

AM-88-386

Howlite, $\text{Ca}_2\text{SiB}_5\text{O}_9(\text{OH})_5$: Structure refinement and hydrogen bonding

Dana T. Griffen

For deposit: Table 1

American Mineralogist, 73, 9-10, 1138-1144. pp. 1-19

Table 1. Observed and calculated structure amplitudes for howlite.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87												PAGE 1			
H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	
2	0	0	529	537	4	2	0	553	531	7	4	0	86	77	
3	0	0	814	824	5	2	0	170	165	8	4	0	297	299	
4	0	0	958	952	6	2	0	436	451	9	4	0	109	108	
5	0	0	999	947	7	2	0	692	682	11	4	0	312	318	
6	0	0	1192	1155	8	2	0	128	144	12	4	0	138	133	
7	0	0	912	921	9	2	0	311	306	13	4	0	104	102	
8	0	0	148	159	10	4	0	217	212	15	4	0	71	68	
9	0	0	143	141	11	2	0	243	235	16	4	0	173	164	
10	0	0	227	227	12	2	0	107	110	17	4	0	106	98	
11	0	0	688	692	13	2	0	256	266	1	5	0	419	408	
13	0	0	583	588	14	2	0	212	206	2	5	0	974	981	
14	0	0	235	243	17	2	0	682	666	3	5	0	103	106	
15	0	0	228	230	18	2	0	155	156	4	5	0	172	160	
16	0	0	64	69	1	3	0	612	602	5	5	0	252	258	
17	0	0	165	165	2	3	0	481	488	6	5	0	518	527	
1	1	0	82	70	4	3	0	305	281	7	5	0	202	202	
2	2	1	0	132	145	5	3	0	365	369	8	5	0	85	86
3	3	1	0	133	124	7	3	0	81	79	9	5	0	343	345
4	4	1	0	1119	1112	8	3	0	239	245	10	5	0	99	99
5	5	1	0	63	44	9	3	0	175	183	11	5	0	97	98
6	6	1	0	886	874	10	3	0	230	239	13	5	0	606	600
7	7	1	0	512	495	12	3	0	179	186	14	5	0	104	99
8	8	1	0	567	567	13	3	0	318	319	15	5	0	224	221
9	9	1	0	45	59	14	3	0	187	184	16	5	0	227	220
10	10	1	0	366	365	15	3	0	153	155	17	5	0	279	273
11	11	1	0	154	153	0	4	0	173	183	2	6	0	71	66
12	12	1	0	550	563	16	3	0	188	186	0	6	0	801	786
13	13	1	0	437	438	18	3	0	145	145	1	4	0	114	103
14	14	1	0	153	153	0	4	0	173	183	2	6	0	71	66
15	15	0	360	356	1	4	0	703	678	3	6	0	233	243	
16	16	0	213	215	2	4	0	622	597	4	4	0	336	341	
17	17	1	0	140	137	3	4	0	42	24	5	6	0	273	274
18	18	0	285	287	4	4	0	71	67	6	6	0	894	896	
19	19	0	575	565	5	4	0	407	390	7	6	0	447	451	
20	20	0	357	352	6	4	0	108	104	8	6	0	56	54	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HUMLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/67

PAGE 2

	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	
4 12 0	0 60	48	7	1 1	1	-1 1	466	464	9	2 1	163	159	9	1 1	51	60
6 12 0	0 197	200	10	1 1	1	216	221	10	2 1	466	458	10	3 1	781	768	
8 12 0	0 111	118	-10	1 1	1	89	102	11	2 1	42	28	11	3 1	325	346	
1 13 0	0 132	125	11	1 1	1	83	90	12	2 1	189	198	12	3 1	289	288	
2 13 0	0 330	329	12	1 1	1	154	148	13	2 1	122	113	14	3 1	75	64	
3 13 0	0 145	136	13	1 1	1	106	97	14	2 1	407	408	15	3 1	120	126	
4 13 0	0 71	70	14	1 1	1	216	211	15	2 1	178	174	16	3 1	384	385	
5 13 0	0 318	315	15	1 1	1	129	126	17	2 1	311	307	17	3 1	56	52	
6 13 0	0 253	254	16	1 1	1	72	78	18	2 1	125	127	18	4 1	187	187	
7 13 0	0 122	124	17	1 1	1	164	155	18	3 1	317	315	17	4 1	165	165	
0 14 0	0 386	381	-18	2 1	1	153	151	17	3 1	393	391	16	4 1	398	401	
1 14 0	0 58	59	-17	2 1	1	183	187	-16	3 1	123	126	15	4 1	86	91	
-1 18 1	416	415	-16	2 1	1	169	176	-15	3 1	194	196	14	4 1	158	161	
-17 11 1	215	215	-15	2 1	1	106	108	-14	3 1	173	170	13	4 1	467	468	
-16 11 1	332	331	-14	2 1	1	401	401	-13	3 1	192	198	12	4 1	420	426	
-15 11 1	136	136	-13	2 1	1	71	72	-12	3 1	80	78	11	4 1	159	153	
-14 11 1	221	226	-11	2 1	1	187	182	-11	3 1	811	820	10	4 1	183	188	
-13 11 1	52	41	-10	2 1	1	381	384	-10	3 1	362	367	9	4 1	1123	1140	
-12 11 1	120	130	-8	2 1	1	83	82	-9	3 1	347	343	8	4 1	564	561	
-11 11 1	369	374	-7	2 1	1	591	587	-8	3 1	578	576	7	4 1	439	448	
-9 11 1	215	206	-6	2 1	1	365	346	-7	3 1	561	561	6	4 1	424	425	
-8 11 1	228	230	-5	2 1	1	416	408	-6	3 1	471	471	5	4 1	602	606	
-7 11 1	1072	1075	-4	2 1	1	491	468	-5	3 1	1295	1326	-1	4 1	452	423	
-6 11 1	354	342	-2	2 1	1	580	554	-4	3 1	88	84	0	4 1	534	533	
-5 11 1	211	217	-1	2 1	1	515	487	-2	3 1	122	113	1	4 1	698	684	
-4 11 1	322	311	0	2 1	1	53	53	-1	3 1	1170	1121	2	4 1	522	541	
-1 1 1	322	322	1	2 1	1	456	448	0	3 1	466	447	4	4 1	681	670	
0 1 1	847	844	2	2 1	1	169	160	1	3 1	1055	1039	7	4 1	72	69	
1 1 1	232	220	3	2 1	1	677	659	2	3 1	161	177	8	4 1	115	108	
2 1 1	100	103	4	2 1	1	368	391	4	3 1	163	174	9	4 1	205	215	
3 1 1	134	127	5	2 1	1	844	836	5	3 1	127	127	10	4 1	687	703	
4 1 1	580	575	6	2 1	1	78	95	6	3 1	391	391	11	4 1	195	198	
5 1 1	862	828	7	2 1	1	434	433	7	3 1	272	281	12	4 1	116	115	
6 1 1	267	276	8	2 1	1	750	762	8	3 1	385	389	14	4 1	586	599	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOOLITE, PST-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 3

	H	K	L	10FC	10FC	H	K	L	10FC	10FC	H	K	L	10FC	10FC			
-17	6	1	52	49	-11	7	1	109	109	114	104	8	9	1	78	76		
-14	6	1	134	139	-10	7	1	351	349	-1	447	441	9	9	1	146	146	
-12	6	1	225	229	-9	7	1	103	104	0	181	189	10	9	1	75	83	
-11	6	1	69	65	-8	7	1	61	71	1	66	79	12	9	1	225	218	
-10	6	1	300	295	-7	7	1	278	284	2	6	561	-13	10	1	230	228	
-9	6	1	113	119	-5	7	1	49	29	1	272	273	-11	10	1	123	123	
-8	6	1	40	42	-4	7	1	273	277	4	83	88	-10	10	1	105	105	
-7	6	1	423	423	-3	7	1	199	195	5	172	177	-9	10	1	293	293	
-6	6	1	349	364	-2	7	1	91	84	6	86	87	-7	10	1	131	141	
-5	6	1	337	345	-1	7	1	367	364	7	8	218	223	-5	10	1	119	117
-4	6	1	111	82	0	7	1	336	339	8	8	352	360	-4	10	1	70	69
-3	6	1	818	817	1	7	1	71	76	10	8	110	115	-3	10	1	418	412
-2	6	1	183	186	2	7	1	179	182	11	124	125	-1	10	1	67	55	
-1	6	1	679	664	3	7	1	371	368	13	135	137	0	10	1	416	413	
0	6	1	53	53	4	7	1	433	444	-14	9	306	305	1	10	1	311	315
1	6	1	190	193	6	7	1	164	171	-13	9	223	224	2	10	1	160	164
2	6	1	235	233	7	7	1	499	501	-12	9	111	119	3	10	1	444	446
3	6	1	389	395	8	7	1	79	74	-11	9	468	471	4	10	1	358	358
4	6	1	314	318	9	7	1	76	80	-9	9	225	219	5	10	1	284	288
5	6	1	329	320	10	7	1	52	54	-7	9	235	231	6	10	1	61	57
6	6	1	460	463	11	7	1	204	205	-6	7	90	89	8	10	1	327	327
7	6	1	662	670	14	7	1	151	150	-5	7	406	405	9	10	1	184	186
8	6	1	313	319	15	7	1	152	153	-4	8	346	350	10	10	1	490	488
9	6	1	361	369	15	8	1	112	108	-3	9	107	101	12	10	1	203	194
10	6	1	308	316	14	8	1	224	220	-2	9	67	69	-12	11	1	135	136
11	6	1	246	246	13	8	1	74	71	-1	9	264	264	-11	11	1	215	215
12	6	1	114	121	11	8	1	288	292	0	1	35	18	-10	11	1	68	76
13	6	1	337	334	9	8	1	141	146	1	9	84	87	-9	11	1	255	255
14	6	1	128	126	8	8	1	71	61	2	9	119	120	-8	11	1	264	264
15	6	1	264	257	7	8	1	287	287	2	9	154	156	-7	11	1	141	141
16	6	1	163	167	6	8	1	285	288	4	4	124	124	-6	11	1	165	160
17	6	1	187	186	5	8	1	492	496	15	9	56	31	-5	11	1	780	777
18	6	1	163	160	4	8	1	116	66	6	6	214	209	-4	11	1	117	117
19	6	1	230	232	3	8	1	234	233	7	7	168	174	-3	11	1	116	118
20	6	1	230	230	2	7	1	233	233	3	7	168	174	-3	11	1	244	244

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PGSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 3

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC		
-11	137	140	2	436	435	0	7	2	124	121	5	2	666	674		
-10	157	158	-6	220	219	1	7	2	172	174	6	3	569	572		
-9	186	197	-4	280	277	3	7	2	674	685	7	3	92	93		
-8	354	347	-3	6	248	4	7	2	125	130	8	2	260	261		
-7	85	86	-2	6	281	281	5	7	2	540	543	10	3	453	453	
-6	483	490	-1	6	2	782	767	6	7	2	164	169	11	2	461	461
-5	553	553	0	6	2	122	113	7	7	2	107	110	14	2	316	313
-4	335	328	1	6	2	429	429	8	7	2	169	175	14	2	212	207
-3	215	218	2	6	2	174	166	9	7	2	454	464	13	2	40	49
-2	287	273	3	6	2	115	118	10	7	2	192	194	12	2	370	364
0	266	285	4	6	2	285	288	11	7	2	61	61	11	2	71	69
1	629	638	5	6	2	584	589	12	7	2	85	75	10	2	103	95
2	151	142	6	6	2	151	142	13	7	2	143	141	9	2	92	99
3	460	460	7	6	2	195	194	15	7	2	124	126	8	2	223	223
4	247	258	8	6	2	87	92	-15	8	2	193	194	7	2	265	267
5	395	400	9	6	2	341	353	-14	8	2	53	54	6	2	74	72
6	619	634	10	6	2	362	359	-13	8	2	103	102	5	2	156	153
7	62	69	11	6	2	428	430	-12	8	2	296	298	4	2	179	178
8	219	212	12	6	2	368	371	-11	6	2	56	50	3	2	124	136
9	269	263	13	6	2	403	396	-10	8	2	129	126	-2	2	198	197
10	62	67	14	6	2	84	88	-9	8	2	175	173	-1	2	127	129
11	219	212	15	6	2	629	623	-8	6	2	228	230	0	2	412	409
12	178	182	16	6	2	75	64	-7	8	2	52	51	1	2	50	59
13	217	212	17	6	2	14	14	-13	7	2	129	126	-2	2	120	125
14	219	214	18	6	2	219	214	-14	7	2	623	627	-1	2	173	170
15	176	171	19	6	2	191	176	-13	7	2	396	391	1	2	125	127
16	176	171	20	6	2	171	166	-12	7	2	124	125	-1	2	119	120
17	405	399	21	6	2	405	399	-12	7	2	124	125	-6	2	464	464
18	98	103	22	6	2	460	464	-10	7	2	182	185	5	2	483	486
19	281	281	23	6	2	335	335	-9	7	2	190	190	4	2	407	414
20	95	93	24	6	2	1200	1200	-8	7	2	510	514	5	2	510	514
21	283	283	25	6	2	283	283	-7	7	2	283	283	-2	2	483	486
22	190	182	26	6	2	182	182	-6	7	2	449	448	1	2	426	427
23	336	336	27	6	2	336	336	-5	7	2	407	414	1	2	129	123
24	1200	1161	28	6	2	1161	1161	-4	6	2	514	514	-1	2	326	326
25	287	297	29	6	2	297	297	-3	6	2	352	347	0	2	104	109
26	688	688	30	6	2	688	688	-2	6	2	510	514	-1	2	68	67
27	181	186	31	6	2	186	181	-1	6	2	449	448	-1	2	66	66
28	422	422	32	6	2	422	422	0	6	2	147	147	0	2	71	69
29	143	145	33	6	2	465	477	1	6	2	154	159	1	2	248	251
30	90	-1	34	6	2	1035	1038	4	6	2	423	426	4	2	397	400

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, FST-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 6

H	K	L	10FC	10FD	H	K	L	10FC	10FD	H	K	L	10FC	10FD
5	11	2	247	245	6	13	2	151	154	-18	2	3	190	190
6	11	2	234	231	-19	1	3	74	73	-17	2	3	172	164
7	11	2	128	125	-16	1	3	303	304	-16	2	3	215	213
8	11	2	184	185	-15	1	3	357	358	-15	2	3	336	334
-10	12	2	206	203	-14	1	3	199	205	-14	2	3	48	41
-9	12	2	84	79	-13	1	3	268	268	-13	2	3	93	91
-8	12	2	134	126	-12	1	3	148	147	-12	2	3	397	401
-6	12	2	245	246	-11	1	3	962	971	-11	2	3	250	252
-5	12	2	182	177	-10	1	3	224	232	-10	2	3	255	255
-4	12	2	161	160	-9	1	3	201	202	-8	2	3	131	138
-3	12	2	154	150	-8	1	3	484	484	-7	2	3	462	462
-1	12	2	310	311	-7	1	3	83	84	-6	2	3	367	387
0	12	2	144	146	-6	1	3	271	255	-5	2	3	125	115
1	12	2	65	77	-5	1	3	447	415	-4	2	3	157	136
2	12	2	127	124	-4	1	3	203	221	-3	2	3	201	174
3	12	2	106	101	-2	1	3	134	131	-2	2	3	230	245
4	12	2	148	147	-1	1	3	193	190	-1	2	3	320	308
5	12	2	379	372	0	1	3	1283	1269	0	1	3	449	448
6	12	2	237	236	1	1	3	584	555	1	2	3	520	476
7	12	2	195	195	2	1	3	423	409	2	2	3	570	563
8	12	2	121	122	1	1	3	798	788	1	2	3	49	42
-7	13	2	187	192	4	1	3	139	149	4	2	3	431	444
-6	13	2	140	139	5	1	3	101	99	5	4	3	187	183
-5	13	2	174	171	6	1	3	261	258	6	5	3	91	82
-4	13	2	207	201	7	1	3	692	682	7	4	3	837	843
-3	13	2	94	89	8	1	3	62	54	8	2	3	401	408
-2	13	2	304	304	10	1	3	249	248	11	2	3	308	302
-1	13	2	262	263	11	1	3	215	208	12	3	3	207	198
0	13	2	42	38	12	1	3	48	27	14	2	3	211	207
1	13	2	156	158	13	1	3	254	254	15	2	3	528	525
2	13	2	396	400	15	1	3	268	265	16	2	3	53	49
3	13	2	234	229	16	1	3	60	63	18	3	3	57	60
4	13	2	141	141	17	1	3	79	70	17	4	3	435	437
5	13	2	290	278	19	1	3	365	358	18	2	3	445	442

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 8

H	K	L	10FC	10FD	H	K	L	10FG	10FC	H	K	L	10FD	10FC
-4	12	3	248	241	0	4	431	431	0	1	4	281	279	559
-3	12	3	187	186	-3	0	4	476	460	1	1	4	1193	1160
-2	12	3	462	470	-1	0	4	375	373	2	1	4	119	126
-1	12	3	193	192	0	0	4	407	363	3	1	4	500	510
0	12	3	136	132	1	0	4	1367	1395	4	1	4	624	634
1	12	3	71	66	2	0	4	448	451	5	1	4	222	205
2	12	3	423	437	3	0	4	596	590	6	1	4	732	737
3	12	3	78	84	4	0	4	227	237	7	1	4	276	281
5	12	3	241	237	5	0	4	261	271	8	1	4	166	170
6	12	3	175	176	6	0	4	425	426	9	1	4	577	587
7	12	3	109	101	7	0	4	71	37	10	1	4	11	12
-7	13	3	175	182	8	0	4	156	164	11	1	4	76	76
-6	13	3	74	72	9	0	4	141	136	12	1	4	176	170
-4	13	3	111	116	10	0	4	112	108	13	1	4	224	224
-3	13	3	123	123	11	0	4	307	307	14	1	4	202	200
-2	13	3	238	238	12	0	4	537	537	15	1	4	177	176
0	13	3	250	251	13	0	4	212	205	16	1	4	224	224
1	13	3	118	123	14	0	4	254	250	19	2	4	49	39
4	13	3	227	221	16	0	4	536	524	18	2	4	53	47
-19	0	4	60	54	-18	1	4	288	286	16	2	4	349	350
-18	0	4	447	445	-17	1	4	365	369	15	2	4	155	151
-17	0	4	167	157	-16	1	4	272	273	14	2	4	185	185
-16	0	4	308	303	-14	1	4	252	257	13	2	4	122	119
-15	0	4	601	605	-13	1	4	94	99	12	2	4	402	405
-14	0	4	49	46	-12	1	4	165	169	11	2	4	267	259
-13	0	4	95	97	-11	1	4	591	585	10	2	4	687	687
-12	0	4	514	534	-9	1	4	402	405	9	2	4	402	405
-11	0	4	1138	1138	-8	1	4	267	259	8	2	4	373	374
-10	0	4	88	85	-7	1	4	691	687	7	2	4	412	412
-9	0	4	871	875	-6	1	4	649	630	6	2	4	153	147
-8	0	4	599	596	-5	1	4	288	284	5	2	4	452	452
-7	0	4	695	684	-4	1	4	241	233	4	2	4	520	489
-6	0	4	640	609	-2	1	4	227	216	-3	2	4	243	238
-5	0	4	1435	1420	-1	1	4	607	593	-2	2	4	360	365

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 9

H	K	L	10FC	10FC	H	K	L	10FC	10FC	H	K	L	10FC	10FC		
-18	4	183	182	-14	6	4	53	60	-7	7	4	550	548	0	8	
-17	5	4	317	-13	6	4	152	152	-6	7	4	344	353	-1	8	
-16	5	4	209	-12	6	4	235	239	-5	7	4	120	115	2	9	
-14	5	4	142	-11	6	4	79	72	-4	7	4	417	415	3	8	
-13	5	4	236	-9	6	4	608	618	-3	7	4	851	863	4	9	
-12	5	4	50	-8	6	4	149	151	-2	7	4	122	131	5	4	
-11	5	4	132	-7	6	4	78	83	-1	7	4	670	677	6	4	
-10	5	4	60	-6	6	4	90	85	0	7	4	478	470	8	4	
-9	5	4	620	-5	6	4	964	967	1	7	4	489	491	9	4	
-8	5	4	143	-4	6	4	60	53	2	7	4	123	115	11	4	
-7	5	4	46	-3	6	4	289	298	3	7	4	555	555	12	8	
-6	5	4	466	-2	6	4	184	183	4	7	4	280	287	14	9	
-5	5	4	142	-1	6	4	426	431	5	7	4	141	145	13	9	
-4	5	4	44	52	0	4	285	280	6	7	4	532	544	12	9	
-3	5	4	206	213	1	6	4	208	218	7	7	4	142	144	11	9
-2	5	4	481	476	2	6	4	325	327	8	7	4	274	276	10	9
-1	5	4	254	251	3	6	4	297	305	9	7	4	85	87	9	7
0	5	4	433	420	5	6	4	301	301	10	7	4	477	473	8	7
2	5	4	296	298	6	6	4	502	500	13	7	4	250	242	7	9
3	5	4	561	555	7	6	4	49	54	-15	8	4	342	342	-6	9
4	5	4	276	285	8	6	4	443	448	-14	8	4	353	357	-5	9
5	5	4	399	414	9	6	4	61	57	-13	8	4	158	160	-4	9
6	5	4	242	253	10	6	4	257	255	-12	8	4	107	112	-3	9
7	5	4	137	142	11	6	4	72	77	-11	8	4	396	394	-2	9
8	5	4	101	95	14	7	4	343	342	-10	8	4	64	67	-1	9
9	5	4	79	70	12	6	4	275	272	-10	8	4	493	498	0	9
10	5	4	137	142	14	6	4	70	60	-9	8	4	493	498	1	9
11	5	4	101	93	14	7	4	242	253	-12	8	4	259	259	1	9
12	5	4	79	77	13	7	4	206	204	-6	8	4	244	240	2	9
13	5	4	127	132	14	6	4	171	170	-5	8	4	241	240	10	9
14	5	4	281	276	12	7	4	170	170	-5	8	4	377	385	4	9
15	5	4	137	142	16	7	4	62	60	-8	8	4	259	259	1	9
16	5	4	101	93	14	7	4	343	342	-7	8	4	244	240	2	9
17	5	4	51	53	10	7	4	83	82	-3	8	4	71	76	8	9
18	5	4	355	349	9	7	4	326	340	-2	8	4	48	46	8	9
19	5	4	331	323	6	7	4	168	168	-1	8	4	744	744	10	9

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 10

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	
7	11	4	122	117	5	352	345	45	40	9	99	99	49	44	
8	11	4	213	205	5	150	147	622	618	213	216	208	213	41	
-9	12	4	169	185	-2	349	331	58	54	682	679	5	416	411	
-8	12	4	82	79	-1	818	798	318	315	156	159	519	523	145	
-7	12	4	125	125	0	421	417	68	66	367	375	10	4	145	
-5	12	4	314	304	-2	410	411	92	101	68	68	11	4	44	
-3	12	4	123	121	-1	147	151	4	200	200	9	197	194	12	4
-2	12	4	170	171	-1	186	180	5	480	492	10	5	257	251	4
-1	12	4	192	186	-1	240	229	6	266	272	11	5	309	303	4
0	12	4	93	89	-1	5	267	272	5	52	23	12	145	145	4
1	12	4	185	183	-1	5	259	260	6	52	42	13	320	312	4
2	12	4	178	188	-1	5	131	138	9	190	189	18	305	301	4
3	12	4	176	181	-1	5	137	149	11	2	5	5	301	297	4
4	12	4	88	88	-1	5	272	274	12	2	5	5	276	276	4
5	12	4	64	62	-1	1	217	209	15	5	140	138	87	87	4
6	12	4	60	54	-1	1	200	195	18	5	140	143	145	145	4
-6	13	4	129	124	-1	5	186	183	17	5	226	229	12	12	4
-5	13	4	116	113	-1	9	345	339	16	5	330	325	11	11	4
-4	13	4	52	31	-1	8	281	277	15	5	150	153	10	10	4
-2	13	4	249	248	-1	7	228	226	14	5	433	428	9	9	4
0	13	4	69	65	-1	6	252	253	12	4	427	426	8	8	4
1	13	4	51	41	-1	5	181	182	11	5	175	186	7	7	4
2	13	4	204	209	-1	4	319	320	10	5	583	598	6	6	4
3	13	4	104	112	-1	3	175	179	8	5	80	83	5	5	4
4	13	4	325	325	-1	2	260	267	7	5	504	505	4	4	4
5	13	4	65	65	-1	1	138	145	6	5	672	894	3	3	4
6	13	4	481	481	-1	0	104	104	12	5	372	372	2	2	4
7	13	4	95	95	-1	2	103	101	1	5	131	136	1	1	4
8	13	4	65	65	-1	2	26	26	1	5	504	346	1	1	4
9	13	4	7	7	-1	1	379	380	2	5	488	482	1	1	4
10	13	4	97	94	-1	0	287	289	1	5	599	608	4	4	4
11	13	4	112	112	-1	1	287	287	2	5	599	608	5	5	5
12	13	4	543	529	-1	1	230	230	2	5	395	396	7	7	5
13	13	4	529	529	-1	0	243	243	2	5	837	844	81	81	5
14	13	4	447	447	-1	1	230	230	2	5	447	459	79	79	5

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 11

	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC
10	5	5	5	140	137	2	8	5	344	357	-8	10	5	583	569
11	-11	7	5	112	114	3	8	5	61	64	-5	10	5	529	521
12	-10	7	5	121	117	5	8	5	45	45	-4	10	5	271	268
13	-9	7	5	91	94	6	8	5	155	157	-2	10	5	357	350
14	-8	7	5	141	130	7	8	5	168	171	-1	10	5	356	356
15	-7	7	5	296	-	10	8	5	160	165	3	10	5	366	372
16	-5	7	5	103	-5	11	8	5	111	112	5	10	5	489	501
17	-4	7	5	252	251	-4	7	5	137	141	5	10	5	57	55
18	-3	7	5	294	-3	7	5	137	141	6	10	5	57	55	
19	-2	7	5	76	91	-2	7	5	102	95	7	10	5	189	187
20	-12	6	5	302	306	-11	7	5	186	190	-13	9	5	111	112
21	-10	6	5	46	9	-1	7	5	176	184	-12	9	5	125	122
22	-9	6	5	159	158	-2	7	5	148	156	-10	9	5	95	94
23	-8	6	5	349	341	-3	7	5	153	153	-8	9	5	303	306
24	-7	6	5	259	265	-5	7	5	172	187	-7	9	5	175	175
25	-6	6	5	115	109	-6	6	5	92	96	-6	8	5	205	204
26	-5	6	5	70	65	-7	7	5	259	263	-5	8	5	103	104
27	-4	6	5	45	33	-8	7	5	147	145	-4	9	5	288	280
28	-2	6	5	169	182	9	7	5	161	164	-3	9	5	159	155
29	-1	6	5	730	723	10	7	5	307	304	-2	9	5	55	52
30	0	6	5	353	359	11	7	5	210	206	-1	9	5	134	130
31	1	6	5	439	456	-15	8	5	71	57	0	9	5	320	315
32	2	6	5	184	199	-14	8	5	70	261	1	9	5	174	177
33	3	6	5	65	65	184	71	5	55	51	2	9	5	101	101
34	4	6	5	142	152	-12	8	5	360	366	3	9	5	126	126
35	5	6	5	122	134	-10	8	5	226	227	4	9	5	134	132
36	6	6	5	270	274	-8	8	5	280	282	5	9	5	301	305
37	7	6	5	114	111	-7	8	5	44	40	6	9	5	87	81
38	8	6	5	145	147	-6	8	5	178	187	7	9	5	409	407
39	9	6	5	137	134	-5	8	5	82	78	8	9	5	209	208
40	10	6	5	132	127	-2	8	5	76	79	-12	10	5	442	444
41	11	6	5	55	51	-3	8	5	52	66	10	9	5	145	143
42	12	7	5	150	152	1	6	5	114	114	-7	12	5	357	365

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E-HOHLITE, PSTI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 12

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC
8	0	6	432	428	112	113	113	146	137	114	117	117	149	158
9	0	6	153	146	111	111	111	160	164	116	116	116	147	156
10	0	6	112	101	114	114	114	72	73	-16	-16	-16	4	6
11	0	6	45	23	-18	-18	-18	140	153	-13	-13	-13	6	6
12	0	6	276	278	-17	-17	-17	337	333	-12	-12	-12	6	6
13	0	6	316	321	-14	-14	-14	210	213	-9	-9	-9	6	6
14	1	6	336	338	-17	-17	-17	238	238	-6	-6	-6	6	6
15	1	6	196	205	-11	-11	-11	128	132	-5	-5	-5	6	6
16	1	6	190	192	-15	-15	-15	210	210	-8	-8	-8	6	6
17	1	6	140	135	-14	-14	-14	190	190	-3	-3	-3	6	6
18	1	6	404	413	-11	-11	-11	210	225	-2	-2	-2	6	6
19	1	6	211	205	-12	-10	-10	401	403	-5	-5	-5	6	6
20	1	6	77	77	-11	-9	-9	190	198	-3	-3	-3	6	6
21	1	6	294	312	-14	-8	-8	210	225	-2	-2	-2	6	6
22	1	6	317	323	-9	-7	-7	51	55	0	0	0	6	6
23	1	6	151	153	-6	-6	-6	141	155	1	1	1	6	6
24	1	6	695	696	-5	-4	-4	520	515	2	2	2	6	6
25	1	6	63	65	-3	-3	-3	217	210	0	0	0	6	6
26	1	6	108	101	-2	-2	-2	350	350	4	4	4	6	6
27	1	6	280	270	-4	-2	-2	148	142	5	5	5	6	6
28	1	6	155	147	-1	-1	-1	300	294	6	6	6	6	6
29	1	6	310	309	0	0	0	169	158	8	8	8	6	6
30	1	6	300	295	-1	-1	-1	193	203	7	7	7	6	6
31	1	6	644	631	-1	-1	-1	310	312	10	10	10	6	6
32	1	6	158	152	0	0	0	169	158	12	12	12	6	6
33	1	6	324	343	-2	-2	-2	250	249	6	6	6	6	6
34	1	6	40	32	-1	-1	-1	242	260	13	13	13	6	6
35	1	6	51	50	0	0	0	288	288	18	18	18	6	6
36	1	6	715	718	6	6	6	122	121	-17	-17	-17	6	6
37	1	6	507	507	1	1	1	86	83	2	2	2	6	6
38	1	6	97	105	1	1	1	49	54	-10	-10	-10	6	6
39	1	6	418	412	1	1	1	475	460	-9	-9	-9	6	6
40	1	6	418	412	1	1	1	302	313	-3	-3	-3	6	6
41	1	6	408	404	1	1	1	187	187	5	5	5	6	6
42	1	6	370	367	1	1	1	130	130	126	126	126	6	6

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, FSII-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 13

	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC		
7	6	171	170	-12	8	6	341	345	9	6	428	430	-16	1	7	134	136	5	55	50		
8	6	287	286	-11	8	6	603	604	5	9	6	136	-15	1	7	184	182	-1	242	236		
9	6	368	367	-10	8	6	81	81	7	9	6	182	-14	1	7	131	125	-1	224	225		
10	6	6	229	229	-9	8	6	79	63	8	9	6	50	-15	1	7	49	49	-1	265	280	
11	6	6	666	666	-8	8	6	534	521	9	9	6	129	134	-11	1	7	217	212	-8	2	54
12	7	6	256	254	-7	8	6	540	532	-11	10	6	58	67	-10	1	7	270	285	-7	2	7
13	7	6	342	340	-5	8	6	83	86	-10	10	6	222	225	-9	1	7	263	268	-6	2	7
14	7	6	218	222	-4	8	6	705	719	-2	10	6	79	76	-8	1	7	611	606	-5	2	7
15	7	6	395	404	-3	8	6	191	186	-8	10	6	173	171	-7	1	7	115	116	-4	2	7
16	7	6	433	440	-2	8	6	165	166	-7	10	6	131	132	-6	1	7	123	131	-3	2	7
17	6	56	59	-1	8	6	138	142	-5	10	6	69	62	-5	1	7	258	267	-2	1	7	
18	7	6	187	188	0	8	6	442	439	-3	10	6	120	121	-4	1	7	389	382	-1	2	7
19	7	6	194	193	1	8	6	50	45	2	10	6	54	55	-3	1	7	237	236	0	2	7
20	7	6	259	265	2	8	6	356	370	3	10	6	179	176	-2	1	7	325	330	1	2	7
21	6	400	407	13	7	6	219	216	6	10	6	235	239	-1	1	7	210	210	2	2	7	
22	7	6	116	123	4	8	6	302	303	7	10	6	233	232	0	1	7	300	295	3	2	7
23	7	6	116	123	4	8	6	302	303	7	10	6	233	232	0	1	7	329	331	4	2	7
24	7	6	182	181	5	8	6	98	100	-10	11	6	84	86	1	1	7	39	39	6	2	7
25	7	6	154	154	6	8	6	196	196	-9	11	6	68	61	2	1	7	63	61	5	1	4
26	7	6	253	253	7	8	6	338	337	-6	11	6	188	190	3	1	7	59	59	3	1	4
27	7	6	77	73	9	8	6	159	157	-5	11	6	393	390	4	1	7	170	171	8	2	7
28	7	6	124	122	7	8	6	301	305	-1	13	6	124	117	5	1	7	126	126	9	2	7
29	7	6	193	194	115	7	6	64	62	-3	11	6	65	74	6	1	7	205	202	0	2	7
30	7	6	193	194	115	7	6	117	113	-1	11	6	146	146	7	1	7	110	112	1	2	7
31	7	6	123	124	123	7	6	61	72	4	11	6	306	308	8	1	7	50	50	1	2	7
32	7	6	363	360	9	7	6	350	352	5	11	6	115	113	9	1	7	137	134	-1	2	7
33	7	6	102	107	8	7	6	135	136	-6	12	6	102	113	10	1	7	127	131	1	1	7
34	7	6	123	126	6	7	6	291	291	-5	12	6	337	336	11	1	7	93	99	-1	2	7
35	7	6	197	198	6	7	6	291	291	-4	12	6	68	69	12	1	7	206	202	0	1	7
36	7	6	566	575	9	7	6	181	185	-3	12	6	130	127	13	1	7	88	88	-1	1	7
37	7	6	408	405	1	7	6	80	78	-1	8	1	276	285	-14	2	7	386	386	-7	3	7
38	7	6	207	207	2	7	6	289	301	-17	1	7	187	197	-13	2	7	156	158	-6	3	7
39	8	6	204	204	6	7	6	289	301	-17	1	7	187	197	-13	2	7	156	158	-6	3	7

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 15

H	K	L	10FC	10FC	H	K	L	10FC	10FC	H	K	L	10FC	10FC		
3 11	7 6	74	84	417	416	-4	2	8	62	62	-15	4	9	197	196	
-17	0 0	136	137	119	120	-3	2	6	455	469	-12	4	8	75	66	
-16	0 0	291	289	142	133	-1	2	8	65	59	-11	4	8	57	62	
-15	0 0	49	38	200	203	1	2	8	427	444	-10	4	8	115	114	
-14	0 0	440	435	311	306	3	2	8	94	83	-9	4	8	170	170	
-13	0 0	226	231	7	8	256	261	4	2	8	200	202	-8	4	8	
-12	0 0	54	66	-6	1	8	623	631	6	2	8	262	-7	4	8	
-11	0 0	71	75	-5	1	8	358	358	7	2	8	223	-5	4	8	
-10	0 0	645	647	-4	1	8	567	590	9	2	8	126	-4	4	8	
-9	0 0	8	124	118	-3	1	8	51	45	-17	8	153	155	-3	4	8
-8	0 0	8	176	174	-2	1	8	330	321	-16	8	114	111	-2	4	8
-7	0 0	8	257	269	-1	8	283	280	-15	8	61	51	-1	4	8	
-6	0 0	8	638	636	0	1	8	110	107	-14	8	192	189	0	4	8
-5	0 0	8	487	491	1	2	8	473	484	-13	8	254	250	1	4	8
-4	0 0	8	172	170	2	1	8	44	28	-11	8	47	52	2	4	8
-3	0 0	8	103	101	1	8	102	105	-10	8	93	253	256	1	4	8
-2	0 0	8	42	27	2	2	8	295	302	-9	8	57	54	4	4	8
-1	0 0	8	551	537	3	0	8	53	46	-7	8	178	182	5	5	8
0	0 0	8	709	717	7	7	8	158	156	-6	8	433	435	6	4	8
1	0 0	8	275	278	8	8	105	103	-5	8	84	83	7	7	8	
2	0 0	8	123	127	9	9	195	199	-3	8	197	193	9	9	8	
3	0 0	8	189	181	11	8	314	309	-2	8	167	164	9	9	8	
4	0 0	8	174	174	11	8	293	286	-1	8	292	301	7	7	8	
5	0 0	8	125	123	12	8	164	166	0	8	129	123	11	11	8	
6	0 0	8	324	316	12	8	126	128	0	8	189	188	-1	1	8	
7	0 0	8	792	792	14	8	224	225	0	8	90	94	-7	7	8	
8	0 0	8	347	347	13	8	118	120	0	8	110	104	-6	6	8	
9	0 0	8	349	349	12	8	190	189	0	8	292	298	-6	6	8	
10	0 0	8	405	405	11	8	244	246	0	8	90	84	-7	7	8	
11	0 0	8	410	410	10	8	474	486	0	8	110	104	-6	6	8	
12	0 0	8	54	54	9	8	349	347	0	8	98	98	-7	7	8	
13	0 0	8	197	197	8	8	204	204	0	8	186	191	5	5	8	
14	0 0	8	153	156	7	8	385	384	0	8	81	80	6	6	8	
15	0 0	8	250	250	7	8	232	227	0	8	99	104	-4	4	8	
16	0 0	8	154	154	6	8	259	255	0	8	220	214	-2	2	8	
17	0 0	8	158	158	5	8	259	255	-1	8	214	215	-2	2	8	
18	0 0	8	154	154	4	8	215	214	0	8	591	591	-1	1	8	
19	0 0	8	156	156	3	8	214	214	0	8	292	290	-1	1	8	
20	0 0	8	154	154	2	8	215	215	0	8	591	591	-1	1	8	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 16

H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC	H	K	L	10FO	10FC		
-10	7	8	248	249	1	9	164	162	9	2	9	69	68	277		
-9	7	8	383	398	-6	1	9	197	198	-15	2	9	195	197		
-8	7	8	421	420	6	8	88	87	-4	-15	2	9	249	241		
-7	7	8	179	183	7	8	73	71	-3	-15	2	9	79	77		
-6	7	8	202	200	-2	8	563	555	-2	-15	2	9	521	515		
-5	7	8	414	411	-1	8	240	249	-1	-15	2	9	142	146		
-4	7	8	404	395	-7	8	7	136	-1	-15	2	9	259	258		
-3	7	8	407	406	-5	9	63	155	2	-15	2	9	340	337		
-2	7	8	89	93	-3	9	8	87	3	-15	2	9	112	116		
-1	7	8	353	351	-2	9	8	111	101	-1	-15	2	9	146	146	
0	7	8	239	236	-1	9	6	311	302	5	-15	2	9	80	80	
1	7	8	331	337	0	9	8	161	164	7	-1	9	151	154		
2	7	8	99	107	1	9	9	251	259	8	-7	2	9	3	3	
3	7	8	199	199	2	9	9	124	126	9	-6	2	9	4	4	
4	7	8	101	98	3	9	9	428	419	10	-5	2	9	4	4	
5	7	8	62	66	4	7	6	102	95	-16	-1	9	75	72	6	
6	7	8	136	141	5	7	7	60	64	-14	-1	9	331	329	7	
7	7	8	61	61	6	8	10	60	64	-14	-1	9	154	154	3	
8	7	8	54	54	7	8	10	195	195	-13	-1	9	331	329	2	
9	7	8	70	62	8	7	7	63	65	-13	-1	9	154	154	1	
10	8	8	259	262	9	8	10	60	63	-11	-1	9	154	154	0	
11	8	8	69	70	10	8	10	63	67	-11	-1	9	154	154	-1	
12	8	8	74	82	11	8	10	63	65	-10	-1	9	154	154	-2	
13	8	8	111	110	12	8	10	60	64	-10	-1	9	154	154	-3	
14	8	8	259	262	13	8	10	60	63	-7	-1	9	154	154	-4	
15	8	8	69	70	14	8	10	63	65	-6	-1	9	154	154	-5	
16	8	8	294	290	15	8	10	60	64	-5	-1	9	154	154	-6	
17	8	8	260	264	16	8	11	6	64	-4	-1	9	154	154	-7	
18	8	8	319	309	17	8	11	6	114	113	-3	-1	9	154	154	-8
19	8	8	174	175	18	8	11	6	69	70	-1	-1	9	154	154	-9
20	8	8	439	433	19	8	11	6	64	50	-4	-1	9	417	417	-10
21	8	8	246	246	20	8	11	6	92	86	-4	-1	9	555	570	-11
22	8	8	226	228	21	8	12	6	267	273	-3	-1	9	213	208	-12
23	8	8	389	382	22	8	11	6	69	70	-2	-1	9	454	452	-13
24	8	8	417	418	23	8	10	6	206	210	-1	-1	9	374	378	-14
25	8	8	137	138	24	8	11	6	314	311	-2	-1	9	85	90	-15
26	8	8	219	212	25	8	12	6	7	7	-1	-1	9	404	409	-16

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HOWLITE, FS1-SCAN CORRECTED, 1/2/15/87

PAGE 17

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC
-9	5	9	202	201	-10	8	9	155	162	-8	0	10	256	261	5	1	10	297	295
-13	6	9	156	148	-9	8	9	293	291	-7	0	10	470	468	6	1	10	419	427
-12	6	9	168	169	-7	8	9	192	184	-6	0	10	140	146	-15	2	10	119	119
-11	6	9	79	72	-6	8	9	256	250	-5	0	10	384	383	-14	2	10	239	238
-8	6	9	84	85	-2	8	9	302	301	-4	0	10	131	131	-13	2	10	159	150
-7	6	9	125	129	-1	8	9	96	87	-3	0	10	204	204	-12	2	10	292	292
-6	6	9	80	81	0	8	9	121	122	-2	0	10	297	296	-11	2	10	229	231
-5	6	9	146	152	1	8	9	126	137	0	0	10	319	314	-10	2	10	66	73
-4	6	9	171	162	2	8	9	194	196	1	0	0	569	577	-9	2	10	337	341
-3	6	9	172	167	3	8	9	138	142	2	0	10	173	167	-8	2	10	57	57
-1	6	9	54	55	8	9	9	172	170	3	0	10	305	313	-7	2	10	273	273
0	6	9	224	224	-9	9	9	56	62	4	0	10	151	162	-6	2	10	48	48
1	6	9	58	60	-8	9	9	254	253	5	0	10	322	322	-5	2	10	320	320
2	6	9	210	215	-7	9	9	203	194	6	0	10	263	264	-4	2	10	105	105
4	6	9	349	351	-6	9	9	96	92	7	0	10	260	268	-5	2	10	391	391
5	6	9	87	82	-5	9	9	80	78	8	0	10	213	207	-2	2	10	275	271
7	6	9	203	193	-4	9	9	667	656	-15	1	10	287	284	-1	2	10	260	259
8	7	9	102	102	-3	9	9	139	133	-14	1	10	173	169	0	2	10	276	275
11	7	9	112	115	-1	9	9	168	161	-13	1	10	94	94	1	2	10	77	76
12	7	9	57	57	-1	9	9	262	261	-12	1	10	68	68	2	2	10	279	289
14	7	9	137	136	0	9	9	262	261	-11	1	10	369	369	3	2	10	230	229
15	7	9	100	98	1	9	9	136	142	-8	1	10	101	96	4	2	10	411	420
16	7	9	78	75	2	9	9	124	126	-10	1	10	370	370	-15	3	10	106	121
17	7	9	57	57	3	9	9	372	375	-9	1	10	68	71	6	2	10	151	158
18	7	9	154	146	-6	10	9	153	151	-8	1	10	89	92	7	2	10	178	174
19	7	9	111	109	-5	10	9	65	63	-7	1	10	370	370	-12	3	10	109	109
20	7	9	109	109	-4	10	9	230	231	-6	1	10	59	59	-11	3	10	50	50
21	7	9	66	66	-2	10	9	57	48	-5	1	10	219	217	-13	3	10	61	74
22	7	9	95	89	-15	0	10	375	376	-4	1	10	186	179	-12	3	10	109	109
23	7	9	110	109	-14	0	10	99	95	-3	1	10	115	114	-11	3	10	50	50
24	7	9	161	160	-11	0	10	56	49	2	1	10	306	304	-7	3	10	148	140
25	7	9	60	70	-10	0	10	56	63	3	1	10	166	167	-5	3	10	213	206
26	8	9	103	103	-9	0	10	349	346	4	1	10	158	158	-4	3	10	95	102

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR E HDWILITE, PSI-SCAN CORRECTED, 12/15/87

PAGE 19

	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC							
-10	3	12	264	259	-2	3	12	289	283	-7	4	12	95	-8	5	12	84	-4	5	12	117	110
-7	3	12	117	108	-1	3	12	111	104	-4	4	12	144	-7	5	12	104	-3	5	12	165	154
-6	3	12	78	81	0	3	12	76	70	-3	4	12	109	-6	5	12	159	-2	5	12	260	255
-5	3	12	141	143	1	3	12	136	140	-1	4	12	80	-5	5	12	149	-4	4	12	95	95
-3	3	12	177	175	-9	4	12	67	67													