

AM-96-614

7105

Mechanism of the  $\text{SiO}_4$  for  $\text{CO}_3$  substitution in defernite,  $\text{Ca}_6(\text{CO}_3)_{1.58}(\text{Si}_2\text{O}_7)_{0.21}(\text{OH})_7[\text{Cl}_{0.50}(\text{OH})_{0.08}(\text{H}_2\text{O})_{0.42}]$ : A single-crystal X-ray study at 100 K

Thomas Armbruster, Ping Yang, and Bernard W. Liebich

For deposit: Table 4

81 May-June 1996

625-631, pp. 1-12

*American mineralogist*

Table 4 (for deposit)  
Observed and calculated structure factors for  
defernite at 100 K

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

PAGE 1

Table with 4 columns of structure factor data (H, K, L, Intensity) for Defernite 30,12,94 100K,Pnam. The table is organized into four groups, each with a header row: H K L 10FO 10FC 10S. The first group has 4 columns, the second has 4 columns, the third has 4 columns, and the fourth has 4 columns. The data rows are numbered 1 to 113, with some rows having multiple values for H, K, L, and Intensity.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

PAGE 2

Table with 15 columns: H, K, L, 10FO, 10FC, 10S, repeated for four groups. It lists observed and calculated structure factors for Defernite 30,12,94 100K,Pnam.

Nov 3 1995 16:48:28

stdin

Page 4

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam															PAGE 3														
H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S						
10	33	0	37	-10	-147	4	40	0	98	127	10	11	3	1	181	172	3	10	6	1	461	-452	7	8	9	1	169	177	4
11	33	0	70	60	-24	5	40	0	182	191	6	12	3	1	727	734	6	11	6	1	315	-323	4	9	9	1	433	434	4
12	33	0	22	23	-89	6	40	0	137	148	7	13	3	1	421	-417	8	12	6	1	284	-291	5	10	9	1	219	222	3
13	33	0	135	152	7	2	0	1029	1019	7	14	3	1	48	-38	-19	13	6	1	131	-135	4	11	9	1	749	754	5	
14	33	0	154	-156	6	4	0	1	62	54	6	15	3	1	593	-583	4	14	6	1	452	-445	5	12	9	1	295	-291	4
15	33	0	226	-224	5	6	0	1	637	-650	5	16	3	1	90	98	10	15	6	1	512	510	4	13	9	1	48	28	-22
16	33	0	51	86	-38	8	0	1	293	290	5	17	3	1	708	708	8	16	6	1	906	904	4	14	9	1	58	-60	-14
17	33	0	142	148	7	10	0	1	224	217	3	18	3	1	32	41	-37	17	6	1	145	150	5	15	9	1	221	-222	5
18	33	0	193	-219	6	12	0	1	163	-153	3	19	3	1	275	266	5	18	6	1	596	-588	5	16	9	1	234	227	3
0	34	0	168	-161	5	14	0	1	194	176	4	20	3	1	215	-204	5	19	6	1	43	-5	-29	17	9	1	390	392	10
1	34	0	347	-345	5	16	0	1	82	-77	6	21	3	1	53	-50	-25	20	6	1	137	-132	5	18	9	1	107	98	6
2	34	0	531	-538	6	18	0	1	1048	1042	7	22	3	1	218	207	4	21	6	1	58	61	-23	19	9	1	292	292	7
3	34	0	120	128	7	20	0	1	419	-412	5	23	3	1	359	-342	5	22	6	1	219	-211	4	20	9	1	281	271	4
4	34	0	249	-246	4	22	0	1	415	397	9	24	3	1	547	-540	6	23	6	1	105	104	7	21	9	1	446	-445	6
5	34	0	308	-307	4	24	0	1	227	205	16	25	3	1	79	62	9	24	6	1	129	121	7	22	9	1	338	-325	5
6	34	0	157	-158	6	26	0	1	124	-111	6	26	3	1	173	170	5	25	6	1	99	-70	8	23	9	1	216	-211	4
7	34	0	43	49	-37	28	0	1	206	-206	5	27	3	1	155	155	6	27	6	1	106	-105	8	24	9	1	601	592	6
8	34	0	70	42	-23	30	0	1	328	-342	4	28	3	1	433	-436	6	28	6	1	337	-346	5	25	9	1	129	-123	6
9	34	0	166	-175	5	0	1	1	120	89	3	29	3	1	91	-80	9	29	6	1	79	66	11	26	9	1	35	-62	-47
10	34	0	91	-94	9	1	1	1	374	364	3	30	3	1	84	111	-23	30	6	1	254	269	4	27	9	1	37	41	-46
11	34	0	134	-132	6	2	1	1	120	-114	3	31	3	1	111	-123	9	31	6	1	50	-88	-39	28	9	1	417	405	6
12	34	0	72	76	12	3	1	1	1412	-1378	12	1	4	1	1265	-1262	13	0	7	1	55	19	-15	29	9	1	375	-378	8
13	34	0	149	148	6	4	1	1	1279	1261	9	2	4	1	1780	1753	24	1	7	1	993	-978	3	30	9	1	129	-126	3
14	34	0	420	433	6	5	1	1	638	620	6	3	4	1	555	-562	6	2	7	1	128	-111	4	1	10	1	625	643	3
15	34	0	204	-209	5	6	1	1	297	-295	4	4	4	1	354	345	4	3	7	1	1094	1086	3	2	10	1	565	571	3
16	34	0	208	-224	5	7	1	1	981	-973	7	5	4	1	836	843	6	4	7	1	263	-219	7	3	10	1	2211	2273	8
1	35	0	194	-201	5	8	1	1	468	454	4	6	4	1	309	-321	3	5	7	1	793	784	14	4	10	1	154	155	3
2	35	0	183	166	5	9	1	1	1815	-1806	10	7	4	1	2241	-2231	12	6	7	1	86	81	4	5	10	1	441	459	4
3	35	0	38	58	-43	10	1	1	80	-79	6	8	4	1	115	-114	5	7	7	1	2001	1990	13	6	10	1	112	-119	11
4	35	0	64	28	-23	11	1	1	229	-214	5	9	4	1	38	39	-17	8	7	1	736	-739	6	7	10	1	74	69	6
5	35	0	33	-29	-49	12	1	1	124	119	10	10	4	1	124	-125	3	9	7	1	337	351	4	8	10	1	146	-144	3
6	35	0	38	-13	-40	13	1	1	649	-642	7	11	4	1	269	264	7	10	7	1	299	294	7	9	10	1	444	-460	4
7	35	0	351	362	5	14	1	1	250	-245	6	12	4	1	88	76	5	11	7	1	110	112	5	10	10	1	444	440	4
8	35	0	208	-225	5	15	1	1	319	310	4	13	4	1	957	944	5	12	7	1	226	227	4	11	10	1	157	157	4
9	35	0	250	264	4	16	1	1	213	203	3	14	4	1	593	-586	7	13	7	1	771	766	6	12	10	1	120	-104	5
10	35	0	64	74	-27	17	1	1	418	-407	5	15	4	1	75	70	-18	14	7	1	32	-29	-33	13	10	1	324	-331	4
11	35	0	226	227	5	18	1	1	447	438	5	16	4	1	187	186	3	15	7	1	161	153	5	14	10	1	87	95	6
12	35	0	194	206	5	19	1	1	225	218	3	17	4	1	235	234	4	16	7	1	490	-494	5	15	10	1	602	-605	14
13	35	0	144	-146	7	20	1	1	156	-140	4	18	4	1	321	-312	5	17	7	1	343	341	5	16	10	1	387	-383	5
14	35	0	304	327	5	21	1	1	298	286	4	19	4	1	841	830	6	18	7	1	210	208	4	17	10	1	474	-467	5
0	36	0	61	44	-28	22	1	1	176	-167	4	20	4	1	169	162	7	19	7	1	335	-334	6	18	10	1	592	596	5
1	36	0	202	-208	8	23	1	1	468	458	9	21	4	1	493	484	7	20	7	1	441	428	6	19	10	1	347	-334	7
2	36	0	135	-127	6	24	1	1	163	-159	6	22	4	1	181	-167	5	21	7	1	261	-251	4	20	10	1	247	-239	4
3	36	0	106	-114	8	25	1	1	189	183	5	23	4	1	307	296	5	22	7	1	512	-498	8	21	10	1	170	-179	-22
4	36	0	132	-116	6	26	1	1	336	335	5	24	4	1	132	-127	6	23	7	1	16	-23	-64	22	10	1	36	-12	-42
5	36	0	81	73	-20	27	1	1	275	270	4	25	4	1	283	-277	4	24	7	1	211	205	4	23	10	1	204	-205	4
6	36	0	34	-66	-53	28	1	1	155	-162	6	26	4	1	173	175	5	25	7	1	431	-436	6	24	10	1	127	-116	6
7	36	0	216	225	5	29	1	1	242	243	4	27	4	1	47	38	-33	26	7	1	86	62	9	25	10	1	171	167	5
8	36	0	228	-233	5	30	1	1	208	-212	5	28	4	1	62	-28	-27	27	7	1	331	-340	5	27	10	1	147	137	6
9	36	0	158	158	6	31	1	1	292	299	4	29	4	1	62	89	-14	28	7	1	224	219	5	28	10	1	177	181	6
10	36	0	122	-132	7	1	2	1	55	-48	-16	31	4	1	311	-327	4	29	7	1	267	-268	4	29	10	1	231	-251	5
11	36	0	48	51	-19	2	2	1	763	744	4	0	5	1	1575	-1540	37	30	7	1	442	-468	6	30	10	1	487	-666	3
12	36	0	88	98	10	3	2	1	1558	-1540	10	1	5	1	728	-726	15	1	8	1	1218	1249	3	0	11	1	898	917	3
13	36	0	84	55	11	4	2	1	126	-124	3	2	5	1	121	-114	5	2	8	1	203	-201	3	1	11	1	145	-169	4
14	36	0	74	7	-25	5	2	1	315	-321	3	3	5	1	571	579	10	3	8	1	652	669	3	2	11	1	427	-426	4
15	36	0	94	84	9	6	2	1	406	370	3	4	5	1	362	-349	5	4	8	1	51	-58	-11	3	11	1	829	857	6
16	36	0	117	-128	7	7	2	1	527	-519	3	5	5	1	649	659	7	5	8	1	1264	-1287	6	4	11	1	810	830	7
17	36	0																											

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

PAGE 4

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
9	12	1	148	144	4	11	15	1	107	-115	5	16	18	1	310	308	4	24	21	1	470	487	7	10	25	1	287	-285	4
10	12	1	247	-244	4	12	15	1	191	202	4	17	18	1	149	148	5	25	21	1	518	-523	7	11	25	1	293	-288	4
11	12	1	503	-507	4	13	15	1	595	-606	6	18	18	1	500	-492	11	26	21	1	219	-225	5	12	25	1	17	16	-67
12	12	1	26	-19	-41	14	15	1	36	-9	-25	19	18	1	306	310	5	27	21	1	36	7	-50	13	25	1	447	-440	6
13	12	1	132	-135	7	15	15	1	289	-277	4	20	18	1	124	129	7	1	22	1	271	273	4	14	25	1	57	-54	-28
14	12	1	566	566	4	16	15	1	329	318	6	21	18	1	315	315	5	2	22	1	718	721	7	15	25	1	42	22	-41
15	12	1	324	-336	6	17	15	1	358	351	5	22	18	1	66	-8	-24	3	22	1	594	606	5	16	25	1	78	-34	-22
16	12	1	58	-58	-21	18	15	1	196	-191	4	23	18	1	318	313	5	4	22	1	270	269	7	17	25	1	134	119	6
17	12	1	243	-242	4	19	15	1	208	205	4	24	18	1	116	98	7	5	22	1	64	-46	-19	18	25	1	52	23	-32
18	12	1	500	503	5	20	15	1	346	-345	5	25	18	1	44	-46	-38	6	22	1	238	-235	5	19	25	1	214	-213	4
19	12	1	613	-605	5	21	15	1	250	247	7	26	18	1	157	-150	6	7	22	1	179	177	4	20	25	1	157	-147	6
20	12	1	303	-305	5	22	15	1	110	107	7	27	18	1	184	-180	5	8	22	1	45	28	-32	21	25	1	161	172	6
21	12	1	46	25	-33	23	15	1	73	-78	11	28	18	1	207	-212	5	9	22	1	165	-161	7	22	25	1	293	306	4
22	12	1	363	350	5	24	15	1	181	-186	5	0	19	1	539	-556	5	10	22	1	494	497	5	23	25	1	70	54	-13
23	12	1	74	88	-22	25	15	1	348	354	5	1	19	1	42	1	-28	11	22	1	91	-77	7	1	26	1	255	258	4
24	12	1	56	-81	-31	26	15	1	121	132	7	2	19	1	307	314	6	12	22	1	185	-181	4	2	26	1	417	-423	6
25	12	1	223	-221	4	27	15	1	246	248	4	3	19	1	489	495	7	13	22	1	44	-72	-31	3	26	1	45	5	-32
26	12	1	257	-245	4	28	15	1	430	-457	6	4	19	1	129	-116	4	14	22	1	148	-146	5	4	26	1	194	189	4
27	12	1	130	-116	7	29	15	1	127	135	8	5	19	1	410	405	5	15	22	1	595	-586	5	5	26	1	268	264	9
29	12	1	189	186	5	1	16	1	784	-803	5	6	19	1	207	213	4	16	22	1	276	-276	4	6	26	1	113	128	6
30	12	1	209	-229	5	2	16	1	141	140	4	7	19	1	685	699	4	17	22	1	155	-146	6	7	26	1	308	-315	5
0	13	1	48	39	-9	3	16	1	446	-464	4	8	19	1	317	-330	5	18	22	1	406	393	5	8	26	1	354	343	5
1	13	1	384	399	4	4	16	1	56	52	-15	9	19	1	611	626	5	19	22	1	311	-315	5	9	26	1	280	287	4
2	13	1	64	54	-11	5	16	1	301	317	8	10	19	1	104	106	6	20	22	1	266	-258	4	10	26	1	491	-502	6
3	13	1	335	-341	7	6	16	1	366	-377	5	11	19	1	92	-102	7	21	22	1	117	-108	7	11	26	1	22	-15	-90
4	13	1	305	302	4	7	16	1	640	-642	4	12	19	1	196	-192	7	22	22	1	108	-107	8	12	26	1	216	219	5
5	13	1	408	-427	9	8	16	1	82	83	6	13	19	1	430	432	5	23	22	1	355	-371	5	13	26	1	108	91	8
6	13	1	539	-541	4	9	16	1	84	-88	6	14	19	1	201	197	4	24	22	1	138	-129	7	15	26	1	290	-290	4
7	13	1	332	-336	5	10	16	1	55	-51	-20	15	19	1	71	59	-14	25	22	1	69	-63	-27	16	26	1	171	169	5
8	13	1	265	-266	4	11	16	1	315	312	5	16	19	1	225	219	4	26	22	1	119	111	9	17	26	1	134	-124	6
9	13	1	660	-669	4	12	16	1	282	291	4	17	19	1	272	271	4	0	23	1	172	168	4	18	26	1	57	24	-30
10	13	1	112	-112	5	13	16	1	661	663	11	18	19	1	111	108	7	1	23	1	505	510	5	19	26	1	172	166	5
11	13	1	609	-604	4	14	16	1	739	-742	5	19	19	1	345	-342	7	2	23	1	414	-414	5	21	26	1	300	-308	5
12	13	1	193	192	3	15	16	1	285	281	4	20	19	1	91	84	9	3	23	1	136	-129	10	22	26	1	183	192	6
13	13	1	936	-954	6	16	16	1	255	253	4	21	19	1	412	-403	6	4	23	1	562	577	5	23	26	1	66	-109	-28
14	13	1	314	-309	5	17	16	1	197	189	4	22	19	1	261	-262	4	5	23	1	244	238	4	0	27	1	230	225	4
15	13	1	60	78	-18	18	16	1	194	196	11	23	19	1	126	128	7	6	23	1	268	-268	4	1	27	1	385	-383	6
16	13	1	517	-513	5	19	16	1	732	736	8	24	19	1	177	178	5	7	23	1	39	-33	-33	2	27	1	416	416	6
17	13	1	152	-149	7	20	16	1	376	372	7	25	19	1	284	-282	4	8	23	1	249	-255	4	3	27	1	490	-482	8
18	13	1	382	377	5	21	16	1	277	273	4	26	19	1	215	-214	5	9	23	1	16	-12	-65	4	27	1	89	-485	6
19	13	1	84	-72	9	22	16	1	132	-127	7	27	19	1	284	-300	4	10	23	1	141	-131	11	5	27	1	372	-383	7
20	13	1	140	-134	6	23	16	1	171	164	5	1	20	1	199	-198	6	11	23	1	245	246	4	6	27	1	59	76	-19
21	13	1	359	351	5	25	16	1	59	-26	-28	2	20	1	381	-382	8	12	23	1	157	171	11	7	27	1	368	-365	11
22	13	1	41	40	-40	26	16	1	210	215	5	3	20	1	126	124	5	13	23	1	40	-11	-36	8	27	1	457	456	7
23	13	1	428	412	6	28	16	1	22	16	-87	4	20	1	43	-20	-30	14	23	1	210	204	4	9	27	1	772	-759	5
24	13	1	418	-410	6	29	16	1	68	91	-28	5	20	1	620	-632	6	15	23	1	198	199	4	10	27	1	272	-267	8
25	13	1	315	322	5	0	17	1	487	-474	4	6	20	1	838	845	4	16	23	1	345	-345	5	11	27	1	233	-242	4
26	13	1	390	386	5	1	17	1	429	-427	5	7	20	1	280	285	4	17	23	1	228	-224	4	12	27	1	367	-366	6
27	13	1	114	122	8	2	17	1	395	403	6	8	20	1	470	-474	7	18	23	1	52	51	-31	13	27	1	152	-150	6
28	13	1	129	-119	7	3	17	1	385	397	5	9	20	1	38	-21	-23	19	23	1	74	91	11	14	27	1	115	-120	7
29	13	1	152	137	6	4	17	1	228	220	4	10	20	1	228	-224	4	21	23	1	98	92	9	15	27	1	140	-143	6
1	14	1	192	-202	3	5	17	1	142	154	4	11	20	1	351	345	5	22	23	1	219	226	5	16	27	1	351	351	5
2	14	1	428	-453	4	6	17	1	37	32	-26	12	20	1	179	-181	5	23	23	1	172	-133	6	18	27	1	158	-146	6
3	14	1	873	-910	7	7	17	1	357	358	5	13	20	1	274	-260	4	24	23	1	27	23	-108	20	27	1	432	-426	6
4	14	1	96	101	5	8	17	1	51	-46	-22	14	20	1	262	260	4	25	23	1	162	-170	6	21	27	1	327	343	5
5	14	1	199	209	3	9	17	1	167	-174	7	15	20	1	45	28	-33	1	24	1	464	468	7	22	27	1	103	87	9
6	14	1	352	374	5	10	17	1	86	93	-24	16																	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Prnm

PAGE 5

H K L 10FO 10FC 10S						H K L 10FO 10FC 10S						H K L 10FO 10FC 10S						H K L 10FO 10FC 10S						H K L 10FO 10FC 10S					
14	29	1	108	-108	8	2	34	1	412	380	6	1	1	2	35	3	-23	0	4	2	1219	1232	3	2	7	2	1376	-1416	3
15	29	1	210	-209	5	4	34	1	48	56	-36	2	1	2	758	-743	3	1	4	2	155	-157	4	3	7	2	341	360	6
16	29	1	67	-30	-25	5	34	1	211	-204	5	3	1	2	138	-147	5	2	4	2	189	-177	5	4	7	2	228	236	3
17	29	1	143	137	6	6	34	1	279	-277	4	4	1	2	151	-157	3	3	4	2	99	101	6	5	7	2	490	-508	5
18	29	1	181	-193	6	7	34	1	271	247	5	5	1	2	250	245	4	4	4	2	564	571	4	6	7	2	73	5	-32
19	29	1	172	176	6	8	34	1	125	115	7	6	1	2	1280	1267	6	5	4	2	306	298	4	7	7	2	67	-66	-12
20	29	1	82	48	-21	9	34	1	72	101	-25	7	1	2	37	-28	-19	6	4	2	151	-165	3	8	7	2	209	193	3
21	29	1	120	128	8	10	34	1	442	435	6	8	1	2	159	181	4	7	4	2	247	-244	4	9	7	2	303	-299	5
22	29	1	258	-260	5	11	34	1	288	-282	5	9	1	2	267	-260	4	8	4	2	705	711	4	10	7	2	1204	-1202	8
1	30	1	349	-357	6	12	34	1	177	-173	6	10	1	2	145	-144	4	9	4	2	126	135	4	11	7	2	180	-179	4
2	30	1	77	-67	-23	13	34	1	68	44	-13	11	1	2	62	48	-13	10	4	2	115	127	12	12	7	2	445	455	5
3	30	1	227	-217	4	14	34	1	358	-366	5	12	1	2	24	-7	-44	11	4	2	435	-437	5	13	7	2	134	130	4
4	30	1	283	-282	5	15	34	1	81	-65	11	13	1	2	59	-51	-13	12	4	2	245	-236	5	14	7	2	340	337	8
5	30	1	339	-344	5	16	34	1	160	-173	7	14	1	2	941	935	11	13	4	2	469	471	6	15	7	2	692	-685	5
6	30	1	302	309	5	17	34	1	178	194	6	15	1	2	295	284	5	14	4	2	104	-112	5	16	7	2	101	-97	6
7	30	1	87	-78	9	0	35	1	209	-201	5	16	1	2	199	198	3	15	4	2	457	-452	10	17	7	2	14	-8	-54
8	30	1	276	-271	4	1	35	1	198	191	5	17	1	2	582	-572	11	16	4	2	210	-201	3	18	7	2	329	-317	5
9	30	1	278	-269	4	2	35	1	323	-306	5	18	1	2	391	-395	5	17	4	2	210	-207	6	19	7	2	114	-113	6
10	30	1	87	-86	9	3	35	1	255	253	4	19	1	2	262	262	6	18	4	2	147	149	5	20	7	2	143	145	5
11	30	1	235	234	4	4	35	1	310	312	5	20	1	2	43	-41	-31	19	4	2	26	35	-50	21	7	2	500	496	6
12	30	1	264	-258	4	5	35	1	121	108	7	21	1	2	177	-176	5	20	4	2	261	-260	5	22	7	2	375	364	8
13	30	1	182	168	5	6	35	1	211	-206	5	22	1	2	179	162	23	21	4	2	238	-233	4	23	7	2	59	53	-13
14	30	1	78	88	-22	7	35	1	107	96	8	23	1	2	246	242	4	22	4	2	21	-28	-84	24	7	2	192	-184	5
15	30	1	408	408	6	8	35	1	256	-266	4	24	1	2	211	-201	4	23	4	2	118	100	7	25	7	2	75	31	-22
16	30	1	160	164	6	9	35	1	173	169	5	25	1	2	342	-342	5	24	4	2	152	155	6	26	7	2	219	-218	5
17	30	1	138	136	7	10	35	1	61	10	-28	26	1	2	353	-355	5	25	4	2	469	-467	7	27	7	2	167	171	6
18	30	1	142	-156	7	11	35	1	416	429	6	27	1	2	387	-388	6	26	4	2	105	96	8	28	7	2	49	38	-37
19	30	1	330	331	5	12	35	1	222	239	5	28	1	2	80	-77	11	27	4	2	289	297	4	30	7	2	232	231	5
20	30	1	164	159	6	13	35	1	54	-46	-34	29	1	2	53	103	-36	29	4	2	46	-37	-38	0	8	2	941	959	3
21	30	1	169	201	7	14	35	1	103	111	10	30	1	2	40	47	-24	30	4	2	135	-134	7	1	8	2	233	-230	4
0	31	1	77	-9	-23	15	35	1	50	-21	-37	0	2	2	1114	-1096	3	1	5	2	141	153	3	2	8	2	288	295	4
1	31	1	74	78	-35	1	36	1	258	250	4	1	2	2	33	15	-25	2	5	2	595	612	4	3	8	2	535	558	4
2	31	1	97	89	9	2	36	1	41	-37	-43	2	2	2	153	-163	3	3	5	2	211	-217	3	4	8	2	222	225	5
3	31	1	53	-18	-14	3	36	1	297	298	5	3	2	2	187	-180	3	4	5	2	98	85	6	5	8	2	191	184	3
4	31	1	171	-153	5	4	36	1	268	269	4	4	2	2	695	-702	3	5	5	2	24	-33	-39	6	8	2	293	292	10
5	31	1	247	231	4	5	36	1	245	246	4	5	2	2	176	164	4	6	5	2	428	436	5	7	8	2	422	412	9
6	31	1	43	9	-37	6	36	1	102	-97	9	6	2	2	333	-316	4	7	5	2	598	625	4	8	8	2	311	311	4
7	31	1	169	164	5	7	36	1	169	-171	6	7	2	2	487	506	5	8	5	2	326	347	4	9	8	2	380	-382	10
8	31	1	84	72	9	8	36	1	160	164	6	8	2	2	454	450	4	9	5	2	130	125	4	10	8	2	70	-71	-26
9	31	1	313	301	5	9	36	1	17	-61	-70	9	2	2	509	510	4	10	5	2	1112	1108	4	11	8	2	346	354	5
10	31	1	112	112	7	10	36	1	71	-84	-13	10	2	2	179	167	8	11	5	2	902	-910	4	12	8	2	1030	-1047	13
11	31	1	187	-193	5	11	36	1	236	-244	5	11	2	2	568	-562	8	12	5	2	148	134	7	13	8	2	273	-277	8
12	31	1	52	87	-33	12	36	1	266	274	4	12	2	2	172	171	3	13	5	2	358	350	6	14	8	2	263	-267	4
13	31	1	193	181	5	13	36	1	65	66	-15	13	2	2	222	-223	3	14	5	2	112	-94	16	15	8	2	321	309	6
14	31	1	184	182	5	0	37	1	126	-112	8	14	2	2	24	28	-46	15	5	2	252	-241	4	16	8	2	351	-359	9
15	31	1	32	110	-59	1	37	1	73	-24	-24	15	2	2	48	37	-17	16	5	2	52	34	-17	17	8	2	45	58	-29
16	31	1	100	95	9	2	37	1	42	-16	-44	16	2	2	422	402	5	17	5	2	383	377	5	18	8	2	267	-262	4
17	31	1	97	86	9	3	37	1	67	70	-28	17	2	2	172	-168	4	18	5	2	90	84	7	19	8	2	266	-261	4
18	31	1	74	-110	-26	4	37	1	108	94	8	18	2	2	238	236	4	19	5	2	258	-255	4	20	8	2	627	-619	9
19	31	1	76	-45	-25	6	37	1	81	-86	11	19	2	2	50	-61	-26	20	5	2	72	60	-20	21	8	2	242	235	4
20	31	1	66	87	-15	7	37	1	116	113	8	20	2	2	218	221	4	21	5	2	321	321	5	22	8	2	145	-143	8
1	32	1	243	-236	4	8	37	1	72	-47	-24	21	2	2	494	-482	6	22	5	2	510	-499	6	23	8	2	66	-1	-23
2	32	1	95	96	9	9	37	1	106	-117	9	22	2	2	245	240	11	23	5	2	143	157	6	24	8	2	118	118	7
3	32	1	56	-22	-27	10	37	1	231	-241	5	23	2	2	553	541	6	24	5	2	340	-335	5	25	8	2	450	456	7
4	32	1	145	-143	6	11	37	1	77	57	-25	24	2	2	216	214	4	25	5	2	124	138	7	26	8	2	252	-252	4
5	32	1	271	-257	4	12	37	1	66	79	-29	25	2	2	269	-256	4	26	5	2	76	-61	-23	27	8	2	460	-467	6
6	32	1	148	140	6	1	38	1	163	160	6	26	2	2	86	-83	10	27	5	2	189	185	5	28	8	2	54	68	-34
7	32	1	96	90	9	2	38	1																					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

PAGE 6

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
5	10	2	33	-40	-35	9	13	2	217	-222	3	18	16	2	482	485	6	0	20	2	866	874	5	15	23	2	238	231	4
6	10	2	213	228	3	10	13	2	327	-341	5	19	16	2	55	1	-30	1	20	2	251	-248	4	16	23	2	498	-488	6
7	10	2	120	129	5	11	13	2	312	324	5	20	16	2	125	-125	7	2	20	2	581	588	5	17	23	2	226	-223	4
8	10	2	298	299	15	12	13	2	384	-400	5	21	16	2	203	-195	5	3	20	2	176	-176	4	18	23	2	427	410	6
9	10	2	130	-143	5	13	13	2	286	287	4	22	16	2	73	62	11	4	20	2	33	-23	-40	20	23	2	139	125	6
10	10	2	243	-258	4	14	13	2	682	694	5	23	16	2	61	76	-28	5	20	2	253	248	4	21	23	2	307	-309	5
11	10	2	355	358	5	15	13	2	42	-63	-32	24	16	2	41	76	-164	6	20	2	496	505	5	22	23	2	125	138	8
12	10	2	70	-54	8	16	13	2	182	-184	4	25	16	2	218	-224	5	7	20	2	477	482	6	23	23	2	172	171	6
13	10	2	162	-162	5	17	13	2	367	-377	5	26	16	2	156	168	6	8	20	2	242	249	4	24	23	2	130	123	8
14	10	2	413	-417	5	18	13	2	278	-275	7	27	16	2	139	146	7	9	20	2	143	-149	5	0	24	2	500	-503	6
15	10	2	204	202	4	19	13	2	362	360	6	1	17	2	55	35	-21	10	20	2	40	39	-158	1	24	2	379	372	5
16	10	2	442	440	12	20	13	2	112	112	7	2	17	2	516	527	13	11	20	2	139	-134	5	2	24	2	124	-125	10
17	10	2	63	74	-22	21	13	2	52	-44	-32	3	17	2	203	-204	3	12	20	2	472	-467	6	3	24	2	51	43	-36
18	10	2	60	-52	-18	22	13	2	313	311	5	4	17	2	741	754	7	13	20	2	87	98	10	4	24	2	156	-155	5
19	10	2	325	322	5	23	13	2	115	-115	7	5	17	2	486	-498	5	14	20	2	190	-189	5	5	24	2	129	-132	6
20	10	2	98	93	15	25	13	2	288	-301	4	6	17	2	328	338	5	15	20	2	223	215	4	6	24	2	43	21	-35
21	10	2	465	455	6	26	13	2	216	-215	5	7	17	2	175	178	4	16	20	2	361	-359	11	7	24	2	499	-495	6
22	10	2	153	-148	6	27	13	2	75	-83	12	8	17	2	491	505	5	17	20	2	176	-164	5	8	24	2	120	117	7
23	10	2	252	-250	4	0	14	2	335	-340	5	9	17	2	482	492	8	18	20	2	497	-497	6	9	24	2	252	251	4
24	10	2	307	312	5	1	14	2	389	-405	5	10	17	2	607	612	7	19	20	2	288	-275	4	10	24	2	181	-222	4
25	10	2	66	45	-25	2	14	2	577	-590	4	11	17	2	279	-278	4	20	20	2	260	-253	4	11	24	2	195	199	5
27	10	2	65	-69	-30	3	14	2	304	-316	4	12	17	2	551	557	5	21	20	2	350	348	5	12	24	2	287	285	4
28	10	2	58	-18	-32	4	14	2	1002	-1037	7	13	17	2	50	34	-34	22	20	2	60	-110	-32	13	24	2	235	-234	4
29	10	2	179	180	6	5	14	2	529	547	4	14	17	2	63	-52	-20	23	20	2	239	-230	4	15	24	2	76	63	-21
1	11	2	215	222	3	6	14	2	71	-81	-13	15	17	2	107	-106	7	24	20	2	180	180	6	16	24	2	60	49	-28
2	11	2	257	267	4	7	14	2	32	49	-38	16	17	2	107	103	7	25	20	2	53	23	-35	17	24	2	243	235	4
3	11	2	129	-132	7	8	14	2	367	374	5	17	17	2	482	490	6	26	20	2	275	-294	5	18	24	2	120	-110	7
4	11	2	210	-203	4	9	14	2	28	-39	-43	18	17	2	85	-92	-15	1	21	2	41	15	-35	19	24	2	531	545	7
5	11	2	175	187	4	10	14	2	346	-360	5	19	17	2	409	-406	6	2	21	2	146	138	5	20	24	2	110	92	8
6	11	2	981	-1015	4	11	14	2	694	-707	5	20	17	2	122	123	7	3	21	2	29	-3	-48	21	24	2	192	-201	5
7	11	2	356	362	9	12	14	2	89	-65	7	21	17	2	151	147	6	4	21	2	101	95	7	22	24	2	186	187	5
8	11	2	416	-418	5	13	14	2	253	257	4	22	17	2	349	-356	5	5	21	2	274	-269	4	23	24	2	40	32	-49
9	11	2	352	366	6	14	14	2	617	619	5	23	17	2	198	196	5	6	21	2	675	-670	5	24	24	2	76	-59	-25
10	11	2	470	-484	5	15	14	2	34	-1	-39	24	17	2	306	-311	5	7	21	2	288	293	4	1	25	2	83	-79	10
11	11	2	79	82	7	16	14	2	426	429	6	25	17	2	100	77	8	8	21	2	151	152	6	2	25	2	20	4	-79
12	11	2	410	-408	6	17	14	2	147	-159	14	26	17	2	72	-85	-13	9	21	2	42	-41	-33	3	25	2	313	310	6
13	11	2	247	-257	6	18	14	2	312	311	5	27	17	2	93	-82	10	10	21	2	257	-260	4	4	25	2	349	-357	5
14	11	2	275	-274	4	19	14	2	126	-139	7	0	18	2	613	632	5	11	21	2	35	4	-32	5	25	2	538	545	6
15	11	2	431	427	6	20	14	2	31	63	-53	1	18	2	143	144	8	12	21	2	298	-296	5	6	25	2	73	-60	-17
16	11	2	404	-407	5	21	14	2	322	-302	5	2	18	2	245	-254	3	13	21	2	383	-390	6	7	25	2	543	-540	6
17	11	2	376	-375	6	22	14	2	535	531	6	3	18	2	520	523	5	14	21	2	179	-175	5	8	25	2	559	-562	6
18	11	2	288	290	5	23	14	2	494	495	6	4	18	2	735	747	5	15	21	2	136	124	6	9	25	2	52	-33	-37
19	11	2	167	170	6	24	14	2	156	140	6	5	18	2	481	-490	5	16	21	2	35	18	-46	10	25	2	56	44	-30
20	11	2	232	227	4	25	14	2	205	-209	5	6	18	2	234	240	4	17	21	2	159	-152	6	11	25	2	186	191	5
21	11	2	249	-251	4	27	14	2	118	103	8	7	18	2	162	-159	5	18	21	2	154	151	6	12	25	2	503	-477	6
22	11	2	223	209	4	28	14	2	320	-331	4	8	18	2	204	188	18	19	21	2	123	122	7	13	25	2	306	298	5
23	11	2	378	359	6	1	15	2	269	-284	4	9	18	2	294	301	6	20	21	2	242	-246	4	14	25	2	76	-74	-23
24	11	2	82	84	-21	2	15	2	86	93	7	10	18	2	30	-23	-43	21	21	2	137	-140	7	15	25	2	352	-355	5
25	11	2	145	-135	6	3	15	2	346	-348	5	11	18	2	305	314	5	22	21	2	57	77	-33	16	25	2	79	-62	-21
26	11	2	387	400	6	4	15	2	149	-148	4	12	18	2	267	-271	4	23	21	2	126	120	8	17	25	2	306	-312	4
27	11	2	293	-297	4	5	15	2	91	-78	6	13	18	2	235	-232	4	24	21	2	222	226	5	18	25	2	211	205	5
28	11	2	483	493	7	6	15	2	921	942	4	14	18	2	113	106	7	25	21	2	129	139	8	19	25	2	227	228	5
29	11	2	179	194	6	7	15	2	108	-113	6	15	18	2	306	-311	12	0	22	2	37	-60	-39	20	25	2	83	84	11
0	12	2	1554	-1602	4	8	15	2	102	101	6	16	18	2	367	-375	6	1	22	2	191	192	7	21	25	2	139	138	7
1	12	2	743	779	9	9	15	2	553	565	5	17	18	2	259	256	4	2	22	2	651	653	11	22	25	2	74	38	12
2	12	2	125	138	5	10	15	2	736	756	5	18	18	2	154	-161	6	3	22	2	150	-144	11	23	25	2	73	-76	-27
3	12	2	30	-18	-41	11	15	2	86	-28	-52	19</																	



OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

Table with 48 columns: H, K, L, 10FO, 10FC, 10S (repeated 4 times). Contains numerical data for structure factors across multiple rows.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

PAGE 8

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
5	11	3	517	-512	5	18	14	3	94	86	9	7	18	3	189	-188	5	2	22	3	649	-644	6	10	26	3	396	390	6
6	11	3	81	-95	-21	20	14	3	235	-236	4	8	18	3	370	370	5	3	22	3	449	-448	6	11	26	3	53	58	-34
7	11	3	190	185	5	21	14	3	288	281	4	9	18	3	198	201	4	4	22	3	234	-239	5	12	26	3	214	-218	5
8	11	3	345	334	7	22	14	3	392	-387	6	10	18	3	271	274	7	6	22	3	285	281	4	13	26	3	96	-68	9
9	11	3	461	451	5	23	14	3	84	-95	-23	11	18	3	341	-350	8	7	22	3	151	-151	6	15	26	3	201	201	5
10	11	3	51	-32	-36	24	14	3	88	76	10	12	18	3	45	-17	-37	8	22	3	66	15	-26	16	26	3	109	-110	8
11	11	3	194	189	4	25	14	3	101	-102	9	13	18	3	193	-196	6	9	22	3	155	154	8	17	26	3	109	-119	9
12	11	3	76	-70	-18	26	14	3	145	153	7	14	18	3	31	55	-55	10	22	3	494	-503	13	19	26	3	119	-117	9
13	11	3	363	355	5	0	15	3	402	-400	6	15	18	3	563	-551	6	11	22	3	80	63	10	0	27	3	289	-273	4
14	11	3	155	-152	5	1	15	3	45	6	-30	16	18	3	201	-196	5	12	22	3	108	113	8	1	27	3	303	295	5
15	11	3	78	-80	-21	2	15	3	178	-177	4	17	18	3	128	-115	7	13	22	3	30	74	-118	2	27	3	352	-334	5
16	11	3	353	350	10	3	15	3	299	-294	5	18	18	3	392	383	6	14	22	3	144	153	6	4	27	3	482	458	7
17	11	3	373	353	8	4	15	3	358	360	6	19	18	3	236	-240	4	15	22	3	465	463	7	5	27	3	362	350	5
18	11	3	73	-67	-18	5	15	3	715	718	7	20	18	3	132	-130	7	16	22	3	269	266	4	7	27	3	346	320	5
19	11	3	201	-202	5	6	15	3	58	48	-24	21	18	3	262	-272	4	17	22	3	113	104	8	8	27	3	395	-390	6
20	11	3	105	-100	8	7	15	3	371	359	6	22	18	3	70	28	-25	18	22	3	345	-341	5	9	27	3	644	610	6
21	11	3	198	-184	5	8	15	3	567	-570	5	23	18	3	263	-276	4	19	22	3	312	317	4	10	27	3	176	175	6
22	11	3	71	-36	-23	9	15	3	305	296	5	24	18	3	57	-89	-36	20	22	3	192	189	5	11	27	3	200	194	5
24	11	3	51	24	-35	10	15	3	441	449	6	0	19	3	352	347	6	21	22	3	84	85	-22	12	27	3	306	299	5
25	11	3	50	71	-37	11	15	3	71	75	-19	1	19	3	80	70	13	22	22	3	87	96	11	13	27	3	125	132	8
27	11	3	56	-96	-35	12	15	3	84	-101	-15	2	19	3	228	-226	4	0	23	3	169	-165	6	14	27	3	170	174	6
1	12	3	420	-423	5	13	15	3	442	437	6	3	19	3	363	-359	6	1	23	3	413	-422	6	15	27	3	131	133	7
2	12	3	169	165	4	14	15	3	104	104	8	4	19	3	163	160	5	2	23	3	302	306	5	16	27	3	304	-308	4
3	12	3	318	-326	9	15	15	3	253	250	8	5	19	3	358	-346	6	3	23	3	112	117	8	17	27	3	56	18	-33
4	12	3	42	32	-30	16	15	3	322	-316	5	6	19	3	111	-116	7	4	23	3	446	-441	6	18	27	3	60	79	-34
5	12	3	56	-58	-27	17	15	3	259	-256	4	7	19	3	514	-510	6	5	23	3	198	-194	6	1	28	3	160	155	6
6	12	3	40	49	-33	18	15	3	101	94	8	8	19	3	200	201	5	6	23	3	250	250	4	2	28	3	418	-407	6
7	12	3	95	63	12	19	15	3	185	-182	5	9	19	3	500	-500	6	7	23	3	48	9	-35	3	28	3	229	214	5
8	12	3	76	-63	-13	20	15	3	322	317	5	10	19	3	159	-159	5	8	23	3	185	187	5	4	28	3	56	-29	-32
9	12	3	110	-103	6	21	15	3	235	-233	4	11	19	3	74	62	-22	9	23	3	35	26	-25	5	28	3	189	185	5
10	12	3	189	194	4	22	15	3	81	-85	-23	12	19	3	170	167	5	10	23	3	46	54	-37	6	28	3	364	354	5
11	12	3	374	371	5	23	15	3	48	68	-40	13	19	3	359	-361	5	11	23	3	217	-213	5	7	28	3	122	126	8
12	12	3	161	157	5	24	15	3	159	166	6	14	19	3	111	-111	8	12	23	3	126	-125	7	9	28	3	85	79	10
13	12	3	104	92	10	25	15	3	268	-287	5	15	19	3	53	-69	-32	13	23	3	42	-19	-40	10	28	3	144	-145	7
14	12	3	466	-467	6	1	16	3	602	599	5	16	19	3	161	-170	6	14	23	3	115	-117	8	11	28	3	44	-30	-40
15	12	3	298	301	7	2	16	3	126	-112	6	17	19	3	192	-187	5	15	23	3	144	-144	6	12	28	3	45	-72	-42
16	12	3	41	-43	-163	3	16	3	301	317	5	18	19	3	136	-136	7	16	23	3	313	321	4	14	28	3	463	464	7
17	12	3	215	206	7	4	16	3	25	15	-101	19	19	3	299	297	5	17	23	3	193	207	5	15	28	3	296	-297	5
18	12	3	393	-394	6	5	16	3	188	-196	4	20	19	3	95	-109	9	18	23	3	72	-84	-13	16	28	3	174	-183	6
19	12	3	472	466	6	6	16	3	271	266	4	21	19	3	314	304	5	19	23	3	81	-97	-24	17	28	3	41	-21	-24
20	12	3	303	302	5	7	16	3	506	500	5	22	19	3	268	272	4	20	23	3	49	-67	-39	18	28	3	202	-195	6
22	12	3	298	-291	4	8	16	3	132	-127	6	23	19	3	99	-104	9	21	23	3	73	-74	-14	0	29	3	687	635	6
23	12	3	75	-44	-23	9	16	3	60	17	-18	24	19	3	137	-136	8	22	23	3	123	-137	9	1	29	3	300	286	4
24	12	3	61	42	-30	10	16	3	74	65	-15	1	20	3	103	110	8	1	24	3	418	-416	6	2	29	3	216	-198	5
25	12	3	178	183	6	11	16	3	238	-232	4	2	20	3	331	332	5	2	24	3	216	215	5	3	29	3	54	-70	-35
26	12	3	158	172	7	12	16	3	152	-151	5	3	20	3	62	-50	-26	3	24	3	321	-316	5	4	29	3	195	-176	5
0	13	3	29	33	-46	13	16	3	508	-515	7	4	20	3	74	64	-17	4	24	3	174	-183	11	5	29	3	305	284	5
1	13	3	241	-240	3	14	16	3	595	589	9	5	20	3	498	493	6	5	24	3	451	-459	6	7	29	3	136	131	7
2	13	3	33	8	-41	15	16	3	249	-241	7	6	20	3	721	-726	9	6	24	3	132	-134	7	8	29	3	221	219	5
3	13	3	351	346	5	16	16	3	274	-273	4	7	20	3	257	-262	4	7	24	3	102	-118	-25	9	29	3	99	101	9
4	13	3	316	-315	5	17	16	3	138	-137	6	8	20	3	289	296	5	8	24	3	189	-180	5	10	29	3	33	6	-53
5	13	3	268	268	8	18	16	3	188	-181	5	9	20	3	48	24	-34	9	24	3	67	-11	-26	11	29	3	214	212	5
6	13	3	318	310	6	19	16	3	629	-640	6	10	20	3	208	213	10	10	24	3	148	147	6	12	29	3	291	-287	4
7	13	3	223	222	3	20	16	3	261	-263	4	11	20	3	283	-286	4	11	24	3	485	470	6	14	29	3	76	70	12
8	13	3	236	241	5	21	16	3	229	-233	5	12	20	3	196	203	5	12	24	3	73	-57	-23	15	29	3	164	157	6
9	13	3	571	564	15	22	16	3	147	145	7	13	20	3	264	261	4	13	24	3	171	-159	5	17	29	3	122	-134	9
10	13	3	150																										

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

PAGE 9

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S						
7	32	3	57	-82	-34	16	2	4	360	-357	5	9	6	4	99	-97	7	6	10	4	165	-158	5	7	14	4	59	-31	-28
8	32	3	167	158	6	17	2	4	142	131	6	10	6	4	124	-116	6	7	10	4	134	-127	6	8	14	4	215	-214	5
10	32	3	45	1	-41	18	2	4	143	-144	6	11	6	4	80	-78	-33	8	10	4	138	-142	7	10	14	4	217	214	5
11	32	3	216	-217	5	19	2	4	96	76	8	13	6	4	143	139	6	9	10	4	211	203	8	11	14	4	520	518	6
12	32	3	273	278	5	20	2	4	130	-141	7	14	6	4	118	122	12	10	10	4	128	125	9	12	14	4	57	-8	-27
13	32	3	115	-132	9	21	2	4	352	349	5	15	6	4	194	189	5	11	10	4	218	-215	4	13	14	4	201	-196	5
0	33	3	395	-377	6	22	2	4	202	-209	5	16	6	4	1029	1021	6	13	10	4	31	51	-56	14	14	4	422	-423	6
1	33	3	152	-147	7	23	2	4	394	-411	6	17	6	4	146	-141	6	14	10	4	324	318	5	16	14	4	347	-340	5
2	33	3	192	182	6	24	2	4	171	-177	6	18	6	4	175	164	5	15	10	4	164	-156	5	17	14	4	145	140	6
3	33	3	65	50	-31	25	2	4	216	225	5	19	6	4	56	52	-28	16	10	4	343	-329	5	18	14	4	246	-240	4
4	33	3	190	195	6	1	3	4	39	10	-34	20	6	4	141	140	6	19	10	4	250	-246	4	19	14	4	126	126	7
5	33	3	439	-420	6	2	3	4	447	-437	5	21	6	4	124	133	7	20	10	4	64	-67	-13	20	14	4	44	-54	-41
6	33	3	96	77	10	4	3	4	41	18	-32	22	6	4	128	135	7	21	10	4	396	-387	6	21	14	4	210	201	5
7	33	3	194	-193	6	6	3	4	878	-865	8	23	6	4	185	187	5	22	10	4	105	113	9	22	14	4	394	-412	6
8	33	3	221	-217	5	7	3	4	179	-174	5	24	6	4	321	340	5	23	10	4	168	186	6	1	15	4	121	122	11
9	33	3	165	-155	6	8	3	4	51	23	-26	1	7	4	166	164	5	24	10	4	231	-236	5	2	15	4	165	-154	5
10	33	3	87	-119	-25	9	3	4	172	-173	5	2	7	4	794	781	5	1	11	4	187	-174	4	3	15	4	298	291	5
11	33	3	148	-149	7	10	3	4	782	-760	6	3	7	4	212	-211	4	2	11	4	180	-172	5	4	15	4	141	138	6
1	34	3	246	-246	5	11	3	4	122	-114	6	4	7	4	174	-173	4	3	11	4	129	125	10	5	15	4	75	73	-23
2	34	3	346	-339	5	12	3	4	94	-98	-25	5	7	4	190	189	8	4	11	4	135	125	12	6	15	4	648	-636	6
4	34	3	67	-83	-32	13	3	4	42	-38	-36	7	7	4	61	58	-24	5	11	4	48	-59	-34	7	15	4	61	49	-29
5	34	3	145	144	8	14	3	4	581	-570	6	8	7	4	138	-128	6	6	11	4	738	722	5	8	15	4	60	-76	-31
6	34	3	256	252	5	15	3	4	204	201	7	9	7	4	254	250	4	7	11	4	267	-258	12	9	15	4	407	-410	6
7	34	3	209	-203	6	16	3	4	154	-155	6	10	7	4	776	758	6	8	11	4	321	316	6	10	15	4	564	-545	6
8	34	3	87	-66	-25	17	3	4	183	-192	5	11	7	4	78	80	-21	9	11	4	252	-248	4	11	15	4	62	66	-27
10	34	3	378	-392	6	18	3	4	226	213	4	12	7	4	301	-297	10	10	11	4	250	257	4	12	15	4	125	132	7
0	35	3	125	126	9	19	3	4	160	-162	5	13	7	4	85	-91	-19	11	11	4	48	-12	-35	13	15	4	91	-83	9
1	35	3	212	-209	6	20	3	4	100	84	8	14	7	4	204	-199	5	12	11	4	297	291	4	14	15	4	157	-157	6
2	35	3	254	246	5	21	3	4	83	84	10	15	7	4	513	515	6	13	11	4	203	199	4	15	15	4	158	152	6
3	35	3	244	-234	5	22	3	4	227	241	5	16	7	4	63	43	-26	14	11	4	276	269	4	16	15	4	248	-240	4
4	35	3	236	-233	5	23	3	4	155	159	6	17	7	4	74	-1	-20	15	11	4	383	-379	5	17	15	4	215	-214	5
5	35	3	37	-56	-57	24	3	4	128	132	8	18	7	4	231	231	4	16	11	4	292	288	5	18	15	4	22	37	-87
6	35	3	218	202	6	25	3	4	141	-159	8	19	7	4	127	115	7	17	11	4	301	298	5	19	15	4	74	101	-26
7	35	3	100	-77	10	0	4	4	758	-740	5	20	7	4	86	-90	10	18	11	4	262	-263	4	20	15	4	45	24	-39
1	36	3	210	-212	6	1	4	4	130	117	5	21	7	4	374	-386	5	19	11	4	141	-128	6	21	15	4	145	157	7
2	36	3	108	101	10	2	4	4	127	118	8	22	7	4	273	-272	4	20	11	4	169	-164	6	22	15	4	253	262	5
3	36	3	251	-249	5	3	4	4	39	-43	-34	24	7	4	133	125	7	21	11	4	185	188	6	0	16	4	316	-311	5
0	0	4	2553	2522	5	4	4	4	259	-260	4	0	8	4	675	-657	5	22	11	4	152	-148	6	1	16	4	383	375	6
2	0	4	44	48	-31	5	4	4	228	-221	6	1	8	4	138	131	5	23	11	4	276	-280	5	2	16	4	386	371	7
4	0	4	132	116	5	6	4	4	102	89	7	2	8	4	195	-192	4	0	12	4	1075	1051	5	3	16	4	128	-124	10
6	0	4	46	-21	-29	7	4	4	140	142	5	3	8	4	193	-191	8	1	12	4	481	-469	6	4	16	4	122	114	7
8	0	4	661	646	5	8	4	4	462	-447	6	4	8	4	111	-104	6	2	12	4	50	-63	-31	5	16	4	68	-78	-42
10	0	4	79	-73	9	9	4	4	112	-104	6	5	8	4	70	-73	-21	3	12	4	16	27	-64	6	16	4	348	337	5
12	0	4	920	-906	5	10	4	4	74	-78	10	6	8	4	190	-181	9	4	12	4	258	259	4	7	16	4	55	4	-39
16	0	4	189	-190	5	11	4	4	282	268	4	7	8	4	351	-332	5	5	12	4	95	87	8	8	16	4	258	-251	4
18	0	4	163	-167	5	12	4	4	262	245	4	8	8	4	250	-238	4	7	12	4	464	447	6	9	16	4	128	118	7
20	0	4	561	-568	6	13	4	4	355	-344	6	9	8	4	316	312	5	8	12	4	205	203	5	10	16	4	75	-53	-22
22	0	4	137	-138	7	14	4	4	65	52	-25	10	8	4	44	46	-31	9	12	4	275	-268	6	11	16	4	163	155	6
24	0	4	185	182	5	15	4	4	297	290	8	11	8	4	178	-176	10	10	12	4	75	35	-22	12	16	4	229	229	4
1	1	4	82	66	8	16	4	4	134	120	6	12	8	4	760	739	7	11	12	4	84	-78	10	13	16	4	256	-249	4
2	1	4	418	406	5	17	4	4	190	199	5	13	8	4	135	127	9	12	12	4	795	-785	6	15	16	4	147	142	6
3	1	4	48	41	-27	18	4	4	90	-101	9	14	8	4	195	184	10	13	12	4	229	216	4	16	16	4	46	-46	-37
4	1	4	92	84	9	19	4	4	70	-14	-22	15	8	4	252	-248	4	14	12	4	100	-74	8	17	16	4	110	107	8
5	1	4	161	-156	5	20	4	4	200	206	5	16	8	4	254	259	4	15	12	4	43	2	-18	18	16	4	386	-395	6
6	1	4	859	-841	8	21	4	4	138	139	7	17	8	4	51	-7	-32	16	12	4	130	-140	7	19	16	4	64	17	-28
7	1	4	57	61	-28	22	4	4	37	23	-46	18	8	4	219	-222	4	17	12	4	123	-119	7	20	16	4	67	76	-14
8	1	4	79	-82	-13	24	4	4	79	-131	-25	19	8	4	205	208	5	18	12	4	48	-79	-37	21	16	4	128	133	

Table with columns: OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam. Includes headers H K L 10FO 10FC 10S and 100 data rows of numerical values.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR Defernite 30,12,94 100K,Pnam

PAGE 11

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																												
15	14	5	54	51	-36	11	18	5	231	236	5	4	23	5	383	380	6	0	4	6	500	496	7	6	9	6	552	-555	7	7	9	6	16	85	-64	8	9	6	41	-8	-44	9	9	6	51	21	-39	10	9	6	399	-432	6	0	10	6	145	-146	7	1	10	6	81	-72	-22	2	10	6	256	258	4	3	10	6	128	-121	8	4	10	6	171	-181	6	5	10	6	61	6	-30	6	10	6	110	96	8	7	10	6	58	84	-35	8	10	6	99	92	10	9	10	6	165	-191	7	10	10	6	69	-48	-28	1	11	6	136	138	7	2	11	6	81	116	-26	3	11	6	117	-121	8	4	11	6	84	-88	-24	5	11	6	32	21	-61	6	11	6	456	-487	7	7	11	6	169	185	7	8	11	6	191	-202	6	9	11	6	166	164	7	0	12	6	727	-740	7	1	12	6	269	289	5	2	12	6	46	41	-41	3	12	6	60	-31	-15	4	12	6	117	-122	8	5	12	6	49	-63	-39	7	12	6	288	-285	5	8	12	6	177	-173	6	1	13	6	209	-213	5	2	13	6	162	-173	6	3	13	6	35	72	-59	4	13	6	181	-178	6	5	13	6	303	321	5	6	13	6	302	315	5	7	13	6	274	-271	5	8	13	6	57	-96	-38	9	13	6	274	-271	5	0	14	6	190	-194	6	1	14	6	171	-183	7	2	14	6	261	-268	5	3	14	6	149	-167	7	4	14	6	400	-403	6	5	14	6	246	262	5	6	14	6	56	-72	-39	1	15	6	42	-53	-169	2	15	6	107	111	10	3	15	6	226	-238	5	4	15	6	101	-104	10	5	15	6	89	-73	12	0	16	6	165	169	7	1	16	6	233	-240	5	2	16	6	256	-261	5	3	16	6	95	85	11