AM-86-293

Refinement of the crystal structure of krausite:....

Herta Effenberger, Franz Pertlik and Josef Zemann

Table 1.

Am. Min., 71, 1-2 , 1-4

Table 1

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
1	0	0	348	366	2	0	0	56	44	3	0	0	62	-65	4	0	0	486	-492	5	0	0	564	-557
6	0	0	269	-272	7	0	0	20	-6	8	0	0	109	-108	9	0	0	117	104	1	1	0	219	-227
2	1	0	1147	-1160	3	1	0	531	-533	4	1	0	311	-307	5	1	0	105	103	6	1	0	78	69
7	1	0	96	81	8	1	0	122	126	9	1	0	44	-15	0	2	0	1180	-1198	1	2	0	25	11
2	2	0	306	-303	3	2	0	64	59	4	2	0	414	417	5	2	0	141	135	6	2	0	9	-13
7	2	0	74	73	8	2	0	181	185	1	3	0	165	161	2	3	0	707	694	3	3	0	243	247
4	3	0	181	183	5	3	0	40	-31	6	3	0	37	-55	7	3	0	91	-77	8	3	0	79	-61
0	4	0	1082	1075	1	4	0	166	167	2	4	0	40	36	3	4	0	15	-25	4	4	0	303	-298
5	4	0	294	-298	6	4	0	126	-137	1	5	0	70	-62	2	5	0	498	-508	3	5	0	254	-253
4	5	0	69	-109	5	5	0	54	53	0	6	0	429	-436	1	6	0	49	-53	-9	0	1	138	-127
-8	0	1	304	-313	-7	0	1	56	-46	-6	0	1	32	27	-5	0	1	170	161	-4	0	1	471	478
-3	0	1	411	-380	-2	0	1	238	228	-1	0	1	546	554	0	0	1	119	115	1	0	1	59	39
2	0	1	42	36	3	0	1	254	222	4	0	1	891	-872	5	0	1	41	39	6	0	1	52	-57
7	0	1	167	161	8	0	1	177	174	-9	1	1	19	-27	-8	1	1	115	119	-7	1	1	107	103
-6	1	1	644	646	-5	1	1	123	-114	-4	1	1	399	392	-3	1	1	32	34	-2	1	1	458	-468
-1	1	1	248	227	0	1	1	188	-185	1	1	1	697	-704	2	1	1	488	-480	3	1	1	160	161
4	1	1	67	-62	5	1	1	213	216	6	1	1	516	514	7	1	1	104	-103	8	1	1	96	101
-8	2	1	474	481	-7	2	1	69	73	-6	2	1	61	-70	-5	2	1	11	-9	-4	2	1	465	-463
-3	2	1	317	-316	-2	2	1	621	-617	-1	2	1	170	-182	0	2	1	58	-22	1	2	1	136	-122
2	2	1	453	442	3	2	1	411	413	4	2	1	706	702	5	2	1	225	-227	6	2	1	27	39
7	2	1	199	-200	8	2	1	327	-323	-8	3	1	54	-84	-7	3	1	89	-100	-6	3	1	558	-558
-5	3	1	20	47	-4	3	1	227	-224	-3	3	1	38	-40	-2	3	1	243	246	-1	3	1	81	-81
0	3	1	280	278	1	3	1	494	497	2	3	1	322	322	3	3	1	107	-98	4	3	1	64	48
5	3	1	239	-235	6	3	1	483	-477	7	3	1	96	84	-7	4	1	0	-8	-6	4	1	34	19
-5	4	1	54	84	-4	4	1	301	296	-3	4	1	166	-174	-2	4	1	113	119	-1	4	1	262	264
0	4	1	68	88	1	4	1	32	29	2	4	1	18	-11	3	4	1	65	-40	4	4	1	511	-511
5	4	1	41	25	6	4	1	49	-36	-5	5	1	93	-93	-4	5	1	138	137	-3	5	1	0	54
-2	5	1	164	-173	-1	5	1	59	105	0	5	1	0	-23	1	5	1	255	-254	2	5	1	274	-272
3	5	1	53	37	4	5	1	62	-25	5	5	1	124	113	-1	6	1	126	-114	0	6	1	0	-38
1	6	1	0	-39	-9	0	2	149	-161	-8	0	2	59	16	-7	0	2	166	-162	-6	0	2	487	480
-5	0	2	603	603	-4	0	2	249	244	-3	0	2	67	-85	-2	0	2	101	-99	-1	0	2	680	-691
0	0	2	809	-806	1	0	2	560	560	2	0	2	238	-237	3	0	2	165	154	4	0	2	218	210
5	0	2	89	-90	6	0	2	292	304	7	0	2	69	77	8	0	2	151	147	-9	1	2	101	-104
-8	1	2	248	239	-7	1	2	337	337	-6	1	2	159	162	-5	1	2	44	54	-4	1	2	389	-384
-3	1	2	94	-129	-2	1	2	714	-697	-1	1	2	472	472	0	1	2	223	-220	1	1	2	294	293
2	1	2	274	280	3	1	2	287	-281	4	1	2	136	144	5	1	2	165	165	6	1	2	84	76
7	1	2	70	-41	8	1	2	58	-62	-8	2	2	39	-53	-7	2	2	135	133	-6	2	2	141	-134
-5	2	2	205	-201	-4	2	2	322	-319	-3	2	2	108	-106	-2	2	2	170	169	-1	2	2	187	202
0	2	2	106	-79	1	2	2	505	-493	2	2	2	556	549	3	2	2	60	-42	4	2	2	150	-155
5	2	2	325	331	6	2	2	121	-115	7	2	2	190	-183	8	2	2	233	-235	-8	3	2	157	-166

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-7	3	2	282	-289	-6	3	2	146	-145	-5	3	2	47	-39	-4	3	2	239	240	-3	3	2	92	78
-2	3	2	429	430	-1	3	2	201	-195	0	3	2	169	169	1	3	2	221	-223	2	3	2	180	-183
3	3	2	286	282	4	3	2	130	-118	5	3	2	172	-165	6	3	2	49	-66	7	3	2	23	27
-7	4	2	95	-121	-6	4	2	286	283	-5	4	2	373	377	-4	4	2	183	185	-3	4	2	9	-31
-2	4	2	55	-47	-1	4	2	335	-329	0	4	2	392	-395	1	4	2	220	224	2	4	2	148	-136
3	4	2	69	66	4	4	2	126	125	5	4	2	75	-67	6	4	2	177	171	-5	5	2	39	51
-4	5	2	165	-175	-3	5	2	229	-222	-2	5	2	306	-309	-1	5	2	157	165	0	5	2	80	-68
1	5	2	122	126	2	5	2	186	186	3	5	2	107	-102	4	5	2	96	94	0	6	2	67	75
-9	0	3	17	-31	-8	0	3	0	13	-7	0	3	205	-213	-6	0	3	403	402	-5	0	3	49	82
-4	0	3	68	-44	-3	0	3	586	569	-2	0	3	319	-331	-1	0	3	671	-681	0	0	3	387	-387
1	0	3	16	-26	2	0	3	229	234	3	0	3	261	275	4	0	3	370	375	5	0	3	52	-61
6	0	3	222	227	7	0	3	180	-184	8	0	3	43	-69	-9	1	3	32	33	-8	1	3	22	12
-7	1	3	0	-33	-6	1	3	52	-48	-5	1	3	243	234	-4	1	3	492	-496	-3	1	3	187	-191
-2	1	3	118	-119	-1	1	3	217	-216	0	1	3	863	861	1	1	3	125	147	2	1	3	394	402
3	1	3	53	-45	4	1	3	66	-52	5	1	3	424	-426	6	1	3	124	-108	7	1	3	64	56
8	1	3	202	-197	-8	2	3	191	-200	-7	2	3	172	177	-6	2	3	238	-238	-5	2	3	101	-103
-4	2	3	160	158	-3	2	3	117	111	-2	2	3	586	589	-1	2	3	166	177	0	2	3	80	75
1	2	3	0	9	2	2	3	543	-536	3	2	3	572	-575	4	2	3	196	-197	5	2	3	263	271
6	2	3	170	-171	7	2	3	192	198	-8	3	3	30	-21	-7	3	3	0	35	-6	3	3	78	95
-5	3	3	129	-129	-4	3	3	359	365	-3	3	3	118	122	-2	3	3	53	69	-1	3	3	75	67
0	3	3	686	-685	1	3	3	195	-195	2	3	3	201	-204	3	3	3	71	70	4	3	3	36	44
5	3	3	362	371	6	3	3	118	124	7	3	3	84	-64	-7	4	3	124	-133	-6	4	3	247	251
-5	4	3	46	50	-4	4	3	29	-32	-3	4	3	231	240	-2	4	3	291	-288	-1	4	3	323	-325
0	4	3	155	-154	1	4	3	0	2	2	4	3	186	178	3	4	3	230	224	4	4	3	213	204
5	4	3	48	-57	-5	5	3	126	145	-4	5	3	269	-285	-3	5	3	139	-125	-2	5	3	53	-27
-1	5	3	82	-89	0	5	3	326	314	1	5	3	153	155	2	5	3	177	176	3	5	3	39	-28
4	5	3	59	-43	-9	0	4	0	18	-8	0	4	0	17	-7	0	4	0	20	-6	0	4	728	-723
-5	0	4	237	-237	-4	0	4	178	-175	-3	0	4	197	181	-2	0	4	162	-169	-1	0	4	368	362
0	0	4	577	566	1	0	4	364	369	2	0	4	407	412	3	0	4	0	26	4	0	4	153	146
5	0	4	201	-209	6	0	4	538	-533	7	0	4	99	-92	-9	1	4	0	-16	-8	1	4	441	-453
-7	1	4	132	-121	-6	1	4	41	27	-5	1	4	95	-96	-4	1	4	276	274	-3	1	4	363	356
-2	1	4	367	357	-1	1	4	26	-14	0	1	4	597	597	1	1	4	64	-58	2	1	4	101	-102
3	1	4	144	-149	4	1	4	759	-762	5	1	4	105	-93	6	1	4	142	-139	7	1	4	70	56
-8	2	4	48	-19	-7	2	4	17	-34	-6	2	4	375	379	-5	2	4	3	-31	-4	2	4	297	300
-3	2	4	98	93	-2	2	4	121	122	-1	2	4	38	-44	0	2	4	45	30	1	2	4	306	-310
2	2	4	722	-722	3	2	4	135	-134	4	2	4	139	-147	5	2	4	26	28	6	2	4	420	417
7	2	4	214	207	-8	3	4	343	355	-7	3	4	115	113	-6	3	4	0	8	-5	3	4	53	51
-4	3	4	202	-205	-3	3	4	171	-172	-2	3	4	174	-178	-1	3	4	49	-54	0	3	4	449	-450
1	3	4	43	40	2	3	4	16	9	3	3	4	63	50	4	3	4	602	603	5	3	4	131	128
6	3	4	114	127	-6	4	4	445	-458	-5	4	4	174	-152	-4	4	4	63	-65	-3	4	4	63	78

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
-2	4	4	76	-66	-1	4	4	169	173	0	4	4	199	205	1	4	4	155	146	2	4	4	308	310
3	4	4	65	33	4	4	4	85	97	5	4	4	124	-121	-4	5	4	165	175	-3	5	4	206	196
-2	5	4	121	115	-1	5	4	47	-24	0	5	4	251	239	1	5	4	27	-23	2	5	4	0	-29
3	5	4	126	-101	-9	0	5	119	127	-8	0	5	63	-52	-7	0	5	315	-314	-6	0	5	554	-559
-5	0	5	61	25	-4	0	5	55	-42	-3	0	5	0	13	-2	0	5	1028	1011	-1	0	5	268	265
0	0	5	372	365	1	0	5	104	-99	2	0	5	96	-93	3	0	5	10	-47	4	0	5	121	-123
5	0	5	276	-276	6	0	5	210	-207	7	0	5	57	80	-8	1	5	145	-143	-7	1	5	68	-61
-6	1	5	105	106	-5	1	5	385	387	-4	1	5	722	709	-3	1	5	114	114	-2	1	5	44	40
-1	1	5	172	-173	0	1	5	565	-569	1	1	5	118	-124	2	1	5	334	-334	3	1	5	10	45
4	1	5	66	-76	5	1	5	36	33	6	1	5	0	-12	7	1	5	117	113	-8	2	5	201	209
-7	2	5	240	236	-6	2	5	335	327	-5	2	5	49	-45	-4	2	5	65	-62	-3	2	5	370	-378
-2	2	5	934	-932	-1	2	5	139	131	0	2	5	91	-98	1	2	5	71	72	2	2	5	265	266
3	2	5	193	198	4	2	5	30	-31	5	2	5	74	66	6	2	5	169	170	-7	3	5	65	40
-6	3	5	113	-123	-5	3	5	326	-329	-4	3	5	511	-518	-3	3	5	0	-36	-2	3	5	16	-46
-1	3	5	156	152	0	3	5	491	500	1	3	5	85	96	2	3	5	180	180	3	3	5	23	-40
4	3	5	89	61	5	3	5	22	-50	-6	4	5	346	-361	-5	4	5	41	6	-4	4	5	0	-28
-3	4	5	47	59	-2	4	5	562	573	-1	4	5	126	124	0	4	5	186	182	1	4	5	0	-42
2	4	5	98	-89	3	4	5	54	-33	4	4	5	69	-73	-4	5	5	394	406	-3	5	5	70	62
-2	5	5	0	33	-1	5	5	74	-71	0	5	5	271	-265	1	5	5	0	-47	2	5	5	147	-159
-8	0	6	55	-40	-7	0	6	27	33	-6	0	6	271	269	-5	0	6	91	-85	-4	0	6	220	227
-3	0	6	87	85	-2	0	6	240	241	-1	0	6	94	-88	0	0	6	224	-218	1	0	6	173	-168
2	0	6	307	-306	3	0	6	162	162	4	0	6	91	-92	5	0	6	262	257	6	0	6	125	126
-8	1	6	262	259	-7	1	6	144	-153	-6	1	6	281	286	-5	1	6	99	92	-4	1	6	33	-52
-3	1	6	125	122	-2	1	6	134	-133	-1	1	6	427	-425	0	1	6	326	-322	1	1	6	90	88
2	1	6	41	-40	3	1	6	253	254	4	1	6	311	311	5	1	6	151	-169	6	1	6	146	146
-8	2	6	89	79	-7	2	6	10	6	-6	2	6	69	-42	-5	2	6	210	215	-4	2	6	399	-408
-3	2	6	330	-332	-2	2	6	227	-228	-1	2	6	60	-57	0	2	6	37	-34	1	2	6	278	274
2	2	6	537	550	3	2	6	71	-72	4	2	6	21	66	5	2	6	162	-165	-7	3	6	92	110
-6	3	6	250	-254	-5	3	6	90	-90	-4	3	6	10	13	-3	3	6	153	-156	-2	3	6	106	102
-1	3	6	391	395	0	3	6	302	304	1	3	6	64	-67	2	3	6	65	47	3	3	6	189	-189
4	3	6	263	-267	-5	4	6	0	-80	-4	4	6	147	150	-3	4	6	129	112	-2	4	6	137	156
-1	4	6	34	-25	0	4	6	116	-114	1	4	6	185	-165	2	4	6	223	-221	3	4	6	115	104
-2	5	6	71	-90	-1	5	6	223	-212	0	5	6	170	-172	-8	0	7	145	156	-7	0	7	231	233
-6	0	7	213	214	-5	0	7	0	23	-4	0	7	19	48	-3	0	7	91	-92	-2	0	7	86	-83
-1	0	7	126	123	0	0	7	504	-504	1	0	7	0	29	2	0	7	74	-92	3	0	7	95	-100
4	0	7	279	272	5	0	7	272	270	-8	1	7	143	143	-7	1	7	4	-2	-6	1	7	146	-145
-5	1	7	137	-124	-4	1	7	184	-177	-3	1	7	163	161	-2	1	7	245	-246	-1	1	7	100	107
0	1	7	0	20	1	1	7	128	-131	2	1	7	219	223	3	1	7	202	193	4	1	7	130	132
5	1	7	7	-37	-7	2	7	125	-131	-6	2	7	2	-22	-5	2	7	52	24	-4	2	7	23	14
-3	2	7	281	282	-2	2	7	51	68	-1	2	7	390	-393	0	2	7	289	285	1	2	7	0	3

--- Observed and Calculated Structure Factors ---

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
2	2	7	0	15	3	2	7	54	36	4	2	7	137	-124	-6	3	7	150	155	-5	3	7	143	138
-4	3	7	102	106	-3	3	7	175	-168	-2	3	7	186	186	-1	3	7	117	-107	0	3	7	0	-53
1	3	7	112	120	2	3	7	164	-145	3	3	7	144	-137	-4	4	7	0	22	-3	4	7	99	-92
-2	4	7	58	-62	-1	4	7	99	96	0	4	7	306	-296	1	4	7	36	11	2	4	7	49	-58
-7	0	8	77	60	-6	0	8	0	-31	-5	0	8	62	-58	-4	0	8	297	-299	-3	0	8	86	-77
-2	0	8	144	-141	-1	0	8	0	32	0	0	8	276	277	1	0	8	232	230	2	0	8	69	28
3	0	8	78	-98	4	0	8	242	255	-7	1	8	0	35	-6	1	8	351	-361	-5	1	8	78	-54
-4	1	8	154	-151	-3	1	8	28	49	-2	1	8	452	457	-1	1	8	178	174	0	1	8	128	125
1	1	8	43	3	2	1	8	0	28	3	1	8	254	-253	4	1	8	0	-12	-6	2	8	74	-86
-5	2	8	16	12	-4	2	8	474	472	-3	2	8	250	248	-2	2	8	112	114	-1	2	8	0	3
0	2	8	154	-162	1	2	8	307	-308	2	2	8	204	-208	3	2	8	58	50	-5	3	8	61	54
-4	3	8	134	121	-3	3	8	32	-12	-2	3	8	375	-368	-1	3	8	206	-190	0	3	8	120	-121
1	3	8	16	7	2	3	8	51	-28	-2	4	8	87	-85	-1	4	8	0	25	-6	0	9	184	-210
-5	0	9	71	-72	-4	0	9	127	-136	-3	0	9	40	-29	-2	0	9	70	60	-1	0	9	396	391
0	0	9	468	461	1	0	9	0	5	2	0	9	137	143	3	0	9	119	-112	-6	1	9	2	45
-5	1	9	0	50	-4	1	9	136	142	-3	1	9	132	135	-2	1	9	361	362	-1	1	9	58	-32
0	1	9	80	90	1	1	9	189	-188	2	1	9	447	-444	3	1	9	92	-80	-5	2	9	78	44
-4	2	9	130	122	-3	2	9	61	-50	-2	2	9	0	7	-1	2	9	152	-148	0	2	9	340	-339
1	2	9	3	-51	2	2	9	127	-123	-3	3	9	94	-85	-2	3	9	300	-299	-1	3	9	16	21
0	3	9	54	-61	-5	0	10	148	148	-4	0	10	227	210	-3	0	10	90	-88	-2	0	10	150	149
-1	0	10	50	-6	0	0	10	16	-27	1	0	10	79	65	-4	1	10	83	74	-3	1	10	92	-109
-2	1	10	155	-137	-1	1	10	48	50	0	1	10	155	-152	1	1	10	0	-40	-3	2	10	48	-38
-2	2	10	109	-106	-1	2	10	58	20															