

Krautite, $\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})(\text{AsO}_3\text{OH})$: crystal structure, hydrogen bonding and relations with haidingerite and pharmacolite

MICHELE CATTI AND MARINELLA FRANCHINI-ANGELA

Istituto di Mineralogia, Cristallografia e Geochimica "G. Spezia"
Università di Torino, Via S. Massimo 22, 10123 Torino, Italy

Abstract

The crystal structure of synthetic krautite was solved (direct methods) and refined isotropically ($R = 0.112$) in space group $P2_1$ with 2294 reflections measured on a single-crystal diffractometer, with $\text{MoK}\alpha$ radiation. The unit cell parameters are: $a = 8.012(2)$, $b = 15.956(4)$, $c = 6.801(2)\text{Å}$, $\beta = 96.60(3)^\circ$; $Z = 8$. A strong $P2_1/n$ pseudosymmetry appears in the structure, yet the average pseudo-center is slightly shifted from the correct position $1/4, 0, 1/4$ in space group $P2_1/n$. The structure is built up by (010) layers of AsO_4 and MnO_6 coordination polyhedra. In each layer, MnO_6 octahedra share edges to form $[10\bar{1}]$ chains, which sandwich the AsO_4 tetrahedra. Adjacent layers are related by the screw axis and are linked by four out of twelve independent hydrogen bonds; two of them are acidic and two are donated by water molecules. One of the latter hydrogen bonds is probably bifurcated, since the water molecule is involved in two contacts 2.92 and 3.08 Å long. Haidingerite ($\text{CaHAsO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$) and pharmacolite ($\text{CaHAsO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) show similar structures formed by layers of coordination polyhedra connected by hydrogen bonds. For the single-layer topology, krautite resembles pharmacolite (chain-like structure) more than haidingerite (network-like structure), since the increase of coordination number from Mn^{2+} to Ca^{2+} is compensated by the increase of water content.

Introduction

In a series of structural and crystal-chemical investigations on mineral arsenates containing hydrogen bonds (Catti *et al.*, 1977), the manganese arsenate krautite, recently described and characterized as a new mineral by Fontan *et al.* (1975), has been examined. The other known natural manganese arsenates are a large group of basic arsenates (Moore, 1967), manganese hoernesite $(\text{Mn, Mg})_3(\text{AsO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$, and the new mineral $\text{CaMn}(\text{HAsO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (Permingeat *et al.*, in preparation). The synthetic crystalline phases reported in the system $\text{MnO}-\text{As}_2\text{O}_5-\text{H}_2\text{O}$ (Pascal, 1966, p. 923) are $\text{Mn}_3(\text{AsO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{MnHAsO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Mn}(\text{H}_2\text{AsO}_4)_2$, $\text{Mn}(\text{H}_2\text{AsO}_4)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, and $\text{MnHAsO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$; the last compound is probably isomorphous with brassite, $\text{MgHAsO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, the structure of which is known (Protas and Gindt, 1976). Krautite is the first acid manganese arsenate studied structurally; we aim to clarify the crystal-chemical relationships with its calcium homolog haidingerite, $\text{CaHAsO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (Cassien *et al.*, 1966; Calleri and Ferraris, 1967). Indeed, both minerals show very similar cell parameters and

strong mica-like (010) cleavages, so that analogous layered structure types seem appropriate, in spite of the fact that the symmetries are different (monoclinic for krautite and orthorhombic for haidingerite), and important differences appear in their X-ray powder patterns.

Experimental

Since good quality single crystals could not be found in the natural samples of krautite (Fontan *et al.*, 1975), synthetic crystalline $\text{MnHAsO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ was prepared. By mixing aqueous solutions of MnCl_2 and KH_2AsO_4 a transparent gel was obtained (Deiss, 1914), from which many small pink balls (about 2 mm diameter) precipitated; each ball was formed by tiny, crystalline packets of $\text{MnHAsO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Every packet contained very thin {010} lamellae, with frequent polysynthetic twinning. With great difficulty an irregular crystalline fragment $0.30 \times 0.10 \times 0.02$ mm could be isolated, and was used for all measurements.

By means of Weissenberg photographs and single-crystal diffractometry the monoclinic unit cell

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA ** MNHASO4.H2O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
2	0	0	310	466	185	1	6	0	218	185	99	6	12	0	161	166	126
4	0	0	1140	1808	184	2	6	0	238	263	29	7	12	0	458	460	284
5	0	0	130	134	185	3	6	0	278	319	65	1	13	0	307	297	87
6	0	0	386	591	183	4	6	0	1088	1209	8	2	13	0	559	569	5
7	0	0	192	300	6	5	6	0	439	458	285	5	13	0	375	402	104
8	0	0	229	391	187	6	6	0	122	123	256	6	13	0	503	523	1
10	0	0	556	858	8	7	6	0	402	429	127	8	13	0	514	478	173
1	1	0	365	584	273	8	6	0	151	140	351	9	13	0	422	436	275
2	1	0	1194	1867	1	10	6	0	478	541	182	0	14	0	771	749	180
3	1	0	696	1150	94	1	7	0	326	336	89	1	14	0	471	494	275
4	1	0	249	338	222	2	7	0	460	483	357	2	14	0	345	388	1
5	1	0	557	812	105	3	7	0	789	852	269	3	14	0	127	76	304
6	1	0	263	376	353	4	7	0	678	738	11	4	14	0	289	312	187
7	1	0	789	1168	278	5	7	0	352	373	307	5	14	0	391	402	101
8	1	0	247	351	203	6	7	0	335	345	182	7	14	0	208	173	134
9	1	0	190	284	307	7	7	0	774	819	98	8	14	0	552	570	357
10	1	0	222	317	132	8	7	0	150	141	25	1	15	0	331	301	282
0	2	0	1515	2667	2	9	7	0	398	447	98	2	15	0	111	84	137
1	2	0	390	567	275	10	7	0	221	245	352	3	15	0	867	890	274
2	2	0	148	194	113	0	8	0	1335	1400	183	4	15	0	345	326	357
3	2	0	465	622	262	1	8	0	258	301	273	6	15	0	235	171	186
4	2	0	969	1373	187	2	8	0	192	239	195	7	15	0	636	605	100
5	2	0	1277	1793	97	3	8	0	769	850	92	0	16	0	448	507	184
7	2	0	247	304	67	4	8	0	656	691	7	1	16	0	196	210	277
8	2	0	111	145	259	5	8	0	962	1003	275	2	16	0	155	199	343
9	2	0	542	713	282	6	8	0	225	261	356	3	16	0	254	231	67
10	2	0	276	390	349	7	8	0	152	97	142	5	16	0	242	261	269
11	2	0	179	258	269	8	8	0	237	307	175	6	16	0	330	267	0
1	3	0	257	382	89	9	8	0	207	271	130	7	16	0	333	372	113
2	3	0	2180	3101	3	1	9	0	683	706	273	1	17	0	496	485	275
3	3	0	978	1167	85	2	9	0	1161	1199	185	2	17	0	543	591	183
4	3	0	450	526	188	3	9	0	507	536	99	3	17	0	704	709	273
5	3	0	284	256	167	4	9	0	120	116	154	4	17	0	405	398	0
6	3	0	110	161	173	5	9	0	169	140	301	5	17	0	165	149	43
8	3	0	448	622	183	6	9	0	135	207	23	6	17	0	266	274	169
9	3	0	307	246	307	7	9	0	126	137	294	7	17	0	247	265	111
10	3	0	245	307	192	8	9	0	335	320	340	1	18	0	329	376	96
11	3	0	154	191	70	9	9	0	534	551	102	2	18	0	568	538	189
0	4	0	1191	1568	184	0	10	0	178	202	8	3	18	0	121	33	16
1	4	0	744	925	271	1	10	0	384	394	275	4	18	0	274	239	11
2	4	0	574	707	16	2	10	0	402	146	208	5	18	0	743	753	273
3	4	0	996	1135	273	3	10	0	158	167	111	6	18	0	435	406	2
4	4	0	224	295	353	4	10	0	313	359	356	1	19	0	390	408	271
5	4	0	1363	1571	91	5	10	0	116	74	66	2	19	0	508	485	187
7	4	0	403	475	111	6	10	0	120	139	39	3	19	0	187	189	84
8	4	0	243	273	346	7	10	0	449	489	290	4	19	0	423	346	186
9	4	0	366	435	290	8	10	0	593	615	180	0	20	0	477	478	0
10	4	0	370	492	194	9	10	0	341	329	120	1	20	0	643	661	95
11	4	0	312	410	264	10	10	0	353	351	6	2	20	0	235	221	184
1	5	0	991	1187	91	1	11	0	119	58	259	3	20	0	529	546	270
2	5	0	2013	2360	3	2	11	0	265	235	188	4	20	0	138	79	241
3	5	0	1031	1194	277	3	11	0	477	499	93	5	20	0	446	478	280
4	5	0	365	452	17	4	11	0	237	239	169	3	21	0	528	547	87
5	5	0	570	639	267	6	11	0	677	728	3	0	22	0	489	461	4
6	5	0	718	830	188	7	11	0	641	640	289	1	22	0	486	466	94
7	5	0	806	915	101	0	12	0	147	132	17	2	22	0	269	256	10
8	5	0	280	326	170	3	12	0	111	154	257	1	0	1	1085	915	187
10	5	0	197	210	267	4	12	0	113	97	318	1	0	-1	472	416	3
0	6	0	1331	1608	185	5	12	0	598	634	98	2	0	1	160	145	185

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA ** MNHASO4.H2O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
2	0	-1	113	124	185	3	-3	-1	410	373	186	3	-6	-1	260	224	201
3	0	1	528	474	4	4	3	1	521	465	91	4	6	1	773	717	233
3	0	-1	881	693	3	4	-3	-1	319	274	79	4	-6	-1	964	1073	276
4	0	1	172	159	12	5	3	1	310	299	276	5	6	1	240	226	315
5	0	1	894	900	183	5	-3	-1	427	446	0	5	-6	-1	267	326	183
6	0	1	200	208	182	6	3	1	463	448	31	6	6	1	1303	1197	90
7	0	1	552	556	4	6	-3	-1	457	414	277	6	-6	-1	130	160	281
7	0	-1	917	959	5	7	3	1	922	913	189	7	6	1	645	601	188
8	0	1	108	55	212	7	-3	-1	493	557	190	7	-6	-1	394	444	187
9	0	1	573	658	6	8	3	1	328	344	234	8	6	1	351	339	37
9	0	-1	875	937	188	9	3	1	610	654	1	8	-6	-1	552	648	98
10	0	1	249	264	5	9	-3	-1	500	573	183	9	6	1	317	351	201
11	0	1	623	732	189	10	-3	-1	239	326	105	9	-6	-1	704	843	8
11	0	-1	219	287	187	11	-3	-1	650	790	9	10	6	1	268	265	254
0	1	1	79	45	266	0	4	1	466	441	96	0	7	1	543	567	282
1	1	1	152	134	236	1	4	1	2155	2015	1	1	7	1	157	113	342
1	-1	-1	612	611	2	1	-4	-1	249	261	199	1	-7	-1	1578	1753	188
2	1	1	409	333	122	2	4	1	281	278	75	2	7	1	717	709	73
2	-1	-1	728	707	274	3	4	1	468	400	135	2	-7	-1	582	683	91
3	1	1	335	288	163	3	-4	-1	565	522	192	3	7	1	1518	1450	5
3	-1	-1	383	330	191	4	4	1	446	440	215	3	-7	-1	287	317	13
4	1	1	552	518	284	4	-4	-1	859	858	95	4	7	1	861	794	79
4	-1	-1	88	118	303	5	4	1	547	504	187	4	-7	-1	221	284	258
5	1	1	451	415	306	6	4	1	657	619	273	5	7	1	204	147	96
5	-1	-1	174	174	358	6	-4	-1	285	300	278	6	7	1	825	756	212
6	1	1	435	482	68	7	4	1	492	496	219	6	-7	-1	259	326	286
6	-1	-1	749	707	95	7	-4	-1	383	429	186	7	7	1	255	204	270
7	1	1	608	628	168	8	4	1	493	531	66	7	-7	-1	484	528	5
7	-1	-1	370	402	175	8	-4	-1	137	86	273	8	7	1	311	283	279
8	-1	-1	463	518	278	9	4	1	335	360	151	8	-7	-1	235	280	103
9	1	1	504	543	36	9	-4	-1	657	740	4	9	7	1	519	536	205
9	-1	-1	374	397	194	10	4	1	206	209	255	9	-7	-1	172	185	36
10	1	1	325	377	267	10	-4	-1	238	310	97	10	7	1	153	128	45
10	-1	-1	359	387	100	0	5	1	110	82	123	0	8	1	543	608	285
11	-1	-1	460	517	2	1	5	1	395	384	108	1	8	1	1103	1166	183
0	2	1	188	174	94	1	-5	-1	356	415	183	1	-8	-1	274	353	51
1	2	1	756	660	356	2	5	1	209	183	294	2	8	1	1021	1023	261
1	-2	-1	142	137	268	2	-5	-1	1082	1125	94	2	-8	-1	151	163	98
2	2	1	1329	1118	93	3	5	1	1437	1294	358	3	8	1	511	523	52
2	-2	-1	511	485	274	3	-5	-1	162	174	20	3	-8	-1	415	573	3
4	2	1	153	132	288	4	5	1	1803	1624	90	4	8	1	356	377	280
4	-2	-1	1501	1342	94	4	-5	-1	191	161	104	4	-8	-1	1279	1580	278
5	2	1	1040	978	175	5	5	1	506	465	187	5	8	1	497	456	12
6	2	1	964	892	271	5	-5	-1	189	227	15	5	-8	-1	354	424	192
6	-2	-1	287	317	275	6	5	1	165	133	215	6	8	1	1650	1552	87
7	2	1	451	449	289	6	-5	-1	1185	1382	277	6	-8	-1	105	3	169
7	-2	-1	383	383	6	7	5	1	372	342	215	7	8	1	389	365	182
8	2	1	346	369	91	7	-5	-1	121	125	206	8	8	1	175	135	223
8	-2	-1	282	281	288	8	5	1	792	734	265	8	-8	-1	754	845	98
9	2	1	395	408	64	8	-5	-1	258	316	101	9	8	1	430	356	257
9	-2	-1	196	241	216	9	5	1	175	218	310	9	-8	-1	174	181	6
10	2	1	146	142	36	10	5	1	191	194	39	0	9	1	373	426	293
10	-2	-1	293	362	106	10	-5	-1	121	39	174	1	9	1	307	401	264
0	3	1	69	85	134	0	6	1	75	24	341	1	-9	-1	792	1017	192
1	3	1	462	411	118	1	6	1	829	834	4	2	9	1	970	1083	80
1	-3	-1	954	922	10	1	-6	-1	169	163	70	2	-9	-1	420	555	273
2	3	1	427	377	239	2	6	1	751	680	269	3	9	1	1150	1192	9
2	-3	-1	204	197	104	2	-6	-1	474	478	83	3	-9	-1	242	282	203
3	3	1	514	425	352	3	6	1	451	403	89	4	9	1	906	870	273

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
4	-9	-1	403	513	271	9	-12	-1	782	770	193	6	16	1	264	248	248
5	9	1	695	627	23	0	13	1	926	1066	91	6	-16	-1	119	63	124
6	9	1	644	589	237	1	-13	-1	1517	1683	8	7	16	1	171	222	75
6	-9	-1	992	1143	98	2	13	1	820	950	268	0	17	1	206	244	239
7	-9	-1	839	906	8	2	-13	-1	757	810	275	1	17	1	264	304	30
8	9	1	653	586	91	3	13	1	1042	1277	193	1	-17	-1	435	421	193
9	9	1	841	834	184	3	-13	-1	284	285	195	2	-17	-1	565	543	86
9	-9	-1	231	187	358	4	13	1	508	670	256	3	17	1	169	125	26
10	-9	-1	187	207	273	4	-13	-1	496	541	89	3	-17	-1	789	784	16
0	10	1	578	823	275	5	13	1	211	273	35	4	17	1	444	439	75
1	10	1	1618	2125	184	5	-13	-1	302	292	186	5	17	1	645	679	193
1	-10	-1	218	256	11	6	13	1	240	266	16	5	-17	-1	303	269	193
2	10	1	741	887	263	6	-13	-1	355	317	91	6	17	1	312	328	102
2	-10	-1	546	688	267	7	13	1	245	213	112	6	-17	-1	567	558	280
3	10	1	327	369	27	7	-13	-1	335	311	196	7	17	1	383	435	353
3	-10	-1	889	1046	9	8	13	1	304	288	83	7	-17	-1	587	556	186
4	10	1	741	732	60	8	-13	-1	388	389	97	0	18	1	524	532	81
4	-10	-1	334	388	277	9	13	-1	288	296	201	1	18	1	415	412	13
5	10	1	739	697	23	0	14	1	327	350	125	1	-18	-1	279	287	34
5	-10	-1	128	158	355	1	14	1	530	575	4	2	18	1	242	257	110
6	10	1	331	307	72	1	-14	-1	409	428	217	2	-18	-1	806	815	94
7	10	1	257	265	357	2	14	1	708	788	73	3	18	1	463	473	14
7	-10	-1	256	253	25	3	14	1	805	928	202	3	-18	-1	544	554	190
8	10	1	399	393	172	3	-14	-1	276	300	188	4	18	1	465	472	271
8	-10	-1	206	199	90	4	14	1	188	301	87	4	-18	-1	311	248	293
9	10	1	395	333	312	4	-14	-1	1112	1133	96	5	18	1	532	518	202
9	-10	-1	768	740	190	5	14	1	222	330	358	5	-18	-1	589	577	193
10	-10	-1	143	161	96	5	-14	-1	849	851	10	6	18	1	281	271	114
0	11	1	505	662	82	6	14	1	504	675	271	0	19	1	708	704	271
1	11	1	333	479	235	6	-14	-1	233	244	92	1	19	1	178	198	358
1	-11	-1	780	973	4	7	14	1	379	471	14	1	-19	-1	653	650	195
2	-11	-1	1017	1193	272	7	-14	-1	420	413	196	2	19	1	524	508	93
3	11	1	245	263	185	8	14	1	354	352	282	2	-19	-1	350	358	87
3	-11	-1	745	809	195	8	-14	-1	658	627	276	3	19	1	430	420	29
4	11	1	1266	1398	263	0	15	1	546	602	102	4	19	1	153	114	339
4	-11	-1	117	117	299	1	15	1	289	327	42	4	-19	-1	360	353	280
5	11	1	653	673	23	1	-15	-1	697	715	10	5	19	1	195	162	255
6	11	1	292	298	297	2	15	1	746	817	259	5	-19	-1	251	233	3
6	-11	-1	1196	1213	99	3	15	1	682	754	200	0	20	1	192	216	309
7	11	1	265	243	138	3	-15	-1	655	679	11	1	20	1	253	252	177
7	-11	-1	372	369	10	4	15	1	323	361	90	1	-20	-1	233	266	30
8	11	1	822	790	101	4	-15	-1	602	615	95	2	20	1	137	154	228
9	11	1	276	258	153	5	15	1	452	520	179	3	20	1	444	440	12
0	12	1	490	562	253	5	-15	-1	502	480	190	3	-20	-1	132	41	56
1	12	1	851	1073	187	6	15	1	242	348	65	4	20	1	178	174	297
1	-12	-1	221	241	262	6	-15	-1	596	579	283	5	-20	-1	567	570	193
2	12	1	108	122	2	7	15	1	260	402	22	0	21	1	467	472	280
2	-12	-1	744	823	271	7	-15	-1	660	630	192	1	21	1	131	100	261
3	12	1	355	494	217	8	15	1	312	344	308	1	-21	-1	149	136	184
3	-12	-1	496	560	17	0	16	1	807	851	95	2	21	1	385	351	87
4	12	1	769	979	72	1	16	1	983	1016	8	2	-21	-1	166	88	102
4	-12	-1	815	862	98	2	16	1	653	681	85	3	21	1	149	179	32
5	12	1	506	600	20	2	-16	-1	965	1002	96	3	-21	-1	363	389	202
5	-12	-1	732	765	8	3	16	1	236	258	193	0	22	1	356	364	277
6	12	1	530	534	278	3	-16	-1	688	754	193	0	22	1	348	353	192
6	-12	-1	271	277	88	4	16	1	317	301	242	1	-22	-1	449	419	287
7	12	1	521	535	358	4	-16	-1	337	367	87	0	0	2	190	193	185
8	12	1	218	254	184	5	16	1	254	302	247	1	0	-2	277	252	4
8	-12	-1	509	489	279	5	-16	-1	189	188	15	2	0	2	2542	2229	5

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA ** MNH₂SO₄·H₂O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
2	0	-2	3034	2767	184	2	3	2	307	258	326	1	-6	-2	766	721	257
3	0	2	345	276	6	2	-3	-2	559	504	11	2	6	2	1940	1791	193
3	0	-2	169	164	6	3	3	2	668	553	3	2	-6	-2	1500	1471	13
4	0	-2	336	296	4	3	-3	-2	548	479	161	3	6	2	409	388	190
5	0	2	1002	902	186	4	3	2	1395	1274	10	3	-6	-2	316	335	194
5	0	-2	498	474	185	4	-3	-2	1593	1501	5	4	6	2	261	227	22
6	0	2	267	288	185	5	3	2	470	431	357	4	-6	-2	274	279	226
6	0	-2	106	62	354	5	-3	-2	297	301	229	5	6	2	718	639	14
7	0	2	181	197	185	6	3	2	382	348	290	5	-6	-2	308	307	339
8	0	2	468	416	189	6	-3	-2	324	296	333	6	6	2	475	411	42
8	0	-2	858	749	7	7	3	2	869	771	169	6	-6	-2	270	235	175
9	0	2	613	596	5	7	-3	-2	387	384	305	7	6	2	265	260	12
9	0	-2	135	78	5	9	3	2	170	221	222	7	-6	-2	365	419	78
10	0	-2	176	191	11	10	3	2	532	516	166	8	6	2	479	454	315
0	1	2	2880	2487	185	10	-3	-2	824	790	191	8	-6	-2	344	342	185
1	1	2	459	396	253	11	-3	-2	259	259	103	9	6	2	533	524	124
1	-1	-2	1010	905	83	0	4	2	539	511	284	9	-6	-2	627	644	99
2	1	2	926	792	89	1	4	2	89	60	91	10	6	2	211	215	49
2	-1	-2	809	750	72	1	-4	-2	501	456	115	10	-6	-2	256	244	189
3	1	2	628	514	282	2	4	2	1184	1063	183	0	7	2	845	802	3
3	-1	-2	623	582	102	2	-4	-2	565	530	1	1	7	2	319	300	19
4	1	2	683	578	1	3	4	2	1539	1329	261	1	-7	-2	409	379	227
4	-1	-2	618	525	357	3	-4	-2	2174	2033	270	2	7	2	898	840	241
5	1	2	1603	1413	88	4	4	2	873	758	50	2	-7	-2	822	810	226
5	-1	-2	2292	2073	274	4	-4	-2	877	816	213	3	7	2	379	367	137
6	1	2	237	222	297	5	4	2	866	785	311	3	-7	-2	669	702	291
6	-1	-2	447	369	350	5	-4	-2	909	853	285	4	7	2	383	334	206
7	1	2	610	561	142	6	4	2	303	303	170	4	-7	-2	269	298	352
7	-1	-2	608	561	285	6	-4	-2	949	885	2	5	7	2	769	676	258
8	1	2	332	299	305	7	4	2	1027	919	96	5	-7	-2	734	742	97
8	-1	-2	235	196	351	7	-4	-2	1280	1175	96	6	7	2	415	366	46
9	1	2	740	703	275	8	4	2	203	173	321	6	-7	-2	169	187	28
9	-1	-2	1060	917	92	8	-4	-2	288	290	188	7	7	2	554	521	303
10	1	2	308	266	202	9	4	2	434	386	108	7	-7	-2	453	496	95
10	-1	-2	526	461	188	9	-4	-2	552	537	94	8	7	2	553	543	170
11	-1	-2	494	470	97	10	4	2	414	406	324	8	-7	-2	585	662	187
0	2	2	1470	1272	270	10	-4	-2	261	218	181	9	7	2	477	454	133
1	2	2	497	433	60	11	-4	-2	192	200	270	9	-7	-2	308	339	285
1	-2	-2	839	761	74	0	5	2	397	403	183	10	7	2	321	323	9
2	2	2	819	764	13	1	5	2	460	391	72	10	-7	-2	518	571	11
2	-2	-2	1277	1218	191	1	-5	-2	992	906	270	0	8	2	538	521	99
3	2	2	745	652	294	2	5	2	832	725	247	1	8	2	542	520	268
3	-2	-2	982	930	289	2	-5	-2	498	451	232	1	-8	-2	885	898	276
4	2	2	627	546	92	3	5	2	1033	933	68	2	8	2	995	974	191
4	-2	-2	277	251	278	3	-5	-2	1192	1124	258	2	-8	-2	1197	1231	7
5	2	2	821	725	236	4	5	2	896	814	30	3	8	2	679	625	84
5	-2	-2	788	743	254	4	-5	-2	1361	1290	9	3	-8	-2	908	961	99
6	2	2	553	520	176	5	5	2	1365	1219	282	4	8	2	700	629	208
6	-2	-2	990	880	357	5	-5	-2	1700	1543	101	4	-8	-2	574	539	5
7	2	2	1193	1108	108	6	5	2	288	245	0	5	8	2	354	319	95
7	-2	-2	1403	1250	99	7	5	2	451	396	220	5	-8	-2	183	129	94
8	2	2	343	295	159	7	-5	-2	180	148	31	6	8	2	604	570	19
8	-2	-2	324	306	6	8	5	2	406	425	165	6	-8	-2	632	713	187
9	2	2	359	375	34	8	-5	-2	416	386	176	7	8	2	635	623	305
9	-2	-2	199	169	74	9	5	2	492	479	145	7	-8	-2	442	479	297
10	2	2	385	398	292	9	-5	-2	178	195	300	8	8	2	348	362	281
0	3	2	2962	2741	184	10	5	2	166	225	122	8	-8	-2	134	44	87
1	3	2	532	454	254	0	6	2	97	115	39	9	8	2	210	184	148
1	-3	-2	395	338	46	1	6	2	630	595	261	9	-8	-2	207	180	111

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA ** MNH4SO4.H2O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
0	9	2	1451	1486	1	3	12	2	227	258	300	0	17	2	293	358	357
1	9	2	257	244	76	3-12	-2		362	493	286	1	17	2	315	387	104
1	-9	-2	193	200	237	4-12	-2		134	93	67	1	-17	-2	439	476	279
2	-9	-2	173	203	228	5	12	2	197	181	115	2	17	2	257	278	192
3	9	2	565	529	253	5-12	-2		413	461	92	2	-17	-2	344	323	207
3	-9	-2	270	257	71	7	12	2	396	416	106	3	17	2	274	331	215
4	9	2	776	701	215	7-12	-2		406	493	101	3	-17	-2	263	314	54
4	-9	-2	143	142	263	8	12	2	394	361	112	4	17	2	146	178	294
5	9	2	412	384	117	8-12	-2		319	350	3	4	-17	-2	239	217	338
5	-9	-2	476	571	287	9-12	-2		518	541	284	5	17	2	252	359	273
6	9	2	383	342	95	0	13	2	454	553	183	5	-17	-2	448	481	97
6	-9	-2	157	97	122	1-13	-2		124	155	97	0	18	2	178	163	114
7	9	2	542	501	309	2	13	2	238	262	14	1	18	2	225	276	122
7	-9	-2	694	815	101	2-13	-2		321	389	14	1	-18	-2	155	149	100
8	9	2	244	231	195	3	13	2	181	177	7	3	18	2	610	752	81
8	-9	-2	408	436	190	3-13	-2		155	117	164	3	-18	-2	856	887	91
9	-9	-2	293	353	267	4-13	-2		344	397	180	4	18	2	381	456	188
0	10	2	376	412	114	5	13	2	235	206	269	4	-18	-2	618	628	12
1	10	2	395	384	122	5-13	-2		280	326	85	6	-18	-2	213	243	183
1	-10	-2	204	197	133	6	13	2	165	163	277	0	19	2	363	365	2
2	10	2	775	746	4	6-13	-2		244	321	356	1	19	2	158	202	135
2	-10	-2	359	364	193	7	13	2	443	412	145	2	19	2	170	220	40
3	10	2	331	310	36	7-13	-2		504	492	288	2	-19	-2	378	405	10
3	-10	-2	122	124	82	8	13	2	413	388	14	3	19	2	383	458	230
4	10	2	592	479	212	8-13	-2		491	525	10	3	-19	-2	421	413	74
4	-10	-2	197	214	37	1-14	-2		137	233	265	4	19	2	247	272	234
5	10	2	409	366	143	2	14	2	200	210	154	4	-19	-2	259	240	215
5	-10	-2	371	440	109	2-14	-2		225	227	353	5	19	2	231	310	76
6	10	2	492	467	356	3	14	2	315	354	265	5	-19	-2	187	216	286
6	-10	-2	657	812	188	3-14	-2		498	568	280	1	20	2	396	496	92
7	10	2	293	286	323	4	14	2	180	198	6	1	-20	-2	481	485	93
7	-10	-2	245	310	291	4-14	-2		192	115	201	2	20	2	337	409	23
8	10	2	172	191	177	5	14	2	280	283	350	2	-20	-2	365	402	221
8	-10	-2	411	498	9	5-14	-2		124	132	29	3	20	2	433	491	87
9	10	2	411	389	282	6	14	2	374	379	182	3	-20	-2	410	452	93
9	-10	-2	415	458	289	6-14	-2		420	406	5	1	21	2	351	401	244
10	-10	-2	367	330	11	7	14	2	332	346	131	1	-21	-2	468	499	72
0	11	2	187	206	358	7-14	-2		402	389	110	2	21	2	334	371	29
1	11	2	348	366	121	8	14	2	290	268	30	2	-21	-2	549	581	23
1	-11	-2	217	180	298	8-14	-2		515	509	187	1	0	-3	1048	857	175
2	11	2	442	469	80	1	15	2	132	206	87	2	0	3	578	496	184
2	-11	-2	199	303	69	1-15	-2		281	369	264	3	0	3	282	259	192
3	11	2	346	345	273	2	15	2	122	166	264	3	0	-3	298	262	186
3	-11	-2	184	244	117	3	15	2	132	177	66	4	0	-3	500	436	6
4	11	2	428	439	205	5	15	2	507	633	278	5	0	3	468	419	2
4	-11	-2	265	308	191	5-15	-2		674	698	102	5	0	-3	1239	1068	3
5	11	2	421	426	114	6	15	2	183	195	320	6	0	3	712	628	7
5	-11	-2	290	431	308	6-15	-2		277	275	2	6	0	-3	199	166	185
6	11	2	220	198	131	7-15	-2		287	324	285	7	0	3	530	489	186
7	11	2	175	178	215	1	16	2	160	146	192	7	0	-3	708	667	187
7	-11	-2	159	211	91	1-16	-2		201	167	248	8	0	3	313	299	187
8	11	2	412	376	347	2	16	2	247	324	203	9	0	3	407	419	8
8	-11	-2	346	394	4	2-16	-2		366	398	31	9	0	-3	497	444	189
9	11	2	426	394	355	3	16	2	152	264	97	10	0	3	135	88	186
0	12	2	199	169	252	3-16	-2		314	301	92	10	0	-3	148	61	3
1	12	2	339	373	92	4-16	-2		151	176	339	11	0	-3	654	634	10
1	-12	-2	254	308	107	5	16	2	284	357	6	0	1	3	124	93	88
2	12	2	675	723	11	7	16	2	262	294	254	1	1	3	1000	860	1
2	-12	-2	432	564	197	7-16	-2		322	312	272	1	-1	-3	636	508	121

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA

** MNHASO₄.H₂O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
2	1	3	724	603	74	1	4	3	397	339	258	2	7	3	523	464	241
2	-1	-3	106	126	34	1	-4	-3	1298	1189	190	2	-7	-3	846	802	223
3	1	3	311	246	191	2	4	3	587	510	9	3	-7	-3	1510	1435	12
3	-1	-3	132	126	43	2	-4	-3	736	676	85	4	7	3	838	733	7
4	1	3	190	206	207	3	4	3	723	655	1	4	-7	-3	423	425	264
4	-1	-3	832	765	92	3	-4	-3	471	383	318	5	7	3	430	370	55
5	1	3	345	282	117	4	4	3	736	675	80	6	7	3	365	306	62
5	-1	-3	533	454	235	4	-4	-3	885	844	221	6	-7	-3	484	487	32
6	1	3	688	617	280	5	4	3	331	292	138	7	7	3	293	261	22
6	-1	-3	577	507	256	5	-4	-3	207	211	157	7	-7	-3	412	408	340
7	1	3	444	427	252	6	4	3	821	735	197	8	7	3	620	578	202
7	-1	-3	403	368	160	6	-4	-3	327	352	284	9	7	3	440	377	310
8	1	3	270	287	64	7	4	3	411	393	358	9	-7	-3	830	819	194
8	-1	-3	191	202	299	7	-4	-3	518	503	28	0	8	3	176	159	68
9	1	3	342	367	136	8	4	3	316	286	292	1	8	3	1076	980	271
9	-1	-3	632	568	13	8	-4	-3	336	300	70	1	-8	-3	820	795	3
10	1	3	158	192	175	9	4	3	412	370	222	2	8	3	248	207	36
10	-1	-3	350	237	102	9	-4	-3	438	408	349	2	-8	-3	1585	1556	261
11	-1	-3	177	126	304	10	4	3	246	269	44	3	8	3	294	281	172
1	2	3	794	697	103	10	-4	-3	271	244	280	3	-8	-3	898	886	223
1	-2	-3	988	852	167	0	5	3	833	735	289	4	8	3	1260	1158	261
2	2	3	324	302	276	1	5	3	1537	1378	180	4	-8	-3	179	200	350
2	-2	-3	402	357	91	1	-5	-3	816	740	68	5	8	3	415	327	23
3	2	3	528	480	330	2	5	3	826	743	258	5	-8	-3	236	178	224
3	-2	-3	111	103	268	2	-5	-3	133	107	80	6	8	3	441	403	349
4	2	3	637	559	96	3	5	3	391	308	79	6	-8	-3	1213	1212	96
5	2	3	115	76	285	3	-5	-3	1128	1049	359	7	8	3	363	317	94
5	-2	-3	687	591	16	4	5	3	340	295	245	7	-8	-3	417	394	348
6	2	3	266	259	355	4	-5	-3	1801	1661	267	8	8	3	664	586	89
6	-2	-3	811	732	269	5	5	3	291	307	345	9	8	3	309	327	121
7	2	3	243	227	257	5	-5	-3	212	189	151	9	-8	-3	190	235	101
7	-2	-3	245	259	146	6	5	3	1178	1082	86	0	9	3	443	407	179
8	2	3	326	316	255	6	-5	-3	229	203	74	1	9	3	1018	956	189
8	-2	-3	554	477	95	7	5	3	361	345	95	1	-9	-3	911	848	268
9	2	3	387	379	291	7	-5	-3	360	335	226	2	9	3	207	190	342
9	-2	-3	279	262	260	8	5	3	149	114	278	2	-9	-3	1002	985	236
10	2	3	241	229	67	8	-5	-3	492	436	92	3	9	3	628	570	268
10	-2	-3	328	273	283	9	5	3	397	397	275	3	-9	-3	667	669	35
0	3	3	128	116	256	0	6	3	734	653	309	4	9	3	981	837	42
1	3	3	560	497	2	1	6	3	1334	1185	280	4	-9	-3	1013	1015	94
1	-3	-3	629	542	107	1	-6	-3	991	946	198	5	9	3	257	211	74
2	3	3	704	623	287	2	6	3	631	558	53	5	-9	-3	560	582	14
2	-3	-3	458	421	47	2	-6	-3	615	562	269	6	9	3	836	774	271
3	3	3	623	524	115	3	6	3	365	296	35	6	-9	-3	349	369	25
3	-3	-3	428	371	340	3	-6	-3	675	616	261	7	9	3	469	436	358
4	3	3	670	569	195	4	6	3	513	487	296	7	-9	-3	263	276	11
4	-3	-3	942	861	268	4	-6	-3	793	759	231	8	9	3	493	417	187
5	3	3	202	163	297	5	6	3	398	323	47	8	-9	-3	476	508	280
5	-3	-3	378	338	195	5	-6	-3	285	301	182	9	9	3	267	278	41
6	3	3	302	231	86	6	6	3	849	768	202	9	-9	-3	720	803	187
6	-3	-3	300	302	211	6	-6	-3	829	797	90	0	10	3	1121	1090	97
7	3	3	358	301	136	7	6	3	219	229	26	1	10	3	133	146	220
7	-3	-3	697	676	194	7	-6	-3	788	736	5	1	-10	-3	1896	1888	10
8	3	3	351	372	22	8	6	3	409	347	67	2	10	3	748	732	263
8	-3	-3	413	318	73	9	6	3	464	402	176	2	-10	-3	843	859	252
9	3	3	360	361	221	9	-6	-3	371	369	24	3	10	3	1254	1163	193
9	-3	-3	942	864	6	0	7	3	586	533	302	3	-10	-3	406	403	197
10	3	3	325	324	216	1	7	3	2075	1872	182	4	10	3	708	656	242
0	4	3	289	264	355	1	-7	-3	158	161	52	4	-10	-3	616	640	36

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
5-10	-3		365	385	224	2-14	-3		615	782	65	5-18	3		302	428	6
6-10	3		819	744	13	3-14	3		339	379	3	5-18	-3		378	474	27
6-10	-3		402	412	89	3-14	-3		641	814	31	6-18	-3		391	342	121
7-10	3		385	360	99	4-14	3		839	828	62	0-19	3		408	469	291
7-10	-3		446	523	189	4-14	-3		201	243	100	1-19	3		361	429	191
8-10	-3		166	201	162	5-14	3		581	596	210	2-19	3		312	386	246
9-10	-3		252	277	163	5-14	-3		319	338	178	2-19	-3		409	478	275
0-11	3		681	720	154	6-14	-3		709	866	277	3-19	-3		322	334	49
1-11	3		611	576	1	7-14	3		289	254	305	4-19	3		209	353	81
1-11	-3		969	1020	256	7-14	-3		262	291	194	4-19	-3		165	178	179
2-11	3		826	783	49	8-14	-3		199	226	281	5-19	-3		143	152	262
2-11	-3		281	279	256	0-15	3		423	567	67	1-20	3		217	198	258
3-11	3		994	961	251	1-15	3		483	589	0	1-20	-3		158	232	28
3-11	-3		266	285	184	1-15	-3		321	424	71	2-20	3		165	195	9
4-11	3		136	125	77	2-15	3		347	416	147	2-20	-3		224	236	226
4-11	-3		1055	1181	88	2-15	-3		658	913	79	3-20	3		208	220	235
5-11	3		264	262	218	3-15	3		522	606	62	3-20	-3		364	439	221
5-11	-3		656	712	21	3-15	-3		543	711	209	4-20	-3		175	201	292
6-11	3		756	699	263	4-15	3		559	614	232	0-21	3		191	193	222
6-11	-3		172	113	119	4-15	-3		248	356	291	1-21	3		185	149	206
7-11	3		303	240	357	5-15	3		457	509	231	1-21	-3		247	249	240
7-11	-3		240	280	140	5-15	-3		399	478	186	2-21	-3		249	289	286
8-11	3		197	196	340	6-15	3		251	231	96	0-0	4		2920	2537	184
8-11	-3		479	539	286	6-15	-3		218	282	228	1-0	4		145	114	184
0-12	3		689	705	118	7-15	3		360	415	177	1-0	-4		554	481	4
1-12	3		733	740	83	7-15	-3		278	324	13	2-0	4		94	75	176
1-12	-3		1076	1145	18	0-16	3		383	537	264	2-0	-4		358	301	6
2-12	3		812	792	236	1-16	-3		560	821	207	3-0	4		733	632	5
2-12	-3		264	257	79	2-16	3		425	582	93	3-0	-4		884	777	187
3-12	3		889	883	205	2-16	-3		337	473	60	4-0	4		1523	1341	4
3-12	-3		451	493	32	3-16	3		667	794	29	4-0	-4		470	430	6
4-12	3		420	402	68	3-16	-3		284	339	59	5-0	4		584	494	6
4-12	-3		571	668	63	4-16	3		297	345	51	5-0	-4		174	164	187
5-12	3		480	457	219	4-16	-3		304	358	247	6-0	4		138	21	17
5-12	-3		447	537	206	5-16	3		203	247	253	6-0	-4		617	558	4
6-12	3		428	429	34	5-16	-3		227	251	63	7-0	4		1219	1073	187
6-12	-3		602	721	284	6-16	3		348	360	205	7-0	-4		650	583	6
7-12	-3		621	769	184	7-16	-3		162	182	331	8-0	-4		391	328	7
8-12	3		434	416	295	0-17	3		272	388	335	9-0	4		239	227	184
8-12	-3		196	211	148	1-17	3		147	233	193	9-0	-4		163	112	5
0-13	3		645	738	105	1-17	-3		473	577	46	10-0	-4		874	791	189
1-13	3		1209	1257	5	2-17	3		271	415	208	0-1	4		2138	1832	279
1-13	-3		360	465	215	2-17	-3		155	130	60	1-1	4		257	220	356
2-13	3		689	717	81	3-17	3		406	549	44	1-1	-4		492	441	110
2-13	-3		601	704	74	3-17	-3		237	317	171	2-1	4		1203	1050	186
3-13	3		313	288	204	4-17	-3		343	421	260	2-1	-4		971	874	352
3-13	-3		542	680	220	5-17	3		245	243	137	3-1	4		787	690	250
4-13	3		697	719	229	5-17	-3		491	552	207	3-1	-4		1266	1095	269
4-13	-3		375	474	67	6-17	3		382	400	70	4-1	4		1527	1340	92
5-13	3		554	539	237	6-17	-3		238	278	298	4-1	-4		303	285	266
5-13	-3		167	195	70	0-18	3		400	498	302	5-1	4		695	620	330
6-13	3		285	256	246	1-18	3		185	249	273	5-1	-4		588	530	334
6-13	-3		260	357	185	1-18	-3		297	363	221	6-1	4		177	152	4
8-13	3		574	543	350	2-18	3		358	520	70	6-1	-4		471	443	331
8-13	-3		136	173	272	2-18	-3		163	164	240	7-1	4		778	697	90
0-14	3		398	451	207	3-18	3		225	317	39	7-1	-4		1006	893	95
1-14	3		579	650	94	3-18	-3		347	391	201	8-1	4		157	115	53
1-14	-3		193	254	177	4-18	3		152	177	230	8-1	-4		471	426	204
2-14	3		342	410	152	4-18	-3		356	395	268	9-1	4		365	306	145

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA ** MNHASO4.H2O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
9	-1	-4	293	289	128	9	-4	-4	364	347	291	9	-7	-4	405	422	263
10	-1	-4	273	259	119	10	-4	-4	491	460	21	10	-7	-4	215	255	355
0	2	4	1320	1131	172	0	5	4	1031	903	91	0	8	4	792	739	356
1	2	4	269	238	317	1	5	4	404	343	227	1	8	4	238	171	109
1	-2	-4	606	513	288	1	-5	-4	711	613	245	1	-8	-4	259	242	68
2	2	4	1978	1703	276	2	5	4	1239	1087	196	2	8	4	628	546	65
2	-2	-4	1145	998	284	2	-5	-4	996	853	34	2	-8	-4	525	513	65
3	2	4	766	664	49	3	5	4	406	379	103	3	8	4	410	399	279
3	-2	-4	814	694	221	3	-5	-4	1292	1199	101	3	-8	-4	484	502	95
4	2	4	989	858	13	4	5	4	566	496	263	4	8	4	698	628	213
4	-2	-4	428	385	18	4	-5	-4	351	375	47	4	-8	-4	512	517	201
5	2	4	914	858	302	5	5	4	630	568	53	5	8	4	448	403	111
5	-2	-4	1406	1273	105	5	-5	-4	483	460	55	5	-8	-4	900	899	288
6	2	4	399	373	71	6	5	4	557	504	27	6	8	4	257	245	128
6	-2	-4	301	262	317	6	-5	-4	418	446	175	6	-8	-4	320	275	162
7	2	4	587	531	207	7	5	4	684	648	315	7	-8	-4	293	281	156
7	-2	-4	279	270	27	7	-5	-4	706	667	296	8	8	4	304	282	342
8	2	4	270	265	123	8	5	4	303	265	317	8	-8	-4	236	221	322
8	-2	-4	362	309	103	8	-5	-4	275	255	154	9	-8	-4	261	278	203
9	2	4	385	380	138	9	5	4	334	304	185	0	9	4	151	123	135
9	-2	-4	548	526	289	9	-5	-4	160	171	192	1	9	4	252	227	141
10	-2	-4	391	358	178	10	-5	-4	258	257	270	1	-9	-4	450	457	95
0	3	4	266	220	356	0	6	4	1417	1274	2	2	9	4	679	648	29
1	3	4	350	303	270	1	6	4	293	243	56	2	-9	-4	745	760	206
1	-3	-4	740	657	207	1	-6	-4	397	340	184	3	9	4	314	290	344
2	3	4	2172	1848	185	2	6	4	544	471	260	3	-9	-4	397	416	313
2	-3	-4	1514	1333	9	2	-6	-4	478	442	223	4	9	4	373	371	269
3	3	4	691	614	197	3	6	4	518	463	225	4	-9	-4	291	307	116
3	-3	-4	542	484	208	3	-6	-4	927	846	22	5	9	4	353	305	190
4	3	4	465	429	72	4	6	4	884	774	216	5	-9	-4	417	408	166
4	-3	-4	274	237	224	4	-6	-4	663	625	216	6	9	4	250	212	269
5	3	4	1101	965	1	5	6	4	559	541	181	6	-9	-4	150	42	118
5	-3	-4	996	880	359	5	-6	-4	361	369	317	7	9	4	290	255	130
6	3	4	531	476	29	6	6	4	545	473	98	7	-9	-4	130	123	202
6	-3	-4	162	146	26	6	-6	-4	273	268	139	8	9	4	497	470	100
7	3	4	402	385	3	7	6	4	737	664	352	8	-9	-4	246	304	341
7	-3	-4	149	130	357	7	-6	-4	566	517	148	9	-9	-4	505	519	290
8	3	4	421	386	318	8	-6	-4	236	221	207	0	10	4	358	361	187
8	-3	-4	733	677	180	9	6	4	197	126	28	1	10	4	212	169	170
9	3	4	593	522	175	9	-6	-4	369	333	255	1	-10	-4	380	371	15
9	-3	-4	396	347	135	10	-6	-4	451	449	9	2	10	4	382	340	71
10	-3	-4	223	189	202	0	7	4	1121	1000	99	2	-10	-4	555	560	69
0	4	4	771	705	16	1	7	4	181	195	195	3	10	4	189	139	339
1	4	4	445	404	41	1	-7	-4	294	236	326	3	-10	-4	335	331	166
1	-4	-4	967	866	248	2	7	4	223	193	53	4	10	4	145	208	123
2	4	4	1735	1511	269	2	-7	-4	117	130	199	4	-10	-4	290	303	163
2	-4	-4	1068	935	249	3	7	4	591	516	24	5	-10	-4	219	215	293
3	4	4	437	399	119	3	-7	-4	839	742	68	6	10	4	228	228	259
3	-4	-4	724	644	318	4	7	4	935	813	247	6	-10	-4	158	150	292
4	4	4	218	153	130	4	-7	-4	614	581	48	7	10	4	475	449	163
5	4	4	806	701	254	5	7	4	549	472	148	7	-10	-4	431	463	295
5	-4	-4	1301	1153	92	5	-7	-4	554	544	157	8	10	4	285	289	5
6	4	4	673	597	76	6	7	4	327	304	337	8	-10	-4	434	457	5
6	-4	-4	215	166	132	6	-7	-4	350	351	174	9	-10	-4	302	288	127
7	4	4	647	572	331	7	7	4	276	287	286	0	11	4	453	425	282
7	-4	-4	415	356	133	7	-7	-4	684	655	289	1	-11	-4	313	338	98
8	4	4	403	341	132	8	7	4	207	200	116	2	-11	-4	328	315	200
8	-4	-4	444	394	154	8	-7	-4	237	254	22	3	11	4	152	172	263
9	4	4	366	361	122	9	7	4	315	266	321	3	-11	-4	393	432	286

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
4	11	4	208	208	12	1-16	-4		138	126	353	4	1	5	280	266	79
4-11	-4		163	130	181	2	16	4	247	246	101	4	-1	-5	580	515	185
5	11	4	273	277	357	3	16	4	535	566	212	5	1	5	236	234	118
6	11	4	295	298	187	3-16	-4		304	389	2	5	-1	-5	501	452	150
6-11	-4		481	535	1	4	16	4	327	349	242	6	1	5	460	401	198
7	11	4	383	360	142	4-16	-4		130	214	326	6	-1	-5	241	229	325
7-11	-4		449	495	140	5-16	-4		172	272	272	7	1	5	218	178	328
8	11	4	326	292	81	6-16	-4		324	397	164	7	-1	-5	568	537	57
8-11	-4		236	252	226	0	17	4	167	214	138	8	1	5	204	230	339
9-11	-4		143	170	329	1	17	4	282	361	84	8	-1	-5	498	476	86
0	12	4	257	234	175	1-17	-4		224	333	57	9	-1	-5	536	469	304
1-12	-4		131	151	320	2	17	4	223	330	8	10	-1	-5	607	535	267
2	12	4	298	299	275	2-17	-4		218	253	235	0	2	5	279	242	244
3	12	4	177	128	21	3	17	4	357	425	64	1	-2	-5	358	284	89
3-12	-4		135	161	226	3-17	-4		298	409	106	2	2	5	390	338	267
4	12	4	276	285	70	4	17	4	204	210	218	2	-2	-5	316	254	32
5	12	4	454	441	286	5	17	4	404	472	196	3	2	5	574	481	100
5-12	-4		400	458	131	5-17	-4		243	323	202	3	-2	-5	188	216	307
6	12	4	397	388	284	6-17	-4		236	352	163	4	2	5	224	204	198
6-12	-4		333	333	286	1	18	4	227	380	223	4	-2	-5	920	839	267
7	12	4	195	172	121	1-18	-4		286	521	68	5	2	5	377	352	306
7-12	-4		484	549	293	2	18	4	256	388	74	5	-2	-5	565	490	97
8-12	-4		183	234	78	2-18	-4		267	411	37	6	2	5	428	378	82
1-13	-4		205	203	214	3	18	4	172	230	199	6	-2	-5	365	303	75
2	13	4	289	295	189	4-18	-4		159	131	175	7	2	5	596	559	98
2-13	-4		162	191	68	5-18	-4		446	556	284	7	-2	-5	584	567	233
4	13	4	159	96	0	1	19	4	297	435	48	8	-2	-5	181	196	41
4-13	-4		186	257	262	1-19	-4		341	375	48	9	-2	-5	302	297	328
5	13	4	597	576	358	2	19	4	219	356	26	10	-2	-5	283	290	227
5-13	-4		373	404	312	2-19	-4		273	376	239	0	3	5	398	361	9
6	13	4	224	223	148	3-19	-4		229	314	243	1	3	5	732	652	278
6-13	-4		383	474	15	4-19	-4		332	401	173	1	-3	-5	458	406	223
7	13	4	170	196	218	0	20	4	281	376	177	2	3	5	345	313	28
8-13	-4		354	524	181	1	20	4	310	453	259	2	-3	-5	160	151	15
0	14	4	318	344	355	1-20	-4		333	429	90	3	3	5	267	218	32
1	14	4	174	170	83	2-20	-4		260	231	63	3	-3	-5	214	185	311
1-14	-4		367	430	268	0	0	5	158	158	188	4	3	5	176	131	342
2-14	-4		259	280	214	1	0	5	884	796	4	4	-3	-5	811	768	206
3	14	4	275	242	206	1	0	-5	251	219	185	5	3	5	461	442	103
3-14	-4		216	278	343	2	0	5	280	271	5	5	-3	-5	622	593	198
4-14	-4		319	389	6	2	0	-5	404	349	11	6	3	5	850	777	193
5	14	4	359	369	284	3	0	5	249	216	185	6	-3	-5	590	538	59
5-14	-4		263	362	141	3	0	-5	155	167	0	7	3	5	284	267	24
6	14	4	175	125	310	4	0	5	448	369	192	7	-3	-5	590	583	21
6-14	-4		212	211	200	5	0	-5	394	389	184	8	3	5	302	318	26
0	15	4	307	358	114	6	0	-5	243	216	176	8	-3	-5	139	19	202
1	15	4	189	211	161	7	0	5	142	129	186	9	-3	-5	443	404	34
1-15	-4		189	154	186	7	0	-5	590	562	187	10	-3	-5	177	140	226
2	15	4	156	122	294	8	0	5	277	274	17	0	4	5	335	327	310
2-15	-4		224	228	91	8	0	-5	433	404	4	1	4	5	843	747	177
3	15	4	413	449	69	9	0	-5	793	752	8	1	-4	-5	405	366	54
3-15	-4		478	626	108	10	0	-5	393	376	185	2	4	5	264	234	202
4	15	4	254	246	234	0	1	5	164	143	52	2	-4	-5	489	415	189
4-15	-4		197	182	311	1	1	5	841	750	95	3	4	5	139	89	315
5	15	4	163	138	350	1	-1	-5	215	169	138	3	-4	-5	306	293	11
6	15	4	147	103	43	2	1	5	305	270	355	4	4	5	575	497	9
7-15	-4		270	336	309	2	-1	-5	342	315	85	4	-4	-5	381	336	263
0	16	4	285	337	340	3	1	5	433	373	317	5	4	5	240	206	347
1	16	4	180	215	167	3	-1	-5	166	166	313	5	-4	-5	444	428	55

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA ** MNHAS04.H2O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
6	4	5	310	300	70	0	8	5	678	620	150	7-11	-5	329	324	175	
6	-4	-5	681	648	39	1	8	5	484	435	5	8-11	-5	179	132	278	
7	4	5	490	468	83	2	-8	-5	890	826	266	0	12	5	631	605	7
7	-4	-5	366	310	295	2	8	5	527	464	40	1	12	5	425	400	2
8	4	5	601	577	201	3	8	5	881	793	274	1-12	-5	726	762	90	
8	-4	-5	308	299	249	3	-8	-5	374	387	185	2	12	5	473	449	175
9	-4	-5	713	680	205	4	8	5	171	171	99	2-12	-5	785	769	45	
0	5	5	227	178	294	4	-8	-5	1030	997	83	3	12	5	882	871	85
1	5	5	976	865	285	5	8	5	212	188	210	3-12	-5	401	431	255	
1	-5	-5	208	176	293	5	-8	-5	309	334	17	4	12	5	896	816	211
2	5	5	140	127	136	6	8	5	732	649	241	4-12	-5	514	543	284	
2	-5	-5	754	710	268	6	-8	-5	208	167	212	5	12	5	417	383	242
3	5	5	230	259	155	7	8	5	163	156	48	5-12	-5	543	580	177	
3	-5	-5	378	361	244	7	-8	-5	518	487	96	6	12	5	230	220	106
4	5	5	533	501	261	8	-8	-5	455	404	270	6-12	-5	541	598	196	
4	-5	-5	286	284	14	0	9	5	497	460	134	8-12	-5	266	275	146	
5	5	5	279	218	65	1	9	5	996	938	94	0	13	5	583	582	285
5	-5	-5	307	288	238	1	-9	-5	550	511	35	1-13	-5	772	796	212	
6	5	5	172	111	357	2	9	5	612	552	219	2	13	5	483	468	73
6	-5	-5	703	655	80	2	-9	-5	575	553	81	2-13	-5	444	477	48	
7	5	5	225	182	53	3	9	5	457	425	198	3	13	5	752	762	33
7	-5	-5	281	304	314	3	-9	-5	566	550	61	3-13	-5	209	217	72	
8	5	5	400	378	59	4	9	5	323	274	92	4	13	5	525	504	41
8	-5	-5	399	332	210	4	-9	-5	638	637	28	4-13	-5	599	663	204	
9	-5	-5	585	567	85	5	9	5	561	492	254	5-13	-5	470	478	92	
0	6	5	178	161	74	5	-9	-5	191	210	226	6	13	5	577	512	192
1	6	5	439	356	163	6	9	5	747	672	24	6-13	-5	253	302	242	
1	-6	-5	513	447	273	6	-9	-5	554	542	276	7-13	-5	320	354	336	
2	6	5	224	158	78	7	-9	-5	742	766	176	0	14	5	661	702	338
2	-6	-5	850	765	201	8	-9	-5	242	271	205	1	14	5	348	361	202
3	6	5	610	535	276	9	-9	-5	228	221	271	1-14	-5	785	843	69	
3	-6	-5	379	346	61	0	10	5	231	245	126	2	14	5	629	636	213
4	6	5	872	788	19	1	10	5	836	811	6	3	14	5	807	801	75
4	-6	-5	895	808	79	2	10	5	430	427	60	4-14	-5	585	617	256	
5	6	5	214	216	85	2-10	-5	917	893	27	5	14	5	161	151	100	
5	-6	-5	248	263	14	3	10	5	220	206	267	5-14	-5	424	512	209	
6	6	5	413	363	262	3-10	-5	638	625	236	6-14	-5	200	265	304		
6	-6	-5	446	449	20	4	10	5	812	745	204	7-14	-5	404	453	332	
7	6	5	225	226	50	4-10	-5	240	235	52	0	15	5	581	617	334	
7	-6	-5	393	370	21	5	10	5	554	510	236	1	15	5	684	698	272
8	6	5	647	598	197	5-10	-5	189	196	115	1-15	-5	531	579	238		
8	-6	-5	585	561	263	6	10	5	380	332	209	2	15	5	569	600	26
9	-6	-5	765	756	189	6-10	-5	722	713	189	2-15	-5	257	299	233		
0	7	5	532	477	152	7	10	5	168	144	126	3	15	5	458	468	53
1	-7	-5	765	715	20	7-10	-5	489	471	120	3-15	-5	349	401	194		
2	7	5	358	311	217	0	11	5	302	333	243	4-15	-5	432	516	229	
2	-7	-5	520	509	251	1	11	5	947	895	92	5	15	5	263	269	25
3	7	5	524	471	189	1-11	-5	378	364	174	5-15	-5	382	430	50		
3	-7	-5	209	166	157	2	11	5	414	392	170	6-15	-5	385	483	127	
4	7	5	526	478	224	2-11	-5	885	915	64	0	16	5	428	494	296	
4	-7	-5	1143	1068	24	3	11	5	258	245	15	1	16	5	499	545	183
5	7	5	175	141	281	3-11	-5	576	554	40	1-16	-5	140	188	31		
5	-7	-5	240	233	276	4	11	5	870	799	46	2	16	5	416	424	261
6	7	5	1191	1079	12	4-11	-5	283	286	163	2-16	-5	499	600	240		
6	-7	-5	220	204	106	5	11	5	581	528	252	3-16	-5	476	563	80	
7	7	5	339	270	82	5-11	-5	360	337	135	4	16	5	353	360	37	
7	-7	-5	469	453	211	6	11	5	162	188	142	4-16	-5	267	329	220	
8	-7	-5	377	414	200	6-11	-5	850	867	276	5-16	-5	258	290	266		
9	-7	-5	331	329	122	7	11	5	303	287	284	0	17	5	351	439	14

M. CATTI & M. FRANCHINI-ANGELA ** MNHASO4.H2O (KRAUTITE) **

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
1	17	5	447	524	284	7	2	6	428	376	325	3	6	6	313	292	6
1-17	-5		167	224	29	7	-2	-6	711	645	301	3	-6	-6	552	466	358
2	17	5	432	529	356	8	-2	-6	306	296	140	4	6	6	131	122	249
2-17	-5		514	679	223	9	-2	-6	200	180	219	4	-6	-6	786	675	83
3	17	5	230	177	212	0	3	6	1020	877	0	5	6	6	744	637	190
3-17	-5		471	641	226	1	3	6	237	231	129	5	-6	-6	860	764	175
5-17	-5		185	270	0	1	-3	-6	602	558	207	6	6	6	513	458	258
0	18	5	306	379	212	2	3	6	124	132	84	7	6	6	317	345	178
1	18	5	168	217	184	2	-3	-6	445	399	238	7	-6	-6	188	195	225
1-18	-5		343	490	246	3	3	6	612	535	192	8	-6	-6	341	363	340
2	18	5	281	364	319	3	-3	-6	1469	1306	6	9	-6	-6	290	284	308
2-18	-5		335	494	246	4	3	6	457	416	207	0	7	6	193	180	215
3-18	-5		334	521	53	4	-3	-6	387	330	187	1	7	6	145	91	199
0	19	5	214	350	92	5	3	6	542	499	185	1	-7	-6	482	446	46
1-19	-5		369	499	58	5	-3	-6	405	395	20	2	7	6	936	849	85
0	0	6	179	181	5	6	-3	-6	449	379	124	2	-7	-6	831	749	73
1	0	6	245	273	2	7	3	6	1016	921	3	3	-7	-6	556	486	166
1	0	-6	813	667	188	7	-3	-6	822	715	168	4	7	6	149	123	47
2	0	6	973	878	186	8	-3	-6	197	164	213	4	-7	-6	411	388	185
2	0	-6	1105	996	4	9	-3	-6	234	183	208	5	7	6	411	402	31
3	0	6	585	509	186	0	4	6	1546	1383	99	5	-7	-6	456	442	290
3	0	-6	649	591	185	1	4	6	457	429	160	6	7	6	370	327	269
5	0	6	1009	859	8	1	-4	-6	207	174	330	6	-7	-6	183	127	307
5	0	-6	1410	1274	6	2	4	6	411	362	0	7	7	6	548	515	174
6	0	6	166	166	7	2	-4	-6	313	311	115	7	-7	-6	242	201	290
7	0	6	326	297	8	3	4	6	516	445	26	8	-7	-6	293	275	345
7	0	-6	191	152	2	3	-4	-6	857	785	73	0	8	6	764	692	277
8	0	-6	566	510	189	4	4	6	862	762	272	1	8	6	182	129	8
9	0	-6	366	296	186	4	-4	-6	770	668	82	1	-8	-6	289	267	72
0	1	6	559	517	38	5	4	6	426	407	163	2	8	6	207	229	43
1	1	6	110	77	340	5	-4	-6	566	489	144	2	-8	-6	488	472	234
1	-1	-6	629	572	235	6	4	6	260	201	254	3	8	6	285	256	188
2	1	6	1768	1559	279	6	-4	-6	367	330	161	3	-8	-6	396	396	309
2	-1	-6	1541	1360	272	7	4	6	196	208	264	4	8	6	590	554	84
3	1	6	384	332	159	7	-4	-6	582	531	297	4	-8	-6	302	268	117
3	-1	-6	800	697	338	8	-4	-6	263	289	12	5	8	6	215	198	219
4	1	6	232	234	199	9	-4	-6	270	249	269	5	-8	-6	241	184	191
4	-1	-6	125	101	193	0	5	6	660	620	341	6	8	6	237	219	238
5	1	6	373	339	251	1	5	6	324	288	158	6	-8	-6	345	329	345
5	-1	-6	980	869	93	1	-5	-6	335	322	104	7	-8	-6	448	420	161
6	1	6	382	358	90	2	5	6	1300	1147	93	8	-8	-6	238	245	261
6	-1	-6	152	127	159	2	-5	-6	564	496	97	0	9	6	443	422	168
7	1	6	606	527	357	3	5	6	252	238	234	1	-9	-6	374	387	359
7	-1	-6	472	434	164	3	-5	-6	642	580	36	2	-9	-6	312	312	81
8	-1	-6	508	490	119	4	5	6	419	397	244	3	9	6	134	160	89
9	-1	-6	304	240	269	4	-5	-6	660	597	214	3	-9	-6	289	226	194
0	2	6	1566	1387	93	5	5	6	301	313	142	4	9	6	543	506	61
1	2	6	129	157	175	5	-5	-6	742	728	314	4	-9	-6	133	132	102
1	-2	-6	754	688	212	6	5	6	314	295	248	5	9	6	233	225	356
2	2	6	471	401	169	6	-5	-6	290	234	125	5	-9	-6	168	187	151
2	-2	-6	725	623	34	7	5	6	247	248	20	6	9	6	285	309	280
3	2	6	332	312	124	7	-5	-6	434	384	185	6	-9	-6	536	517	296
3	-2	-6	980	863	117	8	-5	-6	423	418	297	7	-9	-6	431	426	316
4	2	6	933	844	274	9	-5	-6	306	296	185	8	-9	-6	375	306	75
4	-2	-6	312	278	96	0	6	6	410	389	103	0	10	6	488	444	287
5	2	6	519	435	21	1	6	6	179	167	148	1	10	6	243	224	2
5	-2	-6	828	719	16	1	-6	-6	654	593	17	1	-10	-6	187	158	145
6	2	6	137	170	66	2	6	6	648	607	28	2	10	6	262	264	227
6	-2	-6	352	334	131	2	-6	-6	618	564	228	3	10	6	397	340	188

H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA	H	K	L	FO	FC	ALPHA
4	10	6	621	612	83	5	0	-7	324	297	187	2	5	7	211	183	38
4	-10	-6	255	242	283	6	0	7	674	559	192	3	5	7	790	683	278
5	10	6	401	361	10	6	0	-7	318	252	8	4	-5	-7	535	461	74
5	-10	-6	407	365	346	7	0	-7	343	342	8	5	-5	-7	361	338	285
6	-10	-6	473	475	3	0	1	7	160	74	310	6	5	7	263	231	216
7	-10	-6	382	352	165	1	1	7	125	119	177	6	-5	-7	260	179	233
1	11	6	124	96	352	1	-1	-7	206	144	278	7	-5	-7	608	535	91
1	-11	-6	197	180	281	2	1	7	128	157	212	8	-5	-7	151	59	301
2	11	6	514	463	267	2	-1	-7	360	302	194	0	6	7	594	536	173
3	11	6	156	57	84	3	1	7	149	35	230	1	6	7	1267	1126	95
3	-11	-6	226	249	358	3	-1	-7	146	57	216	1	-6	-7	410	383	74
4	11	6	287	239	51	4	1	7	257	240	8	2	6	7	400	345	190
4	-11	-6	289	250	352	4	-1	-7	290	282	274	2	-6	-7	199	176	99
5	11	6	222	181	249	5	-1	-7	489	436	77	3	6	7	204	133	213
5	-11	-6	471	474	151	6	-1	-7	284	297	31	3	-6	-7	429	386	80
6	-11	-6	430	397	261	7	-1	-7	455	434	291	4	-6	-7	738	672	16
7	-11	-6	201	103	287	8	-1	-7	221	189	184	5	6	7	514	467	272
0	12	6	329	328	89	1	2	7	578	546	281	6	6	7	793	722	9
1	-12	-6	161	163	226	1	-2	-7	235	206	305	6	-6	-7	345	278	233
2	12	6	170	160	211	2	-2	-7	218	212	269	7	-6	-7	393	346	167
2	-12	-6	155	169	116	3	2	7	228	231	113	0	7	7	385	365	162
3	-12	-6	290	297	120	3	-2	-7	187	181	105	1	7	7	483	413	344
4	-12	-6	348	332	293	4	2	7	176	110	264	2	7	7	150	122	78
5	12	6	237	220	15	4	-2	-7	130	124	207	2	-7	-7	1028	912	12
5	-12	-6	273	258	313	5	-2	-7	431	379	264	3	-7	-7	479	402	245
6	-12	-6	345	318	75	6	2	7	183	174	188	4	7	7	636	595	192
7	-12	-6	213	182	345	6	-2	-7	301	260	70	4	-7	-7	142	117	99
0	13	6	219	213	358	7	-2	-7	309	292	302	5	7	7	204	167	239
3	13	6	186	212	196	8	-2	-7	243	196	249	6	-7	-7	577	524	199
3	-13	-6	443	456	5	0	3	7	157	111	39	7	-7	-7	446	419	122
4	13	6	197	172	243	1	3	7	157	122	134	0	8	7	121	52	185
4	-13	-6	225	195	359	1	-3	-7	512	420	279	1	8	7	1267	1175	97
5	-13	-6	254	212	215	2	-3	-7	691	601	195	1	-8	-7	205	221	156
6	-13	-6	320	343	160	3	3	7	748	687	277	2	8	7	407	358	178
0	14	6	207	216	111	3	-3	-7	144	146	119	2	-8	-7	617	553	57
1	-14	-6	210	211	14	4	3	7	603	531	10	3	-8	-7	413	373	66
3	14	6	196	190	42	4	-3	-7	221	202	68	4	8	7	482	398	31
3	-14	-6	272	319	113	5	-3	-7	257	223	330	4	-8	-7	313	322	195
4	14	6	218	247	259	6	-3	-7	347	343	9	5	8	7	580	478	274
5	-14	-6	344	392	193	7	-3	-7	281	247	44	5	-8	-7	318	284	102
6	-14	-6	325	355	139	8	-3	-7	284	274	220	6	-8	-7	348	306	286
1	-15	-6	343	345	56	0	4	7	480	413	184	7	-8	-7	366	328	112
2	15	6	223	252	92	1	4	7	245	185	77	0	9	7	336	310	359
2	-15	-6	142	155	45	1	-4	-7	252	235	18	1	9	7	321	294	327
3	15	6	175	140	207	2	4	7	201	174	196	1	-9	-7	911	809	92
5	-15	-6	377	410	293	2	-4	-7	289	287	236	2	9	7	333	268	179
1	16	6	330	306	24	3	4	7	245	209	160	2	-9	-7	865	792	18
1	-16	-6	490	512	26	3	-4	-7	216	159	113	3	9	7	968	885	94
2	16	6	161	142	35	4	4	7	283	247	208	3	-9	-7	453	399	270
2	-16	-6	236	293	268	4	-4	-7	871	819	14	4	9	7	744	654	194
4	-16	-6	185	183	157	5	4	7	283	283	269	4	-9	-7	396	369	263
0	17	6	211	221	143	5	-4	-7	288	278	319	5	9	7	312	268	258
1	-17	-6	328	354	64	6	4	7	725	656	9	5	-9	-7	249	269	172
2	-17	-6	217	235	71	6	-4	-7	195	168	166	6	-9	-7	494	456	183
0	0	7	245	152	14	7	-4	-7	388	380	237	7	-9	-7	220	231	252
2	0	7	222	184	4	8	-4	-7	228	166	205	0	10	7	400	337	330
3	0	-7	153	6	159	0	5	7	338	289	143	1	10	7	190	199	107
4	0	7	203	204	10	1	5	7	229	209	19	1	-10	-7	533	481	229
4	0	-7	803	761	188	1	-5	-7	705	621	268	2	10	7	190	160	89