AM-81-165

American Mineralogist, Volume 66, pages 852-858, 1981

The crystal structure of jagoite

MARCELLO MELLINI AND STEFANO MERLINO

Istituto di Mineralogia e Petrografia dell' Università di Pisa and C.N.R.
Centro di Studio per la Geologia Strutturale e Dinamica dell' Appennino
via S. Maria 53, 56100 Pisa, Italy

Abstract

The crystal structure of jagoite ($a = 8.528(8)$, $c = 33.33(3)$Å) was solved and refined in space group $P\bar{6}2c$ to $R_1 = 0.057$.

The structure is characterized by the presence of double and single tetrahedral layers connected by a sheet of iron and lead cations. Other lead cations as well as chloride anions are located inside the double layer. The single layer is characterized by an incomplete net of tetrahedra: the absent tetrahedron at the origin is replaced by the Fe(1) octahedron. The double layer is made up of two tetrahedral sheets, each of them built up of six membered rings of tetrahedra and PbO_3 ψ-tetrahedra.

The chemical data give rise to the following crystal chemical formula:

$$(Pb^{2+}_{3.43}Na_{1.33}K_{0.57}Ca_{0.71})Pb^{2+}_{12}(Fe^{3+}_{1.99}Ti_{0.09}Mg_{1.00}Mn_{0.84}Ca_{0.08})$$
$$({}^{III}Pb^{2+}_{4}Si_{25.09}Be_{0.32}Al_{0.66}Fe^{3+}_{3.93})O_{79.81}(OH)_{1.28}Cl_{6.18}.$$

The corresponding idealized crystal chemical formula is

$${}^{VI}X_6Pb^{2+}_{12}{}^{VI}M_4(Si_4T_6)(Pb^{2+}_4Si_{16}T_4)O_{78}(O,OH)_4Cl_6.$$

The chemical and structural data suggest ordering of silicon and iron in tetrahedral sites and of iron, magnesium, and manganese in octahedral sites. Possible ordering schemes, in space group $P31c$, are proposed.

Introduction

Jagoite is a rare lead and iron silicate, which was described from Långban, Sweden, by Blix *et al.* (1957). On the basis of its physical properties and chemical composition they suggested that jagoite is a sheet silicate with unit cell content

$$(Pb,Ca,Mn,Na,K)_{24}(Fe^{3+},Al,Mg)_8$$
$$(Si,Al,Be)_{27}O_{84}(OH,Cl)_8.$$

The absence of adequate data concerning its crystal chemistry and its classification among the silicate minerals led us to undertake a crystal structure analysis.

Experimental

The specimen of jagoite from Långban used in this study (NMNH #113302) was kindly given us by Dr. J. S. White of the Smithsonian Institution.

Whereas Blix *et al.* (1957) reported that jagoite is trigonal with Laue group $\bar{3}$, no systematic extinctions, and lattice parameters $a = 8.65(3)$ and $c = 33.5(1)$Å, the many crystals we examined displayed the Laue symmetry $6/mmm$ and systematic extinctions in hhl for $l = 2n + 1$. This indicated $P6_3/mmc$, $P6_3mc$ and $P\bar{6}2c$ as possible space groups for jagoite. It is worthwhile to recall that Blix *et al.* (1957) reported that the "quality of the photographs was rather poor on account of the easiness with which the plates of jagoite are deformed." Actually, we too observed the easy deformability of jagoite crystals; notwithstanding, we obtained very fine diffraction patterns by carefully picking very tiny crystals.

From the many crystals we examined, a small platelet (nearly $0.17 \times 0.14 \times 0.03$ mm^3) was chosen for intensity data collection. The lattice parameters, refined by least squares fitting of 18 medium range θ values, were $a = 8.528(8)$, $c = 33.33(3)$Å, measured by a Philips PW1100 single crystal diffractometer, using graphite monochromatized MoKα radiation ($\lambda = 0.7107$Å). A total of 3376 reflections were collected by the same diffractometer and the same radiation

0003-004X/81/0708-0852$02.00

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR JAGOITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	1	0	131	124	0	2	1	326	328	3	7	1	162	164	3	4	2	135	140	0	1	3	261	262
1	1	0	180	160	1	2	1	413	406	2	7	1	91	85	4	4	2	62	60	0	1	3	260	262
0	2	0	99	101	2	3	1	305	304	1	7	1	149	146	4	5	2	108	101	1	2	3	131	178
1	2	0	418	412	1	3	1	179	174	0	7	1	216	212	3	5	2	120	122	0	2	3	295	306
2	2	0	366	347	0	3	1	59	61	0	7	1	208	212	2	5	2	144	155	0	2	3	304	306
0	3	0	955	981	0	3	1	52	61	1	7	1	123	146	1	5	2	159	161	1	2	3	181	178
1	3	0	586	604	1	3	1	182	174	2	7	1	101	85	0	5	2	274	266	2	3	3	280	274
2	3	0	143	146	2	3	1	305	304	3	7	1	161	164	0	5	2	276	266	1	3	3	303	304
3	3	0	322	318	3	4	1	309	311	1	8	1	97	100	1	5	2	156	161	0	3	3	75	73
0	4	0	325	315	2	4	1	83	67	0	8	1	131	139	2	5	2	142	155	0	3	3	72	73
1	4	0	551	547	1	4	1	119	127	0	8	1	135	139	3	5	2	120	122	1	3	3	302	304
2	4	0	260	260	0	4	1	239	234	1	8	1	95	100	4	5	2	96	101	2	3	3	272	274
3	4	0	313	314	0	4	1	242	234	0	9	1	101	107	5	5	2	67	51	3	4	3	224	231
4	4	0	475	494	1	4	1	122	127	0	9	1	86	107	4	6	2	163	167	2	4	3	227	225
0	5	0	190	188	2	4	1	81	67	0	1	2	22	26	3	6	2	183	198	1	4	3	323	323
1	5	0	308	302	3	4	1	308	311	0	1	2	35	26	2	6	2	109	116	0	4	3	501	512
2	5	0	375	385	4	5	1	119	115	1	1	2	530	521	1	5	2	130	122	0	4	3	509	512
3	5	0	193	186	3	5	1	104	116	1	2	2	214	220	0	6	2	43	46	1	4	3	327	323
4	5	0	147	135	2	5	1	102	97	0	2	2	287	280	0	5	2	50	46	2	4	3	222	225
5	5	0	207	232	1	5	1	122	128	0	2	2	282	280	1	6	2	111	122	3	4	3	222	231
0	6	0	82	84	0	5	1	246	233	1	2	2	207	220	2	6	2	113	116	4	5	3	279	289
1	6	0	184	177	0	5	1	237	233	2	2	2	256	251	3	6	2	182	198	3	5	3	316	323
2	6	0	101	98	1	5	1	128	128	2	3	2	381	378	4	6	2	153	167	2	5	3	292	296
3	6	0	82	73	2	5	1	93	97	1	3	2	95	94	3	7	2	25	21	1	5	3	336	353
4	6	0	163	157	3	5	1	98	116	0	3	2	29	35	2	7	2	59	39	0	5	3	47	26
0	7	0	25	36	4	5	1	107	115	0	3	2	30	35	1	7	2	140	131	0	5	3	40	26
1	7	0	432	451	4	6	1	193	208	1	3	2	93	94	0	7	2	52	25	1	5	3	337	353
2	7	0	251	247	3	6	1	129	123	2	3	2	373	378	0	7	2	42	25	2	5	3	291	296
3	7	0	93	86	2	6	1	79	92	3	3	2	59	38	1	7	2	134	131	3	5	3	304	323
0	8	0	125	114	1	6	1	146	148	3	4	2	134	140	2	7	2	45	39	4	5	3	275	289
1	8	0	158	146	0	6	1	333	335	2	4	2	245	244	3	7	2	51	21	4	6	3	130	151
0	9	0	24	24	0	6	1	335	335	1	4	2	174	178	1	8	2	97	105	3	6	3	124	128
0	1	1	112	98	1	6	1	140	148	0	4	2	61	68	0	8	2	43	8	2	6	3	226	237
0	1	1	109	98	2	6	1	77	92	0	4	2	63	68	1	8	2	113	105	1	6	3	107	103
1	2	1	414	406	3	6	1	128	123	1	4	2	187	178	0	9	2	103	111	0	6	3	117	114
0	2	1	330	328	4	6	1	201	208	2	4	2	239	244	0	9	2	113	111	0	6	3	113	114

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR JAGOITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	6	3	112	103	1	4	4	75	67	1	8	4	74	67	4	6	5	123	123	0	3	6	129	126
2	6	3	228	237	0	4	4	12	18	0	8	4	90	99	3	6	5	137	196	1	3	6	451	449
3	6	3	119	128	0	4	4	7	18	0	8	4	79	99	2	6	5	195	204	2	3	6	472	464
4	6	3	136	151	1	4	4	67	67	1	8	4	70	67	1	6	5	118	131	3	3	6	342	342
3	7	3	78	97	2	4	4	248	255	0	9	4	19	14	0	5	5	405	404	3	4	6	282	281
2	7	3	86	90	3	4	4	63	59	0	9	4	35	14	0	5	5	413	404	2	4	6	239	243
1	7	3	398	399	4	4	4	88	84	0	1	5	161	169	1	6	5	123	131	1	4	6	250	254
0	7	3	137	152	4	5	4	122	120	0	1	5	165	169	2	6	5	197	204	0	4	6	301	307
0	7	3	143	152	3	5	4	56	46	1	2	5	486	485	3	6	5	187	196	0	4	6	304	307
1	7	3	390	399	2	5	4	107	111	0	2	5	77	68	4	6	5	123	123	1	4	6	253	254
2	7	3	96	90	1	5	4	138	137	0	2	5	77	68	3	7	5	181	189	2	4	6	244	243
3	7	3	105	97	0	5	4	151	156	1	2	5	433	485	2	7	5	204	220	3	4	6	234	261
1	8	3	94	95	0	5	4	157	156	2	3	5	381	366	1	7	5	175	179	4	4	6	105	118
0	8	3	44	65	1	5	4	135	137	1	3	5	147	142	0	7	5	67	49	4	5	6	60	72
0	8	3	40	65	2	5	4	102	111	0	3	5	293	294	0	7	5	54	49	3	5	6	321	311
1	8	3	90	95	3	5	4	49	46	0	3	5	298	294	1	7	5	158	179	2	5	6	160	163
0	9	3	259	279	4	5	4	98	120	1	3	5	146	142	2	7	5	225	220	1	5	6	284	285
0	9	3	268	279	5	5	4	110	114	2	3	5	372	366	3	7	5	159	189	0	5	6	406	409
0	0	4	25	12	4	6	4	62	64	3	4	5	257	247	1	8	5	90	94	0	5	6	400	409
0	1	4	66	64	3	6	4	56	30	2	4	5	282	275	0	8	5	71	36	1	5	6	281	285
0	1	4	58	64	2	6	4	73	66	1	4	5	160	170	0	8	5	40	36	2	5	6	160	163
1	1	4	347	356	1	6	4	52	53	0	4	5	87	86	1	8	5	104	94	3	5	6	316	311
1	2	4	204	203	0	6	4	128	121	0	4	5	84	86	0	9	5	234	249	4	5	6	70	72
0	2	4	106	106	0	6	4	125	121	1	4	5	170	170	0	9	5	234	249	5	5	6	299	306
0	2	4	102	106	1	6	4	50	53	2	4	5	279	275	0	0	6	666	739	4	6	6	254	262
1	2	4	203	203	2	6	4	90	66	3	4	5	242	247	0	1	6	57	42	3	6	6	252	264
2	2	4	106	103	3	6	4	38	30	4	5	5	176	190	0	1	6	50	42	2	6	6	167	169
2	3	4	203	201	4	6	4	67	64	3	5	5	143	138	1	1	6	910	940	1	6	6	193	187
1	3	4	93	92	3	7	4	67	60	2	5	5	181	170	1	2	6	422	420	0	6	6	487	485
0	3	4	96	96	2	7	4	86	100	1	5	5	311	319	0	2	6	523	527	0	6	6	477	485
0	3	4	104	96	1	7	4	112	102	0	5	5	33	22	0	2	6	532	527	1	6	6	201	187
1	3	4	90	92	0	7	4	92	97	0	5	5	32	22	1	2	6	419	420	2	6	6	160	169
2	3	4	198	201	0	7	4	101	97	1	5	5	313	319	2	2	6	397	382	3	6	6	232	264
3	3	4	174	182	1	7	4	110	102	2	5	5	172	170	2	3	6	470	464	4	6	6	249	262
3	4	4	70	59	2	7	4	84	100	3	5	5	134	138	1	3	6	451	449	3	7	6	150	169
2	4	4	261	255	3	7	4	70	60	4	5	5	187	190	0	3	6	136	126	2	7	6	128	144

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR JAGOITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	7	6	110	108	0	5	7	81	71	2	2	8	278	277	3	6	8	71	65	1	5	9	245	263
0	7	6	52	53	0	5	7	74	71	2	3	8	394	395	4	5	8	186	188	0	5	9	30	32
0	7	6	52	53	1	5	7	150	149	1	3	8	158	160	3	7	8	46	15	0	5	9	40	32
1	7	6	87	108	2	5	7	116	111	0	3	8	425	417	2	7	8	64	44	1	5	9	248	263
2	7	6	134	144	3	5	7	130	124	0	3	8	428	417	1	7	8	256	269	2	5	9	254	269
3	7	6	160	169	4	5	7	182	181	1	3	8	168	160	0	7	8	184	184	3	5	9	307	305
1	8	6	116	116	4	6	7	28	24	2	3	8	392	395	0	7	8	134	134	4	5	9	214	217
0	8	6	181	181	3	6	7	57	44	3	3	8	222	215	1	7	8	252	269	4	6	9	151	155
0	8	6	175	181	2	6	7	208	218	3	4	8	66	65	2	7	8	50	44	3	6	9	116	122
1	8	6	122	116	1	6	7	113	117	2	4	8	272	268	1	8	8	114	106	2	6	9	235	251
0	9	6	281	299	0	6	7	298	300	1	4	8	143	148	0	8	8	71	87	1	6	9	97	118
0	9	6	286	299	0	6	7	303	300	0	4	8	129	127	0	8	8	80	87	0	6	9	137	138
0	1	7	245	251	1	6	7	115	117	0	4	8	121	127	1	8	8	110	106	0	6	9	145	138
0	1	7	234	251	2	6	7	212	218	1	4	8	145	148	0	1	9	284	299	1	6	9	125	118
1	2	7	356	361	3	6	7	60	44	2	4	8	272	268	0	1	9	292	299	2	6	9	236	251
0	2	7	23	22	4	6	7	46	24	3	4	8	70	65	1	2	9	195	197	3	6	9	114	122
0	2	7	16	22	3	7	7	101	121	4	4	8	210	214	0	2	9	194	214	4	6	9	129	155
1	2	7	363	361	2	7	7	171	171	4	5	8	129	122	0	2	9	197	214	3	7	9	76	73
2	3	7	197	200	1	7	7	106	87	3	5	8	126	123	1	2	9	193	197	2	7	9	43	47
1	3	7	231	237	0	7	7	32	24	2	5	8	235	256	2	3	9	291	290	1	7	9	323	325
0	3	7	32	26	0	7	7	44	24	1	5	8	42	30	1	3	9	316	323	0	7	9	154	168
0	3	7	29	26	1	7	7	79	87	0	5	8	416	414	0	3	9	34	35	0	7	9	152	168
1	3	7	231	237	2	7	7	166	171	0	5	8	410	414	0	3	9	35	35	1	7	9	318	325
2	3	7	199	200	3	7	7	122	121	1	5	8	26	30	1	3	9	319	323	2	7	9	50	47
3	4	7	84	88	1	8	7	83	78	2	5	8	238	256	2	3	9	293	290	3	7	9	68	78
2	4	7	227	224	0	8	7	84	99	3	5	8	130	123	3	4	9	246	246	1	8	9	74	79
1	4	7	126	128	0	8	7	93	99	4	5	8	136	122	2	4	9	116	124	0	8	9	28	65
0	4	7	199	201	1	8	7	77	78	5	5	8	182	202	1	4	9	237	244	0	8	9	61	65
0	4	7	195	201	0	0	8	172	140	4	6	8	184	188	0	4	9	461	461	1	8	9	93	79
1	4	7	122	128	0	1	8	49	29	3	6	8	58	65	0	4	9	451	461	0	0	10	491	495
2	4	7	237	224	0	1	8	25	29	2	6	8	184	176	1	4	9	251	244	0	1	10	126	134
3	4	7	79	88	1	1	8	783	853	1	6	8	173	169	2	4	9	116	124	0	1	10	120	134
4	5	7	163	181	1	2	8	257	251	0	6	8	204	200	3	4	9	250	246	1	1	10	214	215
3	5	7	131	124	0	2	8	400	412	0	6	8	197	200	4	5	9	221	217	1	2	10	90	93
2	5	7	106	111	0	2	8	405	412	1	6	8	165	169	3	5	9	300	305	0	2	10	110	114
1	5	7	147	149	1	2	8	257	251	2	6	8	175	176	2	5	9	255	269	0	2	10	112	114

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR JAGOITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	2	10	94	93	2	6	10	84	83	2	5	11	149	154	2	2	12	181	183	4	6	12	84	84
2	2	10	45	48	3	6	10	95	74	1	5	11	227	226	2	3	12	49	59	2	7	12	220	219
2	3	10	190	191	4	6	10	61	63	0	5	11	228	232	1	3	12	454	458	1	7	12	302	318
1	3	10	138	138	2	7	10	77	70	0	5	11	223	232	0	3	12	653	692	0	7	12	101	80
0	3	10	117	106	1	7	10	83	91	1	5	11	216	226	0	3	12	678	692	0	7	12	79	85
0	3	10	109	106	0	7	10	40	10	2	5	11	160	154	1	3	12	478	458	1	7	12	296	318
1	3	10	126	138	0	7	10	51	10	3	5	11	149	160	2	3	12	56	59	2	7	12	223	219
2	3	10	181	191	1	7	10	93	91	4	5	11	108	116	3	3	12	93	76	1	8	12	167	153
3	3	10	68	61	2	7	10	75	70	4	6	11	200	221	3	4	12	318	317	0	8	12	49	13
3	4	10	146	138	1	8	10	89	97	3	6	11	204	208	2	4	12	225	224	1	8	12	156	153
2	4	10	107	104	0	8	10	29	40	2	6	11	182	194	1	4	12	313	312	0	0	13	69	0
1	4	10	119	128	0	8	10	42	40	1	6	11	194	195	0	4	12	385	396	0	1	13	59	53
0	4	10	180	194	1	8	10	103	97	0	6	11	428	427	0	4	12	395	396	0	1	13	67	53
0	4	10	172	194	0	0	11	22	0	0	6	11	428	427	1	4	12	298	312	1	2	13	262	276
1	4	10	120	128	0	1	11	183	169	1	6	11	191	195	2	4	12	234	224	0	2	13	384	390
2	4	10	116	104	0	1	11	171	169	2	6	11	190	194	3	4	12	317	317	0	2	13	395	390
3	4	10	140	138	1	2	11	431	436	3	6	11	201	208	4	4	12	326	343	1	2	13	274	276
4	4	10	45	48	0	2	11	242	244	4	6	11	210	221	4	5	12	132	119	2	3	13	181	182
4	5	10	61	28	0	2	11	238	244	2	7	11	125	119	3	5	12	192	183	1	3	13	133	128
3	5	10	116	103	1	2	11	434	436	1	7	11	225	246	2	5	12	239	248	0	3	13	110	112
2	5	10	85	81	2	3	11	382	386	0	7	11	251	268	1	5	12	151	132	0	3	13	100	112
1	5	10	47	37	1	3	11	203	197	0	7	11	251	268	0	5	12	102	115	1	3	13	134	128
0	5	10	149	148	0	3	11	181	184	1	7	11	235	246	0	5	12	93	115	2	3	13	185	182
0	5	10	143	148	0	3	11	180	184	2	7	11	111	119	1	5	12	134	132	3	4	13	161	158
1	5	10	46	37	1	3	11	204	197	1	8	11	95	90	2	5	12	239	248	2	4	13	146	149
2	5	10	78	81	2	3	11	390	386	0	8	11	146	139	3	5	12	190	183	1	4	13	184	194
3	5	10	101	103	3	4	11	403	404	0	8	11	143	139	4	5	12	113	119	0	4	13	46	15
4	5	10	32	23	2	4	11	127	126	1	8	11	87	90	5	5	12	137	199	0	4	13	25	15
5	5	10	101	78	1	4	11	154	156	0	0	12	1276	1311	4	6	12	79	84	1	4	13	173	190
4	6	10	68	63	0	4	11	384	392	0	1	12	279	282	3	6	12	91	79	2	4	13	135	149
3	6	10	80	74	0	4	11	395	392	0	1	12	267	282	2	6	12	80	86	3	4	13	157	153
2	6	10	103	83	1	4	11	151	156	1	1	12	332	311	1	6	12	137	184	4	5	13	166	191
1	6	10	80	76	2	4	11	131	126	1	2	12	257	264	0	6	12	9	10	3	5	13	75	71
0	6	10	70	60	3	4	11	404	404	0	2	12	98	87	1	5	12	184	184	2	5	13	113	125
0	6	10	63	60	4	5	11	122	116	0	2	12	85	87	2	6	12	81	86	1	5	13	174	185
1	6	10	76	76	3	5	11	166	160	1	2	12	269	264	3	6	12	38	79	0	5	13	151	152

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	5	13	143	152	1	3	14	215	214	1	8	14	74	82	1	5	15	70	81	3	4	16	160	159
1	5	13	172	185	2	3	14	414	409	0	8	14	14	40	0	5	15	49	29	4	4	16	99	93
2	5	13	116	125	3	3	14	53	46	0	8	14	67	40	1	6	15	74	81	4	5	16	55	73
3	5	13	82	71	3	4	14	176	172	1	8	14	75	82	2	6	15	175	166	3	5	16	104	98
4	5	13	170	191	2	4	14	338	351	0	0	15	34	0	3	6	15	81	85	2	5	16	20	23
3	6	13	74	28	1	4	14	132	142	0	1	15	39	25	2	7	15	110	108	1	5	16	172	180
2	6	13	34	19	0	4	14	115	141	0	1	15	39	25	1	7	15	281	298	0	5	16	125	124
1	6	13	120	140	0	4	14	118	141	1	2	15	205	189	0	7	15	47	45	0	5	16	111	124
0	6	13	168	177	1	4	14	131	142	0	2	15	304	316	0	7	15	35	45	1	5	16	175	180
0	6	13	174	177	2	4	14	362	351	0	2	15	304	316	1	7	15	231	298	2	5	16	16	23
1	6	13	147	140	3	4	14	164	172	1	2	15	209	189	2	7	15	89	108	3	5	16	95	98
2	6	13	67	19	4	4	14	109	116	2	3	15	231	227	0	8	15	55	7	4	5	16	73	73
3	6	13	59	28	4	5	14	91	81	1	3	15	175	173	0	8	15	41	7	3	6	16	35	16
2	7	13	37	98	3	5	14	164	189	0	3	15	55	7	0	0	16	746	713	2	6	16	39	33
1	7	13	115	129	2	5	14	147	162	1	3	15	183	173	0	1	16	89	74	1	6	16	54	51
0	7	13	102	114	1	5	14	208	216	2	3	15	233	227	0	1	16	84	74	0	6	16	110	120
0	7	13	114	114	0	5	14	399	423	3	4	15	96	98	1	1	16	235	246	0	6	16	116	120
1	7	13	125	129	0	5	14	407	423	2	4	15	203	208	1	2	16	244	255	1	6	16	41	51
2	7	13	122	98	1	5	14	201	216	1	4	15	212	215	0	2	16	93	85	2	6	16	70	33
1	8	13	116	129	2	5	14	169	162	0	4	15	261	280	0	2	16	92	85	3	6	16	46	16
0	8	13	77	96	3	5	14	179	189	0	4	15	254	280	1	2	16	258	255	2	7	16	69	70
0	8	13	99	96	4	5	14	81	81	1	4	15	213	215	2	2	16	71	69	1	7	16	75	78
1	8	13	117	129	3	6	14	195	217	2	4	15	204	208	2	3	16	63	69	0	7	16	165	158
0	0	14	265	248	2	6	14	188	194	3	4	15	110	98	1	3	16	219	221	0	7	16	154	158
0	1	14	39	32	1	6	14	187	195	4	5	15	254	252	0	3	16	219	232	1	7	16	71	78
0	1	14	52	32	0	6	14	63	51	3	5	15	216	221	0	3	16	228	232	2	7	16	70	70
1	1	14	579	584	0	6	14	37	51	2	5	15	224	232	1	3	16	241	221	0	8	16	115	126
1	2	14	291	298	1	6	14	174	195	1	5	15	281	296	2	3	16	67	69	0	8	16	112	126
0	2	14	429	452	2	6	14	193	194	0	5	15	125	118	3	3	16	93	94	0	0	17	53	0
0	2	14	437	452	3	6	14	198	217	0	5	15	123	118	3	4	16	154	159	0	1	17	140	134
1	2	14	300	298	2	7	14	50	44	1	5	15	277	296	2	4	16	147	151	0	1	17	140	134
2	2	14	265	273	1	7	14	156	151	2	5	15	240	232	1	4	16	99	111	1	2	17	517	491
2	3	14	404	409	0	7	14	68	58	3	5	15	225	221	0	4	16	61	46	0	2	17	74	68
1	3	14	207	214	0	7	14	49	58	4	5	15	239	252	0	4	16	33	46	0	2	17	57	68
0	3	14	317	328	1	7	14	137	151	3	6	15	79	85	1	4	16	93	111	1	2	17	522	491
0	3	14	337	328	2	7	14	51	44	2	6	15	162	166	2	4	16	160	151	2	3	17	341	351

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR JAGOITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	3	17	108	102	2	7	17	243	243	4	5	18	74	65	2	4	19	98	103	1	3	20	271	282
0	3	17	125	126	0	8	17	51	11	3	6	18	190	213	3	4	19	140	148	0	3	20	307	312
0	3	17	127	126	0	0	18	734	690	2	6	18	110	101	4	5	19	61	55	0	3	20	330	312
1	3	17	100	102	0	1	18	67	54	1	6	18	122	120	3	5	19	220	228	1	3	20	317	282
2	3	17	353	351	0	1	18	68	54	0	6	18	306	314	2	5	19	137	140	2	3	20	290	279
3	4	17	252	252	1	1	18	555	517	0	6	18	293	314	1	5	19	92	92	3	3	20	131	127
2	4	17	345	340	1	2	18	334	316	1	6	18	114	120	0	5	19	62	56	3	4	20	83	87
1	4	17	142	146	0	2	18	307	305	2	6	18	101	101	0	5	19	52	56	2	4	20	319	325
0	4	17	134	160	0	2	18	312	305	3	6	18	210	213	1	5	19	89	92	1	4	20	48	70
0	4	17	153	160	1	2	18	348	316	2	7	18	105	114	2	5	19	155	140	0	4	20	172	162
1	4	17	146	146	2	2	18	370	353	1	7	18	62	60	3	5	19	219	228	0	4	20	163	162
2	4	17	356	340	2	3	18	229	239	0	7	18	116	113	4	5	19	68	55	1	4	20	68	70
3	4	17	259	252	1	3	18	316	321	0	7	18	97	113	3	6	19	43	14	2	4	20	339	325
4	5	17	266	286	0	3	18	75	70	1	7	18	70	60	2	6	19	171	183	3	4	20	90	87
3	5	17	113	114	0	3	18	72	70	2	7	18	129	114	1	6	19	81	91	4	4	20	152	185
2	5	17	164	149	1	3	18	363	321	0	8	18	149	164	0	6	19	35	18	4	5	20	172	169
1	5	17	369	387	2	3	18	253	239	0	8	18	152	164	0	6	19	48	18	3	5	20	89	95
0	5	17	33	15	3	3	18	290	262	0	0	19	71	0	1	6	19	86	91	2	5	20	198	204
0	5	17	38	15	3	4	18	193	206	0	1	19	325	306	2	6	19	204	188	1	5	20	139	131
1	5	17	381	387	2	4	18	191	205	0	1	19	336	306	3	6	19	62	14	0	5	20	307	320
2	5	17	160	149	1	4	18	146	147	1	2	19	141	144	1	7	19	135	132	0	5	20	304	320
3	5	17	117	114	0	4	18	63	86	0	2	19	26	13	0	7	19	119	140	1	5	20	123	131
4	5	17	286	286	0	4	18	72	86	0	2	19	25	13	0	7	19	124	140	2	5	20	219	204
3	6	17	181	192	1	4	18	185	147	1	2	19	137	144	1	7	19	139	132	3	5	20	107	95
2	6	17	169	190	2	4	18	207	205	2	3	19	112	79	0	8	19	68	104	4	5	20	176	169
1	6	17	111	112	3	4	18	218	206	1	3	19	289	303	0	8	19	84	104	3	6	20	75	79
0	6	17	391	407	4	4	18	66	70	0	3	19	82	86	0	0	20	507	420	2	6	20	113	101
0	6	17	384	407	4	5	18	73	65	0	3	19	87	86	0	1	20	179	171	1	6	20	165	159
1	6	17	102	112	3	5	18	213	206	1	3	19	346	303	0	1	20	193	171	0	6	20	80	86
2	6	17	172	190	2	5	18	144	128	2	3	19	90	79	1	1	20	643	599	0	6	20	81	86
3	6	17	183	192	1	5	18	205	216	3	4	19	141	148	1	2	20	256	241	1	6	20	169	159
2	7	17	233	243	0	5	18	239	247	2	4	19	109	103	0	2	20	25[illegible]	244	2	6	20	115	101
1	7	17	256	265	0	5	18	240	247	1	4	19	160	162	0	2	20	254	244	3	6	20	78	79
0	7	17	93	92	1	5	18	219	216	0	4	19	314	319	1	2	20	254	241	1	7	20	215	235
0	7	17	98	92	2	5	18	131	128	0	4	19	314	319	2	2	20	266	251	0	7	20	162	160
1	7	17	234	265	3	5	18	208	206	1	4	19	182	162	2	3	20	265	279	0	7	20	170	160

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	7	20	207	235	2	6	21	213	189	2	5	22	142	130	0	5	23	146	157	1	4	24	236	219
0	0	21	75	0	1	7	21	198	213	3	5	22	181	162	0	5	23	152	157	2	4	24	115	104
0	1	21	284	273	0	7	21	85	108	2	6	22	75	71	1	5	23	252	234	3	4	24	199	197
0	1	21	304	273	0	7	21	73	108	1	6	22	107	39	2	5	23	177	160	4	4	24	216	232
1	2	21	58	70	1	7	21	200	213	0	6	22	65	70	3	5	23	163	163	3	5	24	133	117
0	2	21	111	117	0	0	22	631	569	0	6	22	64	70	2	6	23	159	174	2	5	24	154	163
0	2	21	127	117	0	1	22	88	54	1	6	22	115	89	1	6	23	159	175	1	5	24	115	119
1	2	21	66	70	0	1	22	78	54	2	6	22	30	71	0	6	23	379	389	0	5	24	36	52
2	3	21	98	90	1	1	22	251	242	1	7	22	101	126	0	6	23	375	389	0	5	24	66	52
1	3	21	182	202	1	2	22	198	183	0	7	22	39	18	1	6	23	153	175	1	5	24	148	119
0	3	21	33	10	0	2	22	185	185	0	7	22	46	18	2	6	23	196	174	2	5	24	182	163
1	3	21	224	202	0	2	22	198	185	1	7	22	112	126	1	7	23	207	224	3	5	24	130	117
2	3	21	75	90	1	2	22	190	183	0	0	23	78	0	0	7	23	187	212	2	6	24	109	122
3	4	21	152	160	2	2	22	146	135	0	1	23	152	146	0	7	23	193	212	1	6	24	119	135
2	4	21	54	66	2	3	22	232	221	0	1	23	167	146	1	7	23	219	224	0	6	24	17	8
1	4	21	193	196	1	3	22	246	235	1	2	23	331	310	0	0	24	813	750	0	6	24	39	9
0	4	21	356	362	0	3	22	212	213	0	2	23	83	75	0	1	24	230	207	1	6	24	143	135
0	4	21	364	362	0	3	22	212	213	0	2	23	83	75	0	1	24	235	207	2	6	24	110	122
1	4	21	204	196	1	3	22	248	235	1	2	23	335	310	1	1	24	46	41	0	7	24	53	49
2	4	21	84	66	2	3	22	225	221	2	3	23	343	351	1	2	24	135	113	0	7	24	51	49
3	4	21	154	160	3	3	22	71	71	1	3	23	119	120	0	2	24	122	111	0	0	25	93	0
4	5	21	78	93	3	4	22	154	162	0	3	23	155	163	0	2	24	112	111	0	1	25	59	41
3	5	21	185	192	2	4	22	116	115	0	3	23	173	163	1	2	24	134	113	0	1	25	60	41
2	5	21	149	161	1	4	22	180	170	1	3	23	128	120	2	2	24	141	136	1	2	25	237	219
1	5	21	124	122	0	4	22	227	243	2	3	23	372	351	2	3	24	133	131	0	2	25	325	297
0	5	21	84	101	0	4	22	234	243	3	4	23	347	349	1	3	24	292	290	0	2	25	332	297
0	5	21	102	101	1	4	22	188	170	2	4	23	125	122	0	3	24	401	386	1	2	25	241	219
1	5	21	132	122	2	4	22	116	115	1	4	23	133	124	0	3	24	413	386	2	3	25	237	233
2	5	21	185	161	3	4	22	157	162	0	4	23	333	336	1	3	24	326	290	1	3	25	120	106
3	5	21	201	192	4	4	22	77	106	0	4	23	346	336	2	3	24	142	131	0	3	25	17	16
4	5	21	98	93	3	5	22	151	162	1	4	23	131	124	3	3	24	115	109	0	3	25	50	16
2	6	21	184	189	2	5	22	128	130	2	4	23	147	122	3	4	24	199	197	1	3	25	117	106
1	6	21	98	89	1	5	22	132	133	3	4	23	349	349	2	4	24	90	104	2	3	25	236	233
0	6	21	50	56	0	5	22	119	126	3	5	23	152	163	1	4	24	205	219	3	4	25	86	77
0	6	21	27	56	0	5	22	129	126	2	5	23	173	160	0	4	24	262	259	2	4	25	178	196
1	6	21	81	89	1	5	22	148	133	1	5	23	213	234	0	4	24	288	259	1	4	25	145	145

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR JAGOITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	4	25	116	113	2	4	26	181	198	2	4	27	62	69	0	4	28	126	134	1	5	29	250	252
0	4	25	123	113	1	4	26	110	115	1	4	27	151	113	0	4	28	113	134	0	5	29	47	16
1	4	25	157	145	0	4	26	41	20	0	4	27	75	65	1	4	28	93	73	0	5	29	61	16
2	4	25	191	196	0	4	26	41	20	0	4	27	66	65	2	4	28	166	149	1	5	29	258	252
3	4	25	84	77	1	4	26	121	115	1	4	27	122	113	3	4	28	196	187	2	5	29	140	123
3	5	25	140	150	2	4	26	205	193	2	4	27	75	69	2	5	28	53	46	0	6	29	305	320
2	5	25	159	161	3	4	26	74	95	3	4	27	92	69	1	5	28	136	131	0	6	29	319	320
1	5	25	243	247	4	4	26	89	95	2	5	27	101	98	0	5	28	113	123	0	0	30	72	42
0	5	25	151	166	3	5	26	156	159	1	5	27	147	130	0	5	28	134	123	0	1	30	75	40
0	5	25	162	166	2	5	26	145	154	0	5	27	108	116	1	5	28	145	131	0	1	30	37	40
1	5	25	275	247	1	5	26	112	103	0	5	27	105	116	2	5	28	46	46	1	1	30	323	307
2	5	25	165	161	0	5	26	348	368	1	5	27	143	130	1	6	28	76	77	1	2	30	125	108
3	5	25	169	150	0	5	26	373	368	2	5	27	81	98	0	6	28	143	147	0	2	30	42	50
2	6	25	119	115	1	5	26	135	103	1	6	27	70	86	0	6	28	157	147	0	2	30	78	50
1	6	25	125	119	2	5	26	156	154	0	6	27	48	41	1	6	28	90	77	1	2	30	128	108
0	6	25	38	27	3	5	26	175	159	0	6	27	41	41	0	0	29	79	0	2	2	30	263	225
0	6	25	49	27	1	6	26	134	147	1	6	27	90	86	0	1	29	74	52	2	3	30	146	123
1	6	25	142	119	0	6	26	108	109	0	0	28	851	789	0	1	29	54	52	1	3	30	66	81
2	6	25	118	115	0	6	26	85	109	0	1	28	55	15	1	2	29	360	323	0	3	30	225	199
0	0	26	213	161	1	6	26	154	147	0	1	28	49	15	0	2	29	25	10	0	3	30	226	199
0	1	26	76	47	0	7	26	65	30	1	1	28	284	260	1	2	29	347	323	1	3	30	90	81
0	1	26	54	47	0	7	26	62	30	1	2	28	221	208	2	3	29	283	271	2	3	30	146	123
1	1	26	657	565	0	0	27	54	0	0	2	28	113	106	1	3	29	38	37	3	3	30	320	284
1	2	26	224	216	0	1	27	39	27	0	2	28	125	106	0	3	29	123	106	3	4	30	119	108
0	2	26	371	348	0	1	27	66	27	1	2	28	232	208	0	3	29	119	106	2	4	30	80	83
0	2	26	372	348	1	2	27	191	170	2	2	28	172	139	1	3	29	60	37	1	4	30	171	165
1	2	26	245	216	0	2	27	268	252	2	3	28	87	104	2	3	29	291	271	0	4	30	137	125
2	2	26	227	197	0	2	27	281	252	1	3	28	253	244	3	4	29	214	220	0	4	30	124	125
2	3	26	410	373	1	2	27	174	170	0	3	28	275	269	2	4	29	225	218	1	4	30	182	165
1	3	26	132	134	2	3	27	139	141	0	3	28	303	269	1	4	29	117	106	2	4	30	87	83
0	3	26	141	129	1	3	27	66	79	1	3	28	261	244	0	4	29	131	154	3	4	30	134	108
0	3	26	142	129	0	3	27	18	29	2	3	28	113	104	0	4	29	140	154	1	5	30	103	102
1	3	26	148	134	0	3	27	28	29	3	3	28	21	40	1	4	29	148	106	0	5	30	34	42
2	3	26	417	373	1	3	27	55	79	3	4	28	176	187	2	4	29	239	218	0	5	30	54	42
3	3	26	23	9	2	3	27	160	141	2	4	28	133	149	3	4	29	215	220	1	5	30	114	102
3	4	26	101	95	3	4	27	61	69	1	4	28	58	73	2	5	29	118	123	0	6	30	215	229

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR JAGOITE

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	6	30	236	229	0	3	32	314	287	0	4	33	147	120	2	2	35	52	0	0	2	37	241	226
0	0	31	55	0	0	3	32	334	287	1	4	33	76	75	2	3	35	198	189	0	2	37	256	226
0	1	31	269	236	1	3	32	198	184	2	4	33	113	84	1	3	35	119	106	1	2	37	225	202
0	1	31	275	236	2	3	32	198	190	0	5	33	36	25	0	3	35	77	57	2	2	37	12	0
1	2	31	26	41	3	3	32	154	124	0	5	33	65	25	0	3	35	83	57	1	3	37	76	74
0	2	31	34	6	2	4	32	278	263	0	0	34	674	614	1	3	35	145	106	0	3	37	32	21
1	2	31	75	41	1	4	32	77	78	0	1	34	69	45	2	3	35	196	189	0	3	37	60	21
2	3	31	166	143	0	4	32	146	133	1	1	34	304	280	1	4	35	105	74	1	3	37	77	74
1	3	31	260	251	0	4	32	151	133	1	2	34	160	158	0	4	35	183	176	0	0	38	90	21
0	3	31	42	9	1	4	32	95	78	0	2	34	178	165	0	4	35	198	176	0	1	38	50	16
1	3	31	284	251	2	4	32	269	263	0	2	34	172	165	1	4	35	110	74	0	1	38	64	16
2	3	31	177	143	1	5	32	122	116	1	2	34	158	158	0	0	35	295	292	1	1	38	369	312
2	4	31	60	51	0	5	32	153	152	2	2	34	125	111	0	1	36	53	68	1	2	38	207	160
1	4	31	153	155	0	5	32	163	152	2	3	34	155	163	0	1	36	77	68	0	2	38	131	124
0	4	31	413	374	1	5	32	119	116	1	3	34	263	251	1	1	35	214	185	0	2	38	101	124
0	4	31	432	374	0	1	33	143	116	0	3	34	257	245	1	2	36	54	46	1	2	38	190	160
1	4	31	187	155	0	1	33	15[illegible]	116	0	3	34	273	245	0	2	36	157	141	2	2	38	240	219
2	4	31	64	51	1	1	33	70	0	1	3	34	266	251	0	2	35	163	141	0	3	38	49	4
1	5	31	137	121	1	2	33	120	110	2	3	34	190	163	1	2	36	77	46	0	3	38	50	4
0	5	31	133	114	0	2	33	37	35	1	4	34	104	93	2	2	36	107	87	0	1	39	102	86
0	5	31	152	114	0	2	33	33	35	0	4	34	181	169	2	3	36	157	159	0	1	39	78	86
1	5	31	160	121	1	2	33	140	110	0	4	34	210	169	1	3	36	57	61	1	1	39	68	0
0	0	32	413	341	2	2	33	58	0	1	4	34	88	93	0	3	36	184	160	1	2	39	173	150
0	1	32	148	125	2	3	33	70	76	0	5	34	163	163	0	3	36	172	160	0	2	39	152	137
0	1	32	154	125	1	3	33	166	162	0	5	34	166	163	1	3	36	74	61	0	2	39	153	137
1	1	32	434	368	0	3	33	51	55	0	0	35	53	0	2	3	36	185	159	1	2	39	175	150
1	2	32	219	201	0	3	33	78	55	0	1	35	87	38	0	4	36	59	60	0	0	40	577	535
0	2	32	154	140	1	3	33	176	162	0	1	35	32	38	0	4	36	59	60	0	1	40	95	76
0	2	32	161	140	2	3	33	93	76	1	1	35	69	0	0	0	37	69	0	0	1	40	83	76
1	2	32	226	201	3	3	33	46	0	1	2	35	244	229	0	1	37	32	2	1	1	40	254	252
2	2	32	148	130	2	4	33	99	84	0	2	35	137	119	1	1	37	40	0	0	2	40	151	136
2	3	32	217	190	1	4	33	101	75	0	2	35	133	119	1	2	37	252	202	0	2	40	153	136
1	3	32	209	184	0	4	33	155	120	1	2	35	242	229										