Am-83-220

American Mineralogist, Volume 68, pages 614–622, 1983

Okenite, $Ca_{10}Si_{18}O_{46} \cdot 18H_2O$: the first example of a chain and sheet silicate

STEFANO MERLINO

Istituto di Mineralogia e Petrografia
Università di Pisa
Via S. Maria 53, 56100 Pisa, Italy

Abstract

The crystal structure of okenite, $Ca_{10}Si_{18}O_{46}\cdot 18H_2O$, was solved with triclinic space group $P\bar{1}$ $a = 9.69$, $b = 7.28$, $c = 22.02$Å, $\alpha = 92.7°$, $\beta = 100.1°$, $\gamma = 110.9°$. The structure is composed of the following structural units: (a) tetrahedral sheets S, with composition $(Si_6O_{15})^{-6}$, characterized by five- and eight-membered rings of silicate tetrahedra, with five tetrahedra pointing in one direction and one tetrahedron pointing in the other direction; (b) three-repeat double chains C, with composition $(Si_6O_{16})^{-8}$ and characterized by four- and six-membered rings, made up by pairing two wollastonite chains, which point in opposite directions; (c) octahedral double chains O, formed by two strands of octahedra. These structural units are connected by corner sharing to give the complex layer SOCOS, with composition $[Ca_8(Si_6O_{16})(Si_6O_{15})_2(H_2O)_6]^{-4}$. Such complex layers alternate in the structure with sheets $[Ca_2(H_2O)_9\cdot 3H_2O]^{+4}$. Weak supercell reflections revealed a larger unit cell with doubled a and b parameters in the unconventional space group $C\bar{1}$.

Introduction

Okenite, a hydrated calcium silicate, has long been of interest to a large number of mineralogists and crystal chemists: its consistent association with gyrolite and zeolites in basalts seemed indicative of some structural relations among them. Of particular interest is the role of water molecules in the structure of okenite, the definition of which could lead to an understanding of the dehydration mechanism which, according to Heller's X-ray studies (Gard and Taylor, 1956), leads topotactically to the formation of wollastonite.

Okenite was first described from Disko Island (Greenland) and was subsequently found in various other localities, such as Crestmore (California), Scawt Hill (Northern Ireland), Bordö (Faröer Islands), Bombay (India), usually in basalts. The most comprehensive account of its crystallographic properties was given by Gard and Taylor (1956) who studied a specimen from Bombay, India, consisting of fibrous aggregates. These authors studied okenite by electron diffraction, as single crystals of sufficient size for X-ray diffraction were not available. The results indicated that the crystals were triclinic with $a = 9.84$, $b = 7.20$, $c = 21.33$Å, $\alpha = 90.0°$, $\beta = 103.9°$, $\gamma = 111.5°$. The fiber direction was [010], with repeated lamellar twinning across the cleavage plane {001}. On the basis of the cell volume and a chemical analysis by Christie (1925), Gard and Taylor (1956) proposed that the cell contents are $Ca_9Si_{18}O_{63}H_{36}$, or $Ca_9(Si_6O_{15})_3\cdot 18H_2O$.

Gard and Taylor (1956) also studied a mineral from Crestmore, California, which was previously characterized as okenite on the basis of its chemical composition and optical properties, and demonstrated that it was in fact a new species for which they proposed the name nekoite. Crystal structures for both minerals were hypothesized by Mamedov and Belov (1958) on the basis of the chemical composition and unit cell dimensions. The crystal structure of nekoite was recently solved by Alberti and Galli (1980) who showed that it was in many respects different from the structural model of Mamedov and Belov (1958).

The present work was undertaken to determine the crystal structure of okenite in order to further our understanding of the crystal chemistry of the hydrated calcium silicates.

Experimental

A specimen of okenite from Kolhapur District, Maharastra State, India, donated by Prof. E. Passaglia, was used in this study. Careful examination of a large number of crystals from this specimen and testing by preliminary Weissenberg photographs resulted in the selection of crystals of sufficient quality for intensity measurement. By means of Weissenberg and precession photographs the lattice parameters were determined on a small fragment cut from a long lath-shaped crystal. The same crystal fragment was used to collect intensity data with a Philips PW 1100 single crystal diffractometer, after obtaining refined lattice parameters by least squares fitting of 20 medium range θ values: $a = 9.69(1)$, $b = 7.28(1)$, $c = 22.02(4)$Å, $\alpha = 92.7(2)°$, $\beta = 100.1(3)°$, $\gamma = 110.9(1)°$.

0003–004X/83/0506–0614$02.00

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRUE CELL OF OKENITE

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
10	0	0	276	274	4	-4	1	318	305	0	6	1	154	-189	-8	0	2	430	-498	-4	-6	3	426	422
-10	2	0	258	272	2	-4	1	478	-314	-2	6	1	105	-159	-6	0	2	638	-713	10	-4	3	327	-311
-8	2	0	102	89	0	-4	1	230	-276	-4	6	1	180	-226	-4	0	2	203	-203	8	-4	3	148	-106
-6	2	0	181	-264	-2	-4	1	204	-233	-8	6	1	182	-174	2	0	2	293	315	6	-4	3	306	310
-4	2	0	101	84	-4	-4	1	215	-193	-10	6	1	251	244	4	0	2	110	-74	4	-4	3	1013	-900
-2	2	0	62	-125	-6	-4	1	282	317	-2	8	1	96	107	6	0	2	206	209	2	-4	3	91	73
2	2	0	194	194	10	-2	1	173	-154	-4	8	1	154	77	8	0	2	119	-213	0	-4	3	215	128
4	2	0	111	28	8	-2	1	75	-84	-6	8	1	283	-304	-10	2	2	85	-115	-2	-4	3	349	291
6	2	0	198	-269	6	-2	1	121	-64	2	-8	2	241	-194	-8	2	2	189	-190	-4	-4	3	189	227
8	2	0	136	-185	4	-2	1	399	426	4	-8	2	261	33	-6	2	2	71	39	-6	-4	3	347	-372
-10	4	0	532	553	2	-2	1	136	-78	6	-8	2	99	92	-4	2	2	95	130	10	-2	3	74	-7
-6	4	0	125	-47	0	-2	1	255	-314	-2	-6	2	134	-213	-2	2	2	242	312	6	-2	3	170	-171
-4	4	0	107	151	-2	-2	1	141	137	0	-6	2	74	80	0	2	2	153	123	2	-2	3	92	102
-2	4	0	149	70	-8	-2	1	69	59	2	-6	2	86	18	2	2	2	374	402	0	-2	3	97	48
0	4	0	245	331	10	0	1	226	260	4	-6	2	323	-265	4	2	2	151	-215	-4	-2	3	163	-202
2	4	0	215	263	6	0	1	92	-111	6	-6	2	330	-353	8	2	2	119	115	8	0	3	326	-373
4	4	0	305	305	4	0	1	254	-329	8	-6	2	131	-110	-10	4	2	200	-215	6	0	3	106	117
6	4	0	606	660	-4	0	1	309	387	-6	-4	2	298	-306	-6	4	2	283	322	2	0	3	121	118
-10	6	0	362	320	-6	0	1	170	193	-4	-4	2	105	-97	-2	4	2	195	-182	-2	0	3	69	47
-8	6	0	86	140	-8	0	1	304	-353	-2	-4	2	299	324	0	4	2	752	-769	-4	0	3	210	-228
-4	6	0	85	101	-10	0	1	131	188	0	-4	2	153	-167	2	4	2	313	274	-6	0	3	861	-854
0	6	0	87	154	6	2	1	71	-149	2	-4	2	230	-142	4	4	2	302	-316	8	2	3	182	-307
2	6	0	88	9	4	2	1	344	-379	4	-4	2	582	-543	6	4	2	89	-72	6	2	3	83	-139
4	6	0	428	405	2	2	1	191	-218	6	-4	2	248	234	-10	6	2	233	185	4	2	3	138	-124
-6	8	0	103	-104	0	2	1	103	-171	8	-4	2	165	-196	-4	6	2	140	67	2	2	3	263	223
-2	8	0	100	76	-4	2	1	60	-82	10	-4	2	256	244	-2	6	2	128	158	0	2	3	157	-114
6	-8	1	186	199	-6	2	1	432	-421	-8	-2	2	81	32	0	6	2	96	-112	-2	2	3	162	-194
4	-8	1	1678	1047	-8	2	1	88	60	-6	-2	2	96	-105	2	6	2	77	71	-4	2	3	259	322
10	-6	1	128	-143	-10	2	1	241	-226	-4	-2	2	351	-405	-6	8	2	129	-173	-6	2	3	123	132
6	-6	1	89	88	6	4	1	233	250	-2	-2	2	278	274	-4	8	2	186	-195	-8	2	3	122	141
4	-6	1	173	153	0	4	1	84	26	0	-2	2	66	-18	-2	8	2	112	184	-10	2	3	140	136
-2	-6	1	140	172	-2	4	1	131	-168	2	-2	2	230	207	6	-8	3	198	216	6	4	3	314	-401
-4	-6	1	180	144	-8	4	1	87	24	6	-2	2	101	-76	2	-8	3	166	-129	4	4	3	210	-184
10	-4	1	395	385	-10	4	1	125	-103	8	-2	2	206	-148	8	-6	3	95	-164	2	4	3	133	-85
8	-4	1	97	74	4	6	1	102	76	10	-2	2	103	-81	4	-6	3	253	-175	0	4	3	1368	-1167
6	-4	1	125	111	2	6	1	336	-381	-10	0	2	130	124	2	-6	3	99	-32	-2	4	3	217	-186

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRUE CELL OF OKENITE

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
-8	4	3	104	-81	4	2	4	67	-84	-8	-2	5	190	229	4	-4	6	361	277	6	-6	7	73	112
-10	4	3	489	-518	-10	4	4	224	-263	8	0	5	117	117	6	-4	6	160	-137	4	-6	7	83	40
2	6	3	118	72	-8	4	4	192	242	4	0	5	487	427	8	-4	6	232	183	2	-6	7	247	153
-4	6	3	87	173	-6	4	4	86	-83	2	0	5	441	346	-8	-2	6	156	-182	0	-6	7	143	-117
-8	6	3	64	-17	-4	4	4	309	-384	0	0	5	154	-200	-6	-2	6	118	-36	-2	-6	7	369	-258
-10	6	3	83	-115	-2	4	4	108	107	-2	0	5	153	-140	-4	-2	6	369	-325	8	-4	7	98	130
-4	8	3	189	-197	0	4	4	353	-225	-4	0	5	77	35	-2	-2	6	279	203	6	-4	7	101	5
-6	8	3	77	-69	2	4	4	286	-271	-6	0	5	449	405	0	-2	6	233	217	4	-4	7	758	644
2	-8	4	333	-235	4	4	4	233	224	-8	0	5	720	706	2	-2	6	322	281	2	-4	7	156	161
4	-8	4	159	-124	-10	6	4	220	245	6	2	5	123	180	4	-2	6	275	-238	-2	-4	7	388	277
-4	-6	4	306	290	-6	6	4	242	287	4	2	5	70	19	6	-2	6	245	-231	-4	-4	7	284	-206
4	-6	4	195	150	-4	6	4	97	-6	2	2	5	376	323	-10	0	6	360	381	-6	-4	7	181	158
-6	-4	4	348	-313	-2	6	4	186	-117	0	2	5	238	179	-8	0	6	107	1	6	-2	7	86	-134
-2	-4	4	269	-206	0	6	4	153	-139	-2	2	5	275	305	-6	0	6	497	459	4	-2	7	184	64
2	-4	4	352	-318	2	6	4	165	-199	-4	2	5	154	177	-4	0	6	346	-335	2	-2	7	296	-196
6	-4	4	490	-463	8	-6	5	75	26	-6	2	5	190	204	-2	0	6	639	665	0	-2	7	296	-263
8	-4	4	115	-130	6	-6	5	167	-54	-8	2	5	69	-82	0	0	6	506	498	-2	-2	7	335	-239
-8	-2	4	148	-165	4	-6	5	464	339	-10	2	5	217	-241	2	0	6	422	392	-4	-2	7	186	-174
-4	-2	4	107	53	2	-6	5	228	132	4	4	5	146	135	4	0	6	413	411	-8	-2	7	85	-85
2	-2	4	188	-157	0	-6	5	257	180	2	4	5	349	-267	6	0	6	234	-260	6	0	7	265	267
4	-2	4	267	206	-2	-6	5	104	14	0	4	5	210	196	-10	2	6	117	167	4	0	7	372	324
6	-2	4	307	-300	8	-4	5	82	97	-2	4	5	218	169	-8	2	6	142	-159	2	0	7	327	-262
8	-2	4	126	-121	6	-4	5	260	-233	-4	4	5	114	-167	-6	2	6	132	-56	0	0	7	804	750
-10	0	4	162	-203	4	-4	5	156	89	-6	4	5	461	522	-4	2	6	80	162	-2	0	7	116	133
-8	0	4	371	416	2	-4	5	171	162	-8	4	5	335	375	0	2	6	116	-104	-4	0	7	694	-608
-6	0	4	398	-429	-2	-4	5	234	131	-10	4	5	100	127	2	2	6	296	249	-6	0	7	329	264
-4	0	4	199	-211	-4	-4	5	175	135	-2	6	5	89	81	4	2	6	183	-191	6	2	7	176	-190
0	0	4	311	359	-6	-4	5	72	-135	-4	6	5	187	199	-8	4	6	204	-246	4	2	7	95	-127
4	0	4	518	-483	8	-2	5	95	111	-6	6	5	70	72	-6	4	6	259	323	-2	2	7	482	-483
6	0	4	82	53	6	-2	5	209	210	0	-6	6	313	218	-4	4	6	82	73	-4	2	7	180	-157
8	0	4	131	-105	4	-2	5	511	439	4	-6	6	478	-408	-2	4	6	169	152	-6	2	7	128	-178
-6	2	4	641	-692	2	-2	5	251	224	6	-6	6	84	-58	2	4	6	102	-57	0	4	7	527	363
-4	2	4	129	-167	0	-2	5	203	-174	-6	-4	6	74	44	-8	6	6	155	-145	-4	4	7	139	168
-2	2	4	215	-222	-2	-2	5	273	203	-4	-4	6	283	228	-6	6	6	102	-100	-6	4	7	263	274
0	2	4	298	236	-4	-2	5	221	-180	0	-4	6	419	320	-4	6	6	73	-62	-8	4	7	245	-209
2	2	4	277	-191	-6	-2	5	106	33	2	-4	6	279	203	-2	6	6	172	132	0	6	7	224	-183

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRUE CELL OF OKENITE

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	6	7	144	-146	6	-2	9	128	-163	14	0	0	313	351	14	-8	1	321	348	-10	10	1	239	-213
-6	6	7	145	193	2	-2	9	81	45	16	0	0	160	209	12	-8	1	185	177	-4	12	1	211	-224
0	-6	8	158	86	0	-2	9	96	-125	-14	2	0	209	243	8	-8	1	146	102	-8	12	1	188	-200
4	-6	8	105	64	-2	-2	9	162	161	-12	2	0	242	238	0	-8	1	192	242	-10	12	1	202	-221
-6	-4	8	75	-67	-6	-2	9	81	-26	12	2	0	198	284	-2	-8	1	132	141	-14	12	1	186	-154
0	-4	8	72	-4	4	0	9	251	-193	-12	4	0	154	119	-4	-8	1	229	-238	6	-12	2	192	124
2	-4	8	535	-441	2	0	9	182	186	8	4	0	278	317	-6	-8	1	215	175	8	-12	2	248	-209
6	-4	8	339	-277	-2	0	9	156	86	12	4	0	161	225	-10	-8	1	203	229	12	-12	2	193	-165
-8	-2	8	85	-91	-6	0	9	113	-105	-16	6	0	148	157	18	-6	1	206	-227	-2	-10	2	234	-245
-6	-2	8	323	-266	-8	0	9	319	-311	-12	6	0	353	420	12	-6	1	107	-132	4	-10	2	226	-186
4	-2	8	139	165	4	2	9	325	-209	-14	8	0	182	183	-6	-6	1	144	99	12	-10	2	196	-201
6	-2	8	142	-176	2	2	9	103	57	-12	8	0	154	-77	-8	-6	1	147	167	14	-10	2	154	-170
-8	0	8	347	-399	-4	2	9	114	181	6	8	0	252	292	-10	-6	1	173	223	-8	-8	2	154	-110
-6	0	8	112	-75	-6	2	9	164	192	8	8	0	142	92	14	-4	1	192	-216	-6	-8	2	180	187
-4	0	8	295	-293	0	4	9	610	-497	-10	10	0	309	-331	12	-4	1	313	318	-4	-8	2	366	-361
-2	0	8	308	-271	-2	4	9	499	-449	-6	10	0	157	148	-8	-4	1	184	-172	-2	-8	2	148	-139
0	0	8	317	401	-6	4	9	292	-333	-4	10	0	276	185	-14	-4	1	151	-149	0	-8	2	110	186
6	0	8	198	144	-8	4	9	194	-183	4	10	0	201	-231	12	-2	1	136	-145	8	-8	2	119	76
-6	2	8	422	-415	-2	-4	10	291	-226	-14	12	0	137	204	16	0	1	280	317	12	-8	2	212	-176
-4	2	8	100	145	0	-4	10	281	210	-8	12	0	120	89	14	0	1	133	-140	14	-8	2	187	121
-2	2	8	176	206	2	-4	10	269	-284	-6	12	0	151	-88	-16	2	1	217	-213	-8	-6	2	153	-163
0	2	8	78	128	4	-4	10	831	-737	2	12	0	149	158	10	4	1	185	-237	10	-6	2	238	213
2	2	8	169	-101	-4	-2	10	189	-168	14	-12	1	273	249	-12	4	1	463	-523	12	-6	2	128	-216
4	2	8	128	-88	-2	-2	10	79	-29	10	-12	1	159	233	-16	4	1	339	-300	-14	-4	2	261	-349
-6	4	8	278	-288	4	-2	10	246	-196	8	-12	1	389	333	-18	4	1	294	-275	-12	-4	2	424	-569
-4	4	8	115	-94	-8	0	10	194	-199	6	-12	1	269	176	8	6	1	216	-205	-8	-4	2	409	-527
-2	4	8	374	-315	-6	0	10	502	-464	4	-12	1	280	248	6	6	1	129	-130	12	-4	2	618	660
2	4	8	441	-351	-4	0	10	241	-227	-2	-12	1	259	337	-12	6	1	132	-132	-10	-2	2	151	223
-2	6	8	298	-201	0	0	10	223	226	14	-10	1	164	-161	6	8	1	190	155	14	-2	2	85	97
4	-6	9	249	-207	2	0	10	106	-97	12	-10	1	262	-244	-10	8	1	231	-248	12	0	2	250	321
0	-6	9	380	260	4	0	10	325	-280	10	-10	1	193	-194	-12	8	1	542	-589	14	0	2	158	187
6	-4	9	163	-138	-8	2	10	109	-140	8	-10	1	252	249	-16	8	1	157	-176	16	0	2	158	184
4	-4	9	123	-76	-4	2	10	132	-167	6	-10	1	138	-91	-18	8	1	151	113	12	2	2	158	-167
2	-4	9	309	-288	2	2	10	292	257	2	-10	1	176	191	0	10	1	327	-429	-18	4	2	253	-224
0	-4	9	134	94	-6	4	10	139	-160	-2	-10	1	143	-148	-6	10	1	123	150	-16	4	2	391	-446
-4	-4	9	91	-57	-4	4	10	290	291	-6	-10	1	152	137	-8	10	1	164	123	-12	4	2	120	-95

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRUE CELL OF OKENITE

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
-18	6	2	159	-152	-12	-4	3	193	-281	14	-10	4	187	-168	8	-10	5	367	282	-6	8	5	158	223
6	6	2	349	371	-12	-2	3	214	292	-10	-8	4	146	174	4	-10	5	374	-283	-8	8	5	141	129
-16	8	2	132	-119	14	0	3	242	267	-8	-8	4	226	213	2	-10	5	161	-90	-14	8	5	199	226
-14	8	2	151	186	12	0	3	222	211	-6	-8	4	173	-140	0	-10	5	236	-180	-16	8	5	204	254
-10	8	2	302	-342	10	0	3	376	-455	-2	-8	4	628	-675	-2	-10	5	186	-151	0	10	5	223	-199
-8	8	2	142	150	-12	2	3	123	158	0	-8	4	191	-222	-4	-10	5	113	95	-2	10	5	166	138
4	8	2	208	-221	-16	2	3	165	156	8	-8	4	274	-260	16	-8	5	262	-224	-4	10	5	122	48
8	8	2	260	238	-14	4	3	233	-241	14	-8	4	296	-300	10	-8	5	153	-114	-12	10	5	158	-122
-14	10	2	176	-172	-18	4	3	277	269	-8	-6	4	154	142	8	-8	5	229	168	0	12	5	99	155
-12	10	2	129	-180	4	6	3	97	79	14	-6	4	151	-134	0	-8	5	115	76	-4	12	5	257	212
-8	10	2	144	184	-16	6	3	214	217	-10	-4	4	134	-183	-2	-8	5	150	38	-6	12	5	474	405
-2	10	2	234	304	6	8	3	309	-401	-8	-4	4	182	197	-4	-8	5	260	227	-10	12	5	147	199
0	10	2	174	-240	4	8	3	355	-327	10	-4	4	454	-467	-6	-8	5	117	-146	2	-12	6	204	205
2	10	2	136	-183	0	8	3	175	-196	14	-4	4	495	-502	12	-4	5	168	210	4	-12	6	215	-128
-14	12	2	195	-246	-8	8	3	158	-193	-14	-2	4	146	-257	10	-4	5	271	-252	6	-12	6	374	263
-6	12	2	272	271	-10	8	3	535	-607	-14	0	4	321	380	-14	-4	5	199	268	8	-12	6	128	-4
-4	12	2	225	-267	-12	8	3	107	191	-12	0	4	304	335	-10	-2	5	157	210	10	-12	6	185	-155
10	-12	3	138	127	-16	8	3	169	208	12	0	4	241	-302	-14	-2	5	117	-142	12	-12	6	189	195
8	-12	3	446	-347	-18	8	3	168	138	-12	2	4	203	192	14	0	5	145	173	-6	-10	6	180	175
4	-12	3	316	-234	4	10	3	199	-212	12	2	4	142	251	12	0	5	227	-267	0	-10	6	507	-429
-2	-12	3	181	-180	2	10	3	145	-123	-18	4	4	250	277	-12	0	5	245	341	2	-10	6	159	125
6	-10	3	310	231	0	10	3	198	179	-14	4	4	251	-280	-14	0	5	239	304	4	-10	6	152	99
4	-10	3	302	163	-6	10	3	192	-204	6	4	4	372	-408	8	2	5	207	317	6	-10	6	286	196
2	-10	3	135	64	-10	10	3	268	-274	4	6	4	270	268	-12	2	5	105	-144	8	-10	6	219	193
0	-10	3	247	-233	-16	10	3	166	235	-14	8	4	207	-222	10	4	5	153	199	10	-10	6	134	133
16	-8	3	246	223	-2	12	3	230	-273	-12	8	4	234	285	8	4	5	145	231	12	-10	6	157	158
12	-8	3	320	-341	-4	12	3	323	-442	-8	8	4	91	-52	-12	4	5	127	168	-8	-8	6	278	245
8	-8	3	244	-243	-12	12	3	143	155	4	8	4	140	181	-18	4	5	248	265	-6	-8	6	342	310
-2	-8	3	464	-493	-14	12	3	152	-164	8	8	4	131	-128	10	6	5	168	244	-4	-8	6	383	377
16	-6	3	181	173	-2	-12	4	275	-313	-10	10	4	253	-310	6	6	5	165	165	-2	-8	6	534	478
14	-6	3	127	85	2	-12	4	162	-123	-4	10	4	343	256	4	6	5	311	293	6	-8	6	282	207
10	-6	3	329	320	8	-12	4	382	-276	-6	12	4	227	206	-10	6	5	240	303	8	-8	6	352	320
-8	-6	3	239	-241	6	-10	4	181	92	0	12	4	148	201	8	8	5	225	-198	12	-8	6	186	-169
14	-4	3	197	-212	8	-10	4	138	138	10	-12	5	250	-253	0	8	5	390	375	16	-8	6	266	-239
12	-4	3	170	179	10	-10	4	309	-296	4	-12	5	241	-90	-2	8	5	432	318	-8	-6	6	206	-174
-10	-4	3	150	-204	12	-10	4	197	-209	12	-10	5	235	-196	-4	8	5	114	100	-6	-6	6	125	132

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRUE CELL OF OKENITE

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	177	105	-4	12	6	335	267	-14	4	7	465	-492	6	-6	8	283	-253	-2	-10	9	280	-225
10	-6	6	452	419	8	-12	7	422	333	6	6	7	159	-155	-14	-4	8	267	-323	-4	-10	9	213	120
14	-6	6	143	160	6	-12	7	334	201	2	6	7	137	-114	-10	-4	8	268	-263	-6	-10	9	170	152
-14	-4	6	167	217	2	-12	7	316	204	-14	6	7	205	-210	-8	-4	8	136	-97	12	-8	9	234	-241
12	-4	6	262	278	-2	-12	7	103	119	6	8	7	323	316	10	-4	8	229	232	4	-8	9	117	123
14	-4	6	211	232	10	-10	7	197	-226	0	8	7	290	241	12	-4	8	207	207	2	-8	9	126	-62
16	-4	6	277	-288	6	-10	7	231	223	-2	8	7	154	-120	14	-4	8	142	97	0	-8	9	176	117
-14	-2	6	157	132	4	-10	7	200	140	-4	8	7	359	312	-14	-2	8	183	-190	-2	-8	9	129	135
-12	-2	6	128	152	-2	-10	7	182	122	-8	8	7	264	-334	10	-2	8	129	-102	-4	-8	9	225	-186
-10	-2	6	160	186	14	-8	7	322	293	-12	8	7	239	-319	10	0	8	150	165	-6	-8	9	197	148
14	-2	6	184	219	12	-8	7	107	-122	4	10	7	204	-213	-14	2	8	134	144	-8	-8	9	177	-155
-14	0	6	156	-100	4	-8	7	463	325	0	10	7	169	153	-12	2	8	97	51	6	-6	9	273	-238
-12	0	6	257	277	2	-8	7	194	121	-10	10	7	223	-302	-10	2	8	148	-140	-6	-6	9	112	64
10	0	6	199	232	0	-8	7	382	-301	-16	10	7	136	183	-18	4	8	285	-294	-10	-6	9	180	199
14	0	6	276	363	-2	-8	7	139	147	-6	12	7	264	-254	8	4	8	100	130	12	-4	9	209	193
8	2	6	101	-156	-4	-8	7	132	-65	4	-12	8	209	149	-12	6	8	101	120	10	-4	9	159	112
6	4	6	115	140	-6	-8	7	213	215	8	-12	8	327	263	0	6	8	201	-166	8	-4	9	386	-340
8	4	6	143	132	-8	-8	7	311	295	-2	-10	8	286	-242	2	6	8	289	-232	-6	-4	9	320	-225
10	4	6	197	224	8	-6	7	148	-133	4	-10	8	368	-271	4	6	8	302	231	-8	-4	9	220	-230
12	4	6	166	-205	-4	-6	7	93	152	6	-10	8	156	-111	-16	8	8	114	-124	-12	-4	9	166	-190
2	6	6	128	68	-8	-6	7	168	-135	8	-10	8	209	172	-12	8	8	311	-362	10	-2	9	295	-299
-14	8	6	238	266	-8	-4	7	122	123	10	-10	8	224	-203	-4	8	8	206	185	8	-2	9	103	-149
-10	8	6	166	200	-10	-4	7	161	-170	12	-10	8	145	-142	-10	10	8	198	-196	-8	-2	9	176	180
-8	8	6	228	-226	14	-2	7	137	139	-10	-8	8	318	-296	-6	10	8	167	123	-10	-2	9	278	265
-6	8	6	130	172	-10	-2	7	116	-80	-6	-8	8	184	-167	-4	10	8	170	107	8	0	9	433	-430
-4	8	6	236	238	-14	-2	7	138	-149	-4	-8	8	501	-404	-2	10	8	219	-179	-10	0	9	256	239
0	8	6	202	145	14	0	7	249	266	-2	-8	8	106	71	0	10	8	389	-329	-12	0	9	204	-205
4	8	6	311	-289	10	0	7	239	330	0	-8	8	291	-230	2	10	8	134	-160	-14	0	9	162	-177
6	8	6	291	283	-10	0	7	226	183	2	-8	8	88	-91	-10	12	8	316	-404	12	2	9	155	-210
-12	10	6	164	-175	-14	0	7	234	-245	4	-8	8	380	262	-4	12	8	141	-119	10	2	9	124	-129
-8	10	6	143	-130	12	2	7	112	183	6	-8	8	114	-144	6	-12	9	186	-107	-14	2	9	155	170
-6	10	6	307	-306	8	2	7	121	-130	8	-8	8	209	195	2	-12	9	257	-167	8	4	9	102	53
-2	10	6	271	257	12	4	7	147	118	10	-8	8	201	189	0	-12	9	175	-165	4	4	9	726	-614
2	10	6	142	-149	6	4	7	153	160	12	-8	8	244	173	8	-10	9	262	231	2	4	9	252	-165
-10	12	6	159	216	4	4	7	248	240	14	-8	8	249	248	4	-10	9	100	-99	-10	4	9	404	-441
-6	12	6	140	34	-12	4	7	157	-168	-6	-6	8	228	-168	2	-10	9	109	7	-12	4	9	218	-273

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
-14	4	9	217	228	-12	-4	10	182	-202	8	-8	11	291	-270	-10	10	11	110	-88	2	0	12	320	300
-2	6	9	314	259	-8	-4	10	210	-193	-2	-8	11	230	-179	-4	-10	12	193	144	4	0	12	298	260
-4	6	9	210	188	-6	-4	10	521	-424	8	-6	11	190	-139	-2	-10	12	154	-85	6	0	12	247	-240
-8	6	9	145	-145	8	-4	10	416	-418	4	-6	11	383	384	2	-10	12	132	-99	8	0	12	303	257
6	8	9	312	-284	14	-4	10	166	-257	2	-6	11	497	389	4	-10	12	227	-143	10	0	12	212	-195
4	8	9	533	-466	6	-2	10	129	-111	0	-6	11	183	117	6	-10	12	244	208	-14	2	12	115	110
0	8	9	350	-248	-14	0	10	166	139	-2	-6	11	182	137	8	-10	12	563	481	-10	2	12	216	-223
-4	8	9	93	-88	-10	0	10	500	476	4	-4	11	230	-246	-8	-8	12	174	152	-8	2	12	128	-139
-6	8	9	170	-188	6	0	10	154	165	-4	-4	11	533	428	-6	-8	12	148	78	-6	2	12	133	-136
-12	8	9	182	-221	8	0	10	485	-423	-8	-4	11	235	191	-4	-8	12	457	319	8	2	12	99	127
-14	8	9	324	365	10	0	10	246	-282	10	-2	11	158	206	-2	-8	12	342	266	-14	4	12	125	176
2	10	9	156	82	-10	2	10	279	248	8	-2	11	173	204	0	-8	12	354	246	-10	4	12	298	-343
-2	10	9	249	218	8	2	10	175	-163	6	-2	11	171	210	6	-8	12	193	167	-8	4	12	286	324
-6	10	9	236	-237	-16	4	10	268	-275	-6	-2	11	130	157	8	-8	12	364	295	-2	4	12	229	258
-8	10	9	196	-258	-10	4	10	353	-393	-8	-2	11	121	150	12	-8	12	287	232	2	4	12	304	-291
-4	12	9	435	-359	2	4	10	309	246	-10	-2	11	88	-103	-10	-6	12	220	213	4	4	12	205	-158
2	-12	10	357	-259	4	4	10	186	-152	-12	-2	11	159	177	-2	-6	12	293	174	6	4	12	202	-192
6	-12	10	203	-106	6	4	10	246	236	12	0	11	108	-115	0	-6	12	294	235	8	4	12	288	283
8	-12	10	373	-262	-12	6	10	172	155	10	0	11	324	-329	6	-6	12	267	-185	-14	6	12	238	-272
0	-10	10	217	-159	-8	6	10	137	152	6	0	11	272	248	10	-6	12	129	88	-12	6	12	141	-161
2	-10	10	224	151	-6	6	10	234	263	-8	0	11	273	454	12	-6	12	220	254	-10	6	12	129	-146
6	-10	10	141	63	-4	6	10	108	77	-14	0	11	427	564	-6	-4	12	153	-145	-4	6	12	109	116
-6	-8	10	432	343	-2	6	10	110	123	-16	2	11	100	-68	-2	-4	12	365	270	4	6	12	165	174
-4	-8	10	343	-252	0	6	10	143	-130	8	4	11	149	119	2	-4	12	322	268	-10	8	12	190	206
0	-8	10	255	-195	6	6	10	274	238	4	4	11	186	109	6	-4	12	182	-173	-2	8	12	307	250
2	-8	10	229	-161	8	6	10	147	171	-2	4	11	311	286	12	-4	12	368	369	0	8	12	449	334
8	-8	10	368	-342	-14	8	10	224	242	-6	4	11	149	142	-14	-2	12	161	-165	2	8	12	272	-227
12	-8	10	484	-418	-10	8	10	192	-211	-12	4	11	197	196	-12	-2	12	158	109	-12	10	12	146	-126
14	-8	10	262	-205	0	8	10	248	-195	-2	6	11	131	-125	-6	-2	12	248	-204	-10	10	12	186	-243
-8	-6	10	299	-263	4	8	10	195	-129	-6	6	11	311	312	4	-2	12	171	115	-8	10	12	242	-227
-6	-6	10	107	90	-4	10	10	275	254	-16	6	11	163	180	6	-2	12	150	-95	-6	10	12	169	-202
-4	-6	10	118	88	0	10	10	193	151	4	8	11	291	258	10	-2	12	175	-129	4	-10	13	136	-101
4	-6	10	224	-201	2	-12	11	389	-285	0	8	11	231	228	-14	0	12	266	300	-2	-10	13	264	-184
10	-6	10	249	232	6	-10	11	189	155	-12	8	11	163	227	-12	0	12	130	110	-4	-10	13	174	69
12	-6	10	167	-160	2	-10	11	275	-187	-4	10	11	165	89	-8	0	12	229	224	10	-8	13	366	-287
-14	-4	10	150	143	-2	-10	11	197	143	-8	10	11	182	202	-6	0	12	111	125	8	-8	13	354	312

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	-8	13	296	220	-16	2	13	152	-89	-2	-2	14	99	65	6	-6	15	327	-332	-4	8	15	183	197
0	-8	13	225	-159	8	4	13	352	297	-14	0	14	171	-146	-2	-6	15	151	-124	-6	8	15	291	-313
-6	-8	13	159	107	4	4	13	134	-61	-12	0	14	175	131	8	-4	15	170	-213	-8	8	15	167	-189
0	-6	13	147	100	-2	4	13	144	153	-10	0	14	338	294	6	-4	15	272	-284	0	-8	16	243	-201
-2	-6	13	375	-301	-6	4	13	465	474	-4	0	14	437	-381	4	-4	15	148	-42	2	-8	16	525	-383
-4	-6	13	415	-322	-10	4	13	432	-479	-2	0	14	412	377	2	-4	15	97	94	-6	-6	16	241	-182
-6	-6	13	94	-122	-12	4	13	135	-150	0	0	14	173	145	0	-4	15	208	-182	0	-6	16	388	279
-8	-6	13	360	-278	-14	4	13	215	-225	2	0	14	202	-213	-2	-4	15	256	-215	2	-6	16	203	-189
-10	-6	13	127	-89	2	6	13	162	-88	4	0	14	506	460	-6	-4	15	263	-180	-6	-4	16	222	-206
12	-4	13	274	274	-2	6	13	199	161	6	0	14	225	142	10	-2	15	135	-130	0	-4	16	319	270
10	-4	13	191	-192	0	8	13	601	455	8	0	14	167	-131	8	-2	15	158	-124	2	-4	16	204	182
8	-4	13	173	-138	-2	8	13	176	109	-10	2	14	163	158	6	-2	15	205	-194	4	-4	16	176	169
-6	-4	13	539	-441	-4	8	13	14,	-122	-6	2	14	199	-214	0	-2	15	156	-125	6	-4	16	359	-304
12	-2	13	164	174	-8	8	13	191	-223	4	2	14	281	-235	-2	-2	15	131	-114	8	-4	16	340	-320
10	-2	13	198	-176	-14	8	13	216	207	8	2	14	201	-218	-10	-2	15	137	-90	-12	-2	16	178	194
6	-2	13	141	-91	-6	10	13	238	-258	-14	4	14	343	-373	4	0	15	149	-151	-10	-2	16	258	210
0	-2	13	284	-266	-8	10	13	262	-259	-12	4	14	134	159	2	0	15	702	-619	-8	-2	16	120	90
-2	-2	13	228	-219	-2	-10	14	190	90	-10	4	14	160	-161	-2	0	15	544	-448	-4	-2	16	115	104
-4	-2	13	504	-478	2	-10	14	137	-112	-8	4	14	297	-333	-4	0	15	464	-455	-2	0	16	384	-410
-14	-2	13	231	-197	-4	-8	14	143	-89	-4	4	14	130	-141	-8	0	15	214	214	0	0	16	266	242
4	0	13	935	824	0	-8	14	353	-270	0	4	14	212	-181	-12	0	15	157	-156	4	0	16	206	184
2	0	13	500	434	2	-8	14	273	217	-12	6	14	109	54	-14	0	15	248	-262	-14	2	16	210	218
0	0	13	128	-125	8	-8	14	404	348	-6	6	14	221	201	4	2	15	163	-130	-8	2	16	224	223
-2	0	13	144	151	10	-8	14	152	122	-2	6	14	170	-158	2	2	15	157	-158	-6	2	16	117	157
-4	0	13	327	-319	-8	-6	14	245	-189	0	6	14	371	-317	-4	2	15	131	127	-4	2	16	232	267
-6	0	13	141	164	-6	-6	14	299	221	2	6	14	239	-212	-6	2	15	177	-133	0	2	16	198	201
-10	0	13	182	215	0	-6	14	168	111	4	6	14	155	-123	-10	2	15	160	-169	2	2	16	153	177
-14	0	13	275	-273	2	-6	14	352	279	-8	8	14	347	-390	-12	2	15	138	-117	4	2	16	123	183
4	2	13	160	-106	-10	-4	14	362	-294	-2	8	14	392	-330	4	4	15	368	-334	6	2	16	156	132
2	2	13	146	127	-8	-4	14	173	146	0	8	14	110	63	2	4	15	509	-452	-12	4	16	188	-224
0	2	13	181	-155	-6	-4	14	279	-221	4	-10	15	335	-267	-2	4	15	263	206	-4	4	16	220	198
-2	2	13	328	-305	-4	-4	14	151	-143	0	-10	15	113	-93	-6	4	15	302	-317	0	4	16	93	110
-4	2	13	158	-179	-2	-4	14	446	375	6	-8	15	374	-321	-10	4	15	150	-141	2	4	16	272	-259
-8	2	13	140	-126	4	-4	14	245	-233	0	-8	15	263	-230	-14	4	15	278	-279	4	4	16	404	-346
-10	2	13	218	200	-8	-2	14	129	-116	-2	-8	15	182	137	-14	6	15	154	-164	-6	6	16	130	146
-12	2	13	174	-111	-4	-2	14	200	-165	8	-6	15	442	-384	-2	8	15	338	-251	-4	6	16	343	354

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	6	16	215	235	-10	0	18	227	244	-4	0	21	138	-152	0	6	0	191	154	-6	-4	1	363	317
0	6	16	190	149	-8	0	18	153	109	18	0	0	307	-253	4	6	0	589	405	-8	-4	1	215	-172
-10	8	16	223	245	-4	0	18	308	312	-14	2	0	249	243	-4	8	0	979	1005	4	-2	1	337	426
-8	8	16	105	188	-2	0	18	121	114	-12	2	0	256	238	6	8	0	374	292	0	-2	1	259	-314
-4	8	16	190	192	2	0	18	255	-212	-10	2	0	298	272	12	8	0	297	216	-2	-2	1	156	137
4	-8	17	259	212	6	0	18	288	235	0	2	0	418	389	-10	10	0	329	-331	16	0	1	319	317
2	-8	17	176	-188	-12	2	18	155	-142	2	2	0	238	194	2	10	0	195	-179	10	0	1	249	260
6	-6	17	212	236	-10	2	18	144	-181	6	2	0	314	-269	4	10	0	368	-231	4	0	1	289	-329
4	-6	17	194	183	-8	2	18	204	-186	8	2	0	207	-185	8	10	0	346	276	-4	0	1	373	387
2	-6	17	277	238	-6	2	18	212	-163	12	2	0	350	284	0	14	0	299	209	-6	0	1	224	193
0	-6	17	428	387	-4	4	18	174	185	-10	4	0	569	553	8	-16	1	383	421	-8	0	1	338	-353
-6	-6	17	348	240	-2	4	18	254	246	0	4	0	469	331	4	-16	1	282	228	-10	0	1	185	188
8	-4	17	400	-370	2	4	18	324	262	2	4	0	392	263	8	-12	1	291	333	-14	0	1	469	434
-10	-4	17	536	476	-10	6	18	126	-179	4	4	0	395	305	4	-12	1	290	248	-18	0	1	262	-270
8	-2	17	193	154	-6	6	18	176	167	6	4	0	848	660	-2	-12	1	497	337	4	2	1	469	-379
2	-2	17	187	158	-2	-6	19	152	-127	8	4	0	435	317	12	-10	1	238	-244	2	2	1	253	-218
-2	-2	17	193	164	-4	-6	19	144	-143	10	4	0	200	-158	8	-10	1	234	249	0	2	1	151	-171
-10	-2	17	153	114	2	-4	19	532	451	4	0	0	184	212	2	-10	1	189	191	-6	2	1	438	-421
4	0	17	222	190	0	-4	19	251	226	10	0	0	278	274	-2	-10	1	215	-148	-10	2	1	233	-226
0	0	17	126	175	-2	-4	19	134	-156	14	0	0	308	351	14	-8	1	297	348	10	4	1	271	-237
-4	0	17	145	210	-6	-4	19	241	-188	-14	2	0	224	243	4	-8	1	951	1047	8	4	1	424	368
-6	0	17	220	224	0	-2	19	205	-190	-12	2	0	237	238	0	-8	1	366	242	6	4	1	298	250
-10	0	17	494	484	-2	-2	19	158	-178	-10	2	0	238	272	-2	-8	1	223	141	-4	4	1	212	-282
4	2	17	98	-45	-8	-2	19	170	111	0	2	0	381	389	-4	-8	1	395	-238	-12	4	1	515	-523
-10	2	17	257	275	-8	0	19	354	358	2	2	0	208	194	-6	-8	1	233	175	-16	4	1	209	-300
2	4	17	249	248	-8	2	19	137	112	6	2	0	241	-269	-10	-8	1	270	229	-18	4	1	285	-275
-6	4	17	161	119	-10	2	19	164	-176	8	2	0	223	-185	-2	-6	1	274	172	8	6	1	262	-205
-12	4	17	117	-155	-2	4	19	338	345	12	2	0	330	284	-8	-6	1	179	167	2	6	1	518	-381
-2	6	17	197	168	-4	4	19	94	124	-10	4	0	514	553	-10	-6	1	225	223	0	6	1	258	-189
-6	6	17	123	205	-10	4	19	156	-133	0	4	0	441	331	12	-4	1	272	318	-4	6	1	226	-226
2	-6	18	212	208	-4	-4	20	304	266	2	4	0	367	263	10	-4	1	339	385	-8	6	1	215	-174
4	-4	18	263	-207	-6	-2	20	204	-189	4	4	0	377	305	4	-4	1	312	305	-10	6	1	260	244
6	-4	18	223	198	-4	-2	20	125	-166	6	4	0	789	660	2	-4	1	277	-314	12	8	1	308	246
-10	-2	18	269	-237	2	-2	20	117	-129	8	4	0	402	317	0	-4	1	341	-276	-6	8	1	272	-304
-6	-2	18	92	79	-6	0	20	123	-79	-12	6	0	354	420	-2	-4	1	342	-233	-10	8	1	252	-248
-2	-2	18	164	175	-2	2	20	290	-305	-10	6	0	317	320	-4	-4	1	287	-193	-12	8	1	540	-589

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	10	1	571	-429	-8	0	2	530	-498	8	-12	3	331	-347	-6	2	3	153	132	4	-4	4	815	-840
8	12	1	285	211	-6	0	2	764	-713	-2	-12	3	217	-180	-10	2	3	132	136	2	-4	4	233	-318
4	12	1	266	238	-4	0	2	250	-203	-4	-12	3	369	-257	-16	2	3	219	156	0	-4	4	423	-347
-4	12	1	214	-224	2	0	2	246	315	-8	-12	3	226	-200	10	4	3	453	-375	-2	-4	4	222	-206
-8	12	1	212	-200	6	0	2	233	209	6	-10	3	244	231	6	4	3	462	-401	-6	-4	4	363	-313
-16	12	1	270	-304	12	0	2	352	321	0	-10	3	298	-233	4	4	3	270	-184	-8	-4	4	244	197
-4	-12	2	296	-174	18	0	2	382	385	16	-8	3	231	223	2	4	3	178	-85	-14	-4	4	304	317
-2	-10	2	390	-245	-8	2	2	212	-190	12	-8	3	276	-341	0	4	3	1391	-1167	6	-2	4	254	-300
0	-10	2	586	-547	-4	2	2	109	130	8	-8	3	180	-243	-2	4	3	171	-186	4	-2	4	232	206
-14	-8	2	283	-222	-2	2	2	290	312	4	-8	3	150	-133	-10	4	3	512	-518	-8	-2	4	201	-165
-6	-8	2	285	187	2	2	2	455	402	-2	-8	3	750	-493	-14	4	3	258	-241	-14	-2	4	234	-257
-4	-8	2	503	-361	4	2	2	169	-215	10	-6	3	284	320	-18	4	3	323	269	12	0	4	273	-302
-2	-8	2	254	-139	8	2	2	179	115	4	-6	3	199	-175	4	10	3	297	-212	10	0	4	353	-379
0	-8	2	192	186	12	2	2	211	-167	-4	-6	3	531	422	0	10	3	205	179	4	0	4	465	-483
2	-8	2	197	-194	-18	4	2	234	-224	-8	-6	3	268	-241	-6	10	3	255	-204	0	0	4	285	359
12	-8	2	218	-176	-16	4	2	434	-446	10	-4	3	319	-311	-10	10	3	219	-274	-4	0	4	225	-211
-14	-6	2	218	162	-10	4	2	203	-215	6	-4	3	251	310	6	12	3	356	-307	-6	0	4	442	-429
-2	-6	2	281	-213	-6	4	2	329	322	4	-4	3	821	-900	2	12	3	383	-321	-8	0	4	373	416
4	-6	2	244	-265	-2	4	2	163	-182	0	-4	3	201	128	-2	12	3	304	-273	-10	0	4	210	-203
6	-6	2	294	-353	0	4	2	980	-769	-2	-4	3	358	291	-4	12	3	438	-442	-12	0	4	394	335
10	-6	2	215	213	2	4	2	425	274	-4	-4	3	214	227	-2	-12	4	451	-313	-14	0	4	409	380
-14	-4	2	382	-349	4	4	2	418	-316	-6	-4	3	350	-372	8	-12	4	270	-276	12	2	4	251	251
-12	-4	2	656	-569	8	4	2	596	482	-12	-4	3	287	-281	14	-12	4	227	-274	2	2	4	291	-191
-8	-4	2	557	-527	18	4	2	291	293	-4	-2	3	199	-202	-8	-10	4	298	291	0	2	4	218	236
-6	-4	2	355	-306	-10	6	2	236	185	-12	-2	3	322	292	-4	-10	4	166	-126	-2	2	4	230	-222
-2	-4	2	404	324	6	6	2	484	371	14	0	3	288	267	10	-10	4	290	-296	-4	2	4	178	-167
0	-4	2	159	-167	-10	8	2	321	-342	12	0	3	252	211	14	-8	4	245	-300	-6	2	4	775	-692
4	-4	2	494	-543	-4	8	2	199	-195	10	0	3	469	-455	8	-8	4	211	-260	-12	2	4	217	192
6	-4	2	172	234	4	8	2	293	-221	8	0	3	382	-373	2	-8	4	208	-235	10	4	4	388	-396
10	-4	2	218	244	8	8	2	291	238	-4	0	3	197	-228	0	-8	4	228	-222	6	4	4	520	-408
12	-4	2	615	660	-2	10	2	321	304	-6	0	3	986	-854	-2	-8	4	991	-675	4	4	4	265	224
-10	-2	2	242	223	0	10	2	310	-240	8	2	3	260	-307	-8	-8	4	252	213	2	4	4	314	-271
-4	-2	2	417	-405	2	10	2	199	-183	4	2	3	158	-124	-4	-6	4	324	290	0	4	4	283	-225
-2	-2	2	248	274	-6	12	2	268	271	2	2	3	245	223	14	-4	4	466	-502	-4	4	4	382	-384
2	-2	2	209	207	-4	12	2	265	-267	-2	2	3	210	-194	10	-4	4	377	-467	-8	4	4	235	242
-10	0	2	176	124	0	-14	3	289	240	-4	2	3	316	322	6	-4	4	402	-463	-10	4	4	257	-263

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
-14	4	4	241	-280	0	-2	5	169	-174	-6	8	5	165	223	-8	-2	6	184	-182	-2	-2	7	276	-239
4	6	4	342	268	2	-2	5	159	224	-2	8	5	366	318	14	0	6	290	363	0	-2	7	260	-263
2	6	4	239	-199	4	-2	5	388	439	0	8	5	397	375	10	0	6	175	232	2	-2	7	208	-196
0	6	4	163	-139	6	-2	5	179	210	8	8	5	254	-198	8	0	6	316	-349	4	-2	7	105	64
-6	6	4	273	287	-14	0	5	345	304	0	10	5	264	-199	6	0	6	192	-260	-18	0	7	431	-429
-10	6	4	260	245	-12	0	5	343	341	-6	12	5	402	405	4	0	6	315	411	-14	0	7	254	-245
4	8	4	194	181	-8	0	5	811	706	-4	12	5	262	212	2	0	6	337	392	-10	0	7	221	183
-12	8	4	243	285	-6	0	5	460	405	6	-12	6	251	263	-2	0	6	640	665	-6	0	7	359	264
-10	10	4	284	-310	-2	0	5	126	-140	2	-12	6	170	205	-4	0	6	356	-335	-2	0	7	741	-608
2	12	4	239	-252	2	0	5	363	346	6	-10	6	224	196	-6	0	6	526	459	-2	0	7	165	133
0	12	4	263	201	4	0	5	415	427	0	-10	6	402	-429	-10	0	6	406	381	0	0	7	623	750
0	14	4	331	302	12	0	5	264	-267	-6	-10	6	210	175	-12	0	6	268	277	2	0	7	240	-262
-4	-12	5	380	277	-10	2	5	260	-241	8	-8	6	254	320	2	2	6	235	249	4	0	7	287	324
8	-12	5	284	-278	-6	2	5	253	204	6	-8	6	181	207	-8	2	6	208	-159	6	0	7	241	267
10	-12	5	229	-253	-4	2	5	216	177	2	-8	6	267	274	10	4	6	249	224	10	0	7	255	330
14	-12	5	293	-360	-2	2	5	301	305	-2	-8	6	629	478	0	4	6	608	505	14	0	7	262	266
-2	-10	5	259	-151	0	2	5	218	179	-4	-8	6	361	377	-6	4	6	302	323	-6	2	7	182	-178
0	-10	5	194	-180	2	2	5	330	323	-6	-8	6	322	310	-8	4	6	256	-246	-4	2	7	190	-157
4	-10	5	242	-283	6	2	5	168	180	-8	-8	6	276	245	-8	6	6	194	-145	-2	2	7	505	-483
8	-10	5	276	282	8	2	5	297	317	10	-6	6	358	419	10	8	6	294	217	6	2	7	146	-190
-4	-8	5	275	227	-20	4	5	145	-44	4	-6	6	327	-408	6	8	6	338	283	-14	4	7	554	-492
8	-8	5	193	168	-18	4	5	252	265	0	-6	6	250	218	4	8	6	345	-289	-12	4	7	184	-168
16	-8	5	274	-224	-8	4	5	375	375	-8	-6	6	189	-174	-8	8	6	212	-226	-8	4	7	259	-209
0	-6	5	147	180	-6	4	5	521	522	12	-4	6	254	278	-14	8	6	301	266	-6	4	7	296	274
4	-6	5	338	339	-4	4	5	168	-167	8	-4	6	146	183	-6	10	6	314	-306	0	4	7	409	363
6	-6	5	166	-54	-2	4	5	180	169	4	-4	6	293	277	-4	12	6	245	267	4	4	7	263	240
-14	-4	5	320	268	0	4	5	195	196	2	-4	6	179	203	2	-16	7	264	284	-14	6	7	197	-210
-4	-4	5	173	135	2	4	5	338	-267	0	-4	6	319	320	-2	-8	7	202	147	-12	8	7	290	-319
-2	-4	5	221	181	8	4	5	246	231	-2	-4	6	732	630	0	-8	7	314	-301	-8	8	7	348	-334
0	-4	5	557	-517	10	4	5	273	199	-4	-4	6	223	228	4	-8	7	316	325	-4	8	7	340	312
6	-4	5	227	-233	-10	6	5	287	303	6	-2	6	193	-231	14	-8	7	216	293	0	8	7	240	241
10	-4	5	235	-252	-4	6	5	219	199	4	-2	6	226	-238	-2	-6	7	355	-258	6	8	7	381	316
-10	-2	5	246	210	4	6	5	358	293	2	-2	6	254	281	2	-6	7	167	153	-10	10	7	273	-302
-8	-2	5	235	229	10	6	5	244	244	0	-2	6	215	217	-2	-4	7	351	277	4	10	7	228	-213
-4	-2	5	185	-180	-14	8	5	215	226	-2	-2	6	248	203	2	-4	7	167	161	-6	12	7	249	-254
-2	-2	5	234	203	-10	8	5	449	482	-4	-2	6	306	-325	4	-4	7	569	644	8	-12	8	249	263

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	-10	8	254	-271	-10	12	8	372	-404	-14	8	9	328	365	-10	0	10	458	476	-18	4	11	355	356
2	-10	8	279	-274	-2	-10	9	267	-225	-12	8	9	218	-221	2	2	10	185	257	-12	4	11	207	196
-2	-10	8	279	-242	0	-10	9	259	-200	-10	8	9	160	-169	-4	2	10	174	-167	-8	4	11	833	823
10	-8	8	175	189	12	-8	9	222	-241	-6	8	9	230	-188	-10	2	10	301	248	-4	4	11	239	214
8	-8	8	198	195	-14	-6	9	257	235	0	8	9	287	-248	6	4	10	208	236	-2	4	11	271	286
4	-8	8	266	262	0	-6	9	280	260	4	8	9	557	-466	2	4	10	271	246	-6	6	11	342	312
0	-8	8	234	-230	4	-6	9	224	-207	6	8	9	318	-284	0	4	10	606	-579	4	6	11	233	204
-4	-8	8	417	-404	6	-6	9	178	-238	-8	10	9	260	-258	-4	4	10	298	291	-18	8	11	309	335
-10	-8	8	276	-296	-8	-4	9	222	-230	-2	10	9	225	218	-6	4	10	179	-160	-2	8	11	280	247
-14	-8	8	317	-336	-6	-4	9	271	-225	-4	12	9	348	-359	-10	4	10	422	-393	4	8	11	297	258
6	-6	8	235	-253	-2	-4	9	397	-304	8	-12	10	284	-262	-16	4	10	261	-275	-12	12	11	351	368
10	-4	8	157	232	2	-4	9	264	-288	2	-12	10	258	-259	6	6	10	261	238	4	-14	12	259	219
6	-4	8	260	-277	8	-4	9	294	-340	-4	-12	10	251	-281	-6	6	10	212	263	0	-12	12	401	368
2	-4	8	388	-441	-10	-2	9	254	265	12	-8	10	383	-418	-14	8	10	271	242	-4	-12	12	316	294
-4	-4	8	300	-268	-8	-2	9	201	180	8	-8	10	309	-342	-2	10	10	397	368	8	-10	12	438	481
-10	-4	8	254	-263	10	-2	9	202	-299	0	-8	10	223	-195	-12	12	10	306	324	8	-8	12	295	295
-14	-4	8	350	-323	-12	0	9	262	-205	-2	-8	10	435	-359	2	-12	11	338	-285	0	-8	12	212	246
-6	-2	8	270	-266	-10	0	9	285	239	-4	-8	10	263	-252	8	-12	11	251	-212	-2	-8	12	303	266
16	0	8	350	372	-8	0	9	333	-311	-6	-8	10	359	343	8	-8	11	208	-270	-4	-8	12	379	319
-2	0	8	338	-271	-2	0	9	146	86	10	-6	10	204	232	-4	-6	11	267	204	-10	-8	12	245	256
-4	0	8	278	-293	4	0	9	189	-193	4	-6	10	190	-201	2	-6	11	342	389	6	-6	12	158	-185
-8	0	8	392	-399	8	0	9	366	-430	-8	-6	10	256	-263	4	-6	11	305	384	-2	-6	12	226	174
-18	0	8	392	-350	-18	2	9	207	169	8	-4	10	321	-418	-14	-4	11	324	277	-10	-6	12	250	213
-2	2	8	213	206	-6	2	9	196	192	4	-4	10	656	-737	-4	-4	11	418	428	12	-4	12	279	369
-6	2	8	443	-415	4	2	9	214	-209	2	-4	10	296	-284	-2	-4	11	221	-222	2	-4	12	209	268
2	4	8	332	-351	-14	4	9	248	228	0	-4	10	210	210	4	-4	11	205	-246	-2	-4	12	315	270
-2	4	8	363	-315	-12	4	9	291	-273	-2	-4	10	225	-226	2	-2	11	299	305	-4	-4	12	720	659
-6	4	8	315	-288	-10	4	9	467	-441	-6	-4	10	421	-424	4	-2	11	455	488	-2	-2	12	189	177
-18	4	8	340	-294	-8	4	9	213	-183	-8	-4	10	197	-193	-14	0	11	610	564	-6	-2	12	226	-204
4	6	8	300	231	-6	4	9	339	-333	4	-2	10	204	-196	-10	0	11	295	266	8	0	12	246	257
2	6	8	202	-232	-2	4	9	467	-449	10	0	10	246	-282	-8	0	11	502	454	4	0	12	157	260
-2	6	8	222	-201	0	4	9	507	-497	8	0	10	355	-423	0	0	11	292	277	2	0	12	228	300
-12	8	8	362	-362	2	4	9	188	-165	4	0	10	268	-280	6	0	11	233	248	-8	0	12	230	224
4	10	8	224	-154	4	4	9	587	-614	-4	0	10	258	-227	10	0	11	293	-329	-14	0	12	329	300
0	10	8	395	-329	-4	6	9	206	188	-6	0	10	523	-464	0	2	11	299	298	-10	2	12	279	-223
0	12	8	253	-223	-2	6	9	276	259	-8	0	10	167	-199	10	2	11	221	253	8	4	12	271	283

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR TRUE CELL OF OKENITE

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	4	12	227	-291	-8	8	13	230	-223	-10	-4	15	456	-428	8	-4	17	323	-370	7	-7	1	71	77
-2	4	12	236	258	0	8	13	462	455	-4	-4	15	481	-464	-10	0	17	518	484	-5	-5	1	95	111
-8	4	12	340	324	-8	10	13	264	-259	-2	-4	15	208	-215	-6	0	17	219	224	-3	-5	1	101	110
-10	4	12	316	-343	-6	10	13	278	-258	-14	0	15	307	-262	-10	2	17	281	275	1	-5	1	109	-70
-8	6	12	288	-338	-10	12	13	323	328	-8	0	15	234	214	-14	4	17	339	327	3	-5	1	68	-33
-14	6	12	282	-272	0	-10	14	256	-226	-4	0	15	452	-455	-6	-8	18	261	200	5	-5	1	70	-30
2	8	12	212	-227	8	-8	14	278	348	-2	0	15	472	-448	-10	-2	18	257	-237	7	-5	1	79	32
0	8	12	420	334	0	-8	14	221	-270	2	0	15	551	-619	-4	0	18	272	312	-3	-3	1	99	84
-2	8	12	256	250	2	-6	14	250	279	12	0	15	218	-235	-10	0	18	302	244	9	-3	1	114	-31
-10	8	12	241	206	-6	-6	14	240	221	-14	4	15	321	-279	2	4	18	217	262	-9	-1	1	107	-91
-6	12	12	318	290	4	-4	14	240	-233	-8	4	15	299	-281	0	-8	19	249	258	7	-1	1	66	38
-10	-10	13	314	-294	-2	-4	14	343	375	-6	4	15	276	-317	2	-4	19	409	451	-3	1	1	81	-6
0	-10	13	228	-187	-6	-4	14	244	-221	-2	4	15	252	206	-8	0	19	353	358	3	1	1	62	73
8	-8	13	326	312	-10	-4	14	330	-294	2	4	15	432	-452	-2	4	19	290	345	9	1	1	95	-63
10	-8	13	214	-287	4	0	14	330	460	4	4	15	318	-334	-8	6	19	249	-240	5	3	1	76	124
-8	-6	13	273	-278	-4	0	14	368	-381	-8	8	15	237	-189	-10	0	20	247	-217	7	3	1	90	-64
-4	-6	13	326	-322	-10	0	14	362	294	-6	8	15	332	-313	-2	2	20	276	-305	-1	5	1	106	-16
-2	-6	13	274	-301	-6	2	14	229	-214	-2	8	15	203	-251	-10	4	20	285	-342	3	5	1	115	126
-6	-4	13	444	-441	-8	4	14	240	-333	2	-8	16	356	-383	18	8	0	562	116	-9	7	1	71	54
-2	-4	13	304	369	-10	4	14	201	-161	0	-6	16	159	279	-18	-8	3	672	-140	-7	7	1	81	88
2	-4	13	243	320	-14	4	14	358	-373	6	-4	16	263	-304	9	1	0	113	81	-1	7	1	99	-68
-4	-2	13	460	-478	0	6	14	283	-317	0	-4	16	163	270	5	1	0	74	34	7	-7	2	91	-76
-2	-2	13	187	-219	-6	6	14	215	201	-8	-4	16	356	-289	-3	3	0	74	79	3	-7	2	156	87
0	-2	13	225	-266	-2	8	14	369	-330	-2	0	16	328	-410	5	5	0	64	-92	5	-5	2	76	13
-16	0	13	387	-392	-8	8	14	366	-390	-4	2	16	216	267	3	5	0	94	-120	3	-5	2	88	18
-14	0	13	296	-273	-18	8	14	291	-298	-8	2	16	299	223	1	5	0	65	40	1	-5	2	147	86
-4	0	13	252	-319	4	10	14	263	-231	4	4	16	301	-346	-1	5	0	67	43	-1	-5	2	78	-1
2	0	13	387	434	-12	12	14	278	-281	-14	4	16	291	315	-7	5	0	66	-52	-5	-5	2	104	-122
4	0	13	708	824	2	-10	15	257	-255	-16	4	16	272	285	-9	5	0	70	-7	9	-3	2	110	41
-10	2	13	219	200	-10	-8	15	281	-265	-4	6	16	344	354	1	7	0	81	38	1	-3	2	78	30
-4	2	13	139	-179	0	-8	15	212	-230	-6	8	16	277	-241	-3	7	0	179	118	7	-1	2	101	-39
-2	2	13	286	-305	6	-8	15	311	-321	-10	8	16	226	245	-5	7	0	76	-8	-5	-1	2	71	12
-14	4	13	250	-225	-12	-6	15	245	210	-14	8	16	267	296	-9	7	0	81	-52	-9	-1	2	85	86
-10	4	13	523	-479	-10	-6	15	284	259	-6	-8	17	309	255	-1	-7	1	90	-58	-7	1	2	87	12
-6	4	13	507	474	6	-6	15	285	-332	0	-6	17	318	387	1	-7	1	102	-61	5	3	2	97	-114
8	4	13	296	297	8	-6	15	317	-384	-10	-4	17	420	476	3	-7	1	185	-109	3	3	2	106	-123

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	5	2	64	-64	-9	-1	4	77	46	-3	5	5	71	-84	1	-1	7	64	35	-1	-1	9	69	12
3	5	2	91	-122	7	1	4	109	107	5	-7	6	67	-4	7	-1	7	114	-113	3	1	9	127	109
-1	5	2	89	5	-9	1	4	83	58	1	-7	6	146	82	-9	1	7	63	-53	-7	3	9	72	44
-5	5	2	70	35	3	3	4	164	-152	1	-5	6	66	42	3	1	7	70	125	-5	3	9	101	-88
-9	5	2	71	-48	-3	3	4	72	129	-3	-5	6	145	-118	5	1	7	69	16	1	3	9	65	72
-7	7	2	63	-95	-1	5	4	66	39	3	-3	6	78	3	-7	3	7	60	34	-3	5	9	114	-105
1	-7	3	88	-83	-5	5	4	75	38	-5	-3	6	90	-48	-5	3	7	73	-78	3	-3	10	81	14
3	-7	3	122	-60	-9	5	4	73	-74	-7	-3	6	68	-3	1	3	7	62	56	-5	-3	10	79	-55
7	-7	3	91	74	-3	7	4	80	76	-3	-1	6	65	-37	3	3	7	103	73	3	-1	10	79	-73
-5	-5	3	112	120	-5	7	4	67	37	-5	-1	6	97	-69	5	3	7	66	50	1	-1	10	64	-29
-1	-5	3	68	-5	1	-7	5	75	-91	-7	-1	6	63	5	-5	5	7	67	-62	-5	-1	10	91	-39
1	-5	3	128	-83	7	-7	5	75	60	-9	-1	6	73	30	-1	5	7	110	-65	3	1	10	83	-85
-5	-1	3	105	19	-5	-5	5	96	84	3	1	6	92	-106	-1	-5	8	93	27	-3	1	10	66	52
7	-1	3	83	17	-3	-5	5	113	128	-3	1	6	62	52	-3	-5	8	106	-61	-5	1	10	94	31
9	-1	3	92	-82	-1	-5	5	67	-44	-9	1	6	67	67	7	-3	8	76	38	1	3	10	71	-65
5	1	3	68	21	1	-5	5	70	-52	3	3	6	147	-108	3	-3	8	70	11	-3	11	0	95	20
7	1	3	79	-116	-5	-3	5	64	24	-9	3	6	68	-3	-5	-3	8	83	-75	-13	-3	3	144	-7
-7	3	3	76	9	-1	-3	5	67	-37	3	5	6	72	-42	5	-1	8	78	-19	-11	11	3	93	-9
3	3	3	139	144	3	-3	5	84	-13	-1	5	6	136	73	-1	-1	8	75	-8	-5	-11	6	124	-4
5	3	3	72	89	5	-3	5	62	-11	-3	5	6	62	79	-5	-1	8	106	-53	-13	7	6	82	29
1	5	3	61	-56	7	-3	5	80	23	-7	5	6	102	-76	3	1	8	155	-125	5	-11	7	126	54
3	5	3	114	105	9	-3	5	76	-57	-3	7	6	103	91	-7	1	8	71	35	-3	7	7	92	-97
-9	7	3	90	44	-9	-1	5	84	-32	1	-7	7	121	-70	3	3	8	91	-46	9	1	8	130	72
-5	7	3	72	-37	-5	-1	5	76	66	3	-7	7	77	-38	-1	3	8	65	-21	-3	7	8	101	93
-1	7	3	72	-81	-1	-1	5	82	47	-3	-5	7	125	93	-5	3	8	72	87	7	-1	9	98	-94
1	-7	4	113	92	5	-1	5	84	42	-1	-5	7	85	-44	-9	3	8	94	-32	7	-5	10	115	-9
1	-5	4	147	68	7	1	5	101	-86	1	-5	7	95	-42	-5	5	8	87	59	-5	-5	11	133	55
-1	-5	4	70	24	-5	3	5	89	-63	-5	-3	7	105	68	1	-5	9	64	-51	-15	9	11	106	-35
9	-3	4	80	62	3	3	5	141	138	-3	-3	7	77	-6	-3	-3	9	71	-16	1	-7	12	131	59
7	-3	4	90	-31	-9	5	5	64	70	-5	-1	7	87	62	5	-3	9	92	-16	3	3	12	109	-58
1	-3	4	78	36	-7	5	5	63	67	-1	-1	7	75	15	-3	-1	9	63	26	-9	7	14	100	-55