
2	9	1	411	407	6	5	-5	2	396	416	6
0	10	1	251	260	4	6	-5	2	40	37	8
1-11	2	2	317	315	4	7	-5	2	249	260	4
2-11	2	2	244	244	4	1	-4	2	436	368	6
3-11	2	2	455	454	6	2	-4	2	950	888	7
4-11	2	2	13*	13	21	3	-4	2	37*	41	21
5-11	2	2	352	363	5	4	-4	2	423	444	6
1-10	2	2	398	390	6	5	-4	2	39*	65	24
2-10	2	2	455	453	6	6	-4	2	366	370	6
3-10	2	2	133	124	4	7	-4	2	43	43	9
4-10	2	2	543	537	8	1	-3	2	1046	897	6
5-10	2	2	33*	27	13	2	-3	2	761	749	6
6-10	2	2	367	391	5	3	-3	2	808	840	7
1 -9	2	2	484	455	7	4	-3	2	96	102	4
2 -9	2	2	247	243	3	5	-3	2	508	535	7
3 -9	2	2	495	476	7	6	-3	2	93	91	5
4 -9	2	2	-52*	48	22	7	-3	2	312	314	5
5 -9	2	2	469	490	7	1	-2	2	487	446	5
6 -9	2	2	-43*	39	26	2	-2	2	1133	1166	6
1 -8	2	2	488	461	8	3	-2	2	182	189	3
2 -8	2	2	669	629	9	4	-2	2	250	255	4
3 -8	2	2	159	154	4	5	-2	2	121	130	4
4 -8	2	2	555	560	8	6	-2	2	278	284	4
5 -8	2	2	138	145	4	7	-2	2	-43*	52	28
6 -8	2	2	398	402	6	1	-1	2	660	655	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	-1	2	304	310	5	4	5	2	264	256	4
3	-1	2	478	506	7	0	6	2	86	82	4
4	-1	2	92	99	4	1	6	2	403	416	6
5	-1	2	246	254	4	2	6	2	188	201	3
6	-1	2	-56*	12	21	3	6	2	358	355	5
7	-1	2	275	267	5	4	6	2	308	293	5
0	0	2	924	911	4	0	7	2	232	237	4
1	0	2	169	180	3	1	7	2	76	86	5
2	0	2	407	439	6	2	7	2	327	330	4
3	0	2	90	93	3	3	7	2	256	247	4
4	0	2	341	356	5	0	8	2	153	156	4
5	0	2	121	124	4	1	8	2	348	352	6
6	0	2	389	380	6	2	8	2	295	298	4
7	0	2	-60*	17	24	0	9	2	356	356	5
0	1	2	341	365	5	1	9	2	111	110	5
1	1	2	714	780	5	0	10	2	-40*	80	33
2	1	2	334	349	5	1	-11	3	219	218	4
3	1	2	411	423	6	2	-11	3	259	252	4
4	1	2	178	182	3	3	-11	3	305	299	4
5	1	2	348	345	5	4	-11	3	326	316	5
6	1	2	113	106	5	1	-10	3	242	249	4
0	2	2	145	158	2	2	-10	3	278	279	5
1	2	2	459	495	6	3	-10	3	225	217	4
2	2	2	332	352	5	4	-10	3	331	338	5
3	2	2	389	410	6	5	-10	3	247	255	4
4	2	2	295	302	4	1	-9	3	442	419	6
5	2	2	156	154	4	2	-9	3	184	168	4
6	2	2	315	296	5	3	-9	3	366	350	5
0	3	2	512	524	6	4	-9	3	250	252	4
1	3	2	217	230	3	5	-9	3	196	200	4
2	3	2	217	218	4	6	-9	3	259	264	4
3	3	2	331	351	5	1	-8	3	313	294	5
4	3	2	167	163	3	2	-8	3	453	416	7
5	3	2	252	242	4	3	-8	3	213	199	4
0	4	2	240	259	4	4	-8	3	264	268	4
1	4	2	136	133	3	5	-8	3	332	348	5
2	4	2	250	255	4	6	-8	3	154	172	5
3	4	2	248	252	4	1	-7	3	457	399	6
4	4	2	324	323	5	2	-7	3	284	263	4
5	4	2	265	246	4	3	-7	3	613	604	8
0	5	2	417	442	6	4	-7	3	331	339	5
1	5	2	275	285	4	5	-7	3	286	305	4
2	5	2	329	337	5	6	-7	3	429	455	6
3	5	2	322	321	5	7	-7	3	92	98	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
1	-6	3	152	134	3	3	0	3	667	696	7
2	-6	3	834	744	9	4	0	3	342	357	5
3	-6	3	309	291	5	5	0	3	326	334	5
4	-6	3	587	612	8	6	0	3	191	188	4
5	-6	3	369	393	6	0	1	3	336	356	5
6	-6	3	162	166	4	1	1	3	910	969	6
7	-6	3	385	390	6	2	1	3	479	493	7
1	-5	3	893	706	8	3	1	3	581	616	8
2	-5	3	237	207	3	4	1	3	453	465	7
3	-5	3	551	566	8	5	1	3	231	220	3
4	-5	3	410	433	6	6	1	3	263	248	4
5	-5	3	248	257	4	0	2	3	1059	1149	6
6	-5	3	321	338	5	1	2	3	469	491	7
7	-5	3	92	90	6	2	2	3	576	604	7
1	-4	3	169	134	3	3	2	3	389	405	6
2	-4	3	741	705	7	4	2	3	269	275	4
3	-4	3	492	506	6	5	2	3	280	268	4
4	-4	3	448	475	6	6	2	3	116	109	6
5	-4	3	554	567	8	0	3	3	58	63	5
6	-4	3	170	174	4	1	3	3	441	462	6
7	-4	3	384	372	6	2	3	3	254	259	4
1	-3	3	947	798	6	3	3	3	471	477	7
2	-3	3	602	590	7	4	3	3	334	330	5
3	-3	3	675	713	7	5	3	3	206	199	4
4	-3	3	457	486	7	0	4	3	766	826	7
5	-3	3	344	357	5	1	4	3	272	285	4
6	-3	3	402	415	6	2	4	3	418	438	6
7	-3	3	126	114	5	3	4	3	329	333	5
1	-2	3	498	461	6	4	4	3	206	205	4
2	-2	3	869	878	6	5	4	3	160	149	5
3	-2	3	504	518	7	0	5	3	71	74	5
4	-2	3	549	557	8	1	5	3	627	667	8
5	-2	3	422	432	6	2	5	3	237	242	3
6	-2	3	115	117	4	3	5	3	243	241	4
7	-2	3	326	303	5	4	5	3	231	224	4
1	-1	3	564	546	6	0	6	3	540	583	8
2	-1	3	321	327	5	1	6	3	125	128	4
3	-1	3	771	809	7	2	6	3	266	269	4
4	-1	3	621	646	8	3	6	3	111	113	5
5	-1	3	261	263	4	0	7	3	102	98	4
6	-1	3	355	355	5	1	7	3	361	370	6
0	0	3	1139	1118	5	2	7	3	163	164	4
1	0	3	676	703	6	3	7	3	183	183	5
2	0	3	499	535	6	0	8	3	365	382	6

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
1	8	3	44	39	10	1	-4	4	704	577	8
2	8	3	244	234	4	2	-4	4	138	135	3
0	9	3	57*	3	24	3	-4	4	433	430	6
1	9	3	262	260	4	4	-4	4	45*	70	22
1-11	4	4	162	161	5	5	-4	4	422	452	6
2-11	4	4	458	458	7	6	-4	4	90	104	6
3-11	4	4	302	294	5	7	-4	4	252	242	4
4-11	4	4	309	313	5	1	-3	4	70	69	5
1-10	4	4	569	539	9	2	-3	4	734	703	7
2-10	4	4	310	298	5	3	-3	4	87	85	4
3-10	4	4	385	365	6	4	-3	4	373	379	5
4-10	4	4	224	220	5	5	-3	4	82	91	5
5-10	4	4	237	248	4	6	-3	4	265	269	4
1 -9	4	4	52	37	8	1	-2	4	863	789	7
2 -9	4	4	494	457	7	2	-2	4	50	44	6
3 -9	4	4	289	282	5	3	-2	4	547	570	8
4 -9	4	4	333	330	6	4	-2	4	59	60	6
5 -9	4	4	287	289	4	5	-2	4	416	416	6
6 -9	4	4	123	134	6	6	-2	4	205	203	4
1 -8	4	4	584	522	9	1	-1	4	40	36	6
2 -8	4	4	341	318	5	2	-1	4	406	410	6
3 -8	4	4	352	350	5	3	-1	4	30*	24	9
4 -8	4	4	275	276	4	4	-1	4	487	505	7
5 -8	4	4	249	258	4	5	-1	4	36*	50	26
6 -8	4	4	186	196	4	6	-1	4	401	390	6
1 -7	4	4	279	240	4	0	0	4	229	221	3
2 -7	4	4	724	655	10	1	0	4	514	507	7
3 -7	4	4	312	307	5	2	0	4	220	221	4
4 -7	4	4	371	388	5	3	0	4	492	504	7
5 -7	4	4	201	201	4	4	0	4	46	29	7
6 -7	4	4	181	188	4	5	0	4	505	482	7
1 -6	4	4	869	712	9	6	0	4	158	149	5
2 -6	4	4	501	461	7	0	1	4	745	767	6
3 -6	4	4	367	368	6	1	1	4	366	378	5
4 -6	4	4	54*	69	24	2	1	4	528	540	8
5 -6	4	4	274	294	4	3	1	4	0*	14	45
6 -6	4	4	109	110	5	4	1	4	424	422	6
1 -5	4	4	35*	26	29	5	1	4	185	175	4
2 -5	4	4	507	458	7	0	2	4	342	351	5
3 -5	4	4	163	164	3	1	2	4	562	590	7
4 -5	4	4	534	538	8	2	2	4	96	93	4
5 -5	4	4	175	182	4	3	2	4	479	495	7
6 -5	4	4	248	255	4	4	2	4	109	116	5
7 -5	4	4	180	175	4	5	2	4	438	419	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	----	-	-	-	----	-----	----
0	3	4	453	483	6	6	-8	5	395	398	6
1	3	4	180	184	3	1	-7	5	608	514	9
2	3	4	498	513	8	2	-7	5	242	224	4
3	3	4	23*	5	12	3	-7	5	593	572	9
4	3	4	471	466	7	4	-7	5	58	58	7
5	3	4	104	93	5	5	-7	5	407	424	6
0	4	4	320	322	5	6	-7	5	177	175	5
1	4	4	519	537	7	1	-6	5	511	446	7
2	4	4	58	54	6	2	-6	5	776	690	9
3	4	4	416	419	6	3	-6	5	50*	39	25
4	4	4	35*	65	30	4	-6	5	614	622	9
0	5	4	278	285	4	5	-6	5	212	218	4
1	5	4	247	254	4	6	-6	5	321	323	5
2	5	4	395	395	6	1	-5	5	595	512	8
3	5	4	38*	39	10	2	-5	5	242	217	3
4	5	4	449	410	7	3	-5	5	757	733	9
0	6	4	196	202	3	4	-5	5	122	130	4
1	6	4	517	528	8	5	-5	5	513	517	8
2	6	4	-21*	5	13	6	-5	5	102	114	6
3	6	4	397	380	6	1	-4	5	441	387	6
0	7	4	359	378	5	2	-4	5	634	591	8
1	7	4	174	172	4	3	-4	5	106	102	4
2	7	4	469	452	7	4	-4	5	408	418	6
0	8	4	220	219	4	5	-4	5	-52*	36	21
1	8	4	363	363	5	6	-4	5	325	321	5
0	9	4	318	313	4	1	-3	5	557	501	8
1-11	5	5	300	305	4	2	-3	5	352	341	5
2-11	5	5	118	113	6	3	-3	5	583	599	9
3-11	5	5	497	472	7	4	-3	5	148	159	4
1-10	5	5	271	268	4	5	-3	5	415	420	6
2-10	5	5	550	519	9	6	-3	5	176	173	4
3-10	5	5	-32*	14	28	1	-2	5	185	178	3
4-10	5	5	486	495	7	2	-2	5	710	703	8
5-10	5	5	23*	79	46	3	-2	5	78	74	5
1	-9	5	440	410	6	4	-2	5	441	454	7
2	-9	5	182	170	5	5	-2	5	91	82	5
3	-9	5	546	528	8	6	-2	5	322	314	5
4	-9	5	-31*	35	32	1	-1	5	706	678	7
5	-9	5	482	500	7	2	-1	5	248	262	4
1	-8	5	324	290	4	3	-1	5	651	671	9
2	-8	5	584	529	9	4	-1	5	42*	23	21
3	-8	5	118	108	5	5	-1	5	341	340	5
4	-8	5	558	555	9	6	-1	5	16*	17	19
5	-8	5	92	88	6	0	0	5	822	822	7

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	0	5	475	491	7	2	-9	6	348	324	5
2	0	5	582	598	8	3	-9	6	215	212	5
3	0	5	32*	12	22	4	-9	6	438	454	7
4	0	5	284	290	4	5	-9	6	127	132	6
5	0	5	-64*	28	20	1	-8	6	506	466	8
0	1	5	308	322	5	2	-8	6	287	266	4
1	1	5	603	632	8	3	-8	6	296	287	5
2	1	5	165	167	3	4	-8	6	164	161	5
3	1	5	324	338	5	5	-8	6	280	293	5
4	1	5	-52*	13	21	1	-7	6	336	296	5
5	1	5	288	277	5	2	-7	6	377	348	5
0	2	5	707	739	8	3	-7	6	240	232	4
1	2	5	187	203	3	4	-7	6	309	316	5
2	2	5	477	489	8	5	-7	6	111	115	6
3	2	5	160	159	4	1	-6	6	492	443	7
4	2	5	315	302	5	2	-6	6	297	276	5
5	2	5	53	42	9	3	-6	6	407	379	6
0	3	5	416	440	6	4	-6	6	291	296	4
1	3	5	607	631	9	5	-6	6	421	434	6
2	3	5	238	233	4	6	-6	6	117	108	5
3	3	5	343	347	5	1	-5	6	405	355	6
4	3	5	74	69	7	2	-5	6	371	337	5
0	4	5	381	380	6	3	-5	6	402	395	5
1	4	5	327	339	5	4	-5	6	385	380	5
2	4	5	279	278	4	5	-5	6	249	250	4
3	4	5	194	181	4	6	-5	6	350	351	5
4	4	5	239	225	4	1	-4	6	270	240	4
0	5	5	241	246	4	2	-4	6	698	659	9
1	5	5	359	370	5	3	-4	6	376	354	6
2	5	5	107	104	5	4	-4	6	251	255	4
3	5	5	191	180	4	5	-4	6	399	409	6
0	6	5	397	404	6	6	-4	6	37*	63	35
1	6	5	181	184	4	1	-3	6	533	491	8
2	6	5	255	243	4	2	-3	6	281	269	4
0	7	5	214	206	4	3	-3	6	354	353	5
1	7	5	174	172	4	4	-3	6	337	339	5
0	8	5	141	144	5	5	-3	6	149	141	4
1-11	6		209	216	5	6	-3	6	402	383	6
2-11	6		364	358	6	1	-2	6	547	512	7
1-10	6		387	368	6	2	-2	6	462	455	7
2-10	6		91	70	7	3	-2	6	328	329	5
3-10	6		332	333	5	4	-2	6	284	294	4
4-10	6		104	103	7	5	-2	6	382	379	5
1	-9	6	314	288	5	1	-1	6	636	623	8

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
2	-1	6	281	279	4	4	-9	7	272	281	5
3	-1	6	476	483	7	1	-8	7	759	712	10
4	-1	6	380	381	6	2	-8	7	216	205	4
5	-1	6	122	125	5	3	-8	7	355	361	5
0	0	6	717	693	8	4	-8	7	273	286	4
1	0	6	125	126	3	5	-8	7	145	150	6
2	0	6	484	496	7	1	-7	7	98	85	6
3	0	6	308	312	5	2	-7	7	671	635	10
4	0	6	226	219	4	3	-7	7	295	299	4
5	0	6	381	354	6	4	-7	7	270	270	4
0	1	6	-34*	19	19	5	-7	7	346	361	5
1	1	6	496	512	7	1	-6	7	709	656	9
2	1	6	222	226	3	2	-6	7	458	437	7
3	1	6	373	379	6	3	-6	7	330	326	4
4	1	6	391	386	6	4	-6	7	211	215	4
5	1	6	115	108	6	5	-6	7	186	189	4
0	2	6	639	667	9	1	-5	7	251	236	4
1	2	6	426	437	6	2	-5	7	619	598	9
2	2	6	377	381	6	3	-5	7	350	358	5
3	2	6	352	339	6	4	-5	7	265	266	4
4	2	6	145	149	5	5	-5	7	237	239	4
0	3	6	23*	20	33	1	-4	7	693	652	9
1	3	6	480	480	7	2	-4	7	302	301	4
2	3	6	251	244	4	3	-4	7	336	328	5
3	3	6	365	359	5	4	-4	7	220	225	4
4	3	6	335	309	5	5	-4	7	244	245	4
0	4	6	477	484	8	1	-3	7	343	327	5
1	4	6	192	198	3	2	-3	7	477	472	7
2	4	6	311	308	5	3	-3	7	213	217	3
3	4	6	294	274	4	4	-3	7	319	328	5
0	5	6	100	110	5	5	-3	7	209	201	4
1	5	6	408	402	7	1	-2	7	641	615	9
2	5	6	299	283	4	2	-2	7	351	353	5
0	6	6	436	436	7	3	-2	7	426	420	7
1	6	6	198	198	4	4	-2	7	167	161	4
2	6	6	330	313	5	5	-2	7	206	202	4
0	7	6	137	139	5	1	-1	7	336	340	5
1	7	6	320	310	5	2	-1	7	424	428	6
1-10	7	7	537	529	8	3	-1	7	218	226	4
2-10	7	7	286	284	5	4	-1	7	287	269	5
3-10	7	7	334	353	5	5	-1	7	121	111	5
1	-9	7	200	191	5	0	0	7	147	144	4
2	-9	7	503	508	7	1	0	7	421	416	6
3	-9	7	267	281	5	2	0	7	176	182	4

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
3	0	7	388	378	6	4	-5	8	95	91	6
4	0	7	113	119	5	1	-4	8	248	235	3
0	1	7	512	509	8	2	-4	8	587	586	9
1	1	7	238	243	3	3	-4	8	-34*	14	10
2	1	7	344	351	5	4	-4	8	443	453	6
3	1	7	81	80	6	1	-3	8	667	631	10
4	1	7	312	287	4	2	-3	8	199	194	4
0	2	7	60	52	7	3	-3	8	577	568	9
1	2	7	389	391	6	4	-3	8	29*	49	33
2	2	7	-71*	23	16	1	-2	8	235	227	4
3	2	7	367	357	5	2	-2	8	528	521	8
0	3	7	302	307	5	3	-2	8	-39*	14	24
1	3	7	-50*	5	21	4	-2	8	341	344	5
2	3	7	315	308	5	1	-1	8	409	409	6
3	3	7	42*	52	28	2	-1	8	138	141	4
0	4	7	0*	37	46	3	-1	8	523	529	8
1	4	7	335	340	5	4	-1	8	122	118	5
2	4	7	85	73	6	0	0	8	629	633	8
0	5	7	280	279	4	1	0	8	196	194	4
1	5	7	127	120	5	2	0	8	543	534	8
2	5	7	282	279	5	3	0	8	108	106	5
0	6	7	120	117	5	4	0	8	338	331	5
1	6	7	252	239	4	0	1	8	433	437	6
0	7	7	184	183	5	1	1	8	556	549	9
1-10	8		-66*	28	23	2	1	8	73	76	7
2-10	8		329	342	5	3	1	8	418	402	6
1	-9	8	343	358	5	0	2	8	423	438	6
2	-9	8	25*	22	19	1	2	8	151	147	4
3	-9	8	384	394	6	2	2	8	363	358	6
1	-8	8	149	136	5	3	2	8	30*	31	36
2	-8	8	498	501	8	0	3	8	149	143	4
3	-8	8	-53*	20	23	1	3	8	420	408	6
4	-8	8	390	415	6	2	3	8	56*	66	29
1	-7	8	390	382	7	0	4	8	391	393	5
2	-7	8	57*	74	30	1	4	8	123	120	5
3	-7	8	455	464	7	2	4	8	381	352	6
4	-7	8	58*	55	25	0	5	8	188	185	4
1	-6	8	162	150	4	1	5	8	348	332	5
2	-6	8	545	555	8	0	6	8	309	294	4
3	-6	8	70	70	8	1	-9	9	173	181	6
4	-6	8	454	450	7	2	-9	9	381	406	6
1	-5	8	440	429	6	1	-8	9	473	475	7
2	-5	8	170	169	4	2	-8	9	46*	50	35
3	-5	8	595	592	9	3	-8	9	359	371	5

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF	H	K	L	Fobs	Fcalc	SigF
-	-	-	----	-----	-----	-	-	-	----	-----	-----
1	-7	9	196	189	5	1	-6	10	487	493	7
2	-7	9	433	447	7	2	-6	10	276	280	5
3	-7	9	59	65	10	3	-6	10	306	308	4
1	-6	9	396	394	5	1	-5	10	234	235	4
2	-6	9	52*	65	32	2	-5	10	406	431	6
3	-6	9	331	333	5	3	-5	10	370	380	6
4	-6	9	-34*	44	29	1	-4	10	578	589	8
1	-5	9	36*	25	12	2	-4	10	348	354	6
2	-5	9	238	238	4	3	-4	10	174	185	5
3	-5	9	57*	51	26	1	-3	10	229	228	4
4	-5	9	306	311	4	2	-3	10	378	373	6
1	-4	9	347	335	6	3	-3	10	259	255	4
2	-4	9	137	127	5	1	-2	10	414	422	6
3	-4	9	346	348	5	2	-2	10	249	244	4
4	-4	9	113	111	6	3	-2	10	202	198	5
1	-3	9	250	250	4	1	-1	10	252	257	4
2	-3	9	271	269	4	2	-1	10	265	269	4
3	-3	9	168	164	5	0	0	10	81	95	7
4	-3	9	286	282	4	1	0	10	384	393	6
1	-2	9	188	188	4	2	0	10	181	186	5
2	-2	9	235	237	4	0	1	10	399	389	6
3	-2	9	276	279	4	1	1	10	229	225	4
1	-1	9	180	178	4	2	1	10	150	149	5
2	-1	9	238	238	4	0	2	10	137	141	5
3	-1	9	177	175	5	1	2	10	266	260	4
0	0	9	361	377	5	0	3	10	260	256	4
1	0	9	268	276	4	1	-7	11	329	340	5
2	0	9	264	264	4	1	-6	11	57*	2	25
3	0	9	255	250	4	1	-5	11	343	354	4
0	1	9	123	129	5	2	-5	11	23*	37	46
1	1	9	424	416	6	1	-4	11	112	109	6
2	1	9	163	159	5	2	-4	11	384	395	6
0	2	9	363	367	5	1	-3	11	396	404	6
1	2	9	209	211	4	2	-3	11	32*	28	36
2	2	9	261	248	4	1	-2	11	49*	25	24
0	3	9	137	138	5	2	-2	11	431	425	6
1	3	9	383	361	6	1	-1	11	406	416	7
0	4	9	409	397	6	0	0	11	345	349	5
1	4	9	196	184	4	1	0	11	50*	42	28
0	5	9	92	111	8	0	1	11	91	98	7
1	-8	10	465	477	7	0	2	11	392	375	6
2	-8	10	307	319	5						
1	-7	10	217	213	5						
2	-7	10	474	497	7						

Reflections flagged with an asterisk were considered unobserved.

**COSKRENITE-(Ce), (Ce,Nd,La)₂(SO₄)₂(C₂O₄)•8H₂O,
A NEW RARE-EARTH OXALATE MINERAL FROM ALUM CAVE BLUFF,
TENNESSEE: CHARACTERIZATION AND CRYSTAL STRUCTURE***

DONALD R. PEACOR[§], ROLAND C. ROUSE AND ERIC J. ESSENE

Department of Geological Sciences, The University of Michigan, Ann Arbor, Michigan 48109-1063, U.S.A.

ROBERT J. LAUF

Metals and Ceramics Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831, U.S.A.

ABSTRACT

The new mineral species coskrenite-(Ce) [(Ce,Nd,La)₂(SO₄)₂(C₂O₄)•8H₂O] occurs as transparent, pink- to cream-colored clusters of tabular crystals 0.1 to 1.0 mm across embedded within, or in cavities in, epsomite and "hair salts" (principally apjohnite) at Alum Cave Bluff, Great Smoky Mountains, Tennessee. A complex suite of sulfates occurs in the soil or on the ceiling of a rock shelter, as a result of weathering of pyritic phyllite and evaporation of the resulting solutions. Coskrenite-(Ce) is closely associated with two other new minerals, levinsonite-(Y) [(Y,Nd,Ce)Al(SO₄)₂(C₂O₄)•12H₂O] and zugshunite-(Ce) [(Ce,Nd,La)Al(SO₄)₂(C₂O₄)•12H₂O]. They are the first natural examples of rare-earth oxalate salts. Coskrenite-(Ce) is triclinic, space group *P* $\bar{1}$, *a* 6.007(1), *b* 8.368(2), *c* 9.189(2) Å, α 99.90(2), β 105.55(2), γ 107.71(2)°, *V* 407.4(2) Å³, and *Z* = 1. The basic structural unit is a four-membered ring of two REE(O,H₂O)₉ polyhedra and two SO₄ tetrahedra, each sulfate tetrahedron sharing two of its vertices with two REE polyhedra. These rings are linked into chains, and adjacent chains are linked by oxalate groups and hydrogen bonds into sheets oriented parallel to {001}. Adjacent sheets are weakly bonded together through hydrogen bonds. The REE site is nine-coordinated by a distorted monocapped square antiprism of five O and four H₂O, with an average REE-O distance of 2.518 Å. The strongest lines in the powder-diffraction pattern [*d* in Å(*hkl*)] are: 5.48(100)($\bar{1}\bar{1}0$), 8.52(70)(001), 6.72(60)(01 $\bar{1}$), 3.84(60)(020,110), 4.26(50)(002,01 $\bar{2}$), 3.35(40)(02 $\bar{2}$), and 2.744(40)(12 $\bar{2}$,2 $\bar{1}$ 2,1 $\bar{3}0$,2 $\bar{2}0$). Coskrenite-(Ce) is biaxial negative, α = 1.544(4), β = 1.578(4), γ = 1.602(4), 2*V*(obs.) = 65(10)°, 2*V*(calc.) = 69(3)° dispersion medium (*r* > *v*), and *Z'* \wedge *c* = 21° (in plane of cleavage). The mineral is named after its discoverer, T. Dennis Coskren.

Keywords: coskrenite-(Ce), new mineral species, rare-earth oxalate, X-ray data, crystal-structure determination, Alum Cave Bluff, Tennessee.

SOMMAIRE

La coskrenite-(Ce) [(Ce,Nd,La)₂(SO₄)₂(C₂O₄)•8H₂O], nouvelle espèce minérale, se présente en amas de cristaux transparents tabulaires, de couleur rose ou crème, de 0.1 à 1.0 mm, encastés dans l'epsomite et les sels capillaires, surtout l'apjohnite, à Alum Cave Bluff, dans les montagnes Great Smoky, au Tennessee. Une association complexe de sulfates se trouve dans le sol ou sur le plafond d'un abri naturel, résultat de l'altération de surface de phyllite pyriteuse et de l'évaporation des solutions. La coskrenite-(Ce) est étroitement associée à deux autres nouvelles espèces minérales, levinsonite-(Y) [(Y,Nd,Ce)Al(SO₄)₂(C₂O₄)•12H₂O] et zugshunite-(Ce) [(Ce,Nd,La)Al(SO₄)₂(C₂O₄)•12H₂O]. Ce sont les premiers exemples naturels d'oxalates de terres rares (TR). La coskrenite-(Ce) est triclinique, groupe spatial *P* $\bar{1}$, *a* 6.007(1), *b* 8.368(2), *c* 9.189(2) Å, α 99.90(2), β 105.55(2), γ 107.71(2)°, *V* 407.4(2) Å³, et *Z* = 1. L'unité structurale de base est un anneau à quatre membres, composé de deux polyèdres TR(O,H₂O)₉ et deux tétraèdres SO₄, chaque tétraèdre partageant deux des coins avec deux polyèdres à terres rares. Ces anneaux sont agencés en chaînes, et les chaînes adjacentes sont liées par des groupes oxalate et des liaisons hydrogène pour former des feuillets orientés parallèles à {001}. Les feuillets adjacents sont faiblement interliés grâce à d'autres liaisons hydrogène. Le site occupé par les terres rares a une coordination neuf, les liaisons définissant un antiprisme carré difforme à terminaison unique, avec cinq atomes d'oxygène et quatre molécules H₂O, et une distance TR-O moyenne de 2.518 Å. Les raies les plus intenses du spectre de diffraction (méthode des poudres) [*d* en Å(*hkl*)] sont: 5.48(100)($\bar{1}\bar{1}0$), 8.52(70)(001), 6.72(60)(01 $\bar{1}$), 3.84(60)(020,110), 4.26(50)(002,01 $\bar{2}$), 3.35(40)(02 $\bar{2}$), et 2.744(40)(12 $\bar{2}$,2 $\bar{1}$ 2,1 $\bar{3}0$,2 $\bar{2}0$). La coskrenite-(Ce) est biaxe négative, α = 1.544(4), β = 1.578(4),

* Contribution No. 515 from the Mineralogical Laboratory, Department of Geological Sciences, The University of Michigan.

§ E-mail address: drpeacor@umich.edu