

Refinement of the crystal structure of pseudomalachite

GERALD L. SHOEMAKER, JAMES B. ANDERSON AND EDWARD KOSTINER¹

*Institute of Materials Science and Department of Chemistry
University of Connecticut, Storrs, Connecticut 06268*

Abstract

The crystal structure of pseudomalachite, $\text{Cu}_5(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_4$, (from Rheinbreitenbach, Germany) has been refined by full-matrix least-squares techniques to a residual $R = 0.040$ ($R_w = 0.047$) using automatic diffractometer data. The lattice parameters (space group $P2_1/c$) are $a = 4.4728(4)$, $b = 5.7469(5)$, $c = 17.032(3)$ Å, and $\beta = 91.043(7)^\circ$. The copper ions lie in sheets of edge-sharing coordination polyhedra in the bc plane; the sheets are linked together in the a direction by highly distorted phosphate tetrahedra. This work confirms the essential features of an earlier structural study of pseudomalachite with increased precision. Through an analysis of bond distances, coordination, and bond valence sums, probable locations of hydrogen bonds were determined. Hydrogen bonds appear to be important in stabilizing the pseudomalachite structure.

Introduction

We recently reported (Anderson *et al.*, 1977) the preparation and crystal-structure determination of synthetic $\text{Cu}_5(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_4$, a polymorph of pseudomalachite (PM). The structure of this synthetic phase (called PPM for convenience) differs from that of PM only in the difference in the polyhedral linkages in two-dimensional copper-containing sheets.

In our comparison of the two structures, the only difference in cooper coordination seemed to occur about the Cu(2) ion, which we considered to be five-coordinated (4 + 1) in PPM but which Ghose (1963) reports as six-coordinated (4 + 1 + 1) in PM. As a result, we decided to complete a three-dimensional least-squares refinement of the structure of PM in order to compare the coordination polyhedra at the same level of accuracy. This paper reports the results of that refinement.

Experimental

Samples of pseudomalachite were obtained from the Harvard University Mineralogical Museum and from the Smithsonian Institution. The best crystals for X-ray diffraction were found in a sample from Rheinbreitenbach, Germany (Harvard #110744). According to published analyses, pseudomalachite from Rheinbreitenbach contains traces of iron, but an ex-

amination of fragments from our sample by electron microprobe showed none.

A sphere was ground to a radius of 0.0065(5) cm. Precession photographs revealed monoclinic symmetry with systematic absences corresponding to the space group $P2_1/c$. The lattice parameters were determined in a PICK-II least-squares refinement program, using 50 reflections within the angular range $37^\circ < 2\theta < 50^\circ$; the reflections were automatically centered on a Picker FACS-I four-circle diffractometer using MoK α_1 radiation. At 22°C the lattice parameters are $a = 4.4728(4)$, $b = 5.7469(5)$, $c = 17.032(3)$ Å, and $\beta = 91.043(7)^\circ$, where the figures in parentheses represent the standard deviations in the last reported figure. The calculated density, with $Z = 2$, is 4.367 g cm $^{-3}$.

Diffraction intensities were measured using Zr filtered MoK α radiation at a take-off angle of 2.5° with the diffractometer operating in the ω scan mode. 10-second background counts were taken at the ends of a 1.4° θ -2 θ scan corrected for dispersion. Of the 1694 independent data investigated in the angular range $2\theta < 65^\circ$, 1411 were considered observable according to the criterion $|F_o| > 3.00\sigma_F$, where σ_F is defined as $0.02 |F_o| + [C + k^2B]^{1/2}/2 |F_o|$ Lp; the total scan count is C , k is the ratio of scanning time to the total background time, and B is the total background count. Three reflections were systematically monitored and no variations in intensity greater than 3

¹ Author to whom correspondence should be addressed

H	K	L	FERS	FCAL	H	K	L	FERS	FCAL	H	K	L	FERS	FCAL	H	K	L	FERS	FCAL	H	K	L	FERS	FCAL
-6	0	2	328	352	-5	6	46	12	-5	4	3	301	301	-4	1	20	76	75	-4	4	4	322	322	
-6	0	4	346	365	-5	1	7	267	262	-5	4	4	144	148	-4	2	1	109	51	-4	13	76	57	
-6	0	6	47	78	-5	1	8	136	127	-5	4	4	106	98	-4	2	2	862	854	-4	14	324	326	
-6	0	8	173	186	-5	1	9	471	473	-5	4	4	7	101	124	-4	2	3	399	331	-4	14	324	326
-6	0	10	155	153	-5	1	10	273	291	-5	4	4	88	44	-4	2	4	255	226	-4	14	617	596	
-6	0	12	85	90	-5	1	11	130	130	-5	4	4	9	130	146	-4	2	5	617	596	-4	14	617	596
-6	1	1	210	205	-5	1	12	191	200	-5	4	4	16	52	-4	2	6	221	219	-4	14	221	219	
-6	1	2	142	157	-5	1	13	127	129	-5	4	4	11	110	-4	2	7	105	78	-4	14	444	444	
-6	1	3	109	125	-5	1	14	72	62	-5	4	4	13	213	-4	2	8	228	236	-4	14	155	163	
-6	1	4	171	173	-5	1	15	116	113	-5	4	4	5	302	-4	2	10	115	106	-4	14	155	163	
-6	1	5	112	115	-5	1	16	107	113	-5	4	4	1	302	-4	2	11	296	280	-4	14	226	236	
-6	1	6	165	176	-5	2	17	560	564	-5	4	4	6	206	-4	2	12	155	163	-4	14	617	596	
-6	1	7	178	181	-5	2	18	560	564	-5	4	4	5	84	-4	2	13	314	303	-4	14	303	303	
-6	1	8	148	173	-5	2	19	65	25	-5	4	4	7	197	-4	2	14	503	504	-4	14	503	504	
-6	1	9	513	529	-5	2	20	253	249	-5	5	5	8	100	-4	2	16	120	151	-4	14	444	444	
-6	1	10	120	122	-5	2	21	302	290	-5	5	5	9	390	-4	2	15	96	102	-4	14	155	163	
-6	1	11	153	158	-5	2	22	203	213	-4	0	2	2	531	-4	2	20	136	163	-4	14	303	303	
-6	1	12	408	415	-5	2	23	623	543	-4	2	2	2	623	-4	2	1	256	243	-4	14	114	116	
-6	1	13	242	247	-5	2	24	257	251	-4	0	6	6	564	-4	2	3	264	290	-4	14	116	116	
-6	1	14	159	139	-5	2	25	101	-4	0	8	8	322	-4	3	2	1	256	243	-4	14	114	116	
-6	1	15	175	181	-5	2	26	113	96	-4	0	10	10	134	-4	3	4	114	116	-4	14	114	116	
-6	1	16	158	158	-5	2	27	92	80	-4	0	12	12	411	-4	3	6	80	76	-4	14	114	116	
-6	1	17	84	93	-5	2	28	153	188	-4	0	14	14	567	-4	3	7	760	736	-4	14	241	241	
-6	1	18	57	111	-5	2	29	11	13	-4	0	16	16	507	-4	3	9	127	134	-4	14	107	107	
-6	1	19	105	105	-5	2	30	54	55	-4	0	16	16	522	-4	3	11	355	362	-4	14	107	107	
-6	1	20	100	100	-5	2	31	100	135	-4	0	20	20	149	-4	3	12	163	127	-4	14	107	107	
-6	1	21	14	14	-5	2	32	14	272	-4	0	20	18	96	-4	3	13	308	309	-4	14	114	116	
-6	1	22	16	16	-5	2	33	16	137	-4	1	1	1	147	-4	3	15	282	280	-4	14	114	116	
-6	1	23	13	13	-5	2	34	171	76	-4	1	1	2	129	-4	3	16	163	127	-4	14	114	116	
-6	1	24	230	230	-5	2	35	230	221	-4	1	1	3	432	-4	3	17	127	134	-4	14	114	116	
-6	1	25	198	198	-5	2	36	191	-4	1	1	4	4	439	-4	3	18	187	184	-4	14	114	116	
-6	1	26	165	165	-5	2	37	198	53	-4	1	1	5	288	-4	3	19	197	196	-4	14	114	116	
-6	1	27	137	137	-5	2	38	65	-4	1	1	6	2	276	-4	3	20	197	196	-4	14	114	116	
-6	1	28	109	109	-5	2	39	71	76	-4	1	1	7	129	-4	3	21	197	196	-4	14	114	116	
-6	1	29	347	346	-5	2	40	53	-4	1	1	8	8	260	-4	3	18	196	196	-4	14	114	116	
-6	1	30	262	262	-5	2	41	198	193	-4	1	1	9	821	-4	3	19	196	201	-4	14	222	222	
-6	1	31	130	137	-5	2	42	198	193	-4	1	1	10	808	-4	3	20	201	201	-4	14	222	222	
-6	1	32	81	58	-5	2	43	104	-4	1	1	11	6	260	-4	3	21	201	201	-4	14	222	222	
-5	0	4	919	899	-5	2	44	6	235	-4	1	1	7	385	-4	3	22	203	190	-4	14	222	222	
-5	0	5	95	79	-5	2	45	7	430	-4	1	1	8	193	-4	3	23	375	375	-4	14	222	222	
-5	0	6	12	189	-5	2	46	9	442	-4	1	1	9	821	-4	3	24	477	472	-4	14	222	222	
-5	0	7	16	192	-5	2	47	192	-4	1	1	10	808	-4	3	25	497	472	-4	14	222	222		
-5	0	8	14	147	-5	2	48	147	-4	1	1	11	162	-4	4	26	476	476	-4	14	222	222		
-5	0	9	12	172	-5	2	49	172	-4	1	1	12	172	-4	4	27	476	476	-4	14	222	222		
-5	0	10	16	265	-5	2	50	12	139	-4	1	1	13	114	-4	4	28	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	11	17	171	-5	2	51	171	165	-4	1	1	14	324	-4	4	29	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	12	18	612	-5	2	52	16	148	-4	1	1	15	162	-4	4	30	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	13	24	264	-5	2	53	11	395	-4	1	1	16	172	-4	4	31	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	14	24	147	-5	2	54	172	127	-4	1	1	17	114	-4	4	32	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	15	1	16	-5	2	55	112	109	-4	1	1	18	323	-4	4	33	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	16	1	17	-5	2	56	130	137	-4	1	1	19	323	-4	4	34	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	17	1	18	-5	2	57	130	137	-4	1	1	20	323	-4	4	35	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	18	1	19	-5	2	58	130	137	-4	1	1	21	323	-4	4	36	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	19	1	20	-5	2	59	130	137	-4	1	1	22	323	-4	4	37	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	20	1	21	-5	2	60	130	137	-4	1	1	23	323	-4	4	38	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	21	1	22	-5	2	61	130	137	-4	1	1	24	323	-4	4	39	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	22	1	23	-5	2	62	130	137	-4	1	1	25	323	-4	4	40	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	23	1	24	-5	2	63	130	137	-4	1	1	26	323	-4	4	41	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	24	1	25	-5	2	64	130	137	-4	1	1	27	323	-4	4	42	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	25	1	26	-5	2	65	130	137	-4	1	1	28	323	-4	4	43	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	26	1	27	-5	2	66	130	137	-4	1	1	29	323	-4	4	44	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	27	1	28	-5	2	67	130	137	-4	1	1	30	323	-4	4	45	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	28	1	29	-5	2	68	130	137	-4	1	1	31	323	-4	4	46	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	29	1	30	-5	2	69	130	137	-4	1	1	32	323	-4	4	47	475	475	-4	14	222	222	
-5	0	30	1	31	-5	2	70	130	137	-4	1	1	33	323	-4	4	48</							

৩. ক্ষেত্র বিশেষ পরিস্থিতি অবস্থায় প্রযোজন করা হোল্ডিং একাই প্রক্রিয়া করা হবে।

中華人民共和國農業部農業科學院植物保護研究所編《中國農業科學》雜誌社印制

--

本章由志愿者贡献，感谢您的支持！[贡献者列表](#)

H	K	L	FCS	FCAL	H	K	L	FCS	FCAL	H	K	L	FCS	FCAL	H	K	L	FCS	FCAL	H	K	L	FCS	FCAL	
C	1	19	241	248	0	2	12	243	245	0	5	13	72	51	0	8	4	155	122	1	2	2	628	619	
0	1	20	112	113	0	3	14	103	105	0	6	14	372	398	C	8	5	145	139	1	2	4	1035	1029	
0	1	21	128	133	0	3	15	427	425	0	6	15	84	123	C	8	6	129	158	1	2	5	816	803	
0	1	22	240	216	0	3	16	277	384	0	6	16	65	102	C	8	7	331	329	1	2	6	118	97	
0	0	23	173	162	0	3	17	114	112	0	6	17	530	545	C	8	8	52	34	1	2	7	907	532	
0	0	24	162	169	0	3	18	52	39	0	5	18	77	82	0	8	10	220	238	1	2	8	304	207	
0	0	25	63	2	0	3	19	652	654	0	5	19	152	168	1	0	0	2096	2030	1	2	9	536	539	
0	0	26	2	0	0	3	20	208	211	0	5	20	304	257	1	1	0	61	74	1	2	10	1666	1113	
0	0	27	2	0	0	3	21	132	157	0	5	21	98	132	1	1	0	4	1520	1456	1	2	11	590	612
0	0	28	0	0	0	3	22	126	119	0	6	21	684	657	1	1	0	6	489	540	1	2	12	501	530
0	0	29	2	0	0	3	23	24	122	0	6	22	283	264	1	1	0	8	518	532	1	2	13	290	263
0	0	30	2	0	0	3	24	816	846	0	6	23	92	1	1	0	19	496	497	1	2	14	350	352	
0	0	31	566	693	0	4	2	734	806	0	6	24	317	302	1	1	0	12	1927	1675	1	2	16	389	384
0	0	32	6	2	0	4	3	1627	1653	0	6	25	658	1	1	0	14	565	578	1	2	17	441	421	
0	0	33	7	1	0	4	5	65	66	0	6	26	694	658	1	1	0	14	565	578	1	2	18	409	401
0	0	34	8	1	0	4	6	80	84	0	6	27	442	446	1	1	0	18	235	221	1	2	19	409	401
0	0	35	9	1	0	4	7	314	299	0	6	28	238	249	1	1	0	20	526	503	1	2	20	526	503
0	0	36	10	1	0	4	8	253	256	0	6	29	397	397	1	1	0	22	139	146	1	2	21	21	79
0	0	37	11	1	0	4	9	817	826	0	6	30	141	141	1	1	0	24	511	517	1	2	22	264	260
0	0	38	12	1	0	4	10	727	736	0	6	31	265	265	1	1	0	20	560	543	1	2	23	264	260
0	0	39	13	1	0	4	11	288	253	0	6	32	716	723	1	1	1	2	128	134	1	2	24	205	203
0	0	40	14	1	0	4	12	537	537	0	6	33	123	125	1	1	1	3	1132	1133	1	2	25	54	54
0	0	41	15	1	0	4	13	54	47	0	6	34	14	14	1	1	1	4	462	390	1	2	26	579	581
0	0	42	16	1	0	4	14	201	201	0	6	35	95	95	1	1	1	5	1645	1616	1	2	27	441	441
0	0	43	17	1	0	4	15	496	463	0	6	36	145	157	1	1	1	6	325	309	1	2	28	436	436
0	0	44	18	1	0	4	16	304	292	0	6	37	96	96	1	1	1	7	514	523	1	2	29	436	436
0	0	45	19	1	0	4	17	208	215	0	6	38	58	38	1	1	1	10	337	343	1	2	30	405	405
0	0	46	20	1	0	4	18	72	61	0	6	39	105	105	1	1	1	11	336	350	1	2	31	204	204
0	0	47	21	1	0	4	19	198	201	0	7	40	140	144	1	1	1	12	575	566	1	2	32	54	54
0	0	48	22	1	0	4	20	72	83	0	7	41	140	144	1	1	1	13	88	86	1	2	33	58	58
0	0	49	23	1	0	4	21	177	190	0	7	42	168	168	1	1	1	14	166	169	1	2	34	250	250
0	0	50	24	1	0	4	22	311	218	0	7	43	171	171	1	1	1	15	228	224	1	2	35	347	347
0	0	51	25	1	0	4	23	307	296	0	7	44	171	171	1	1	1	16	312	312	1	2	36	366	366
0	0	52	26	1	0	4	24	21	21	0	7	45	262	274	1	1	1	17	681	655	1	2	37	259	259
0	0	53	27	1	0	4	25	177	190	0	7	46	169	169	1	1	1	18	33	30	1	2	38	259	259
0	0	54	28	1	0	4	26	311	218	0	7	47	178	178	1	1	1	19	352	340	1	2	39	776	776
0	0	55	29	1	0	4	27	176	196	0	7	48	171	171	1	1	1	20	276	253	1	2	40	776	776
0	0	56	30	1	0	4	28	462	422	0	7	49	424	422	1	1	1	20	276	253	1	2	41	776	776
0	0	57	31	1	0	4	29	67	61	0	7	50	424	422	1	1	1	21	276	253	1	2	42	776	776
0	0	58	32	1	0	4	30	90	90	0	7	51	424	422	1	1	1	22	276	253	1	2	43	776	776
0	0	59	33	1	0	4	31	333	333	0	7	52	467	467	1	1	1	23	431	436	1	2	44	776	776
0	0	60	34	1	0	4	32	339	338	0	7	53	467	467	1	1	1	24	431	436	1	2	45	776	776
0	0	61	35	1	0	4	33	1039	1053	0	5	54	462	462	1	1	1	25	176	191	1	2	46	776	776
0	0	62	36	1	0	4	34	62	67	0	5	55	462	462	1	1	1	26	276	253	1	2	47	776	776
0	0	63	37	1	0	4	35	1205	1216	0	5	56	464	464	1	1	1	27	767	714	1	2	48	776	776
0	0	64	38	1	0	4	36	338	338	0	5	57	464	464	1	1	1	28	176	191	1	2	49	776	776
0	0	65	39	1	0	4	37	629	637	0	5	58	465	465	1	1	1	29	276	253	1	2	50	776	776
0	0	66	40	1	0	4	38	331	333	0	5	59	465	465	1	1	1	30	176	191	1	2	51	776	776
0	0	67	41	1	0	4	39	5	5	0	5	60	465	465	1	1	1	31	276	253	1	2	52	776	776
0	0	68	42	1	0	4	40	6	6	0	5	61	466	466	1	1	1	32	176	191	1	2	53	776	776
0	0	69	43	1	0	4	41	7	7	0	5	62	466	466	1	1	1	33	276	253	1	2	54	776	776
0	0	70	44	1	0	4	42	8	8	0	5	63	467	467	1	1	1	34	276	253	1	2	55	776	776
0	0	71	45	1	0	4	43	9	9	0	5	64	467	467	1	1	1	35	276	253	1	2	56	776	776
0	0	72	46	1	0	4	44	10	10	0	5	65	468	468	1	1	1	36	276	253	1	2	57	776	776
0	0	73	47	1	0	4	45	11	11	0	5	66	469	469	1	1	1	37	276	253	1	2	58	776	776
0	0	74	48	1	0	4	46	12	12	0	5	67	470	470	1	1	1	38	276	253	1	2	59	776	776
0	0	75	49	1	0	4	47	13	13	0	5	68	470	470	1	1	1	39	276	253	1	2	60	776	776
0	0	76	50	1	0	4	48	14	14	0	5	69	471	471	1	1	1	40	276	253	1	2	61	776	776
0	0	77	51	1	0	4	49	15	15	0	5	70	471	471	1	1	1	41	276	253	1	2	62	776	776
0	0	78	52	1	0	4	50	16	16	0	5	71	472	472	1	1	1	42	276	253	1	2	63	776	776
0	0	79	53	1	0	4	51	17	17	0	5	72	472	472	1	1									

H	K	L	FCL	FCL	H	K	L	FCL	FCL	H	K	L	FCL	FCL	H	K	L	FCL	FCL	H	K	L	FCL	FCL	
1	4	1	315	315	1	6	7	303	308	2	C	15	205	205	2	2	15	246	237	2	4	16	210	206	
1	4	2	360	592	1	6	8	716	728	2	C	18	567	522	2	2	16	469	452	2	4	17	285	401	
1	4	3	323	953	1	6	9	284	274	2	C	20	427	422	2	2	17	158	155	2	4	18	145	143	
1	4	4	346	544	1	6	10	81	67	2	C	22	425	435	2	2	18	80	71	2	4	20	72	68	
1	4	5	337	542	1	6	12	425	428	2	C	24	400	413	2	2	19	212	230	2	4	21	170	171	
1	4	6	366	20	1	6	13	317	311	2	C	25	256	266	2	2	21	294	297	2	5	26	229	219	
1	4	7	33	170	1	6	14	62	58	1	C	26	129	135	2	2	22	449	463	2	5	27	224	213	
1	4	8	170	122	1	6	15	11	447	426	1	C	27	421	426	2	2	23	188	193	2	5	28	500	479
1	4	9	170	122	1	6	16	418	427	1	C	28	666	666	2	2	24	421	426	2	5	29	220	227	
1	4	10	170	122	1	6	17	447	426	1	C	29	117	117	2	2	25	744	747	2	5	30	195	200	
1	4	11	170	122	1	6	18	426	409	1	C	30	17	42	2	2	26	206	206	2	5	31	606	591	
1	4	12	170	122	1	6	19	224	224	1	C	31	13	13	2	2	27	467	467	2	5	32	144	127	
1	4	13	170	122	1	6	20	427	422	1	C	32	126	126	2	2	28	320	309	2	5	33	92	80	
1	4	14	170	122	1	6	21	426	420	1	C	33	129	129	2	2	29	138	138	2	5	34	90	79	
1	4	15	170	122	1	6	22	647	629	1	C	34	128	128	2	2	30	484	490	2	5	35	212	206	
1	4	16	170	122	1	6	23	647	629	1	C	35	127	127	2	2	31	18	18	2	5	36	606	591	
1	4	17	170	122	1	6	24	426	409	1	C	36	126	126	2	2	32	126	126	2	5	37	606	591	
1	4	18	170	122	1	6	25	426	409	1	C	37	125	125	2	2	33	125	125	2	5	38	606	591	
1	4	19	170	122	1	6	26	247	242	1	C	38	124	124	2	2	34	206	206	2	5	39	606	591	
1	4	20	170	122	1	6	27	247	242	1	C	39	123	123	2	2	35	206	206	2	5	40	606	591	
1	4	21	170	122	1	6	28	302	318	1	C	40	122	122	2	2	36	18	18	2	5	41	606	591	
1	4	22	170	122	1	6	29	250	318	1	C	41	121	121	2	2	37	121	121	2	5	42	606	591	
1	4	30	170	122	1	6	31	209	195	1	C	42	120	120	2	2	38	120	120	2	5	43	606	591	
1	4	41	170	122	1	6	32	247	242	1	C	43	119	119	2	2	39	120	120	2	5	44	606	591	
1	4	42	170	122	1	6	33	247	242	1	C	44	118	118	2	2	40	120	120	2	5	45	606	591	
1	4	43	170	122	1	6	34	45	175	1	C	45	117	117	2	2	41	120	120	2	5	46	606	591	
1	4	44	170	122	1	6	35	45	175	1	C	46	116	116	2	2	42	120	120	2	5	47	606	591	
1	4	45	170	122	1	6	36	45	175	1	C	47	115	115	2	2	43	120	120	2	5	48	606	591	
1	4	46	170	122	1	6	37	474	469	1	C	48	114	114	2	2	44	120	120	2	5	49	606	591	
1	4	47	170	122	1	6	38	474	469	1	C	49	113	113	2	2	45	120	120	2	5	50	606	591	
1	4	48	170	122	1	6	39	474	469	1	C	50	112	112	2	2	46	120	120	2	5	51	606	591	
1	4	49	170	122	1	6	40	474	469	1	C	51	111	111	2	2	47	120	120	2	5	52	606	591	
1	4	50	170	122	1	6	41	474	469	1	C	52	110	110	2	2	48	120	120	2	5	53	606	591	
1	4	51	170	122	1	6	42	474	469	1	C	53	109	109	2	2	49	120	120	2	5	54	606	591	
1	4	52	170	122	1	6	43	474	469	1	C	54	108	108	2	2	50	120	120	2	5	55	606	591	
1	4	53	170	122	1	6	44	474	469	1	C	55	107	107	2	2	51	120	120	2	5	56	606	591	
1	4	54	170	122	1	6	45	474	469	1	C	56	106	106	2	2	52	120	120	2	5	57	606	591	
1	4	55	170	122	1	6	46	474	469	1	C	57	105	105	2	2	53	120	120	2	5	58	606	591	
1	4	56	170	122	1	6	47	474	469	1	C	58	104	104	2	2	54	120	120	2	5	59	606	591	
1	4	57	170	122	1	6	48	474	469	1	C	59	103	103	2	2	55	120	120	2	5	60	606	591	
1	4	58	170	122	1	6	49	474	469	1	C	60	102	102	2	2	56	120	120	2	5	61	606	591	
1	4	59	170	122	1	6	50	474	469	1	C	61	101	101	2	2	57	120	120	2	5	62	606	591	
1	4	60	170	122	1	6	51	474	469	1	C	62	100	100	2	2	58	120	120	2	5	63	606	591	
1	4	61	170	122	1	6	52	474	469	1	C	63	99	99	2	2	59	120	120	2	5	64	606	591	
1	4	62	170	122	1	6	53	474	469	1	C	64	98	98	2	2	60	120	120	2	5	65	606	591	
1	4	63	170	122	1	6	54	474	469	1	C	65	97	97	2	2	61	120	120	2	5	66	606	591	
1	4	64	170	122	1	6	55	474	469	1	C	66	96	96	2	2	62	120	120	2	5	67	606	591	
1	4	65	170	122	1	6	56	474	469	1	C	67	95	95	2	2	63	120	120	2	5	68	606	591	
1	4	66	170	122	1	6	57	474	469	1	C	68	94	94	2	2	64	120	120	2	5	69	606	591	
1	4	67	170	122	1	6	58	474	469	1	C	69	93	93	2	2	65	120	120	2	5	70	606	591	
1	4	68	170	122	1	6	59	474	469	1	C	70	92	92	2	2	66	120	120	2	5	71	606	591	
1	4	69	170	122	1	6	60	474	469	1	C	71	91	91	2	2	67	120	120	2	5	72	606	591	
1	4	70	170	122	1	6	61	474	469	1	C	72	90	90	2	2	68	120	120	2	5	73	606	591	
1	4	71	170	122	1	6	62	474	469	1	C	73	89	89	2	2	69	120	120	2	5	74	606	591	
1	4	72	170	122	1	6	63	474	469	1	C	74	88	88	2	2	70	120	120	2	5	75	606	591	
1	4	73	170	122	1	6	64	474	469	1	C	75	87	87	2	2	71	120	120	2	5	76	606	591	
1	4	74	170	122	1	6	65	474	469	1	C	76	86	86	2	2	72	120	120	2	5	77	606	591	
1	4	75	170	122	1	6	66	474	469	1	C	77	85	85	2	2	73	120	120	2	5	78	606	591	
1	4	76	170	122	1	6	67	474	469	1	C	78	84	84	2	2	74	120	120	2	5	79	606	591	
1	4	77	170	122	1	6	68	474	469	1	C	79	83	83	2	2	75	120	120	2	5	80	606	591	
1	4	78	170	122	1	6	69	474	469	1	C	80	82	82	2	2	76	120	120	2	5	81	606	591	
1	4	79	170	122	1	6	70	474	469	1	C	81	81												

P	K	L	FIPS	FCAL	P	K	L	FIPS	FCAL	H	K	L	FIPS	FCAL	H	K	L	FIPS	FCAL	H
7	7	8	219	218	7	7	8	219	218	3	4	0	352	335	3	6	12	342	272	5
7	7	9	133	122	7	9	10	1013	1016	4	4	2	204	206	3	6	13	309	313	4
7	7	10	121	128	7	11	100	2	2	5	5	3	563	553	4	4	14	142	4	2
7	7	11	62	100	7	11	326	2	2	6	6	2	276	262	6	6	14	142	4	2
7	7	12	361	351	7	12	100	2	2	7	7	0	202	291	7	7	122	133	4	2
7	7	13	65	100	7	13	63	2	2	8	8	5	76	96	8	7	133	195	4	2
7	7	14	47	47	7	14	63	2	2	9	9	5	126	125	9	7	185	195	4	2
7	7	15	424	424	7	15	62	2	2	10	10	6	126	125	10	7	185	195	4	2
7	7	16	424	424	7	16	96	2	2	11	11	6	413	388	11	7	185	195	4	2
7	7	17	202	202	7	17	96	2	2	12	12	6	413	388	11	7	185	195	4	2
7	7	18	96	96	7	18	96	2	2	13	13	6	656	642	11	7	185	195	4	2
7	7	19	71	61	7	19	61	2	2	14	14	6	126	125	11	7	185	195	4	2
7	7	20	238	246	7	20	63	2	2	15	15	11	283	280	11	7	185	195	4	2
7	7	21	1212	1212	7	21	563	2	2	16	16	12	146	146	13	7	185	195	4	2
7	7	22	563	563	7	22	13	2	2	17	17	13	151	185	13	7	185	195	4	2
7	7	23	200	202	7	23	13	2	2	18	18	13	151	185	13	7	185	195	4	2
7	7	24	1164	1166	7	24	15	2	2	19	19	13	151	185	13	7	185	195	4	2
7	7	25	1090	1082	7	25	16	2	2	20	20	14	469	469	14	7	185	195	4	2
7	7	26	102	102	7	26	16	2	2	21	21	14	474	474	14	7	185	195	4	2
7	7	27	176	163	7	27	17	2	2	22	22	14	474	474	14	7	185	195	4	2
7	7	28	932	962	7	28	18	2	2	23	23	14	291	272	14	7	185	195	4	2
7	7	29	0	14	7	29	18	2	2	24	24	14	469	469	14	7	185	195	4	2
7	7	30	451	455	7	30	19	2	2	25	25	14	474	474	14	7	185	195	4	2
7	7	31	34	38	7	31	20	2	2	26	26	14	359	354	14	7	185	195	4	2
7	7	32	1042	1048	7	32	21	2	2	27	27	14	199	199	14	7	185	195	4	2
7	7	33	1043	1048	7	33	22	2	2	28	28	14	359	354	14	7	185	195	4	2
7	7	34	217	226	7	34	23	2	2	29	29	14	197	199	14	7	185	195	4	2
7	7	35	161	167	7	35	24	2	2	30	30	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	36	161	167	7	36	25	2	2	31	31	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	37	161	167	7	37	26	2	2	32	32	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	38	161	167	7	38	27	2	2	33	33	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	39	161	167	7	39	28	2	2	34	34	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	40	161	167	7	40	29	2	2	35	35	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	41	161	167	7	41	30	2	2	36	36	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	42	161	167	7	42	31	2	2	37	37	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	43	161	167	7	43	32	2	2	38	38	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	44	161	167	7	44	33	2	2	39	39	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	45	161	167	7	45	34	2	2	40	40	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	46	161	167	7	46	35	2	2	41	41	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	47	161	167	7	47	36	2	2	42	42	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	48	161	167	7	48	37	2	2	43	43	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	49	161	167	7	49	38	2	2	44	44	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	50	161	167	7	50	39	2	2	45	45	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	51	161	167	7	51	40	2	2	46	46	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	52	161	167	7	52	41	2	2	47	47	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	53	161	167	7	53	42	2	2	48	48	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	54	161	167	7	54	43	2	2	49	49	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	55	161	167	7	55	44	2	2	50	50	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	56	161	167	7	56	45	2	2	51	51	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	57	161	167	7	57	46	2	2	52	52	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	58	161	167	7	58	47	2	2	53	53	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	59	161	167	7	59	48	2	2	54	54	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	60	161	167	7	60	49	2	2	55	55	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	61	161	167	7	61	50	2	2	56	56	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	62	161	167	7	62	51	2	2	57	57	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	63	161	167	7	63	52	2	2	58	58	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	64	161	167	7	64	53	2	2	59	59	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	65	161	167	7	65	54	2	2	60	60	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	66	161	167	7	66	55	2	2	61	61	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	67	161	167	7	67	56	2	2	62	62	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	68	161	167	7	68	57	2	2	63	63	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	69	161	167	7	69	58	2	2	64	64	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	70	161	167	7	70	59	2	2	65	65	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	71	161	167	7	71	60	2	2	66	66	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	72	161	167	7	72	61	2	2	67	67	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	73	161	167	7	73	62	2	2	68	68	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	74	161	167	7	74	63	2	2	69	69	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	75	161	167	7	75	64	2	2	70	70	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	76	161	167	7	76	65	2	2	71	71	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	77	161	167	7	77	66	2	2	72	72	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	78	161	167	7	78	67	2	2	73	73	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	79	161	167	7	79	68	2	2	74	74	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	80	161	167	7	80	69	2	2	75	75	14	367	367	14	7	185	195	4	2
7	7	81	161	167	7	81	70	2	2	76</										

F	K	L	E ₀ AS	F ₀ CAU	H	K	L	E ₀ PS	F ₀ CAU	H	K	L	E ₀ PS	F ₀ CAU	H	K	L	E ₀ PS	F ₀ CAU	H	K	L	E ₀ PS	F ₀ CAU				
4	4	4	16	122	144	6	8	703	606	2	9	110	116	6	306	211	1	6	235	274	1	11	51	55	51	51		
4	5	5	9	263	354	6	16	249	262	5	6	202	22	6	208	188	6	1	11	51	55	51	51	51	51			
4	5	5	1	164	173	6	12	303	204	5	5	10	551	555	4	4	9	7	168	188	6	1	11	51	55	51	51	
4	5	5	2	216	204	6	14	647	667	5	5	21	11	2	256	313	5	4	9	7	168	188	6	1	11	51	55	51
4	5	5	3	620	624	6	16	200	214	5	5	22	12	55	44	5	4	10	156	169	6	2	2	2	2	2	2	2
4	5	5	5	111	107	5	1	16	261	279	5	2	13	178	179	5	4	11	242	260	6	2	2	122	164	164	164	164
4	5	5	6	216	219	1	1	96	106	5	5	5	2	15	125	135	5	4	10	194	202	6	2	4	161	164	164	164
4	5	5	8	102	98	1	1	676	671	5	5	16	173	176	5	4	11	242	260	6	2	2	122	164	164	164	164	
4	5	5	9	94	90	1	1	128	109	5	5	2	1	462	462	5	4	11	114	111	6	2	6	256	292	292	292	292
4	5	5	12	153	149	1	1	179	191	5	5	2	87	94	5	5	5	215	205	6	2	4	161	164	164	164	164	
4	5	5	13	137	137	5	1	180	180	5	5	2	271	266	5	5	5	206	200	6	2	8	164	116	116	116	116	
4	5	5	14	165	164	5	1	154	175	5	5	2	321	321	5	5	5	125	135	6	2	5	154	167	167	167	167	
4	5	5	16	245	253	5	1	11	171	172	5	2	6	157	123	5	5	5	215	205	6	2	7	256	292	292	292	292
4	6	6	1	277	253	1	12	132	124	5	5	2	73	86	6	0	0	460	473	6	3	1	218	218	218	218	218	
4	6	6	2	112	102	1	12	121	140	5	5	2	111	123	6	0	0	460	473	6	3	0	221	221	221	221	221	
4	6	6	3	66	43	1	14	67	56	5	5	2	11	60	6	0	0	477	488	6	3	3	145	170	170	170	170	
4	6	6	4	3CR	314	1	15	170	172	5	5	2	12	252	6	0	8	608	645	6	3	5	218	218	218	218	218	
4	6	6	5	118	133	5	1	16	61	5	5	2	13	215	6	0	8	608	645	6	3	1	418	427	427	427	427	
4	6	6	6	226	242	5	2	1	423	442	5	3	14	58	96	6	1	1	477	488	6	3	3	263	273	273	273	273
4	6	6	7	204	204	5	2	2	96	76	5	4	1	97	129	6	1	2	174	191	6	4	0	76	80	80	80	80
4	6	6	8	300	329	5	2	3	186	190	5	4	1	111	165	6	1	3	295	301	6	4	1	151	142	142	142	142
5	5	5	9	304	304	5	2	4	256	273	5	4	2	71	76	6	1	4	169	160	6	3	7	147	169	169	169	169
5	5	5	10	193	177	5	2	5	72	90	5	4	2	243	244	6	1	5	73	54	6	3	7	135	130	130	130	130
5	5	5	11	346	325	5	2	6	269	270	5	4	4	174	169	6	1	6	74	63	6	3	7	141	142	142	142	142
5	5	5	12	402	394	5	2	7	465	412	5	4	4	435	450	6	1	7	113	113	6	3	7	141	142	142	142	142