

AM-87-353

Neutron-diffraction study of bertrandite

Downs, and Ross

To be deposited: Table 8

American Mineralogist, 72, 9-10, 979-983

H	K	L	Fo ²	Fc ²
-9	-3	1	4226	4206
-9	1	0	429	372
-9	3	0	112	6
-9	3	1	4193	4327
-9	5	0	316	313
-8	-6	1	3872	3878
-8	-6	2	884	883
-8	-4	2	188	265
-8	0	2	601	656
-8	2	1	134	153
-8	2	2	87	51
-8	4	0	133	167
-8	4	2	252	266
-8	6	0	218	222
-8	6	1	3948	4284
-8	6	2	975	949
-8	8	0	199	196
-8	8	1	106	120
-7	-9	1	430	430
-7	-9	2	4559	4776
-7	-3	1	11103	10981
-7	-3	2	2731	3095
-7	-3	3	3862	4009
-7	-1	2	114	164
-7	1	2	137	164
-7	3	0	1760	1611
-7	3	1	10757	12381
-7	3	2	3055	3212
-7	3	3	4100	4171
-7	9	0	1951	2079
-7	9	1	383	431
-7	9	2	4636	5027
-6	-12	1	4467	4226
-6	-8	2	126	113
-6	-6	1	7864	7560
-6	-6	2	5673	5588
-6	-6	3	5451	5696
-6	-4	2	175	178
-6	-2	1	232	293
-6	-2	3	536	555
-6	0	2	17996	17996
-6	0	4	9893	9621
-6	2	1	234	294
-6	2	3	524	557
-6	4	0	794	716
-6	4	1	55	89
-6	4	2	142	179
-6	6	0	9093	9712
-6	6	1	8087	9306
-6	6	2	6542	6426
-6	6	3	5902	5984
-6	8	0	167	210
-6	10	1	185	163
-6	12	1	3766	4262
-6	12	2	3312	3410
-5	-13	2	307	346
-5	-11	3	167	222
-5	-9	1	11149	11485
-5	-9	2	5190	5366
-5	-9	3	5130	5638

Table 8. Observed and calculated structure-factor moduli (calculated values on relative scale)

H	K	L	Fo ²	Fc ²
-5	-7	2	69	5
-5	-5	4	188	192
-5	-3	1	5747	5520
-5	-3	2	4004	4261
-5	-5	3	17683	16070
-5	-3	4	2081	2234
-5	-1	2	359	412
-5	1	1	83	80
-5	1	2	364	412
-5	3	0	12949	13154
-5	3	1	6375	6655
-5	3	2	4650	4381
-5	3	3	18373	17406
-5	3	4	2322	2249
-5	5	0	235	247
-5	5	4	198	192
-5	7	1	141	184
-5	7	3	152	136
-5	9	0	16568	19391
-5	9	1	10073	11958
-5	9	2	5151	5458
-5	9	3	5741	5677
-5	11	2	74	57
-5	11	3	230	222
-5	13	1	133	90
-5	13	2	328	346
-4	-12	1	2094	2046
-4	-12	2	4237	3967
-4	-12	3	573	623
-4	-10	1	153	176
-4	-10	2	211	288
-4	-8	3	137	155
-4	-6	1	4793	5049
-4	-6	2	1713	1813
-4	-6	3	815	796
-4	-6	4	1647	1616
-4	-4	2	102	192
-4	-4	4	130	115
-4	0	2	4867	5140
-4	0	4	6163	6190
-4	2	0	110	143
-4	4	2	199	193
-4	4	4	177	115
-4	6	0	1582	1807
-4	6	1	4588	5292
-4	6	2	1838	1829
-4	6	3	771	797
-4	6	4	1613	1619
-4	8	3	162	155
-4	10	0	93	29
-4	10	2	245	288
-4	12	0	966	1219
-4	12	1	1748	2048
-4	12	1	3504	3964
-4	12	3	601	623
-4	14	0	264	349
-3	-15	1	14015	12814
-3	-15	2	2691	2562
-3	-13	1	187	196
-3	-13	2	371	467

H	K	L	Fo ²	Fc ²
-3	-11	1	554	547
-3	-11	3	144	236
-3	-9	1	1888	1702
-3	-9	2	13883	13502
-3	-9	3	4739	4802
-3	-9	4	3965	3924
-3	-7	1	540	665
-3	-7	2	162	119
-3	-7	3	794	873
-3	-5	2	480	524
-3	-5	4	189	142
-3	-3	1	2603	2823
-3	-3	2	4724	5186
-3	-3	3	14391	14460
-3	-3	4	542	574
-3	-1	1	185	237
-3	-1	2	93	110
-3	-1	3	246	296
-3	-1	4	215	231
-3	1	0	810	821
-3	1	1	221	237
-3	1	2	149	111
-3	1	3	323	296
-3	1	4	187	231
-3	3	0	9601	9666
-3	3	1	3220	3185
-3	3	2	5572	5250
-3	3	3	15161	14709
-3	3	4	542	574
-3	5	0	276	365
-3	5	2	492	524
-3	5	3	88	111
-3	5	4	140	142
-3	7	1	590	666
-3	7	3	874	873
-3	9	0	23641	25842
-3	9	1	1664	1704
-3	9	2	12790	13475
-3	9	3	4700	4779
-3	9	4	3923	3915
-3	11	1	486	546
-3	11	3	255	235
-3	13	0	1138	1180
-3	13	1	129	196
-3	13	2	473	467
-3	15	0	160	137
-3	15	1	11347	12759
-3	15	2	2129	2557
-2	16	1	221	184
-2	-12	1	3959	3752
-2	-12	2	15719	14570
-2	-12	3	2720	2542
-2	-10	1	384	395
-2	-10	2	362	416
-2	-8	1	116	120
-2	-8	2	169	176
-2	-8	3	232	306
-2	-6	1	8758	8449
-2	-6	2	1446	1439
-2	-6	3	19696	20012

H	K	L	Fo ²	Fc ²
-2	-6	4	1879	2090
-2	-4	2	449	492
-2	-4	4	243	259
0	-20	1	476	455
0	-18	1	5325	4921
0	-18	2	4829	4864
0	-16	1	401	349
0	-16	2	277	242
0	-16	3	326	337
0	-16	4	162	202
0	-14	1	168	193
0	-14	2	243	242
0	-14	4	255	162
0	-12	1	5868	5488
0	-12	2	4526	4319
0	-12	3	8363	8375
0	-12	4	7302	7592
0	-10	1	200	186
0	-10	3	306	342
0	-10	5	166	153
0	-8	1	178	185
0	-8	2	241	240
0	-8	4	214	221
0	-6	1	7704	7294
0	-6	2	8681	8311
0	-6	3	28008	28862
0	-6	4	3093	3156
0	-6	5	15474	15461
0	-4	2	263	318
0	-4	3	141	146
0	-4	4	209	248
0	-4	5	132	88
0	-2	1	455	416
0	-2	3	557	622
0	-2	4	62	67
0	-2	5	446	460
0	0	2	24432	22648
0	0	4	772	773
0	0	6	17106	17367
0	2	1	450	415
0	2	2	120	89
0	2	3	602	621
0	2	5	445	460
0	4	0	858	835
0	4	1	160	136
0	4	2	330	317
0	4	3	119	146
0	4	4	241	248
0	4	5	104	88
0	4	6	195	176
0	6	0	12423	12160
0	6	1	7590	7208
0	6	2	8675	8186
0	6	3	29081	27752
0	6	4	3172	3143
0	6	5	14977	15269
0	6	6	1050	913
0	8	0	230	246
0	8	1	191	185
0	8	2	212	240

H	K	L	Fo ²	Fc ²
0	8	3	125	61
0	8	4	234	220
0	8	5	174	168
0	10	0	321	296
0	10	1	197	186
0	10	2	50	76
0	10	3	364	342
0	10	4	231	259
0	10	5	146	153
0	12	0	15229	14453
0	12	1	5795	5471
0	12	2	4514	4299
0	12	3	8547	8284
0	12	4	7545	7515
0	12	5	4337	4541
0	14	1	177	193
0	14	2	214	242
0	14	3	72	50
0	14	4	188	162
0	16	0	517	493
0	16	1	331	349
0	16	2	224	242
0	16	3	364	337
0	16	4	273	202
0	18	0	7778	7644
0	18	1	5289	4916
0	18	2	4868	4850
0	18	3	13836	14298
0	20	0	67	42
0	20	1	407	455
1	-19	1	401	405
1	-17	2	81	131
1	-15	1	1358	1243
1	-15	2	1405	1319
1	-15	3	3741	3770
1	-15	4	319	353
1	-13	1	81	81
1	-13	2	254	272
1	-13	3	63	75
1	-11	3	153	170
1	-9	1	6050	5647
1	-9	2	1739	1536
1	-9	3	1624	1743
1	-9	4	1745	1763
1	-9	5	504	495
1	-7	1	235	193
1	-7	3	59	106
1	-7	5	202	293
1	-5	1	108	78
1	-5	4	180	151
1	-3	1	6957	6719
1	-3	3	9506	9645
1	-3	4	815	829
1	-3	5	3065	2994
1	-3	6	1476	1332
1	-1	2	392	419
1	1	2	411	419
1	1	4	116	78
1	3	0	4064	4333
1	3	1	6849	6671

H	K	L	!Fo! 2	!Fc! 2
1	3	2	822	763
1	3	3	9745	9525
1	3	4	836	829
1	3	5	2989	2990
1	3	6	1306	1331
1	5	0	204	187
1	5	3	98	107
1	5	4	164	151
1	5	5	155	142
1	7	1	212	193
1	7	3	179	106
1	7	5	192	203
1	9	0	6008	5872
1	9	1	6035	5621
1	9	2	1596	1533
1	9	3	1894	1739
1	9	4	1795	1758
1	9	5	547	494
1	11	1	103	92
1	11	2	144	72
1	11	3	169	170
1	13	2	286	272
1	13	3	149	75
1	15	0	822	806
1	15	1	1322	1242
1	15	2	1358	1318
1	15	3	3877	3756
1	15	4	371	353
1	17	0	454	424
1	17	1	9	45
1	17	2	172	131
1	19	0	101	39
1	19	1	411	405
2	-18	1	7666	8120
2	-18	2	8211	8405
2	-16	1	293	184
2	-16	2	149	113
2	-16	3	225	216
2	-14	2	95	102
2	-12	1	3694	3761
2	-12	2	14845	14741
2	-12	3	2609	2548
2	-12	4	620	599
2	-10	1	372	395
2	-10	2	432	417
2	-10	3	62	8
2	-10	5	270	227
2	-8	3	313	306
2	-6	1	8831	8690
2	-6	2	1474	1447
2	-6	3	20207	21118
2	-6	4	1993	2103
2	-6	5	7573	7478
2	-4	2	572	494
2	-4	3	134	142
2	-4	4	226	259
2	-4	5	76	85
2	-2	1	267	242
2	-2	4	161	136
2	-2	5	129	147

H	K	L	Fo ²	Fc ²
2	0	0	12380	11901
2	0	2	4174	4063
2	0	4	10763	10885
2	0	6	18139	18685
2	2	0	122	135
2	2	1	272	242
2	2	2	105	61
2	2	3	121	36
2	2	4	109	137
2	2	5	151	147
2	2	6	144	154
2	4	1	99	58
2	4	2	511	494
2	4	3	121	142
2	4	4	251	259
2	4	5	118	85
2	6	0	937	786
2	6	1	9113	8621
2	6	2	1572	1445
2	6	3	20878	20817
2	6	4	2066	2098
2	6	5	7244	7427
2	8	0	116	134
2	8	1	123	120
2	8	2	147	176
2	8	3	288	306
2	8	4	36	37
2	10	0	132	129
2	10	1	387	395
2	10	2	453	416
2	10	5	210	227
2	12	0	33310	32356
2	12	1	3958	3754
2	12	2	15465	14585
2	12	3	2761	2542
2	12	4	601	598
2	12	5	2304	2279
2	14	0	531	507
2	14	2	104	102
2	14	3	144	94
2	16	0	132	182
2	16	1	104	184
2	16	2	171	113
2	16	3	228	216
2	18	0	10205	9655
2	18	1	8073	8112
2	18	2	8609	8373
2	18	3	7433	8105
3	-19	2	337	333
3	-17	1	175	190
3	-15	1	12295	12885
3	-15	2	2520	2567
3	-15	3	22503	24103
3	-13	1	171	196
3	-13	2	475	467
3	-13	4	531	504
3	-11	1	592	547
3	-11	3	277	236
2	-9	1	1778	1708
3	-9	2	13424	13966

H	K	L	Fo ²	Fc ²
3	-9	3	4838	4865
3	-9	4	4006	3978
3	-9	5	5538	5380
3	-7	1	710	667
3	-7	3	1001	876
3	-7	5	336	324
3	-5	2	581	526
3	-5	3	115	111
3	-5	4	142	142
3	-3	1	3461	3278
3	-3	2	5660	5601
3	-3	3	15604	16402
3	-3	4	597	576
3	-3	5	9698	9569
3	-1	1	196	238
3	-1	2	114	111
3	-1	3	340	297
3	-1	4	337	231
3	-1	5	257	272
3	1	0	639	813
3	1	1	228	238
3	1	2	106	111
3	1	3	323	297
3	1	4	234	231
3	1	5	277	272
3	3	0	8570	8805
3	3	1	3405	3298
3	3	2	5878	5616
3	3	3	15946	16152
3	3	4	604	576
3	3	5	9299	9528
3	3	6	7036	6487
3	5	0	355	364
3	5	1	156	112
3	5	2	547	526
3	5	3	144	111
3	5	4	156	142
3	7	0	103	112
3	7	1	672	667
3	7	2	107	119
3	7	3	948	876
3	7	5	347	324
3	9	0	27517	25356
3	9	1	2017	1706
3	9	2	14635	13866
3	9	3	5040	4851
3	9	4	3955	3957
3	9	5	5190	5349
3	11	1	555	547
3	11	3	247	236
3	11	4	141	66
3	11	5	157	172
3	13	0	1048	1179
3	13	1	190	196
3	13	2	468	467
3	13	3	84	22
3	13	4	497	504
3	15	0	174	137
3	15	1	13472	12845
3	15	2	2693	2564

H	K	L	Fo ²	Fc ²
3	15	3	22587	23816
3	15	4	4196	4551
3	17	1	195	190
3	17	2	197	134
3	17	3	152	131
3	19	0	292	213
3	19	0	93	98
3	19	2	360	333
3	-18	1	1557	1546
4	-16	1	208	205
4	-16	3	26	80
4	-14	2	134	106
4	-14	3	100	66
4	-12	1	2104	2052
4	-12	2	4070	3998
4	-12	3	695	624
4	-12	4	7353	7305
4	-10	1	136	176
4	-10	2	314	288
4	-8	3	166	155
4	-6	1	5354	5350
4	-6	2	1947	1848
4	-6	3	806	801
4	-6	4	1685	1633
4	-6	5	2447	2311
4	-4	1	132	112
4	-4	2	209	193
4	-4	4	76	115
4	-2	1	153	124
4	2	2	94	90
4	0	0	1829	2028
4	0	2	5972	5602
4	0	4	6652	6468
4	2	0	130	142
4	2	1	155	124
4	4	1	103	112
4	4	2	206	193
4	4	3	51	64
4	4	4	136	115
4	4	5	56	36
4	6	0	1738	1791
4	6	1	5423	5340
4	6	2	2040	1849
4	6	3	818	801
4	6	4	1616	1630
4	6	5	2393	2307
4	8	0	133	119
4	8	1	151	66
4	8	2	100	66
4	8	3	132	155
4	10	1	166	176
4	10	2	289	288
4	12	0	1302	1218
4	12	1	2113	2050
4	12	2	4217	3993
4	12	3	580	624
4	12	4	6913	7252
4	14	0	324	349
4	14	3	111	66
4	16	0	135	73

H	K	L	Fo ²	Fc ²
4	16	1	184	205
4	18	0	3422	3936
4	18	1	1452	1545
4	18	2	4380	4463
5	-13	1	50	96
5	-13	2	323	346
5	-11	3	242	222
5	-9	1	11217	12112
5	-9	2	5372	5550
5	-9	3	5917	5832
5	-8	2	5917	5832
5	-7	1	182	184
5	-7	3	111	136
5	-5	4	210	192
5	-3	1	6775	7031
5	-3	2	4776	4823
5	-3	3	18130	20201
5	-3	4	2401	2284
5	-1	2	412	414
5	-1	4	102	85
5	1	1	101	80
5	1	2	379	415
5	1	3	109	84
5	1	4	278	85
5	3	0	12312	12405
5	3	1	7103	7085
5	3	2	5061	4838
5	3	3	19383	20022
5	3	4	2318	2281
5	3	5	8325	8907
5	5	0	214	247
5	5	2	129	34
5	5	3	137	135
5	5	4	187	192
5	5	5	159	194
5	7	1	189	184
5	7	3	164	136
5	9	0	18703	18669
5	9	1	12157	12020
5	9	2	5352	5551
5	9	3	5885	5831
5	9	4	2260	2378
5	11	1	163	99
5	11	2	81	57
5	11	3	204	222
5	13	1	121	91
5	13	2	300	346
5	15	0	4104	3805
5	15	1	5916	5509
5	15	2	5971	5711
5	15	3	13248	13666
5	17	0	438	467
5	17	2	244	156
6	-12	1	4176	4274
6	-12	2	3605	3436
6	-10	2	145	94
6	-8	2	129	113
6	-8	3	164	95
6	-6	1	8979	9360
6	-6	2	6656	6684

H	K	L	Fo ²	Fc ²
6	-6	3	6297	6253
6	-4	1	134	89
6	-4	2	174	179
6	-2	1	308	294
6	-2	2	65	76
6	-2	3	594	560
6	0	0	16490	16532
6	0	2	20443	21348
6	0	4	10783	10514
6	2	1	210	294
6	2	2	123	76
6	2	3	568	560
6	2	4	86	72
6	4	0	694	714
6	4	1	117	89
6	4	2	185	179
6	4	3	66	55
6	6	0	8927	9203
6	6	1	9328	9345
6	6	2	6759	6717
6	6	3	6338	6245
6	8	0	202	210
6	8	2	132	113
6	8	3	117	96
6	10	0	81	104
6	10	1	147	163
6	10	2	130	94
6	12	0	176	145
6	12	1	3777	4265
6	12	2	3148	3427
6	16	0	574	567
6	16	1	346	330
7	-15	1	1973	1931
7	-9	1	466	431
7	-9	2	5242	5104
7	-9	3	3911	3624
7	-7	1	127	83
7	-3	1	12492	12745
7	-3	2	3515	3298
7	-3	3	4434	4326
7	-3	4	4555	3937
7	-1	2	160	164
7	1	2	170	164
7	3	0	1544	1598
7	3	1	12535	12759
7	3	2	3418	3302
7	3	3	4456	4321
7	3	4	4018	3930
7	5	0	84	59
7	5	4	80	63
7	7	1	87	83
7	9	0	1952	2062
7	9	1	420	431
7	9	2	4985	5115
7	9	3	3570	3625
7	11	1	54	58
7	13	0	82	2
7	13	2	62	81
7	15	0	1616	1680
8	-12	1	3978	3940

H	K	L	Fo ²	Fc ²
8	-12	2	7531	7569
8	-10	2	380	329
8	-8	1	122	120
8	-8	2	129	96
8	-8	3	374	313
8	-6	1	4294	4304
8	-6	2	990	956
8	-6	3	12426	12077
8	-4	2	314	267
8	-2	1	178	153
8	-2	3	141	110
8	-2	4	58	82
8	0	0	7627	7922
8	0	2	725	659
8	0	4	6474	6133
8	2	0	169	196
8	2	1	123	153
8	2	2	86	51
8	2	3	117	110
8	4	0	174	167
8	4	1	77	92
8	4	2	324	267
8	4	3	150	87
8	4	4	151	143
8	6	0	225	222
8	6	1	4255	4301
8	6	2	999	956
8	6	3	11831	12068
8	8	0	185	196
8	8	1	128	120
8	8	2	203	96
8	8	3	292	313
8	10	1	175	181
8	10	2	317	329
8	12	0	16098	17427
8	12	1	4058	3929
8	12	2	6954	7579
8	14	0	486	515
9	-11	1	200	232
9	-9	1	9404	9233
9	-9	2	12246	11836
9	-7	1	500	428
9	-7	2	107	92
9	-7	3	642	521
9	-5	1	53	73
9	-5	2	321	299
9	-3	1	5049	4373
9	-3	2	7680	6789
9	-3	3	1283	1093
9	-1	1	93	94
9	-1	3	251	255
9	1	0	324	372
9	1	1	185	94
9	1	3	272	255
9	3	0	121	6
9	3	1	4792	4366
9	3	2	6668	6807
9	3	3	1022	1093
9	5	0	300	312
9	5	1	98	73

H	K	L	Fo ²	Fc ²
9	5	2	250	299
9	7	0	151	124
9	7	1	484	428
9	7	3	558	521
9	9	0	2202	2223
9	9	1	8392	9150
9	9	2	11986	11881
9	11	1	283	232
10	-6	1	4601	4213
10	-6	2	1846	1663
10	0	0	8347	7797
10	0	2	7743	7257
10	2	1	115	78
10	4	1	26	33
10	6	0	2222	2106
10	6	1	4350	4206
10	6	2	1578	1663
10	-3	1	12057	10645
11	3	0	1074	988
11	3	1	11125	10567
11	5	0	280	264