

Am-87-327

Barian tomichite, $Ba_{0.5}(As_2)_{0.5}Ti_2(V,Fe)_5O_{13}(OH)$, its crystal structure and relationship to derbylite and tomichite

Grey, etal.

To be deposited: Tables 4 and 5

American Mineralogist, 72, 1-2, 201-208

Table 4. Observed and calculated structure factors for Ba-Tomichite.

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	0	2	25	33	0	9	5	16	-16	0	21	1	58	57	-1	4	4	59	-59	-1	9	7	22	24
0	0	4	92	91	0	9	7	26	-27	0	21	3	5	-5	-1	4	2	15	-4	-1	9	5	8	-9
0	0	6	14	13	0	10	0	259	275	0	22	0	38	39	1	4	0	120	-116	-1	9	3	18	17
0	1	1	6	3	0	10	2	9	-1	0	22	2	8	-8	1	4	2	31	-29	-1	9	1	22	-21
0	1	3	55	-54	0	10	4	55	54	-1	0	8	35	-36	1	4	4	60	-59	1	9	1	43	43
0	1	5	37	-35	0	10	6	4	-2	-1	0	6	11	-11	1	4	6	6	-2	1	9	3	4	5
0	1	7	12	-11	0	11	1	73	76	-1	0	4	45	47	-1	5	7	36	35	1	9	5	7	-1
0	2	2	5	4	0	11	3	19	-18	-1	0	2	144	157	-1	5	5	8	7	1	9	7	8	6
0	2	4	131	128	0	11	5	15	-16	1	0	0	24	-15	-1	5	3	261	291	-1	10	6	13	-14
0	2	6	20	20	0	12	0	15	20	1	0	2	134	-124	-1	5	1	71	78	-1	10	4	18	16
0	3	1	42	-39	0	12	2	28	-27	1	0	4	54	54	1	5	1	137	139	-1	10	2	87	82
0	3	3	86	89	0	12	4	46	44	1	0	6	61	57	1	5	3	16	18	1	10	0	37	-34
0	3	5	79	79	0	12	6	8	-4	-1	1	7	5	-2	1	5	5	128	130	1	10	2	73	-71
0	3	7	14	-15	0	13	1	25	-22	-1	1	5	18	-17	1	5	7	71	69	1	10	4	23	22
0	4	0	77	70	0	13	3	59	60	-1	1	3	67	66	-1	6	6	12	-13	1	10	6	33	34
0	4	2	45	-45	0	13	5	64	66	-1	1	1	9	-12	-1	6	4	6	-2	-1	11	7	8	-7
0	4	4	23	21	0	14	0	31	25	1	1	1	28	-27	-1	6	2	98	100	-1	11	5	6	3
0	4	6	15	-13	0	14	2	12	-12	1	1	3	20	-19	1	6	0	73	-70	-1	11	3	98	99
0	5	1	90	100	0	14	4	55	56	1	1	5	28	26	1	6	2	27	-20	-1	11	1	40	41
0	5	3	22	-21	0	14	6	6	4	1	1	7	20	19	1	6	4	19	-16	1	11	1	15	-13
0	5	5	57	-55	0	15	1	19	19	-1	2	6	51	51	1	6	6	45	45	1	11	3	1	1
0	5	7	42	41	0	15	3	23	-24	-1	2	4	50	-46	-1	7	7	46	46	1	11	5	56	56
0	6	0	142	145	0	15	5	43	-42	-1	2	2	29	-29	-1	7	5	4	2	-1	12	6	6	5
0	6	2	15	-12	0	16	0	116	115	1	2	0	31	32	-1	7	3	8	-7	-1	12	4	46	-45
0	6	4	13	-4	0	16	2	18	17	1	2	2	138	142	-1	7	1	22	-20	-1	12	2	22	-22
0	6	6	5	-7	0	16	4	8	-3	1	2	4	37	-34	1	7	1	98	98	1	12	0	49	-47
0	7	1	60	-60	0	17	1	26	-26	1	2	6	16	-14	1	7	3	33	33	1	12	2	22	21
0	7	3	14	13	0	17	3	23	-23	-1	3	7	89	87	1	7	5	11	-12	1	12	4	41	-42
0	7	5	26	27	0	17	5	10	-9	-1	3	5	41	41	1	7	7	5	-3	1	12	6	13	-11
0	7	7	22	-24	0	18	0	21	19	-1	3	3	5	5	-1	8	6	70	72	-1	13	5	41	41
0	8	0	33	35	0	18	2	19	18	-1	3	1	31	36	-1	8	4	28	-26	-1	13	3	12	13
0	8	2	41	44	0	18	4	88	90	1	3	1	212	233	-1	8	2	13	-8	-1	13	1	32	32
0	8	4	150	153	0	19	1	28	-29	1	3	3	100	103	1	8	0	61	62	1	13	1	147	147
0	8	6	41	41	0	19	3	14	12	1	3	5	3	-3	1	8	2	154	161	1	13	3	78	80
0	9	1	59	-61	0	20	0	83	84	1	3	7	10	8	1	8	4	15	-13	1	13	5	6	3
0	9	3	30	-30	0	20	2	22	-22	-1	4	6	14	-14	1	8	6	10	-10	-1	14	6	13	12
-1	14	4	46	-47	-1	21	3	71	71	2	3	7	62	59	2	8	4	31	31	-2	14	6	4	-3
-1	14	2	23	-23	-1	21	1	36	35	-2	4	6	14	7	2	8	6	51	49	-2	14	4	7	6

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	14	0	38	-37	1	21	1	8	-6	-2	4	4	15	10	-2	9	7	37	-39	-2	14	2	29	30
1	14	2	23	23	-1	22	2	7	5	-2	4	2	30	-28	-2	9	5	13	-14	2	14	0	53	52
1	14	4	38	-40	1	22	0	35	-34	2	4	0	18	14	-2	9	3	65	-64	2	14	2	17	-17
1	14	6	17	-18	1	22	2	11	-10	2	4	2	31	-20	-2	9	1	4	2	2	14	4	15	17
-1	15	5	13	-14	-2	0	8	7	6	2	4	4	38	33	2	9	1	79	-74	-2	15	5	32	33
-1	15	3	112	115	-2	0	6	150	145	2	4	6	15	-16	2	9	3	26	-27	-2	15	3	17	-17
-1	15	1	8	7	-2	0	4	117	114	-2	5	7	14	12	2	9	5	35	-35	-2	15	1	60	-57
1	15	1	37	37	-2	0	2	108	111	-2	5	5	86	85	-2	10	6	101	100	2	15	1	4	-4
1	15	3	10	-9	2	0	0	71	68	-2	5	3	7	8	-2	10	4	68	63	2	15	3	17	17
1	15	5	58	59	2	0	2	228	214	-2	5	1	143	-140	-2	10	2	45	37	2	15	5	11	12
-1	16	4	32	32	2	0	4	181	170	2	5	1	66	64	2	10	0	27	25	-2	16	4	59	58
-1	16	2	95	95	2	0	6	7	5	2	5	3	73	68	2	10	2	114	105	-2	16	2	23	-20
1	16	0	19	-19	-2	1	7	28	-28	2	5	5	33	35	2	10	4	109	109	2	16	0	16	15
1	16	2	7	2	-2	1	5	35	33	2	5	7	45	-45	2	10	6	3	-4	2	16	2	53	51
1	16	4	17	15	-2	1	3	77	-75	-2	6	6	43	40	-2	11	7	8	5	2	16	4	71	71
-1	17	5	9	-9	-2	1	1	38	-39	-2	6	4	52	49	-2	11	5	78	78	-2	17	5	7	-5
-1	17	3	15	16	2	1	1	89	-75	-2	6	2	55	-50	-2	11	3	21	-20	-2	17	3	36	-36
-1	17	1	10	-9	2	1	3	38	33	2	6	0	10	2	-2	11	1	8	-5	-2	17	1	7	-4
1	17	1	21	19	2	1	5	34	-31	2	6	2	47	35	2	11	1	8	-7	2	17	1	40	-39
1	17	3	3	2	2	1	7	21	-20	2	6	4	72	69	2	11	3	92	88	2	17	3	10	-9
1	17	5	6	4	-2	2	8	29	30	2	6	6	19	-20	2	11	5	5	3	-2	18	4	21	19
-1	18	4	23	-24	-2	2	6	18	-17	-2	7	7	27	-27	-2	12	6	13	-12	-2	18	2	69	68
-1	18	2	13	-12	-2	2	4	14	15	-2	7	5	22	-21	-2	12	4	6	2	2	18	0	99	91
1	18	0	15	14	-2	2	2	100	105	-2	7	3	31	-30	-2	12	2	11	9	2	18	2	5	-5
1	18	2	70	74	2	2	0	173	172	-2	7	1	84	80	2	12	0	47	45	2	18	4	16	17
1	18	4	14	-14	2	2	2	43	-39	2	7	1	49	-45	2	12	2	27	-26	-2	19	3	16	-16
-1	19	3	9	8	2	2	4	18	17	2	7	3	31	-31	2	12	4	9	10	-2	19	1	40	41
-1	19	1	2	2	2	2	6	30	28	2	7	5	29	-28	2	12	6	4	-3	2	19	1	22	-23
1	19	1	63	64	-2	3	7	14	-15	2	7	7	24	25	-2	13	5	12	-12	2	19	3	21	-23
1	19	3	28	28	-2	3	5	17	-15	-2	8	6	5	-5	-2	13	3	15	16	-2	20	4	12	11
-1	20	4	11	-9	-2	3	3	20	24	-2	8	4	35	35	-2	13	1	127	127	-2	20	2	9	5
-1	20	2	19	16	-2	3	1	193	216	-2	8	2	135	141	2	13	1	4	4	2	20	0	5	2
1	20	0	29	-28	2	3	3	27	-23	2	8	0	186	191	2	13	3	18	-17	2	20	2	22	22
1	20	2	35	-33	2	3	5	8	-6	2	8	2	11	-7	2	13	5	4	-2	-2	21	3	2	-3
-2	21	1	4	1	-3	4	6	34	-35	-3	9	5	8	-5	3	14	2	22	-23	-4	0	2	261	282
2	21	1	9	7	-3	4	4	39	-39	-3	9	3	43	42	3	14	4	5	-3	4	0	0	66	63
-2	22	2	6	-5	-3	4	2	54	-54	-3	9	1	39	-37	-3	15	5	5	3	4	0	2	78	73

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
2	22	0	14	15	3	4	0	48	-46	3	9	1	38	34	-3	15	3	13	11	4	0	4	38	37
-3	0	8	56	52	3	4	2	39	-35	3	9	3	15	-14	-3	15	1	32	32	4	0	6	121	116
-3	0	6	35	33	3	4	4	45	-43	3	9	5	33	33	3	15	1	108	104	-4	1	7	36	-38
-3	0	4	104	-102	3	4	6	22	-19	-3	10	6	19	17	3	15	3	13	-11	-4	1	5	15	-14
-3	0	2	84	85	-3	5	7	75	76	-3	10	4	79	-78	3	15	5	21	21	-4	1	3	27	-26
3	0	0	42	48	-3	5	5	26	28	-3	10	2	36	32	-3	16	4	15	-14	-4	1	1	36	32
3	0	2	140	128	-3	5	3	42	43	3	10	0	24	19	-3	16	2	14	12	4	1	1	107	-91
3	0	4	94	-84	-3	5	1	145	150	3	10	2	70	67	3	16	0	83	79	4	1	3	18	-17
3	0	6	11	8	3	5	1	273	269	3	10	4	69	-70	3	16	2	40	40	4	1	5	22	-20
-3	1	7	28	28	3	5	3	10	12	3	10	6	2	1	3	16	4	17	-18	-4	2	8	17	16
-3	1	5	34	-32	3	5	5	46	45	-3	11	7	50	51	-3	17	5	11	-11	-4	2	6	82	83
-3	1	3	6	6	-3	6	6	10	-10	-3	11	5	21	-21	-3	17	3	27	27	-4	2	4	9	-7
-3	1	1	25	-22	-3	6	4	40	-37	-3	11	3	9	10	-3	17	1	22	-21	-4	2	2	5	-2
3	1	1	108	89	-3	6	2	21	-15	-3	11	1	31	31	3	17	1	27	29	4	2	0	29	28
3	1	3	42	-36	3	6	0	69	66	3	11	1	125	116	3	17	3	17	-16	4	2	2	128	122
3	1	5	10	8	3	6	2	27	18	3	11	3	15	-14	-3	18	4	55	55	4	2	4	28	28
3	1	7	5	-3	3	6	4	42	-40	3	11	5	5	3	-3	18	2	24	23	4	2	6	11	-14
-3	2	8	21	-21	3	6	6	13	-11	-3	12	6	17	-18	3	18	0	33	-32	-4	3	7	49	48
-3	2	6	1	-2	-3	7	7	4	5	-3	12	4	4	1	3	18	2	8	-5	-4	3	5	67	67
-3	2	4	77	77	-3	7	5	11	11	-3	12	2	16	-17	-3	19	3	58	59	-4	3	3	67	-64
-3	2	2	40	40	-3	7	3	94	93	3	12	0	52	-49	-3	19	1	12	-12	-4	3	1	14	16
3	2	0	81	-73	-3	7	1	58	-55	3	12	2	30	-30	3	19	1	19	19	4	3	1	80	73
3	2	2	17	-15	3	7	1	22	21	3	12	4	9	-8	3	19	3	16	14	4	3	3	91	86
3	2	4	51	47	3	7	3	2	-2	-3	13	5	57	58	-3	20	2	6	3	4	3	5	28	-28
3	2	6	27	26	3	7	5	60	59	-3	13	3	133	135	3	20	0	17	-15	-4	4	6	6	6
-3	3	7	15	15	-3	8	6	15	13	-3	13	1	6	-4	3	20	2	20	19	-4	4	4	16	-13
-3	3	5	60	60	-3	8	4	102	104	3	13	1	38	37	-3	21	3	7	7	-4	4	2	36	26
-3	3	3	176	184	-3	8	2	60	62	3	13	3	44	46	-3	21	1	34	30	4	4	0	22	-20
-3	3	1	34	-27	3	8	0	51	-45	3	13	5	93	96	3	21	1	81	79	4	4	2	11	8
3	3	1	47	44	3	8	2	6	7	-3	14	6	20	-21	3	22	0	9	-9	4	4	4	4	-2
3	3	3	52	49	3	8	4	75	73	-3	14	4	11	7	-4	0	8	25	23	4	4	6	13	9
3	3	5	114	108	3	8	6	40	41	-3	14	2	15	-15	-4	0	6	17	17	-4	5	7	61	-63
-3	4	8	7	-4	-3	9	7	7	8	3	14	0	54	-52	-4	0	4	94	95	-4	5	5	34	35
-4	5	3	12	12	4	10	0	25	23	4	16	4	23	23	5	2	2	34	-31	5	7	5	14	16
-4	5	1	170	172	4	10	2	40	39	-4	17	5	5	-3	5	2	4	25	-27	-5	8	6	27	-28
4	5	1	140	-127	4	10	4	14	15	-4	17	3	37	-36	5	2	6	6	9	-5	8	4	5	1
4	5	3	8	9	-4	11	7	22	-25	-4	17	1	7	-6	-5	3	7	25	25	-5	8	2	57	58
4	5	5	15	13	-4	11	5	6	7	4	17	1	38	-38	-5	3	5	17	-16	5	8	0	121	116

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
-4	6	6	10	-8	-4	11	3	43	44	4	17	3	3	-2	-5	3	3	55	55	5	8	2	16	-14
-4	6	4	19	14	-4	11	1	79	78	-4	18	4	12	10	-5	3	1	137	135	5	8	4	18	-20
-4	6	2	93	87	4	11	1	51	-47	-4	18	2	10	8	5	3	1	112	101	-5	9	7	7	6
4	6	0	10	-4	4	11	5	20	20	4	18	0	33	32	5	3	3	26	-25	-5	9	5	13	-12
4	6	2	21	-17	-4	12	6	29	30	4	18	2	85	87	5	3	5	32	34	-5	9	3	16	17
4	6	4	13	13	-4	12	4	19	-19	-4	19	3	44	-45	-5	4	6	38	-40	-5	9	1	3	2
4	6	6	38	35	-4	12	2	7	5	-4	19	1	4	-3	-5	4	4	14	1	5	9	1	26	25
-4	7	7	11	10	4	12	0	13	-12	4	19	1	1	-2	-5	4	2	80	-78	5	9	3	16	-16
-4	7	5	25	24	4	12	2	38	37	-4	20	2	51	50	5	4	0	21	-20	5	9	5	18	19
-4	7	3	74	-72	4	12	4	9	5	4	20	0	7	-6	5	4	2	54	-54	-5	10	6	5	-4
-4	7	1	13	-12	-4	13	5	54	55	4	20	2	14	14	5	4	4	10	-10	-5	10	4	91	89
4	7	1	7	-6	-4	13	3	43	-44	-4	21	1	61	59	5	4	6	24	-24	-5	10	2	79	-78
4	7	3	36	34	-4	13	1	22	11	-5	0	8	17	16	-5	5	7	42	43	5	10	0	12	-10
4	7	5	34	-35	4	13	1	54	50	-5	0	6	12	11	-5	5	5	128	131	5	10	2	4	-1
-4	8	6	105	107	4	13	3	65	69	-5	0	4	140	139	-5	5	3	80	79	5	10	4	44	47
-4	8	4	18	19	4	13	5	19	-21	-5	0	2	106	-99	-5	5	1	40	40	-5	11	5	51	53
-4	8	2	17	19	-4	14	6	33	35	5	0	0	4	-3	5	5	1	48	45	-5	11	3	45	45
4	8	0	66	65	-4	14	4	4	-4	5	0	2	28	21	5	5	3	133	138	-5	11	1	44	-43
4	8	2	149	150	-4	14	2	7	5	5	0	4	74	73	5	5	5	57	61	5	11	1	37	36
4	8	4	44	47	4	14	0	9	9	5	0	6	5	-4	-5	6	6	5	4	5	11	3	40	43
4	8	6	5	-7	4	14	2	46	48	-5	1	7	4	8	-5	6	4	58	54	5	11	5	42	46
-4	9	7	19	-20	4	14	4	7	7	-5	1	5	16	17	-5	6	2	63	-59	-5	12	6	36	-36
-4	9	5	6	-7	-4	15	5	14	13	-5	1	3	25	24	5	6	0	17	-14	-5	12	4	13	-13
-4	9	3	70	-71	-4	15	3	19	-19	-5	1	1	59	-55	5	6	2	6	-4	-5	12	2	30	-30
-4	9	1	13	-13	-4	15	1	64	65	5	1	1	26	21	5	6	4	36	36	5	12	0	14	13
4	9	1	61	-56	4	15	1	80	-78	5	1	3	9	9	-5	7	7	2	4	5	12	2	33	-36
4	9	3	3	-4	4	15	3	6	-3	5	1	5	31	31	-5	7	5	21	-22	5	12	4	21	-22
4	9	5	39	-42	-4	16	4	31	30	-5	2	6	39	-39	-5	7	3	15	14	-5	13	5	8	-8
-4	10	6	6	5	-4	16	2	88	87	-5	2	4	11	-11	-5	7	1	52	47	-5	13	3	50	49
-4	10	4	51	50	4	16	0	18	17	-5	2	2	29	30	5	7	1	55	48	-5	13	1	104	103
-4	10	2	160	159	4	16	2	10	-11	5	2	0	101	92	5	7	3	31	-31	5	13	1	85	83
5	13	3	13	-14	-6	1	5	34	-34	6	6	2	66	66	6	12	2	15	17	7	1	1	21	-19
-5	14	6	39	-41	-6	1	3	47	-45	6	6	4	24	-27	6	12	4	6	-6	7	1	3	4	-3
-5	14	4	11	-11	-6	1	1	19	-16	-6	7	7	21	-22	-6	13	5	37	37	-7	2	6	29	29
-5	14	2	26	-26	6	1	1	6	-2	-6	7	5	5	5	-6	13	3	68	69	-7	2	4	38	37
5	14	0	20	20	6	1	3	17	-14	-6	7	3	22	21	-6	13	1	21	20	-7	2	2	83	-80
5	14	2	42	-44	6	1	5	34	-37	-6	7	1	6	-5	6	13	1	40	-41	7	2	0	34	34
5	14	4	18	-22	-6	2	6	18	19	6	7	1	61	-58	6	13	3	24	28	7	2	2	18	19

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
-5	15	5	59	59	-6	2	4	54	54	6	7	3	5	2	-6	14	4	14	14	7	2	4	29	32
-5	15	3	26	26	-6	2	2	103	97	6	7	5	7	7	-6	14	2	42	43	-7	3	7	49	48
-5	15	1	6	5	6	2	0	53	-48	-6	8	6	33	33	6	14	0	26	-26	-7	3	5	83	84
5	15	1	7	8	6	2	2	33	33	-6	8	4	82	85	6	14	2	22	23	-7	3	3	13	-10
5	15	3	57	63	6	2	4	26	27	-6	8	2	121	121	-6	15	5	27	-27	-7	3	1	18	18
-5	16	4	69	69	-6	3	7	17	-18	6	8	0	28	-25	-6	15	3	32	-31	7	3	1	60	58
-5	16	2	20	-20	-6	3	5	40	41	6	8	2	41	45	-6	15	1	3	0	7	3	3	81	90
5	16	0	4	2	-6	3	3	85	83	6	8	4	46	51	6	15	1	16	17	-7	4	6	33	-34
5	16	2	27	27	-6	3	1	26	27	-6	9	7	13	-15	6	15	3	8	8	-7	4	4	13	-13
-5	17	3	5	4	6	3	1	62	-55	-6	9	5	27	-27	-6	16	4	31	-32	-7	4	2	50	-49
-5	17	1	5	-2	6	3	3	29	31	-6	9	3	17	-17	-6	16	2	28	29	7	4	0	7	-3
5	17	1	18	18	6	3	5	38	41	-6	9	1	37	-35	6	16	0	41	39	7	4	2	51	-55
5	17	3	7	-7	-6	4	6	19	20	6	9	1	44	-44	6	16	2	68	69	7	4	4	7	-9
-5	18	4	8	-7	-6	4	4	34	-32	6	9	3	14	-15	-6	17	3	18	-18	-7	5	7	16	14
-5	18	2	25	24	-6	4	2	28	27	-6	10	6	48	47	-6	17	1	10	-9	-7	5	5	5	4
5	18	0	60	60	6	4	0	33	-28	-6	10	4	9	6	6	17	1	28	-28	-7	5	3	124	125
5	18	2	12	-14	6	4	2	39	36	-6	10	2	20	20	-6	18	2	75	73	-7	5	1	112	109
-5	19	3	24	24	6	4	4	17	-17	6	10	0	104	100	6	18	0	18	-17	7	5	1	47	47
-5	19	1	42	40	-6	5	7	73	74	6	10	2	72	76	-6	19	1	11	-12	7	5	3	6	4
5	19	1	35	35	-6	5	5	26	-27	6	10	4	12	13	-7	0	6	44	-44	-7	6	6	35	-37
-5	20	2	48	-47	-6	5	3	42	-39	-6	11	5	7	-7	-7	0	4	41	40	-7	6	4	14	14
5	20	0	10	-8	-6	5	1	35	33	-6	11	3	25	-25	-7	0	2	53	51	-7	6	2	20	16
-6	0	6	74	74	6	5	1	69	65	-6	11	1	28	29	7	0	0	90	81	7	6	0	30	27
-6	0	4	21	22	6	5	3	24	26	6	11	1	55	54	7	0	2	88	-88	7	6	2	49	-54
-6	0	2	45	43	6	5	5	49	-55	6	11	3	10	11	7	0	4	29	30	7	6	4	5	3
6	0	0	187	172	-6	6	6	38	39	-6	12	6	5	5	-7	1	7	26	-25	-7	7	7	9	14
6	0	2	125	117	-6	6	4	49	-48	-6	12	4	3	1	-7	1	5	5	2	-7	7	5	39	40
6	0	4	23	25	-6	6	2	28	28	-6	12	2	36	36	-7	1	3	2	4	-7	7	3	24	-24
-6	1	7	13	12	6	6	0	31	17	6	12	0	33	-33	-7	1	1	43	40	-7	7	1	1	1
7	7	1	13	13	-7	15	3	54	54	8	4	0	20	-21	-8	12	4	17	-17	9	4	2	21	-23
7	7	3	40	47	-7	15	1	44	44	8	4	2	17	16	-8	12	2	8	9	-9	5	5	65	66
-7	8	6	52	53	7	15	1	17	18	8	4	4	7	-3	8	12	0	12	12	-9	5	3	22	-24
-7	8	4	50	51	-7	16	4	30	30	-8	5	5	30	32	8	12	2	10	11	-9	5	1	67	71
-7	8	2	63	-63	-7	16	2	51	49	-8	5	3	78	78	-8	13	3	21	21	9	5	1	76	82
7	8	0	46	47	7	16	0	44	41	-8	5	1	84	-83	-8	13	1	41	40	-9	6	6	18	17
7	8	2	41	45	-7	17	3	7	-6	8	5	1	21	23	8	13	1	51	56	-9	6	4	22	-22
7	8	4	40	45	-7	17	1	8	9	8	5	3	8	9	-8	14	4	15	-14	-9	6	2	27	-28

Table 5. Observed and calculated structure factors for TOMICHITE

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	0	0	14	-21	1	6	0	37	-37	-7	0	1	36	-40	-1	3	1	22	8	-5	6	1	28	28
2	0	0	40	38	3	6	0	106	111	-5	0	1	32	-32	0	3	1	26	9	-2	6	1	22	-27
3	0	0	61	-79	7	6	0	50	49	-2	0	1	34	35	1	3	1	224	219	-1	6	1	29	-42
4	0	0	26	37	2	7	0	30	39	-1	0	1	39	55	2	3	1	30	-34	0	6	1	36	-45
5	0	0	24	-19	3	7	0	26	38	0	0	1	48	60	3	3	1	28	23	1	6	1	26	-42
6	0	0	160	168	4	7	0	22	32	1	0	1	40	47	4	3	1	103	-111	5	6	1	24	30
7	0	0	101	-101	1	8	0	84	-97	2	0	1	20	24	5	3	1	79	79	6	6	1	35	33
8	0	0	28	-31	2	8	0	169	179	6	0	1	38	-39	6	3	1	35	38	-3	7	1	86	-83
1	1	0	27	-32	3	8	0	26	26	-8	1	1	45	-42	7	3	1	56	56	-2	7	1	85	-83
2	1	0	40	-49	4	8	0	54	57	-5	1	1	89	87	-8	4	1	27	-22	-1	7	1	56	-50
3	1	0	35	-49	5	8	0	139	-146	-4	1	1	67	67	-6	4	1	23	-30	0	7	1	50	38
4	1	0	29	-43	6	8	0	40	-40	-3	1	1	48	47	-5	4	1	24	-28	1	7	1	61	55
1	2	0	59	64	7	8	0	71	-71	-2	1	1	22	-9	-2	4	1	22	29	2	7	1	40	34
2	2	0	127	-135	2	9	0	20	-31	-1	1	1	44	39	-1	4	1	44	52	5	7	1	22	13
3	2	0	47	-47	3	9	0	25	-37	0	1	1	36	35	0	4	1	42	53	6	7	1	45	44
5	2	0	107	110	4	9	0	31	-37	1	1	1	58	58	1	4	1	38	44	-7	8	1	24	-27
6	2	0	71	69	0	10	0	223	-239	2	1	1	49	-45	4	4	1	20	-19	-5	8	1	34	-34
7	2	0	54	54	1	10	0	20	-15	3	1	1	65	-60	5	4	1	29	-31	-2	8	1	30	27
8	2	0	51	-53	3	10	0	30	26	4	1	1	72	-72	7	4	1	26	-26	-1	8	1	31	38
2	3	0	29	40	6	10	0	80	-87	6	1	1	27	25	-8	5	1	66	-72	0	8	1	39	45
3	3	0	31	46	2	11	0	28	31	7	1	1	42	39	-7	5	1	91	-91	1	8	1	32	39
4	3	0	33	37	3	11	0	31	36	-6	2	1	23	33	-6	5	1	57	59	6	8	1	26	-27
5	3	0	31	30	1	12	0	42	43	-5	2	1	33	37	-5	5	1	20	-17	-7	9	1	27	25
8	3	0	26	-27	3	12	0	25	26	-2	2	1	31	-33	-4	5	1	199	200	-3	9	1	60	61
0	4	0	36	25	4	12	0	36	-38	-1	2	1	41	-53	-3	5	1	126	-122	-2	9	1	43	41
1	4	0	86	84	6	12	0	46	-45	0	2	1	42	-58	-2	5	1	130	-116	-1	9	1	48	48
3	4	0	24	32	2	13	0	24	-25	1	2	1	46	-53	-1	5	1	52	-51	0	9	1	57	-53
4	4	0	40	-43	3	13	0	25	-29	3	2	1	21	-4	0	5	1	120	118	1	9	1	51	-43
6	4	0	51	-51	2	14	0	53	-54	4	2	1	21	22	1	5	1	126	-112	2	9	1	60	-53
8	4	0	40	-39	3	14	0	44	-49	5	2	1	24	29	2	5	1	91	95	4	9	1	29	-28
2	5	0	24	-38	5	14	0	55	58	-8	3	1	63	-72	3	5	1	240	-244	6	9	1	35	-37
3	5	0	47	-52	3	15	0	26	29	-6	3	1	59	-54	4	5	1	111	-110	-7	10	1	26	28
4	5	0	23	-35	4	15	0	25	26	-5	3	1	117	120	5	5	1	31	-28	-2	10	1	24	-23
5	5	0	22	-23	0	16	0	122	125	-4	3	1	46	-45	6	5	1	85	88	-1	10	1	34	-39
8	5	0	23	22	3	16	0	108	-122	-3	3	1	56	-49	7	5	1	30	-27	0	10	1	38	-41
0	6	0	133	-135	2	17	0	26	-23	-2	3	1	257	-253	-7	6	1	26	29	1	10	1	23	-30

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
6	10	1	28	28	-8	0	2	84	-83	-4	3	2	34	-43	-4	7	2	28	-36	-2	12	2	41	37
-6	11	1	59	-61	-7	0	2	63	71	-3	3	2	37	-40	-3	7	2	38	-42	0	12	2	57	53
-5	11	1	64	-66	-6	0	2	25	-22	-2	3	2	32	-36	1	7	2	23	26	2	12	2	39	42
-4	11	1	120	-123	-5	0	2	75	-71	2	3	2	33	41	2	7	2	27	35	4	13	2	29	-28
-3	11	1	28	31	-4	0	2	258	-256	3	3	2	28	35	3	7	2	30	30	-2	14	2	31	30
-1	11	1	42	43	-3	0	2	124	120	4	3	2	39	41	4	7	2	33	34	0	14	2	28	-23
0	11	1	121	-118	-2	0	2	89	-78	-7	4	2	43	-40	-7	8	2	55	-53	1	14	2	61	-61
1	11	1	34	-35	-1	0	2	209	203	-5	4	2	56	-55	-6	8	2	118	-118	2	14	2	35	-36
2	11	1	23	-30	1	0	2	108	-95	-4	4	2	22	19	-5	8	2	86	87	2	15	2	27	27
3	11	1	120	119	2	0	2	211	-205	-2	4	2	58	59	-3	8	2	110	107	-2	16	2	38	36
4	11	1	32	29	3	0	2	139	140	-1	4	2	21	23	-2	8	2	125	-121	-1	16	2	143	144
5	11	1	35	26	4	0	2	59	-60	0	4	2	83	80	0	8	2	34	-35	-8	0	3	30	-27
6	11	1	91	-97	5	0	2	48	52	1	4	2	24	2	1	8	2	196	189	-6	0	3	26	-32
-6	12	1	28	-28	6	0	2	105	-103	2	4	2	46	44	2	8	2	29	25	-2	0	3	23	28
1	12	1	26	32	7	0	2	75	-79	3	4	2	31	-25	3	8	2	34	32	-1	0	3	32	43
-5	13	1	89	-98	-5	1	2	31	30	5	4	2	48	-47	4	8	2	154	-156	0	0	3	32	39
-4	13	1	32	29	-4	1	2	36	41	7	4	2	43	-37	6	8	2	45	-38	1	0	3	23	25
-3	13	1	23	15	-3	1	2	41	47	-4	5	2	42	43	-5	9	2	28	26	2	0	3	22	21
-2	13	1	154	150	-2	1	2	19	35	-3	5	2	30	37	-3	9	2	24	33	5	0	3	31	-32
1	13	1	148	-144	1	1	2	26	-28	-2	5	2	35	34	1	9	2	21	-19	-8	1	3	29	-18
2	13	1	26	19	2	1	2	33	-43	0	5	2	25	-10	2	9	2	33	-34	-6	1	3	36	40
3	13	1	31	-24	4	1	2	31	-34	2	5	2	39	-43	3	9	2	28	-31	-5	1	3	27	23
4	13	1	68	78	-8	2	2	38	41	3	5	2	32	-38	-5	10	2	63	62	-3	1	3	22	-23
5	13	1	66	-69	-7	2	2	73	71	4	5	2	27	-30	-4	10	2	130	126	-2	1	3	48	42
-5	14	1	25	20	-6	2	2	82	79	-7	6	2	46	-47	-3	10	2	59	-55	-1	1	3	28	29
-1	14	1	29	-31	-5	2	2	53	-52	-5	6	2	40	32	-1	10	2	107	-100	1	1	3	58	-58
0	14	1	26	-32	-4	2	2	39	-36	-4	6	2	74	71	0	10	2	41	-39	2	1	3	71	-70
1	14	1	24	-25	-3	2	2	83	-79	-3	6	2	20	-21	1	10	2	59	55	3	1	3	70	-67
-4	15	1	68	-68	-2	2	2	61	59	-2	6	2	89	-84	2	10	2	95	87	-7	2	3	25	27
-2	15	1	46	47	0	2	2	25	-24	-1	6	2	165	-157	3	10	2	69	-70	-6	2	3	26	31
1	15	1	28	22	1	2	2	163	-159	0	6	2	34	-37	4	10	2	29	27	-5	2	3	23	22
3	15	1	66	69	2	2	2	66	-69	2	6	2	40	35	-4	11	2	29	-33	-2	2	3	25	-30
-2	16	1	23	16	4	2	2	114	111	3	6	2	41	-40	-3	11	2	28	-31	-1	2	3	33	-38
-1	16	1	29	24	5	2	2	27	22	4	6	2	34	-38	-2	11	2	25	-27	0	2	3	40	-46
0	16	1	26	25	6	2	2	24	18	6	6	2	62	57	2	11	2	29	31	1	2	3	27	-27
-1	17	1	23	17	7	2	2	35	-38	-5	7	2	23	-24	-5	12	2	26	-25	4	2	3	27	15

