AM-91-469

Ashburtonite, a new bicarbonate-silicate mineral from Ashburton Downs, Western Australia: Description and structure determination

Joel D. Grice, Ernest H. Nickel, Robert A. Gault

For deposit: Table 4

American Mineralogist, 76, 9-10, 1701-1707.

Table 4

Observed and calculated structure factors for ASHBURTONITE LOT 27/89 XL#7 I4/M

h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	1	0	1763	1795	9
0	2	0	1709	-1927	21
2	2	0	2044	-2064	11
-1	3	0	1546	1542	26
1	3	0	4137	-3984	15
3	3	0	1595	-1503	15
-2	4	0	142	-469	-567
0	4	0	3596	3498	15
2	4	0	4236	-4116	15
4	4	0	4150	4191	13
-3	5	0	102	32	-408
-1	5	0	4618	4440	15
1	5	0	113	-223	-453
3	5	0	3903	3844	15
5	5	0	1842	1819	15
-4	6	0	5602	-5327	15
-2	6	0	462	418	-103
0	6	0	99	-67	-397
2	6	0	1389	1500	24
4	6	0	1728	1594	17
6	6	0	2465	2485	15
-5	7	0	146	245	-275
-3	7	0	4206	-3922	15
-1	7	0	590	425	60
1	7	0	4189	-4123	17
3	7	0	374	-176	-116
5	7	0	1600	-1573	19
7	7	0	612	607	49
-6	8	0	3107	2904	19
-4	8	0	661	587	60
-2	8	0	799	607	43
0	8	0	1376	1343	26
2	8	0	2478	-2160	21
4	8	0	148	175	-288
6	8	0	5235	-5172	15
8	8	0	2177	2169	19
-7	9	0	2229	2146	21
-5	9	0	736	501	58
-3	9	0	1316	1261	28
-1	9	0	4322	4121	17
1	9	0	331	-114	-142
3	9	0	3364	3115	19
5	9	0	2012	-1900	21
7	9	0	339	-220	-110
9	9	0	782	-744	39
-8	10	0	2658	-2613	21
-6	10	0	1430	1337	28
-4	10	0	3983	-3797	17
-2	10	0	3996	3825	19
0	10	0	1456	-1314	26
2	10	0	3639	3556	19
4	10	0	953	854	37
6	10	0	1078	1065	32
8	10	0	1205	1141	24
10	10	0	348	69	-120
-9	11	0	1404	-1308	26
-7	11	0	339	384	-140
-5	11	0	2875	-2738	19
-3	11	0	1273	-1095	30
-1	11	0	631	-528	77
1	11	0	1713	-1553	26
3	11	0	2040	1963	24
5	11	0	975	-938	41
7	11	0	2890	2791	21
9	11	0	732	779	37
11	11	0	820	857	41
-10	12	0	213	-290	-228
-8	12	0	1713	1696	24
-6	12	0	391	215	-120
-4	12	0	736	-611	54
-2	12	0	588	-527	77
0	12	0	2278	-1976	26
2	12	0	1325	-1262	28
4	12	0	863	-861	43
6	12	0	1314	-1392	28
8	12	0	1829	1810	21
10	12	0	1694	-1761	21
12	12	0	2581	2661	24
-11	13	0	1615	1534	30
-9	13	0	678	-924	64
-7	13	0	2832	2785	19
-5	13	0	599	567	71
-3	13	0	2132	1952	24
-1	13	0	187	250	-256
1	13	0	906	-778	41
3	13	0	335	258	-146
5	13	0	2218	-2268	24
7	13	0	651	567	64
9	13	0	2626	-2567	24
11	13	0	225	-172	-178
13	13	0	367	-53	-146
-12	14	0	238	28	-217
-10	14	0	1209	-1141	32
-8	14	0	812	-777	47
-6	14	0	1606	1522	26
-4	14	0	202	-168	-245
-2	14	0	3474	3281	21
0	14	0	1104	-1079	34
2	14	0	3940	3636	21
4	14	0	1207	-1196	30
6	14	0	1767	1792	26
8	14	0	897	-875	41
10	14	0	1069	-1056	34
12	14	0	238	-461	-176
14	14	0	906	-987	43
-13	15	0	341	379	-159
-11	15	0	537	-539	90
-9	15	0	1572	-1578	28
-7	15	0	221	-85	-228
-5	15	0	2074	-1989	24
-3	15	0	1235	1254	32
-1	15	0	709	-784	60
1	15	0	891	785	41
3	15	0	1634	1584	26
5	15	0	732	668	54
7	15	0	2042	2026	26
9	15	0	571	-264	79
11	15	0	1162	1207	32
13	15	0	586	-598	82
-10	16	0	1166	-1250	34
-8	16	0	1408	1485	30
-6	16	0	1793	-1727	26
-4	16	0	511	-352	84
-2	16	0	1009	-935	39
0	16	0	1235	-1082	32
2	16	0	217	19	-234
4	16	0	475	-339	-107
6	16	0	475	512	-105
8	16	0	895	899	41
10	16	0	792	723	60
-9	17	0	955	968	45
-7	17	0	1718	1691	28
-5	17	0	966	-968	41
-3	17	0	1198	1138	34
-1	17	0	1419	-1376	30
1	17	0	225	178	-234
3	17	0	1009	-957	39
5	17	0	1552	-1512	28
7	17	0	571	276	90
9	17	0	882	-968	45
-8	18	0	1411	1463	32
-6	18	0	648	495	73
-4	18	0	713	585	73
-2	18	0	1207	1160	37
0	18	0	543	-310	101
2	18	0	2044	2059	26
4	18	0	2209	-2381	28
6	18	0	758	708	62
8	18	0	1632	-1706	28
-5	19	0	535	-492	103
-3	19	0	1136	993	39
-1	19	0	468	-300	-120
1	19	0	2396	2291	30
3	19	0	247	-55	-232
5	19	0	676	571	67
0	1	1	2409	2380	6
-1	2	1	865	-932	15
1	2	1	2456	-2291	6
-2	3	1	696	-742	21
0	3	1	586	552	26
2	3	1	5239	-5270	9
-3	4	1	114	159	-191
-1	4	1	5207	5368	9
1	4	1	1110	1176	15
3	4	1	324	357	60
-4	5	1	945	-922	19
-2	5	1	2061	2011	11
0	5	1	3813	3817	11
2	5	1	1211	1285	15
4	5	1	4706	4650	11
-5	6	1	1303	-1327	17
-3	6	1	3704	-3686	11
-1	6	1	1937	2007	13
1	6	1	2435	-2406	13
3	6	1	2817	2788	11
5	6	1	1183	1207	17
-6	7	1	1439	1401	19
-4	7	1	2632	-2543	13
-2	7	1	567	-633	43
0	7	1	2570	-2454	13
2	7	1	2682	-2619	13
4	7	1	754	719	26
6	7	1	1720	-1604	15
-7	8	1	2040	2005	17
-5	8	1	2332	2216	15
-3	8	1	148	119	-245
-1	8	1	1226	1138	21
1	8	1	3760	-3674	13
3	8	1	644	731	41
5	8	1	2720	-2685	15
7	8	1	1134	-1154	24
-8	9	1	1052	-1057	28
-6	9	1	3036	2950	17
-4	9	1	356	154	-103
-2	9	1	4470	4239	17
0	9	1	152	-38	-271
2	9	1	775	746	41
4	9	1	1677	1648	19
6	9	1	1567	-1541	19
8	9	1	337	187	-101
-9	10	1	3210	-3191	17
-7	10	1	402	-284	-107
-5	10	1	736	-664	56
-3	10	1	670	488	67
-1	10	1	1851	1670	21
1	10	1	163	-112	-247
3	10	1	3878	3844	17
5	10	1	505	531	69
7	10	1	2405	2469	17
9	10	1	391	-324	-92
-10	11	1	475	-315	82
-8	11	1	1421	-1392	26
-6	11	1	483	-134	-99
-4	11	1	2926	-2675	19
-2	11	1	440	399	88
0	11	1	2622	-2504	19
2	11	1	1078	997	32
4	11	1	640	623	62
6	11	1	706	714	45
8	11	1	2484	2565	21
10	11	1	350	308	-107
-11	12	1	2162	2211	21
-9	12	1	210	-50	-202
-7	12	1	2497	2336	21
-5	12	1	1441	-1360	28
-3	12	1	183	115	-245
-1	12	1	691	-619	58
1	12	1	2388	-2298	21
3	12	1	402	260	-103
5	12	1	2688	-2623	21
7	12	1	1001	960	30
9	12	1	384	-253	-101
11	12	1	1284	1310	26
-12	13	1	1099	1110	32
-10	13	1	354	214	-127
-8	13	1	1784	1739	24
-6	13	1	1823	1677	26
-4	13	1	195	66	-249
-2	13	1	2480	2335	21
0	13	1	1071	-994	32
2	13	1	1406	1345	26
4	13	1	1960	-1879	21
6	13	1	1217	-1233	28
8	13	1	659	-601	54
10	13	1	1239	-1295	26
12	13	1	734	700	45
-13	14	1	1235	-1223	34
-11	14	1	563	-363	90
-9	14	1	1024	-918	37
-7	14	1	1490	1453	28
-5	14	1	951	-942	41
-3	14	1	2063	1930	24
-1	14	1	788	854	49
1	14	1	1677	1591	24
3	14	1	1625	1536	28
5	14	1	1022	-1008	34
7	14	1	1119	1097	30
9	14	1	1542	-1556	24
11	14	1	402	69	-103
13	14	1	1241	-1302	30
-12	15	1	427	315	-125
-10	15	1	1769	-1713	28
-8	15	1	228	11	-232
-6	15	1	1355	-1289	32
-4	15	1	1265	-1135	32
-2	15	1	1005	938	37
0	15	1	857	-871	43
2	15	1	2373	2352	21
4	15	1	213	-16	-221
6	15	1	1617	1659	26
8	15	1	788	780	54
10	15	1	365	100	-127
12	15	1	709	658	58
-11	16	1	472	403	-118
-9	16	1	378	-433	-148
-7	16	1	605	500	86
-5	16	1	2018	-1959	24
-3	16	1	442	326	-103
-1	16	1	2038	-2014	26
1	16	1	298	-251	-165
3	16	1	438	-177	-105
5	16	1	459	-235	-97
7	16	1	1718	1702	26
9	16	1	481	-369	-105
11	16	1	1643	1733	26
-10	17	1	253	16	-221
-8	17	1	1597	1484	30
-6	17	1	348	-184	-159
-4	17	1	859	868	47
-2	17	1	367	81	-144
0	17	1	1716	-1637	28
2	17	1	228	21	-183
4	17	1	1879	-1882	26
6	17	1	779	713	56
8	17	1	1082	-1123	37
10	17	1	253	-40	-206
-7	18	1	1054	918	39
-5	18	1	320	232	-174
-3	18	1	2519	2399	26
-1	18	1	623	-516	79
1	18	1	953	886	43
3	18	1	539	-460	103
5	18	1	356	-160	-148
7	18	1	249	-71	-217
-4	19	1	1138	1212	39
-2	19	1	764	642	62
0	19	1	346	323	-159
2	19	1	1419	1356	34
4	19	1	421	9	-120
0	0	2	4739	4662	6
1	1	2	1831	1823	9
0	2	2	2282	2265	9
2	2	2	5492	-5483	9
-1	3	2	1649	1604	11
1	3	2	2413	-2393	9
3	3	2	3783	-3733	9
-2	4	2	3193	3271	9
0	4	2	983	822	15
2	4	2	125	-18	-142
4	4	2	550	542	26
-3	5	2	734	-795	21
-1	5	2	3824	3804	9
1	5	2	271	37	-75
3	5	2	3656	3562	11
5	5	2	1812	1777	13
-4	6	2	1404	-1310	15
-2	6	2	1844	-1833	13
0	6	2	1209	1208	15
2	6	2	2246	-2281	11
4	6	2	5509	5567	11
6	6	2	1413	-1454	17
-5	7	2	157	-89	-178
-3	7	2	2497	-2488	13
-1	7	2	240	454	-86
1	7	2	4041	-3957	11
3	7	2	889	860	21
5	7	2	1469	-1465	17
7	7	2	429	474	62
-6	8	2	4318	4295	15
-4	8	2	2085	-2128	15
-2	8	2	3534	3524	13
0	8	2	2038	-2059	13
2	8	2	522	435	39
4	8	2	2383	-2395	15
6	8	2	2336	-2267	15
8	8	2	230	-48	-155
-7	9	2	2145	2182	17
-5	9	2	1071	1037	26
-3	9	2	475	318	62
-1	9	2	3757	3735	13
1	9	2	900	858	26
3	9	2	2044	1993	15
5	9	2	2216	-2177	17
7	9	2	335	267	-107
9	9	2	809	-745	34
-8	10	2	790	-802	39
-6	10	2	337	-173	-116
-4	10	2	1464	-1411	21
-2	10	2	983	827	28
0	10	2	1937	1949	17
2	10	2	1222	1129	24
4	10	2	2690	2600	15
6	10	2	623	-560	45
8	10	2	3163	3200	17
10	10	2	1864	-1909	21
-9	11	2	2042	-1993	19
-7	11	2	627	621	56
-5	11	2	2407	-2353	17
-3	11	2	1542	-1499	21
-1	11	2	666	-696	43
1	11	2	1447	-1320	24
3	11	2	1877	1822	19
5	11	2	1228	-1209	24
7	11	2	2823	2788	17
9	11	2	552	493	62
11	11	2	1162	1207	28
-10	12	2	1351	1326	26
-8	12	2	208	88	-213
-6	12	2	1799	1723	21
-4	12	2	2469	-2331	19
-2	12	2	1971	1957	21
0	12	2	4427	-4198	17
2	12	2	578	521	71
4	12	2	2186	-2113	19
6	12	2	305	285	-133
8	12	2	208	-382	-183
10	12	2	298	175	-137
12	12	2	1269	1264	28
-11	13	2	1181	1075	34
-9	13	2	281	-267	-165
-7	13	2	2349	2277	21
-5	13	2	496	291	94
-3	13	2	2497	2299	21
-1	13	2	195	252	-238
1	13	2	1230	-1095	30
3	13	2	539	517	75
5	13	2	1688	-1637	21
7	13	2	329	-128	-125
9	13	2	1898	-1973	21
11	13	2	232	-145	-195
13	13	2	444	-32	-110
-12	14	2	792	722	47
-10	14	2	2227	-2151	24
-8	14	2	928	940	41
-6	14	2	277	-509	-161
-4	14	2	1398	1328	28
-2	14	2	1935	1811	24
0	14	2	513	364	84
2	14	2	1621	1538	24
4	14	2	687	627	52
6	14	2	238	125	-185
8	14	2	389	491	-125
10	14	2	2188	-2252	21
12	14	2	621	612	64
-11	15	2	397	-358	-127
-9	15	2	1819	-1688	28
-7	15	2	228	160	-243
-5	15	2	1952	-1842	26
-3	15	2	1207	1078	32
-1	15	2	678	-757	58
1	15	2	932	953	39
3	15	2	1585	1568	26
5	15	2	348	134	-133
7	15	2	2450	2475	21
9	15	2	739	-485	56
11	15	2	1061	1069	34
-10	16	2	305	-285	-191
-8	16	2	419	39	-137
-6	16	2	507	-69	-110
-4	16	2	1703	-1655	28
-2	16	2	236	79	-219
0	16	2	2227	-2083	21
2	16	2	1533	1584	28
4	16	2	2085	-2072	24
6	16	2	1950	1889	26
8	16	2	404	8	-120
10	16	2	1469	1452	28
-9	17	2	724	721	67
-7	17	2	1518	1461	32
-5	17	2	588	-467	92
-3	17	2	846	787	52
-1	17	2	1512	-1538	28
1	17	2	490	570	-101
3	17	2	1226	-1172	32
5	17	2	1443	-1391	30
7	17	2	331	139	-155
9	17	2	754	-691	58
-6	18	2	668	-555	75
-4	18	2	1700	1673	28
-2	18	2	371	58	-148

Table 4 (cont'd)

Observed and calculated structure factors for ASHBURTONITE LOT 27/89 XL#7 I4/M

h	k	l	10Fo	10Fc	10s
0	18	2	743	811	60
2	18	2	672	718	69
4	18	2	1016	-986	41
6	18	2	363	-339	-146
-3	19	2	1172	1172	37
-1	19	2	311	-111	-183
1	19	2	1801	1706	28
3	19	2	442	226	-122
0	1	3	2482	2397	9
-1	2	3	893	-939	15
1	2	3	2596	-2500	11
-2	3	3	550	-466	26
0	3	3	638	734	21
2	3	3	3835	-3756	9
-3	4	3	410	376	52
-1	4	3	3852	3784	9
1	4	3	298	58	-67
3	4	3	558	467	30
-4	5	3	895	-842	19
-2	5	3	1559	1557	13
0	5	3	3510	3485	11
2	5	3	975	995	17
4	5	3	3330	3320	11
-5	6	3	1020	-983	19
-3	6	3	3111	-3088	11
-1	6	3	1859	1820	13
1	6	3	1690	-1676	13
3	6	3	2463	2411	13
5	6	3	1166	1168	19
-6	7	3	1527	1511	17
-4	7	3	2566	-2522	13
-2	7	3	1065	-1097	19
0	7	3	1846	-1828	13
2	7	3	2312	-2293	13
4	7	3	264	132	-105
6	7	3	1460	-1401	19
-7	8	3	1857	1869	17
-5	8	3	1922	1944	15
-3	8	3	432	323	60
-1	8	3	1127	1115	19
1	8	3	3178	-3179	13
3	8	3	659	675	32
5	8	3	2192	-2109	15
7	8	3	1162	-1171	21
-8	9	3	928	-958	30
-6	9	3	2602	2546	15
-4	9	3	444	199	73
-2	9	3	3639	3604	13
0	9	3	444	-54	64
2	9	3	820	801	30
4	9	3	1574	1567	17
6	9	3	1278	-1335	21
8	9	3	279	151	-120
-9	10	3	2570	-2579	19
-7	10	3	447	-416	79
-5	10	3	874	-851	30
-3	10	3	603	595	45
-1	10	3	1462	1435	19
1	10	3	567	-601	45
3	10	3	3455	3389	15
5	10	3	449	510	77
7	10	3	1950	1909	19
9	10	3	479	-331	84
-10	11	3	410	-209	-105
-8	11	3	1168	-1124	28
-6	11	3	200	-111	-180
-4	11	3	2336	-2288	17
-2	11	3	292	411	-122
0	11	3	2128	-2084	17
2	11	3	1007	935	26
4	11	3	462	510	69
6	11	3	590	601	62
8	11	3	2433	2374	19
10	11	3	219	178	-198
-11	12	3	1935	1945	24
-9	12	3	221	-77	-198
-7	12	3	2083	2065	21
-5	12	3	1308	-1257	26
-3	12	3	236	82	-167
-1	12	3	575	-595	56
1	12	3	1967	-1894	19
3	12	3	200	154	-195
5	12	3	2248	-2316	19
7	12	3	996	965	32
9	12	3	221	-202	-202
11	12	3	1071	1067	34
-12	13	3	1108	1105	34
-10	13	3	414	104	-118
-8	13	3	1389	1438	28
-6	13	3	1703	1653	24
-4	13	3	417	24	-90
-2	13	3	1821	1784	21
0	13	3	818	-765	41
2	13	3	1299	1277	26
4	13	3	2010	-1939	21
6	13	3	1112	-1090	30
8	13	3	498	-447	90
10	13	3	1286	-1256	30
12	13	3	627	566	77
-11	14	3	316	-271	-170
-9	14	3	915	-871	43
-7	14	3	1262	1284	30
-5	14	3	696	-701	49
-3	14	3	1737	1656	24
-1	14	3	855	820	39
1	14	3	1492	1441	26
3	14	3	1445	1389	26
5	14	3	940	-877	34
7	14	3	1048	1013	34
9	14	3	1445	-1432	28
11	14	3	271	120	-187
-10	15	3	1604	-1548	30
-8	15	3	238	-51	-232
-6	15	3	1177	-1141	34
-4	15	3	1037	-1007	37
-2	15	3	887	799	41
0	15	3	829	-794	52
2	15	3	2106	2068	21
4	15	3	225	59	-208
6	15	3	1488	1445	26
8	15	3	698	647	62
10	15	3	462	160	-110
-9	16	3	404	-308	-148
-7	16	3	530	475	94
-5	16	3	2003	-1928	26
-3	16	3	449	422	-101
-1	16	3	1866	-1738	26
1	16	3	459	-383	-103
3	16	3	404	-179	-103
5	16	3	331	-63	-150
7	16	3	1378	1374	28
9	16	3	316	-362	-165
-6	17	3	344	-222	-165
-4	17	3	990	754	49
-2	17	3	485	164	-112
0	17	3	1531	-1487	28
2	17	3	240	18	-217
4	17	3	1585	-1641	28
6	17	3	678	638	58
-3	18	3	2192	2111	26
-1	18	3	629	-431	88
1	18	3	846	768	54
3	18	3	655	-404	84
0	0	4	7158	7190	11
1	1	4	1582	1502	13
0	2	4	1398	-1362	13
2	2	4	1434	-1342	15
-1	3	4	717	707	24
1	3	4	2656	-2604	11
3	3	4	1707	-1650	13
-2	4	4	447	178	45
0	4	4	2695	2651	11
2	4	4	2598	-2564	13
4	4	4	3152	3131	13
-3	5	4	281	-372	-86
-1	5	4	3036	2976	13
1	5	4	165	28	-152
3	5	4	2690	2661	13
5	5	4	1436	1387	17
-4	6	4	3607	-3590	13
-2	6	4	442	479	47
0	6	4	816	-815	24
2	6	4	659	659	28
4	6	4	1531	1458	17
6	6	4	1393	1404	19
-5	7	4	305	273	-86
-3	7	4	2705	-2702	13
-1	7	4	481	425	54
1	7	4	2774	-2673	13
3	7	4	236	9	-114
5	7	4	1153	-1174	21
7	7	4	612	557	45
-6	8	4	1919	1883	17
-4	8	4	414	311	75
-2	8	4	578	549	43
0	8	4	661	630	32
2	8	4	1780	-1734	17
4	8	4	187	212	-155
6	8	4	3882	-3827	17
8	8	4	1570	1556	19
-7	9	4	1662	1685	19
-5	9	4	361	480	-75
-3	9	4	623	726	43
-1	9	4	2924	2930	15
1	9	4	187	61	-163
3	9	4	2076	2103	17
5	9	4	1698	-1658	17
7	9	4	249	-112	-140
9	9	4	818	-644	34
-8	10	4	2023	-1975	19
-6	10	4	1037	1048	26
-4	10	4	2750	-2779	15
-2	10	4	2972	2901	17
0	10	4	844	-792	30
2	10	4	2778	2734	15
4	10	4	801	729	30
6	10	4	900	897	28
8	10	4	1013	954	28
10	10	4	225	45	-176
-9	11	4	1226	-1146	28
-7	11	4	412	260	-94
-5	11	4	2012	-2053	19
-3	11	4	998	-972	28
-1	11	4	563	-495	52
1	11	4	1166	-1164	24
3	11	4	1484	1450	21
5	11	4	730	-750	39
7	11	4	2209	2162	19
9	11	4	689	620	54
11	11	4	782	700	52
-10	12	4	236	-187	-206
-8	12	4	1378	1350	26
-6	12	4	219	149	-187
-4	12	4	599	-457	56
-2	12	4	507	-253	69
0	12	4	1752	-1627	19
2	12	4	1059	-1043	28
4	12	4	614	-574	54
6	12	4	1069	-1091	30
8	12	4	1316	1282	28
10	12	4	1387	-1366	28
12	12	4	2141	2146	26
-11	13	4	1282	1221	32
-9	13	4	676	-716	62
-7	13	4	2261	2203	21
-5	13	4	399	447	-105
-3	13	4	1670	1569	21
-1	13	4	354	218	-114
1	13	4	621	-574	47
3	13	4	509	264	79
5	13	4	1765	-1735	24
7	13	4	554	463	84
9	13	4	1977	-2008	24
11	13	4	271	-125	-178
-10	14	4	983	-902	45
-8	14	4	621	-590	79
-6	14	4	1151	1078	32
-4	14	4	228	-156	-202
-2	14	4	2753	2628	19
0	14	4	943	-942	34
2	14	4	2759	2727	19
4	14	4	966	-879	34
6	14	4	1406	1393	28
8	14	4	767	-748	64
10	14	4	792	-851	54
-9	15	4	1284	-1282	34
-7	15	4	245	-49	-219
-5	15	4	1655	-1538	28
-3	15	4	966	959	37
-1	15	4	683	-645	54
1	15	4	788	683	56
3	15	4	1275	1237	30
5	15	4	487	455	-105
7	15	4	1722	1649	26
9	15	4	558	-208	84
-6	16	4	1436	-1392	32
-4	16	4	378	-275	-142
-2	16	4	831	-747	52
0	16	4	953	-861	41
2	16	4	423	36	-120
4	16	4	494	-278	-103
6	16	4	698	428	71
-3	17	4	900	872	49
-1	17	4	1224	-1165	37
1	17	4	313	167	-178
3	17	4	889	-783	47
0	1	5	1432	1385	15
-1	2	5	477	-452	41
1	2	5	1512	-1481	15
-2	3	5	784	-750	26
0	3	5	674	663	28
2	3	5	3049	-2921	13
-3	4	5	320	-233	-71
-1	4	5	3184	3091	13
1	4	5	511	503	45
3	4	5	185	115	-133
-4	5	5	713	-729	28
-2	5	5	1211	1207	19
0	5	5	2420	2370	15
2	5	5	532	603	45
4	5	5	2791	2730	15
-5	6	5	887	-866	26
-3	6	5	2214	-2165	15
-1	6	5	1123	1132	21
1	6	5	1449	-1393	17
3	6	5	1907	1900	15
5	6	5	728	787	30
-6	7	5	807	801	28
-4	7	5	1739	-1659	17
-2	7	5	371	-325	64
0	7	5	1703	-1662	17
2	7	5	1720	-1665	17
4	7	5	612	533	41
6	7	5	1136	-1107	21
-7	8	5	1381	1335	21
-5	8	5	1406	1400	19
-3	8	5	202	129	-144
-1	8	5	859	864	26
1	8	5	2377	-2377	15
3	8	5	513	432	52
5	8	5	1799	-1745	17
7	8	5	700	-693	37
-8	9	5	694	-774	47
-6	9	5	2111	2088	17
-4	9	5	260	156	-122
-2	9	5	2634	2592	15
0	9	5	204	105	-161
2	9	5	599	602	45
4	9	5	983	962	28
6	9	5	1009	-970	28
8	9	5	223	252	-163
-9	10	5	2373	-2358	19
-7	10	5	361	-108	-107
-5	10	5	599	-433	58
-3	10	5	247	196	-140
-1	10	5	1132	1064	24
1	10	5	389	-1	77
3	10	5	2527	2434	17
5	10	5	526	294	62
7	10	5	1728	1736	21
9	10	5	414	-230	-103
-10	11	5	498	-285	97
-8	11	5	1097	-1021	32
-6	11	5	225	-26	-176
-4	11	5	1913	-1860	19
-2	11	5	421	226	-88
0	11	5	1675	-1634	19
2	11	5	745	647	37
4	11	5	329	353	-116
6	11	5	608	514	56
8	11	5	1758	1730	24
10	11	5	313	227	-137
-9	12	5	384	-21	-127
-7	12	5	1649	1581	24
-5	12	5	938	-922	34
-3	12	5	225	73	-176
-1	12	5	515	-441	77
1	12	5	1681	-1635	21
3	12	5	268	269	-133
5	12	5	1823	-1809	24
7	12	5	595	575	69
9	12	5	477	-160	84
-8	13	5	1314	1304	30
-6	13	5	1091	1072	32
-4	13	5	234	-14	-189
-2	13	5	1778	1711	24
0	13	5	760	-735	47
2	13	5	887	832	37
4	13	5	1282	-1234	28
6	13	5	936	-908	37
8	13	5	612	-479	67
-7	14	5	1043	1051	37
-5	14	5	773	-768	54
-3	14	5	1488	1441	28
-1	14	5	644	593	64
1	14	5	1119	1094	32
3	14	5	1157	1090	32
5	14	5	803	-695	47
7	14	5	762	742	54
-6	15	5	857	-900	54
-4	15	5	829	-826	47
-2	15	5	749	621	54
0	15	5	696	-576	62
2	15	5	1739	1727	26
4	15	5	249	-99	-206
6	15	5	1265	1207	34
-1	16	5	1524	-1457	30
1	16	5	468	-118	-112
0	0	6	2671	2573	15
1	1	6	887	875	26
0	2	6	1153	1088	19
2	2	6	2965	-2858	15
-1	3	6	711	627	30
1	3	6	1625	-1589	17
3	3	6	1424	-1357	19
-2	4	6	1718	1669	17
0	4	6	505	434	56
2	4	6	204	-149	-148
4	4	6	290	316	-107
-3	5	6	322	-252	-97
-1	5	6	2143	2043	15
1	5	6	206	-76	-148
3	5	6	2016	1994	17
5	5	6	1119	1100	24
-4	6	6	822	-819	28
-2	6	6	1108	-1058	24
0	6	6	786	741	30
2	6	6	1123	-1126	21
4	6	6	3004	2940	15
6	6	6	638	-661	45
-5	7	6	316	-72	-110
-3	7	6	1643	-1612	19
-1	7	6	354	167	-84
1	7	6	2345	-2238	17
3	7	6	419	297	69
5	7	6	915	-936	28
7	7	6	228	260	-165
-6	8	6	2701	2633	17
-4	8	6	1228	-1194	24
-2	8	6	1939	1903	19
0	8	6	1116	-1067	24
2	8	6	301	199	-99
4	8	6	1374	-1345	24
6	8	6	1490	-1431	24
8	8	6	277	-42	-146
-7	9	6	1297	1234	26
-5	9	6	438	515	79
-3	9	6	408	338	-90
-1	9	6	2224	2178	17
1	9	6	402	282	-88
3	9	6	1325	1297	24
5	9	6	1202	-1179	26
7	9	6	258	30	-159
9	9	6	601	-455	71
-8	10	6	565	-487	67
-6	10	6	350	-160	-118
-4	10	6	928	-914	32
-2	10	6	468	534	79
0	10	6	970	1040	30
2	10	6	728	710	39
4	10	6	1535	1524	24
6	10	6	571	-402	67
8	10	6	2003	1956	24
10	10	6	1254	-1202	30
-7	11	6	286	356	-163
-5	11	6	1570	-1512	24
-3	11	6	818	-757	39
-1	11	6	397	-350	-103
1	11	6	863	-900	34
3	11	6	1155	1160	28
5	11	6	739	-641	52
7	11	6	1767	1733	24
-6	12	6	1132	1114	32
-4	12	6	1471	-1425	26
-2	12	6	1116	1089	30
0	12	6	2564	-2525	19
2	12	6	457	370	-97
4	12	6	1415	-1383	28
6	12	6	472	170	-99
-5	13	6	251	210	-191
-3	13	6	1456	1394	28
-1	13	6	281	137	-163
1	13	6	618	-647	64
3	13	6	309	261	-150
5	13	6	1022	-1080	39
-2	14	6	1144	1099	34
0	14	6	449	214	-99
2	14	6	1097	1023	37
0	1	7	1237	1165	21
-1	2	7	567	-330	58

Table 4 (cont'd)

Observed and calculated structure factors for ASHBURTONITE LOT 27/89 XL#7 14/M

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
1	2	7	1215	-1179	21	-3	6	7	1872	-1806	19	-3	8	7	468	91	82	-3	10	7	359	329	-114	1	3	8	1185	-1165	26
-2	3	7	352	-366	-90	-1	6	7	829	881	32	-1	8	7	530	614	67	-1	10	7	865	826	34	3	3	8	874	-793	34
0	3	7	221	172	-146	1	6	7	794	-722	32	1	8	7	1668	-1615	21	1	10	7	438	-333	-97	-2	4	8	417	77	-88
2	3	7	1954	-1897	17	3	6	7	1157	1105	26	3	8	7	380	269	-94	3	10	7	1988	1903	21	0	4	8	1445	1330	24
-3	4	7	225	126	-163	5	6	7	629	471	56	5	8	7	1239	-1139	26	5	10	7	440	267	88	2	4	8	1284	-1194	26
-1	4	7	2020	1958	17	-6	7	7	930	891	32	7	8	7	575	-612	67	-2	11	7	511	263	86	4	4	8	1516	1399	24
1	4	7	223	115	-152	-4	7	7	1359	-1304	24	-6	9	7	1351	1343	28	0	11	7	1282	-1207	28	-3	5	8	249	-175	-165
3	4	7	266	218	-120	-2	7	7	543	-483	60	-4	9	7	359	162	-125	2	11	7	565	439	69	-1	5	8	1464	1356	24
-4	5	7	494	-496	75	0	7	7	975	-904	30	-2	9	7	1997	1951	21	0	0	8	3072	2949	17	1	5	8	438	-40	-90
-2	5	7	816	833	30	2	7	7	1192	-1162	26	0	9	7	256	-141	-144	1	1	8	627	651	47	3	5	8	1385	1336	26
0	5	7	1761	1710	19	4	7	7	236	165	-165	2	9	7	530	428	69	0	2	8	653	-533	52	-2	6	8	414	294	-92
2	5	7	367	429	-82	6	7	7	745	-734	41	4	9	7	928	904	37	2	2	8	678	-711	49	0	6	8	608	-502	60
4	5	7	1711	1684	21	-7	8	7	1134	1082	30	6	9	7	846	-801	39	-1	3	8	386	317	-101	2	6	8	481	250	75
-5	6	7	500	-473	62	-5	8	7	1003	1021	32	-5	10	7	502	-465	79												

Notes: Structure factors and deviation (s) are all multiplied by 10. Fc's are phased + or - .