AM-85-290

Filut et al.

Crystal structure refinement of anandite-2Or....

Table

Am. Min., 70, 11-12

Filut, Rule & Bailey for deposit

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE AMPLITUDES -- ANANDITE-2OR

K	L	10FO	10FC
	H = 0		
0	2	905	623
0	4	2037	1633
0	6	2828	2166
0	8	3616	3242
0	10	2020	1813
0	12	3350	2977
0	14	1808	1551
0	16	2935	2716
0	18	420	414
0	20	2149	2029
0	22	1751	1622
0	24	1195	1172
0	26	543	534
1	1	631	578
1	3	178	232
1	5	191	151
1	7	288	242
1	9	1060	997
1	13	1051	930
1	15	288	268
1	17	273	245
1	19	946	888
1	21	930	891
1	23	287	282
1	25	661	689
1	27	211	199
2	0	526	523
2	2	1353	1356
2	4	2595	2671
2	6	2868	3039
2	8	1115	1060
2	10	244	258
2	12	1657	1679
2	14	1615	1491
2	16	637	629
2	18	785	748
2	20	625	567
2	22	945	943
2	24	969	918
3	5	314	308
3	7	1028	1106
3	9	543	575
3	11	634	650
3	13	640	647
3	15	602	570
3	17	770	770
3	19	755	794
3	21	250	229
3	23	315	315
3	25	618	626
3	27	549	556
4	0	1543	1513
4	2	2064	2050
4	4	1561	1560
4	6	1393	1476
4	8	196	195
4	10	413	415
4	12	2034	2098
4	16	365	368
4	18	263	285
4	22	873	899
4	24	938	979
5	5	388	387
5	7	457	454
5	9	546	535
5	11	481	501
5	13	502	535
5	15	193	200
5	17	148	148
5	19	826	830
5	21	618	671
5	23	357	397
5	25	371	373
6	2	1041	1023
6	4	1186	1193
6	6	611	613
6	8	2664	2801
6	10	878	888
6	12	1311	1386
6	14	1583	1697
6	16	1751	1817
6	18	559	558
6	20	1647	1770
6	22	1083	1244
6	24	676	703
7	1	513	513
7	3	94	87
7	5	382	378
7	9	490	493
7	11	377	395
7	13	631	682
7	15	212	236
7	17	314	333
7	19	408	424
7	21	435	470
8	0	874	852
8	2	557	568
8	4	1032	1024
8	6	751	764
8	8	231	229
8	12	1212	1244
8	14	802	817
8	16	385	377
8	22	329	339
9	1	98	86
9	3	379	390
9	7	376	399
9	9	557	559
9	11	227	231
9	13	377	396
9	17	241	238
9	19	280	327
10	2	453	450
10	4	699	683
10	6	951	917
10	8	121	114
10	12	703	726
10	14	754	770
11	3	411	413
11	5	272	259
11	7	264	248
11	9	128	130
11	11	215	200
11	15	231	227
12	0	2029	2025
12	2	489	494
12	4	259	262
12	6	498	488
12	10	268	239
12	12	608	592
13	1	142	120
13	3	255	235
	H = 1		
0	1	117	118
0	2	160	185
0	4	196	151

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
0	5	193	121	2	1	148	163	3	24	788	806
0	6	437	372	2	2	598	618	3	25	624	627
0	7	814	702	2	3	318	310	3	26	1289	1237
0	8	1332	1130	2	5	199	181	3	27	748	761
0	9	243	220	2	6	170	172	4	1	215	207
0	10	165	162	2	7	68	45	4	2	401	419
0	11	135	119	2	8	368	372	4	3	581	560
0	12	251	189	2	9	200	222	4	4	171	170
0	13	407	343	2	10	348	345	4	5	310	315
0	14	1102	922	2	11	285	273	4	7	386	385
0	15	371	375	2	12	658	641	4	8	357	362
0	16	538	473	2	13	546	534	4	10	208	217
0	17	302	321	2	14	781	834	4	11	298	290
0	18	684	681	2	15	318	322	4	12	396	415
0	19	382	396	2	18	320	326	4	13	146	150
0	20	287	283	2	19	351	346	4	14	734	785
0	23	204	207	2	20	771	705	4	15	478	497
0	24	609	618	2	21	249	230	4	16	145	134
0	25	317	335	2	22	324	315	4	17	118	139
0	26	738	726	2	23	223	228	4	18	255	292
0	27	321	354	2	24	464	457	4	19	568	538
1	0	384	395	2	25	353	356	4	20	556	583
1	1	596	614	2	26	507	519	4	22	185	192
1	2	518	487	2	27	254	259	4	23	246	260
1	3	1908	1808	3	0	200	182	4	24	414	446
1	4	1620	1502	3	1	3061	3043	4	26	532	509
1	5	2769	2745	3	2	2460	2476	5	0	146	147
1	6	1492	1344	3	3	818	750	5	1	462	458
1	7	2038	1927	3	4	2170	2171	5	2	519	508
1	8	711	667	3	5	1050	982	5	3	1145	1121
1	9	209	202	3	6	2748	2847	5	4	758	757
1	11	893	885	3	7	1332	1329	5	5	1780	1801
1	12	1067	1010	3	8	910	907	5	6	1060	1051
1	13	2022	1772	3	9	2400	2452	5	7	1266	1267
1	14	806	677	3	10	2996	3177	5	8	250	254
1	15	930	836	3	11	1662	1652	5	9	101	99
1	16	424	375	3	12	1503	1490	5	10	191	177
1	17	554	506	3	13	737	716	5	11	624	634
1	18	241	232	3	15	203	202	5	12	590	595
1	19	513	479	3	16	720	718	5	13	1202	1270
1	20	336	318	3	17	1434	1420	5	14	586	609
1	21	602	556	3	18	1896	2081	5	15	568	601
1	22	403	411	3	19	1752	1552	5	16	140	154
1	23	1021	1014	3	20	489	448	5	17	401	422
1	24	574	555	3	21	185	181	5	18	295	300
1	25	449	435	3	22	637	649	5	19	367	371
1	27	231	194	3	23	504	478	5	21	336	361

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
5	22	325	389	8	9	207	220	12	3	186	176
5	23	663	761	8	11	100	99	12	5	181	185
5	24	377	357	8	13	399	412	12	7	260	254
5	25	374	357	8	14	426	437	12	8	240	232
6	2	74	75	8	20	395	404	13	3	247	237
6	3	65	69	8	21	281	258	13	4	298	281
6	5	196	202	9	1	1287	1285	13	5	517	483
6	6	215	232	9	2	1133	1136				
6	7	424	450	9	3	425	422				
6	8	653	680	9	4	1147	1165		H =	2	
6	10	114	113	9	5	163	146				
6	12	106	109	9	6	1168	1203	0	0	269	273
6	13	208	219	9	7	538	534	0	1	2955	2992
6	14	561	582	9	8	501	504	0	2	2196	2532
6	15	280	286	9	9	1051	1060	0	3	756	675
6	16	252	252	9	10	1493	1532	0	4	2218	2169
6	18	434	469	9	11	730	723	0	5	1284	1096
6	19	251	270	9	12	789	810	0	6	2863	2931
6	20	188	206	9	13	476	472	0	7	1497	1406
6	24	392	405	9	14	500	530	0	8	887	804
7	0	199	205	9	16	475	488	0	9	2675	2419
7	1	212	213	9	17	710	727	0	10	3553	3281
7	2	120	106	9	18	1117	1153	0	11	1877	1571
7	3	892	883	9	19	822	816	0	12	1819	1548
7	4	867	879	10	1	203	200	0	13	899	760
7	5	1409	1423	10	2	103	104	0	14	1241	1057
7	6	619	607	10	3	256	252	0	15	234	216
7	7	862	866	10	5	253	245	0	16	792	701
7	8	297	304	10	7	296	291	0	17	1620	1491
7	9	147	150	10	8	218	227	0	18	2362	2205
7	10	191	196	10	11	152	143	0	19	1306	1643
7	11	460	458	10	14	373	382	0	20	376	360
7	12	648	677	10	15	315	322	0	21	234	247
7	13	1103	1135	10	17	201	196	0	22	673	671
7	14	360	365	11	1	145	139	0	23	513	496
7	15	446	457	11	2	245	225	0	24	866	844
7	16	252	256	11	3	279	272	0	25	564	538
7	19	206	220	11	4	124	120	0	26	1254	1209
7	20	191	211	11	5	602	588	0	27	640	682
7	21	282	322	11	6	492	468	1	2	523	543
7	22	192	199	11	7	417	403	1	3	550	524
7	23	668	692	11	11	199	190	1	4	329	336
8	1	358	360	11	12	126	118	1	5	178	168
8	2	405	417	11	13	474	464	1	7	332	335
8	5	143	140	11	14	312	293	1	8	468	475
8	7	139	136	11	15	183	165	1	10	191	191
8	8	127	132	12	1	104	100	1	11	315	281

K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC	K	L	10FO	10FC
1	12	340	309	3	15	262	273	5	20	584	623
1	13	226	227	3	16	245	254	5	21	273	310
1	14	733	680	3	17	183	204	5	22	186	191
1	15	398	361	3	18	687	626	5	24	227	230
1	16	138	130	3	19	454	423	6	0	415	431
1	18	487	455	3	20	456	442	6	1	2293	2324
1	19	612	558	3	22	241	238	6	2	1827	1846
1	20	861	803	3	23	240	243	6	3	408	410
1	21	248	238	3	24	472	459	6	4	1614	1664
1	22	303	284	3	25	331	310	6	6	1491	1501
1	23	244	251	3	26	492	461	6	7	416	419
1	24	392	388	4	0	304	321	6	8	772	773
1	25	174	176	4	1	420	424	6	9	1359	1432
1	26	388	391	4	2	280	266	6	10	2127	2236
2	0	1033	1020	4	3	1273	1243	6	11	1217	1277
2	1	1712	1698	4	4	1177	1187	6	12	853	889
2	2	997	955	4	5	1850	1878	6	13	235	234
2	3	1568	1561	4	6	905	903	6	14	848	884
2	4	893	924	4	7	1224	1236	6	15	200	202
2	5	1291	1343	4	8	467	475	6	16	542	560
2	6	581	635	4	10	113	117	6	17	852	899
2	7	574	610	4	11	623	630	6	18	1374	1480
2	10	168	161	4	12	869	854	6	19	883	915
2	11	1238	1189	4	13	1313	1373	6	20	415	463
2	12	1210	1164	4	14	477	501	6	22	428	454
2	13	2024	2071	4	15	599	627	6	23	380	380
2	14	954	965	4	16	323	341	7	1	238	238
2	15	1043	978	4	17	362	361	7	3	246	244
2	16	353	323	4	19	387	402	7	5	337	337
2	17	318	304	4	20	289	319	7	7	397	417
2	21	269	271	4	21	417	453	7	8	458	485
2	22	379	381	4	22	297	332	7	10	211	207
2	23	988	943	4	23	784	827	7	11	281	293
2	24	576	552	4	24	513	481	7	12	135	134
2	25	599	574	4	25	295	259	7	14	356	375
3	1	301	325	5	1	384	390	7	15	283	290
3	2	255	272	5	2	586	602	7	17	209	211
3	3	100	105	5	3	210	212	7	18	170	195
3	4	307	298	5	4	279	288	7	19	417	443
3	5	111	107	5	5	136	136	7	20	469	520
3	6	386	422	5	8	206	210	8	1	350	348
3	7	607	635	5	9	136	150	8	2	367	364
3	8	1033	1065	5	12	260	290	8	3	550	551
3	9	359	356	5	13	369	404	8	4	333	345
3	11	131	134	5	14	517	551	8	5	919	921
3	13	187	200	5	18	340	350	8	6	651	662
3	14	446	470	5	19	271	289	8	7	606	615

K	L	10FO	10FC
8	10	135	130
8	11	404	403
8	12	323	332
8	13	773	791
8	14	443	449
8	15	322	325
8	17	220	226
8	18	231	229
8	19	195	203
9	2	123	123
9	3	167	173
9	5	123	126
9	7	323	333
9	8	368	358
9	10	162	175
9	14	284	295
9	15	243	244
9	16	163	151
9	18	330	349
9	19	273	288
10	0	201	183
10	1	195	176
10	3	464	452
10	4	467	467
10	5	677	672
10	6	244	246
10	7	303	298
10	9	261	258
10	10	163	162
10	11	307	295
10	12	504	495
10	13	801	791
10	14	260	259
10	15	280	265
11	1	286	275
11	2	161	159
11	3	157	143
11	5	102	86
11	7	133	118
11	8	170	173
11	9	249	238
11	12	194	186
11	13	302	285
11	14	156	150
12	1	766	749
12	2	668	658
12	3	349	331

K	L	10FO	10FC
12	4	785	769
12	6	676	654
12	7	202	173
12	8	378	377
12	9	565	537
12	10	953	940

H = 3

K	L	10FO	10FC
0	3	292	336
0	7	930	812
0	9	724	620
0	11	195	192
0	13	784	738
0	15	581	510
0	17	475	450
0	19	549	513
0	23	418	404
0	25	775	722
1	0	294	321
1	2	1078	1092
1	4	1783	1809
1	6	2097	2196
1	8	603	564
1	10	281	312
1	12	1428	1395
1	14	1459	1370
1	16	415	392
1	18	613	538
1	20	340	322
1	22	911	853
1	24	839	808
2	1	376	380
2	2	70	69
2	3	375	399
2	7	134	130
2	9	363	374
2	11	200	234
2	13	756	776
2	15	371	396
2	19	688	642
2	21	545	528
2	23	240	231
2	25	524	526
3	1	105	81
3	2	1018	1006

K	L	10FO	10FC
3	4	1321	1340
3	6	505	516
3	8	2816	2992
3	10	947	969
3	12	1384	1483
3	14	1524	1676
3	16	1965	1891
3	18	574	565
3	20	1834	1822
3	22	1255	1236
3	24	895	782
4	1	393	403
4	5	101	89
4	9	611	637
4	13	800	859
4	15	236	232
4	19	350	373
4	21	457	514
5	0	457	461
5	2	592	599
5	4	1372	1395
5	6	1425	1455
5	8	521	517
5	10	89	81
5	12	1085	1146
5	14	848	885
5	16	396	419
5	18	356	361
5	20	256	293
5	22	488	519
6	2	95	93
6	3	124	135
6	7	440	468
6	9	358	373
6	11	298	307
6	13	478	516
6	15	298	293
6	17	374	392
6	19	363	387
7	2	597	608
7	4	942	968
7	6	1278	1329
7	10	110	96
7	12	834	841
7	14	893	931
7	18	272	295
8	1	109	95

K	L	10FO	10FC
8	3	336	344
8	5	295	300
8	7	220	229
8	11	308	308
8	13	330	340
8	15	260	259
8	17	201	200
8	19	420	437
9	0	2542	2588
9	1	113	43
9	2	600	612
9	4	505	505
9	6	416	426
9	8	1420	1450
9	10	371	358
9	12	728	729
9	14	1073	1079
9	16	991	1047
10	1	267	254
10	3	100	100
10	5	158	156
10	9	316	321
10	11	282	283
10	13	418	422
11	0	267	250
11	4	546	519
11	6	460	451
11	8	210	201
11	10	155	145
12	1	177	166
12	3	156	144

H = 4

K	L	10FO	10FC
0	0	330	323
0	1	2489	2592
0	3	308	303
0	4	1429	1632
0	6	1635	1571
0	7	495	454
0	8	980	866
0	9	1727	1584
0	10	2442	2229
0	11	1586	1427
0	12	974	858
0	14	1101	1018
0	15	367	304
0	16	666	582
0	17	1080	986
0	18	1594	1455
0	19	1104	980
0	20	586	523
0	23	410	369
1	1	74	66
1	2	338	348
1	3	275	288
1	5	134	127
1	8	327	329
1	10	168	179
1	12	300	300
1	13	165	150
1	14	557	481
1	15	323	284
1	18	313	311
1	19	435	420
1	20	680	610
1	22	274	258
1	23	201	187
2	0	232	231
2	1	352	353
2	2	313	315
2	3	930	960
2	4	701	710
2	5	1484	1571
2	6	745	752
2	7	1034	1071
2	8	244	259
2	11	478	497
2	12	506	535
2	13	980	1066
2	14	488	437
2	15	603	528
2	16	233	222
2	17	427	405
2	18	242	237
2	19	384	385
2	20	194	186
2	21	383	393
2	22	283	258
2	23	701	658
3	1	78	73
3	3	90	91
3	6	272	292
3	7	336	355
3	8	535	606
3	10	169	185
3	13	166	172
3	14	536	539
3	15	197	182
3	16	304	300
3	17	200	210
3	18	507	552
3	19	248	267
3	20	234	234
4	0	458	493
4	1	631	663
4	2	260	269
4	3	865	900
4	4	656	677
4	5	1031	1065
4	6	347	342
4	7	467	498
4	8	151	159
4	9	165	159
4	11	620	655
4	12	742	760
4	13	1298	1337
4	14	446	454
4	15	562	601
4	16	222	240
4	17	186	173
4	21	224	229
5	1	149	155
5	2	263	265
5	8	260	277
5	9	235	246
5	10	194	207
5	12	318	318
5	13	274	276
5	14	314	323
5	19	187	210
5	20	512	524
5	21	240	243
6	1	1362	1415
6	2	1212	1230
6	3	344	343
6	4	1110	1150
6	5	202	197
6	6	1208	1267
6	7	590	606

K	L	10FO	10FC
6	8	530	544
6	9	1131	1177
6	10	1506	1562
6	11	789	801
6	12	790	811
6	13	426	441
6	14	574	621
6	16	463	480
6	17	768	794
6	18	1164	1197
6	19	904	908
6	20	338	351
7	1	152	158
7	2	248	248
7	3	309	325
7	4	123	120
7	5	165	168
7	7	270	270
7	8	182	177
7	9	99	100
7	14	375	390
7	15	318	340
7	18	241	213
8	0	123	121
8	1	343	341
8	2	282	281
8	3	425	429
8	4	197	182
8	5	635	637
8	6	410	401
8	7	352	363
8	9	116	98
8	10	111	109
8	11	342	342
8	12	275	270
8	13	719	718
8	14	359	350
8	15	310	303
9	4	136	134
9	5	177	176
9	7	273	270
9	8	387	404
9	14	218	218
10	0	111	109
10	3	334	335
10	4	364	356
10	5	595	587
10	6	201	187
10	7	301	286
10	9	197	193
10	10	163	155
10	11	183	186
11	1	245	229
11	2	267	253
11	5	134	123

H = 5

K	L	10FO	10FC
0	6	210	213
0	7	310	302
0	8	556	521
0	9	260	223
0	11	211	189
0	14	386	365
0	15	298	252
0	16	260	230
0	17	190	172
0	18	463	412
0	19	281	254
1	0	252	261
1	1	332	344
1	2	228	236
1	3	703	728
1	4	680	722
1	5	1094	1145
1	6	557	589
1	7	717	753
1	8	235	254
1	11	575	497
1	12	725	617
1	13	991	939
1	14	427	410
1	15	443	420
1	16	238	227
1	17	215	207
1	19	290	237
1	20	223	177
1	21	306	285
2	1	123	133
2	2	171	179
2	8	259	269
2	10	196	192
2	11	195	182
2	12	317	326
2	13	241	255
2	14	436	447
2	19	264	239
2	20	461	397
3	0	149	168
3	1	1358	1409
3	2	1290	1334
3	3	282	281
3	4	1133	1202
3	5	243	243
3	6	1241	1308
3	7	608	625
3	8	438	441
3	9	1130	1170
3	10	1677	1766
3	11	814	840
3	12	768	809
3	13	342	352
3	14	600	625
3	16	439	475
3	17	670	764
3	18	1258	1301
3	19	930	854
3	20	348	315
4	2	153	166
4	3	238	259
4	5	179	183
4	7	233	235
4	8	255	259
4	11	194	218
4	14	389	406
4	15	244	257
4	18	215	199
4	19	306	325
5	0	99	102
5	1	286	288
5	2	262	271
5	3	493	500
5	4	407	425
5	5	815	841
5	6	529	550
5	7	566	573
5	11	388	388
5	12	368	383
5	13	674	704
5	14	359	390

K	L	10FO	10FC
5	15	268	292
6	1	160	158
6	4	180	165
6	7	258	259
6	8	384	392
6	9	136	142
6	12	121	130
6	14	241	265
6	15	187	190
7	0	168	171
7	1	136	126
7	3	441	439
7	4	485	507
7	5	729	742
7	6	303	308
7	7	438	425
7	8	153	149
7	9	147	142
7	10	124	127
7	11	261	257
7	12	456	459
7	13	649	653
7	14	216	221
7	15	259	262
8	1	258	252
8	2	225	219
8	9	134	129
8	12	163	153
8	13	265	265
9	1	765	745
9	2	740	715
9	3	300	284
9	4	787	773
9	6	731	729
9	7	279	264
9	8	353	344
9	9	618	605
10	3	158	153

H = 6

K	L	10FO	10FC
0	0	2687	2759
0	2	576	559
0	4	669	740
0	6	311	310
0	8	1808	1709
0	10	448	414
0	12	955	814
0	14	1283	1095
1	1	275	266
1	3	157	142
1	9	223	242
1	13	451	430
2	0	468	495
2	2	564	580
2	4	711	729
2	6	742	738
2	12	812	888
2	14	831	814
2	16	258	229
3	2	115	121
3	3	101	88
3	7	383	409
3	9	284	281
3	11	168	177
3	13	268	274
3	15	219	195
4	2	429	435
4	4	699	706
4	6	956	990
4	12	543	549
4	14	678	665
5	1	183	166
5	3	332	316
5	7	125	121
5	13	271	272
6	0	2266	2261
6	2	406	406
6	4	426	426
6	6	478	487
6	8	1155	1132
6	10	301	306
6	12	754	748
7	3	113	122
7	9	329	342
8	0	198	206
8	2	131	128
8	4	502	481

H = 7

K	L	10FO	10FC
0	8	476	382
1	0	158	157
1	1	191	186
1	3	425	421
1	6	273	269
1	7	437	416
1	11	301	276
2	2	194	203
3	0	87	95
3	1	894	891
3	2	801	780
3	3	230	226
3	4	778	750
3	6	825	821
3	7	353	336
3	8	395	402
3	9	735	752
4	3	112	119
4	5	147	150
4	7	145	142
5	1	154	147
5	2	108	113
5	3	308	308
5	4	204	188