

342

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PAULKELLERITE

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	0	0	3911	3925	1	5	0	444	405	-8	2	1	2301	2336	-7	5	1	849	859	-2	8	1	1554	1485
4	0	0	4502	4747	3	5	0	720	753	-6	2	1	1718	1737	-5	5	1	2189	2209	0	8	1	1635	1656
6	0	0	2864	2916	5	5	0	277	356	-4	2	1	1254	1260	-3	5	1	1889	1851	2	8	1	838	720
8	0	0	3413	3481	7	5	0	964	955	-2	2	1	1318	1304	-1	5	1	2857	2772	4	8	1	343	367
10	0	0	1077	1066	9	5	0	731	780	0	2	1	2214	2118	1	5	1	3277	3201	-3	9	1	1143	1188
12	0	0	1346	1306	11	5	0	789	869	2	2	1	526	524	3	5	1	3717	3636	-1	9	1	1671	1690
14	0	0	380	153	0	6	0	1597	1613	4	2	1	565	532	5	5	1	2731	2751	1	9	1	1651	1662
1	1	0	322	317	2	6	0	293	250	6	2	1	381	395	7	5	1	2795	2878	3	9	1	1880	1861
3	1	0	2037	2036	4	6	0	897	882	10	2	1	847	843	9	5	1	2131	2196	-14	0	2	2120	2102
5	1	0	1621	1603	6	6	0	427	287	12	2	1	657	576	11	5	1	1738	1744	-12	0	2	1402	1405
7	1	0	3019	3069	8	6	0	758	801	-7	3	1	656	689	-10	6	1	2102	2099	-10	0	2	1727	1759
9	1	0	2301	2341	1	7	0	421	406	-5	3	1	1612	1585	-8	6	1	2591	2665	-8	0	2	1288	1271
11	1	0	2470	2527	5	7	0	347	302	-3	3	1	1883	1863	-6	6	1	2820	2778	-6	0	2	968	970
13	1	0	1824	1866	9	7	0	417	480	-1	3	1	2682	2605	-4	6	1	2582	2543	-4	0	2	644	669
0	2	0	5381	5222	0	8	0	955	858	1	3	1	2876	2794	-2	6	1	2303	2307	-2	0	2	1199	1217
2	2	0	4229	4112	2	8	0	883	940	3	3	1	2876	2847	0	6	1	1791	1798	0	0	2	2855	2713
6	2	0	2685	2704	4	8	0	560	525	5	3	1	2662	2673	2	6	1	1100	1096	2	0	2	3330	3190
8	2	0	2538	2632	6	8	0	862	810	7	3	1	2175	2212	4	6	1	602	609	4	0	2	4574	4474
10	2	0	912	902	1	9	0	641	564	9	3	1	1764	1758	6	6	1	335	308	6	0	2	2549	2537
12	2	0	946	956	-13	1	1	429	365	11	3	1	1318	1375	8	6	1	578	537	8	0	2	3151	3168
1	3	0	432	266	-7	1	1	322	277	13	3	1	882	923	10	6	1	1002	962	10	0	2	2980	2996

1 1 0 328 453 0 4 0 1027 1083 11 2 1 1254 1304 -7 5 7 358 379 -13 1 8 1538 1504
 5 4 6 1707 1773 0 4 6 2792 2770 -12 2 7 1286 1258 -7 5 7 358 379 -13 1 8 1538 1504

0	0	0	2384	2318	3	0	0	277	336	-4	2	1	1234	1268	-3	0	1	1889	1831	2	8	1	838	728
8	0	0	3413	3481	7	5	0	964	955	-2	2	1	1318	1304	-1	5	1	2857	2772	4	8	1	343	367
10	0	0	1077	1066	9	5	0	731	780	0	2	1	2214	2118	1	5	1	3277	3201	-3	9	1	1143	1188
12	0	0	1346	1306	11	5	0	789	869	2	2	1	526	524	3	5	1	3717	3636	-1	9	1	1671	1690
14	0	0	380	153	0	6	0	1597	1613	4	2	1	565	532	5	5	1	2731	2751	1	9	1	1651	1662
1	1	0	322	317	2	6	0	293	250	6	2	1	381	395	7	5	1	2795	2878	3	9	1	1880	1861
3	1	0	2037	2036	4	6	0	897	882	10	2	1	847	843	9	5	1	2131	2196	-14	0	2	2120	2102
5	1	0	1621	1603	6	6	0	427	287	12	2	1	657	576	11	5	1	1738	1744	-12	0	2	1402	1405
7	1	0	3019	3069	8	6	0	758	801	-7	3	1	656	689	-10	6	1	2102	2099	-10	0	2	1727	1759
9	1	0	2301	2341	1	7	0	421	406	-5	3	1	1612	1585	-8	6	1	2591	2665	-8	0	2	1288	1271
11	1	0	2470	2527	5	7	0	347	302	-3	3	1	1883	1863	-6	6	1	2820	2778	-6	0	2	968	970
13	1	0	1824	1866	9	7	0	417	480	-1	3	1	2682	2605	-4	6	1	2582	2543	-4	0	2	644	669
0	2	0	5381	5222	0	8	0	955	858	1	3	1	2876	2794	-2	6	1	2303	2307	-2	0	2	1199	1217
2	2	0	4229	4112	2	8	0	883	940	3	3	1	2876	2847	0	6	1	1791	1798	0	0	2	2855	2713
6	2	0	2685	2704	4	8	0	560	525	5	3	1	2662	2673	2	6	1	1100	1096	2	0	2	3330	3190
8	2	0	2538	2632	6	8	0	862	810	7	3	1	2175	2212	4	6	1	602	609	4	0	2	4574	4474
10	2	0	912	902	1	9	0	641	564	9	3	1	1764	1758	6	6	1	335	308	6	0	2	2549	2537
12	2	0	946	956	-13	1	1	429	365	11	3	1	1318	1375	8	6	1	578	587	8	0	2	3151	3168
1	3	0	432	266	-7	1	1	322	277	13	3	1	882	923	10	6	1	1002	962	10	0	2	2980	2996
3	3	0	2641	2590	-5	1	1	343	337	-12	4	1	1708	1723	-9	7	1	347	149	12	0	2	2341	2342
5	3	0	344	276	-3	1	1	1767	1767	-10	4	1	2372	2455	-7	7	1	946	902	-15	1	2	1191	1190
7	3	0	2417	2452	-1	1	1	712	640	-8	4	1	2035	2086	-5	7	1	1144	1135	-13	1	2	1113	1114
9	3	0	1263	1232	1	1	1	2059	1950	-6	4	1	2928	2966	-3	7	1	2135	2139	-11	1	2	2847	2878
11	3	0	2259	2340	3	1	1	876	868	-4	4	1	2613	2603	-1	7	1	2064	2077	-9	1	2	2382	2391
13	3	0	1154	1173	5	1	1	952	936	-2	4	1	2627	2608	1	7	1	3245	3194	-7	1	2	4537	4624
0	4	0	3029	2931	7	1	1	765	793	0	4	1	2023	1932	3	7	1	2712	2650	-5	1	2	4295	4233
2	4	0	1992	1908	9	1	1	883	883	2	4	1	1260	1239	5	7	1	2600	2540	-3	1	2	5733	5950
4	4	0	2795	2782	11	1	1	294	344	6	4	1	449	437	7	7	1	2301	2282	-1	1	2	3512	3589
6	4	0	1475	1433	13	1	1	584	623	8	4	1	752	766	9	7	1	2220	2239	1	1	2	5915	5775
8	4	0	1430	1432	-14	2	1	776	783	10	4	1	774	828	-8	8	1	2250	2234	3	1	2	2659	2611
10	4	0	532	518	-12	2	1	1042	1124	12	4	1	1138	1125	-6	8	1	2080	2017	5	1	2	3142	3096
12	4	6	695	717	-10	2	1	1027	1029	-11	5	1	377	375	-4	8	1	1935	1948	7	1	2	713	680

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PAULKELLERITE

PAGE 2

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
9	1	2	991	955	4	4	2	2333	2288	-15	1	3	492	499	9	3	3	1277	1289	4	6	3	2798	2691
11	1	2	408	386	6	4	2	1275	1281	-13	1	3	573	565	11	3	3	1179	1163	6	6	3	2162	2187
-14	2	2	1848	1852	8	4	2	2007	2066	-11	1	3	802	856	-14	4	3	336	166	8	6	3	1737	1709
-12	2	2	1233	1227	10	4	2	992	976	-9	1	3	398	200	-12	4	3	836	838	-9	7	3	1477	1534
-10	2	2	1813	1854	-13	5	2	342	122	-7	1	3	974	994	-10	4	3	1002	1057	-7	7	3	2035	2084
-8	2	2	512	574	-11	5	2	1111	1144	-5	1	3	429	418	-8	4	3	1588	1585	-5	7	3	1492	1465
-6	2	2	1574	1595	-9	5	2	427	397	-3	1	3	1410	1388	-6	4	3	1919	1929	-3	7	3	1267	1308
-4	2	2	1915	1955	-7	5	2	1767	1777	1	1	3	691	634	-4	4	3	3174	3211	3	7	3	805	699
0	2	2	2616	2497	-5	5	2	988	968	7	1	3	727	757	-2	4	3	3225	3196	5	7	3	826	835
2	2	2	2154	1991	-3	5	2	1707	1718	9	1	3	322	323	0	4	3	3885	3737	7	7	3	1427	1418
4	2	2	3941	3813	-1	5	2	501	553	11	1	3	700	695	2	4	3	2590	2483	-8	8	3	1134	1107
6	2	2	2352	2344	1	5	2	2218	2174	-14	2	3	269	261	4	4	3	3003	2956	-6	8	3	1923	1932
8	2	2	3234	3248	3	5	2	409	283	-10	2	3	733	776	6	4	3	1990	2030	-4	8	3	2077	2069
10	2	2	1838	1819	5	5	2	1276	1282	-8	2	3	870	866	8	4	3	1752	1777	-2	8	3	2262	2328
12	2	2	2296	2302	9	5	2	407	503	-6	2	3	1849	1891	10	4	3	1111	1072	0	8	3	2157	2159
-13	3	2	1233	1235	-10	6	2	370	303	-4	2	3	1982	2064	-13	5	3	1918	1978	2	8	3	2631	2569
-11	3	2	1694	1724	0	6	2	512	512	-2	2	3	1889	1946	-11	5	3	1847	1928	4	8	3	2248	2108
-9	3	2	1813	1856	4	6	2	622	557	0	2	3	1253	1199	-9	5	3	2241	2290	-3	9	3	678	689
-7	3	2	2982	3069	8	6	2	504	425	2	2	3	3138	3098	-7	5	3	1998	2011	-14	0	4	2462	2465
-5	3	2	2859	2877	-5	7	2	768	782	4	2	3	1786	1807	-5	5	3	1983	2040	-12	0	4	2135	2184
-3	3	2	3898	3944	-3	7	2	370	369	6	2	3	1253	1253	-3	5	3	641	672	-10	0	4	3920	3944
-1	3	2	3157	3022	-1	7	2	549	671	8	2	3	754	762	-1	5	3	837	796	-8	0	4	2355	2317
1	3	2	3588	3515	3	7	2	523	491	10	2	3	808	872	3	5	3	509	532	0	0	4	1412	1328
3	3	2	2096	2061	5	7	2	355	348	12	2	3	451	369	5	5	3	1622	1648	2	0	4	3143	2995
5	3	2	1382	1344	7	7	2	477	443	-13	3	3	1464	1460	7	5	3	1238	1263	4	0	4	311	259
7	3	2	941	938	-8	8	2	355	516	-11	3	3	1680	1738	9	5	3	1537	1515	6	0	4	847	809
-10	4	8	632	594	-4	2	9	861	879	-2	6	9	1846	1976	-7	3	10	294	37	-1	3	11	1294	1426

12	2	2	1233	1227	10	4	2	992	976	-9	1	3	398	200	-12	4	3	836	838	-9	7	3	1477	1534
-10	2	2	1813	1854	-13	5	2	342	122	-7	1	3	974	994	-10	4	3	1002	1057	-7	7	3	2035	2084
-8	2	2	512	574	-11	5	2	1111	1144	-5	1	3	429	418	-8	4	3	1588	1585	-5	7	3	1492	1465
-6	2	2	1574	1595	-9	5	2	427	397	-3	1	3	1410	1388	-6	4	3	1919	1929	-3	7	3	1267	1308
-4	2	2	1915	1955	-7	5	2	1767	1777	1	1	3	691	634	-4	4	3	3174	3211	3	7	3	805	699
0	2	2	2616	2497	-5	5	2	988	968	7	1	3	727	757	-2	4	3	3225	3196	5	7	3	826	835
2	2	2	2154	1991	-3	5	2	1707	1718	9	1	3	322	323	0	4	3	3885	3737	7	7	3	1427	1418
4	2	2	3941	3813	-1	5	2	501	553	11	1	3	700	695	2	4	3	2590	2483	-8	8	3	1134	1107
6	2	2	2352	2344	1	5	2	2218	2174	-14	2	3	269	261	4	4	3	3003	2956	-6	8	3	1923	1932
8	2	2	3234	3248	3	5	2	409	283	-10	2	3	733	776	6	4	3	1990	2030	-4	8	3	2077	2069
10	2	2	1838	1819	5	5	2	1276	1282	-8	2	3	870	866	8	4	3	1752	1777	-2	8	3	2262	2328
12	2	2	2296	2302	9	5	2	407	503	-6	2	3	1849	1891	10	4	3	1111	1072	0	8	3	2157	2159
-13	3	2	1233	1235	-10	6	2	370	303	-4	2	3	1982	2064	-13	5	3	1918	1978	2	8	3	2631	2569
-11	3	2	1694	1724	0	6	2	512	512	-2	2	3	1889	1946	-11	5	3	1847	1928	4	8	3	2248	2108
-9	3	2	1813	1856	4	6	2	622	557	0	2	3	1253	1199	-9	5	3	2241	2290	-3	9	3	678	689
-7	3	2	2982	3069	8	6	2	504	425	2	2	3	3138	3098	-7	5	3	1998	2011	-14	0	4	2462	2465
-5	3	2	2859	2877	-5	7	2	768	782	4	2	3	1786	1807	-5	5	3	1983	2040	-12	0	4	2135	2184
-3	3	2	3898	3944	-3	7	2	370	369	6	2	3	1253	1253	-3	5	3	641	672	-10	0	4	3920	3944
-1	3	2	3157	3022	-1	7	2	549	671	8	2	3	754	762	-1	5	3	837	796	-8	0	4	2355	2317
1	3	2	3588	3515	3	7	2	523	491	10	2	3	808	872	3	5	3	509	532	0	0	4	1412	1328
3	3	2	2096	2061	5	7	2	355	348	12	2	3	451	369	5	5	3	1622	1648	2	0	4	3143	2995
5	3	2	1382	1344	7	7	2	477	443	-13	3	3	1464	1460	7	5	3	1238	1263	4	0	4	311	259
7	3	2	941	938	-8	8	2	355	516	-11	3	3	1680	1738	9	5	3	1537	1515	6	0	4	847	809
9	3	2	898	888	-6	8	2	441	323	-9	3	3	1730	1767	-12	6	3	379	421	8	0	4	1223	1183
11	3	2	389	340	-4	8	2	608	577	-7	3	3	1446	1525	-10	6	3	1201	1199	10	0	4	305	334
-12	4	2	666	662	-2	8	2	855	809	-5	3	3	1736	1783	-8	6	3	1717	1731	-15	1	4	790	806
-10	4	2	1212	1262	2	8	2	855	857	-3	3	3	1044	1052	-6	6	3	2107	2093	-13	1	4	1217	1215
-6	4	2	986	976	6	8	2	947	908	-1	3	3	351	322	-4	6	3	2863	2855	-11	1	4	387	371
-4	4	2	745	805	-3	9	2	1006	988	3	3	3	638	572	-2	6	3	3239	3276	-7	1	4	1581	1643
0	4	2	1905	1843	-1	9	2	1055	1145	5	3	3	1024	1035	0	6	3	3029	2966	-5	1	4	1033	1041
2	4	2	688	627	1	9	2	983	996	7	3	3	1069	1103	2	6	3	3371	3214	-3	1	4	3025	3170

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PAULKELLERITE

PAGE 3

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	1	4	3351	3260	-10	4	4	2056	2098	-8	8	4	714	688	-3	3	5	2491	2545	-2	6	5	417	280
1	1	4	4217	4203	-8	4	4	1449	1563	-6	8	4	538	537	-1	3	5	2692	2707	0	6	5	1308	1285
3	1	4	3302	3344	-6	4	4	2101	2140	-4	8	4	910	941	1	3	5	2170	2178	2	6	5	1691	1591
5	1	4	3966	3988	-4	4	4	1513	1487	-2	8	4	371	390	3	3	5	1537	1532	4	6	5	1735	1670
7	1	4	2644	2600	-2	4	4	2284	2275	0	8	4	638	607	5	3	5	1408	1362	6	6	5	1890	1869
9	1	4	2596	2600	0	4	4	1027	960	4	8	4	352	333	7	3	5	820	763	-9	7	5	2106	2143
11	1	4	1684	1645	2	4	4	1256	1209	-13	1	5	597	602	-14	4	5	1243	1191	-7	7	5	2019	2057
-14	2	4	1761	1821	6	4	4	408	376	-9	1	5	990	989	-12	4	5	1401	1407	-5	7	5	2656	2674
-12	2	4	2037	2044	8	4	4	485	530	-7	1	5	707	687	-10	4	5	1260	1279	-3	7	5	2667	2737
-10	2	4	3161	3171	-13	5	4	597	508	-5	1	5	1060	1095	-8	4	5	1138	1163	-1	7	5	2593	2675
-8	2	4	2963	2984	-9	5	4	321	296	-3	1	5	1122	1163	-6	4	5	328	326	1	7	5	1988	1877
-4	2	4	2852	2971	-7	5	4	627	653	-1	1	5	1287	1228	-4	4	5	661	657	3	7	5	2109	2056
-2	2	4	3811	3854	-5	5	4	285	245	1	1	5	403	400	-2	4	5	1059	1108	5	7	5	1277	1296
0	2	4	1678	1621	-3	5	4	964	940	3	1	5	901	902	0	4	5	1126	1065	-6	8	5	632	543
2	2	4	2212	2215	-1	5	4	748	763	5	1	5	250	221	2	4	5	1583	1519	0	8	5	1015	996
4	2	4	528	512	1	5	4	1317	1223	7	1	5	694	694	4	4	5	1454	1494	2	8	5	1017	950
6	2	4	292	105	3	5	4	1005	979	-14	2	5	978	990	6	4	5	1890	1910	-16	0	6	446	445
8	2	4	628	597	5	5	4	1459	1455	-12	2	5	947	930	8	4	5	1713	1695	-12	0	6	373	459
10	2	4	513	492	7	5	4	502	549	-10	2	5	905	911	-13	5	5	889	937	-10	0	6	1243	1229
-15	3	4	434	452	9	5	4	889	925	-8	2	5	349	281	-11	5	5	1862	1876	-8	0	6	1599	1636
-13	3	4	1151	1110	-10	6	4	677	726	-6	2	5	683	662	-9	5	5	2093	2137	-4	0	6	2990	3028
-9	3	4	388	412	-8	6	4	408	332	-4	2	5	275	236	-7	5	5	2645	2720	-2	0	6	4360	4627
-7	3	4	857	860	-6	6	4	1070	1178	0	2	5	1033	1013	-5	5	5	2681	2633	0	0	6	3812	3726
-5	3	4	402	267	-4	6	4	431	77	2	2	5	706	653	-3	5	5	3329	3353	2	0	6	3283	3197
-3	3	4	3503	3586	-2	6	4	911	871	4	2	5	1327	1310	-1	5	5	2708	2795	4	0	6	3065	3095
-1	3	4	1502	1494	0	6	4	441	426	6	2	5	1190	1203	1	5	5	2748	2662	6	0	6	3047	2984
1	3	4	3438	3302	2	6	4	811	734	8	2	5	1100	1088	3	5	5	2065	2026	8	0	6	1736	1649
3	3	4	1802	1811	4	6	4	413	409	10	2	5	714	648	5	5	5	1766	1792	-15	1	6	1770	1693
5	3	4	3193	3184	6	6	4	571	564	-15	3	5	635	613	7	5	5	625	667	-13	1	6	2622	2582
7	3	4	1680	1687	8	6	4	510	506	-13	3	5	752	704	10	5	5	1820	1820	10	1	6	1770	1693

5	1	4	3966	3988	-4	4	4	1513	1487	-2	8	4	371	390	3	3	5	1537	1532	4	6	5	1735	1670
7	1	4	2644	2600	-2	4	4	2284	2275	0	8	4	638	607	5	3	5	1408	1362	6	6	5	1890	1869
9	1	4	2596	2608	0	4	4	1027	960	4	8	4	352	333	7	3	5	820	763	-9	7	5	2106	2143
11	1	4	1684	1645	2	4	4	1256	1209	-13	1	5	597	602	-14	4	5	1243	1191	-7	7	5	2019	2057
-14	2	4	1761	1821	6	4	4	408	376	-9	1	5	990	989	-12	4	5	1401	1407	-5	7	5	2656	2674
-12	2	4	2037	2044	8	4	4	485	530	-7	1	5	707	687	-10	4	5	1260	1279	-3	7	5	2667	2737
-10	2	4	3161	3171	-13	5	4	597	508	-5	1	5	1050	1095	-8	4	5	1138	1163	-1	7	5	2593	2675
-8	2	4	2963	2984	-9	5	4	321	296	-3	1	5	1122	1163	-6	4	5	328	326	1	7	5	1988	1877
-4	2	4	2852	2971	-7	5	4	627	653	-1	1	5	1287	1228	-4	4	5	661	657	3	7	5	2109	2056
-2	2	4	3811	3854	-5	5	4	285	245	1	1	5	403	400	-2	4	5	1059	1108	5	7	5	1277	1296
0	2	4	1678	1621	-3	5	4	964	940	3	1	5	901	902	0	4	5	1126	1065	-6	8	5	632	543
2	2	4	2212	2215	-1	5	4	748	763	5	1	5	250	221	2	4	5	1583	1519	0	8	5	1015	996
4	2	4	528	512	1	5	4	1317	1223	7	1	5	694	694	4	4	5	1454	1494	2	8	5	1017	950
6	2	4	292	185	3	5	4	1005	979	-14	2	5	978	990	6	4	5	1890	1910	-16	0	6	446	445
8	2	4	628	597	5	5	4	1459	1455	-12	2	5	947	930	8	4	5	1713	1695	-12	0	6	373	459
10	2	4	513	492	7	5	4	502	549	-10	2	5	905	911	-13	5	5	889	937	-10	0	6	1243	1229
-15	3	4	434	452	9	5	4	889	925	-8	2	5	349	281	-11	5	5	1862	1876	-8	0	6	1599	1636
-13	3	4	1151	1110	-10	6	4	677	726	-6	2	5	683	662	-9	5	5	2093	2137	-4	0	6	2990	3028
-9	3	4	388	412	-8	6	4	408	332	-4	2	5	275	236	-7	5	5	2645	2720	-2	0	6	4360	4627
-7	3	4	857	860	-6	6	4	1070	1178	0	2	5	1033	1013	-5	5	5	2681	2633	0	0	6	3812	3726
-5	3	4	402	267	-4	6	4	431	77	2	2	5	706	653	-3	5	5	3329	3353	2	0	6	3283	3197
-3	3	4	3503	3586	-2	6	4	911	871	4	2	5	1327	1310	-1	5	5	2708	2795	4	0	6	3065	3095
-1	3	4	1502	1494	0	6	4	441	426	6	2	5	1190	1203	1	5	5	2748	2662	6	0	6	3047	2984
1	3	4	3438	3302	2	6	4	811	734	8	2	5	1100	1088	3	5	5	2065	2026	8	0	6	1736	1649
3	3	4	1802	1811	4	6	4	413	409	10	2	5	714	648	5	5	5	1766	1792	-15	1	6	1770	1693
5	3	4	3193	3184	6	6	4	571	564	-15	3	5	635	613	7	5	5	625	667	-13	1	6	2622	2582
7	3	4	1680	1687	8	6	4	510	506	-13	3	5	752	784	-12	6	5	1524	1526	-11	1	6	2198	2186
9	3	4	2134	2126	-7	7	4	342	259	-11	3	5	1276	1333	-10	6	5	1447	1456	-9	1	6	3659	3623
11	3	4	1096	1037	-5	7	4	488	385	-9	3	5	1819	1855	-8	6	5	990	963	-7	1	6	1973	1968
-14	4	4	1062	1113	-1	7	4	672	549	-7	3	5	2223	2257	-6	6	5	509	535	-5	1	6	2817	2793
-12	4	4	975	1047	3	7	4	449	471	-5	3	5	2319	2326	-4	6	5	321	25	-3	1	6	1172	1207

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PAULKELLERITE

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-1	1	6	2056	2107	-2	4	6	2170	2240	7	1	7	389	485	-13	5	7	689	709	6	0	8	2163	2079
1	1	6	526	495	0	4	6	1624	1563	-14	2	7	721	693	-11	5	7	705	663	-15	1	8	476	369
5	1	6	1383	1372	2	4	6	2392	2370	-12	2	7	1286	1258	-7	5	7	358	379	-13	1	8	1538	1504
7	1	6	734	813	4	4	6	1013	1076	-10	2	7	1203	1207	-5	5	7	994	975	-11	1	8	1586	1594
9	1	6	1781	1762	6	4	6	1569	1568	-8	2	7	1710	1707	-3	5	7	999	1036	-9	1	8	2396	2360
-14	2	6	508	440	8	4	6	727	697	-6	2	7	872	942	-1	5	7	1981	2039	-7	1	8	2590	2554
-12	2	6	303	199	-13	5	6	993	1013	-4	2	7	1549	1657	1	5	7	2148	2059	-5	1	8	3705	3692
-10	2	6	1529	1496	-11	5	6	605	600	-2	2	7	1485	1472	3	5	7	2184	2172	-3	1	8	2571	2741
-8	2	6	1393	1389	-9	5	6	1352	1373	0	2	7	1169	1180	5	5	7	1775	1789	-1	1	8	3272	3387
-6	2	6	2949	2953	-5	5	6	1379	1344	2	2	7	271	389	-10	6	7	1970	1933	1	1	8	2605	2564
-4	2	6	1943	1999	-1	5	6	877	893	4	2	7	618	510	-8	6	7	2541	2570	3	1	8	2504	2414
-2	2	6	3782	3914	3	5	6	302	179	-15	3	7	863	835	-6	6	7	2435	2412	5	1	8	1287	1293
0	2	6	2820	2825	5	5	6	689	671	-13	3	7	511	512	-4	6	7	2152	2208	7	1	8	1186	1214
2	2	6	3823	3846	7	5	6	355	92	-11	3	7	323	370	-2	6	7	1977	2080	-14	2	8	1618	1569
4	2	6	1967	1966	-6	6	6	431	427	-9	3	7	294	264	0	6	7	1743	1726	-12	2	8	1958	1878
6	2	6	2616	2579	-4	6	6	336	280	-7	3	7	320	380	2	6	7	1247	1147	-10	2	8	1130	1103
8	2	6	1365	1328	-2	6	6	607	675	-5	3	7	891	904	4	6	7	648	575	-8	2	8	1712	1685
-15	3	6	1367	1308	2	6	6	396	306	-3	3	7	978	1018	-9	7	7	425	388	-6	2	8	646	606
-13	3	6	1805	1857	4	6	6	447	325	-1	3	7	1394	1463	-7	7	7	436	415	-4	2	8	478	427
-11	3	6	1606	1630	6	6	6	553	506	1	3	7	1717	1692	-5	7	7	862	808	-2	2	8	378	379
-9	3	6	2158	2186	-7	7	6	450	388	3	3	7	1740	1764	-3	7	7	1401	1424	0	2	8	573	533
-7	3	6	1886	1913	-3	7	6	566	477	5	3	7	1560	1528	-1	7	7	1246	1305	2	2	8	1574	1585
-5	3	6	1874	1919	-1	7	6	458	445	7	3	7	1343	1349	1	7	7	2130	2035	4	2	8	1200	1208
-3	3	6	1235	1237	-6	8	6	338	314	-14	4	7	1444	1484	-4	8	7	1808	1859	6	2	8	1670	1680
-1	3	6	624	709	-4	8	6	866	930	-12	4	7	1417	1440	-14	0	8	1409	1378	-13	3	8	1238	1241
1	3	6	292	366	-2	8	6	464	289	-10	4	7	2278	2227	-8	0	8	1409	1378	-11	3	8	1238	1241

12	2	0	946	956	-13	1	1	429	365	11	3	1	1318	1375	8	6	1	578	537	8	0	2	3151	3168
1	3	0	432	266	-7	1	1	322	277	13	3	1	882	923	10	6	1	1002	962	10	0	2	2980	2996
5	1	6	1383	1372	2	4	6	2392	2370	-12	2	7	1286	1258	-7	5	7	358	379	-13	1	8	1538	1504
7	1	6	734	813	4	4	6	1013	1076	-10	2	7	1203	1207	-5	5	7	994	975	-11	1	8	1586	1594
9	1	6	1781	1762	6	4	6	1569	1568	-8	2	7	1710	1707	-3	5	7	999	1036	-9	1	8	2396	2360
-14	2	6	508	440	8	4	6	727	697	-6	2	7	872	942	-1	5	7	1981	2039	-7	1	8	2590	2554
-12	2	6	303	199	-13	5	6	993	1013	-4	2	7	1549	1657	1	5	7	2148	2059	-5	1	8	3705	3692
-10	2	6	1529	1496	-11	5	6	605	600	-2	2	7	1485	1472	3	5	7	2184	2172	-3	1	8	2571	2741
-8	2	6	1393	1389	-9	5	6	1352	1373	0	2	7	1169	1180	5	5	7	1775	1789	-1	1	8	3272	3387
-6	2	6	2949	2953	-5	5	6	1379	1344	2	2	7	271	389	-10	6	7	1970	1933	1	1	8	2605	2564
-4	2	6	1943	1999	-1	5	6	877	893	4	2	7	618	510	-8	6	7	2541	2570	3	1	8	2504	2414
-2	2	6	3782	3914	3	5	6	302	179	-15	3	7	863	835	-6	6	7	2435	2412	5	1	8	1287	1293
0	2	6	2820	2825	5	5	6	689	671	-13	3	7	511	512	-4	6	7	2152	2208	7	1	8	1186	1214
2	2	6	3823	3846	7	5	6	355	92	-11	3	7	323	370	-2	6	7	1977	2080	-14	2	8	1618	1569
4	2	6	1967	1966	-6	6	6	431	427	-9	3	7	294	264	0	6	7	1743	1726	-12	2	8	1958	1878
6	2	6	2616	2579	-4	6	6	336	280	-7	3	7	320	380	2	6	7	1247	1147	-10	2	8	1130	1103
8	2	6	1365	1328	-2	6	6	607	675	-5	3	7	891	904	4	6	7	648	575	-8	2	8	1712	1685
-15	3	6	1367	1308	2	6	6	396	306	-3	3	7	978	1018	-9	7	7	425	388	-6	2	8	646	606
-13	3	6	1805	1857	4	6	6	447	325	-1	3	7	1394	1463	-7	7	7	436	415	-4	2	8	478	427
-11	3	6	1606	1630	6	6	6	553	506	1	3	7	1717	1692	-5	7	7	862	808	-2	2	8	378	379
-9	3	6	2158	2186	-7	7	6	450	388	3	3	7	1740	1764	-3	7	7	1401	1424	0	2	8	573	533
-7	3	6	1886	1913	-3	7	6	566	477	5	3	7	1560	1528	-1	7	7	1246	1305	2	2	8	1574	1585
-5	3	6	1874	1919	-1	7	6	458	445	7	3	7	1343	1349	1	7	7	2130	2035	4	2	8	1200	1208
-3	3	6	1235	1237	-6	8	6	338	314	-14	4	7	1444	1484	-4	8	7	1808	1859	6	2	8	1670	1680
-1	3	6	624	709	-4	8	6	866	930	-12	4	7	1417	1440	-14	0	8	1409	1370	-13	3	8	1238	1241
1	3	6	292	366	-2	8	6	464	289	-10	4	7	2079	2087	-12	0	8	2340	2257	-11	3	8	579	593
5	3	6	713	731	0	8	6	1097	1117	-8	4	7	2116	2146	-10	0	8	147	1435	-9	3	8	2311	2274
7	3	6	943	1014	-13	1	7	408	275	-6	4	7	2900	2939	-8	0	8	2235	2251	-7	3	8	1586	1553
9	3	6	1177	1187	-9	1	7	396	410	-4	4	7	1868	1908	-6	0	8	319	268	-5	3	8	2797	2954
-14	4	6	392	329	-5	1	7	454	480	-2	4	7	1948	1997	-4	0	8	649	932	-3	3	8	1635	1706
-10	4	6	890	893	-3	1	7	919	938	0	4	7	1601	1575	-2	0	8	1169	1158	-1	3	8	2590	2652
-8	4	6	529	590	1	1	7	936	891	2	4	7	1279	1245	0	0	8	310	190	1	3	8	1438	1460
-6	4	6	1969	2042	3	1	7	563	477	4	4	7	467	475	2	0	8	2047	1987	3	3	8	2064	2096
-4	4	6	934	923	5	1	7	812	771	6	4	7	510	446	4	0	8	1213	1214	5	3	8	764	743

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR PAULKELLERITE

PAGE 5

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-14	4	8	990	915	-8	2	9	387	456	-6	6	9	1306	1339	-13	3	10	698	720	-5	3	11	1281	1349
-12	4	8	1164	1145	-6	2	9	926	902	-4	6	9	1899	1950	-11	3	10	819	747	-3	3	11	1459	1527
-10	4	8	632	594	-4	2	9	861	879	-2	6	9	1846	1976	-7	3	10	294	37	-1	3	11	1294	1426
-8	4	8	1122	1098	-2	2	9	1308	1331	0	6	9	1865	1838	-5	3	10	784	825	1	3	11	1081	1112
-6	4	8	341	291	0	2	9	1191	1185	-5	7	9	1153	1199	-3	3	10	697	700	-10	4	11	1133	1147
-4	4	8	367	387	2	2	9	1396	1370	-14	0	10	1288	1197	-1	3	10	962	1047	-8	4	11	979	876
-2	4	8	455	455	4	2	9	598	670	-12	0	10	2126	2022	1	3	10	1327	1211	-6	4	11	450	456
2	4	8	985	969	-13	3	9	1403	1378	-10	0	10	2368	2281	3	3	10	1585	1513	-4	4	11	450	537
4	4	8	833	769	-11	3	9	1432	1462	-8	0	10	2863	2727	-12	4	10	1395	1387	-2	4	11	387	246
-11	5	8	479	491	-9	3	9	1368	1361	-6	0	10	2775	2663	-10	4	10	936	915	0	4	11	414	166
-9	5	8	795	823	-7	3	9	1405	1414	-4	0	10	2526	2532	-8	4	10	1577	1476	-9	5	11	1237	1229
-7	5	8	626	684	-5	3	9	1469	1456	-2	0	10	1802	1914	-6	4	10	876	990	-7	5	11	1646	1667
-5	5	8	1084	1151	-3	3	9	779	787	0	0	10	2160	2089	-4	4	10	1681	1824	-5	5	11	1623	1650
-3	5	8	699	699	-1	3	9	544	537	2	0	10	1175	1222	-2	4	10	757	799	-3	5	11	1868	1999
-1	5	8	1286	1358	1	3	9	481	327	4	0	10	920	872	0	4	10	1191	1151	-12	0	12	469	363
1	5	8	659	667	5	3	9	486	381	-13	1	10	790	784	2	4	10	465	390	-8	0	12	1492	1461
3	5	8	788	728	-12	4	9	349	421	-11	1	10	1181	1025	-11	5	10	486	530	-6	0	12	1029	965
-8	6	8	676	644	-10	4	9	302	345	-9	1	10	321	273	-9	5	10	402	211	-4	0	12	1749	1819
-6	6	8	477	361	-8	4	9	1044	1040	-7	1	10	368	392	-1	5	10	875	929	-2	0	12	1349	1380
-4	6	8	350	509	-6	4	9	1381	1381	-5	1	10	884	890	-4	6	10	421	245	0	0	12	2182	2176
-2	6	8	667	572	-4	4	9	1859	1952	-3	1	10	864	915	-11	1	11	287	147	-11	1	12	2164	2025
0	6	8	504	412	-2	4	9	1588	1677	-1	1	10	2001	2089	-9	1	11	828	781	-9	1	12	1759	1727
2	6	8	642	508	0	4	9	2002	1907	1	1	10	1242	1262	-5	1	11	652	616	-7	1	12	1976	1872
-7	7	8	399	413	2	4	9	1716	1698	3	1	10	2211	2141	-3	1	11	385	454	-5	1	12	1405	1357
-3	7	8	350	350	4	4	9	1980	1960	-14	2	10	1089	1020	-1	1	11	479	588	-3	1	12	1378	1505

7 3 2 941 938 -8 8 2 355 516 -11 3 3 1680 1738 9 5 3 1537 1515 6 0 4 847 809

-10 4 8 632 594	-4 2 9 861 879	-2 6 9 1846 1976	-7 3 10 294 37	-1 3 11 1294 1426
-8 4 8 1122 1098	-2 2 9 1308 1331	0 6 9 1865 1838	-5 3 10 784 825	1 3 11 1081 1112
-6 4 8 341 291	0 2 9 1191 1185	-5 7 9 1153 1199	-3 3 10 697 700	-10 4 11 1133 1147
-4 4 8 367 387	2 2 9 1396 1370	-14 0 10 1288 1197	-1 3 10 962 1047	-8 4 11 979 876
-2 4 8 455 455	4 2 9 598 670	-12 0 10 2126 2022	1 3 10 1327 1211	-6 4 11 458 456
2 4 8 985 969	-13 3 9 1403 1378	-10 0 10 2368 2281	3 3 10 1585 1513	-4 4 11 458 537
4 4 8 833 769	-11 3 9 1432 1462	-8 0 10 2863 2727	-12 4 10 1395 1387	-2 4 11 387 246
-11 5 8 479 491	-9 3 9 1368 1361	-6 0 10 2775 2663	-10 4 10 936 915	0 4 11 414 166
-9 5 8 795 823	-7 3 9 1405 1414	-4 0 10 2526 2532	-8 4 10 1577 1476	-9 5 11 1237 1229
-7 5 8 626 684	-5 3 9 1469 1456	-2 0 10 1802 1914	-6 4 10 876 990	-7 5 11 1646 1667
-5 5 8 1084 1151	-3 3 9 779 787	0 0 10 2160 2089	-4 4 10 1681 1824	-5 5 11 1623 1650
-3 5 8 699 699	-1 3 9 544 537	2 0 10 1175 1222	-2 4 10 757 799	-3 5 11 1868 1999
-1 5 8 1286 1358	1 3 9 481 327	4 0 10 920 872	0 4 10 1191 1151	-12 0 12 469 363
1 5 8 659 667	5 3 9 486 381	-13 1 10 790 784	2 4 10 465 390	-8 0 12 1492 1461
3 5 8 788 728	-12 4 9 349 421	-11 1 10 1181 1025	-11 5 10 486 530	-6 0 12 1029 965
-8 6 8 676 644	-10 4 9 302 345	-9 1 10 321 273	-9 5 10 402 211	-4 0 12 1749 1819
-6 6 8 477 361	-8 4 9 1044 1040	-7 1 10 368 392	-1 5 10 875 929	-2 0 12 1349 1380
-4 6 8 350 509	-6 4 9 1381 1381	-5 1 10 884 890	-4 6 10 421 245	0 0 12 2182 2176
-2 6 8 667 572	-4 4 9 1859 1952	-3 1 10 864 915	-11 1 11 287 147	-11 1 12 2164 2025
0 6 8 504 412	-2 4 9 1588 1677	-1 1 10 2001 2089	-9 1 11 828 781	-9 1 12 1759 1727
2 6 8 642 508	0 4 9 2002 1907	1 1 10 1242 1262	-5 1 11 652 616	-7 1 12 1976 1872
-7 7 8 399 413	2 4 9 1716 1698	3 1 10 2211 2141	-3 1 11 385 454	-5 1 12 1405 1357
-3 7 8 350 350	4 4 9 1980 1960	-14 2 10 1089 1020	-1 1 11 479 588	-3 1 12 1378 1505
-15 1 9 483 471	-11 5 9 1796 1742	-12 2 10 2180 2086	1 1 11 465 377	-1 1 12 630 627
-13 1 9 450 428	-9 5 9 1910 1876	-10 2 10 1665 1622	-12 2 11 390 557	-10 2 12 416 237
-11 1 9 611 593	-7 5 9 1574 1601	-8 2 10 2602 2501	-10 2 11 740 706	-8 2 12 1005 940
-9 1 9 408 437	-5 5 9 1639 1728	-6 2 10 1756 1758	-8 2 11 517 502	-6 2 12 764 855
-7 1 9 966 938	-3 5 9 1039 1035	-4 2 10 2719 2855	-6 2 11 559 567	-4 2 12 1455 1551
-5 1 9 314 223	-1 5 9 939 961	-2 2 10 1461 1527	0 2 11 510 418	-2 2 12 1273 1416
-3 1 9 477 452	3 5 9 340 131	0 2 10 1789 1748	-11 3 11 941 867	0 2 12 1802 1778
1 1 9 411 378	-10 6 9 748 766	2 2 10 963 832	-9 3 11 1099 1097	-11 3 12 1712 1673
-10 2 9 754 649	-8 6 9 837 853	4 2 10 1050 994	-7 3 11 1273 1241	-9 3 12 1172 1160

