

AM-90-436

Single-crystal X-ray structure refinements of two biogenic magnesian calcite  
crystals

Jeanne Paquette, Richard J. Reeder

For deposit: Table 2

American Mineralogist, 75, 9-10, 1151-1158.

Structure factors\* for magnesian calcite LB, 12.9 mol% MgCO<sub>3</sub>

	-5,-5,l	-2,-4,l	13 135 135 3	0,4,l	2,3,l
0	49 62 10	2 241 239 3	16 68 62 3	2 31 5 5	2 327 330 4
3	-26 23 31	5 -25 238 6	19 68 62 3	8 574 589 7	5 144 155 3
6	80 70 7	8 221 223 3	22 167 160 3	14 59 56 4	8 277 276 4
11	-24 149 150	7 149 150 3	-1,-1,l	20 258 257 5	11 101 103 3
2	72 72 9	17 -26 14 10	0 602 626 6	0,5,l	17 66 57 4
5	-24 11 30	20 126 131 4	3 616 585 6	4 314 324 5	23 -32 27 12
11	-24 149 150	7 149 150 3	6 733 747 7	4 314 324 5	23 -32 27 12
-4,-5,l	-2,-3,l	9 333 337 4	0,-8,l	10 155 156 4	
1	26 19 15	1 174 178 3	15 166 152 3	16 198 208 5	2,4,l
4	16 109 7	4 321 313 5	18 260 266 3	22 79 76 5	
7	-26 15 32	7 147 150 3	21 69 66 4	0,6,l	1 26 29 6
10	67 71 9	10 249 248 3	24 174 174 4	6 181 188 4	4 231 230 3
13	-36 10 11	13 103 99 3	3 332 337 4	12 148 151 5	7 -26 23 7
16	85 72 8	16 204 208 3	0,-8,l	13 151 156 4	10 196 202 3
-4,-6,l	-5,l	19 61 55 4	2 -26 23 18	16 148 150 4	
1	-4,-4,l	22 110 109 4	8 152 141 5	18 96 96 5	16 148 150 4
0	247 246 4	14 -26 19 23	14 -26 19 23	19 -26 19 23	22 92 95 4
3	-21 12 7	-2,-2,l	0,-7,l	0,7,l	2,5,l
6	35 32 6	0 454 453 5	4 204 197 5	6 65 66 6	
9	-33 10 12	3 50 54 3	10 48 59 7	14 54 52 6	3 78 72 4
12	177 182 4	6 373 373 4	16 129 124 5	20 109 94 5	6 141 135 3
15	-31 6 14	9 337 338 4	16 129 124 5	20 109 94 5	9 49 54 5
18	29 30 15	12 318 319 4	0,-5,l	8 436 452 5	8 147 142 5
21	-26 3 12	15 -16 21 12	0,-6,l	0,8,l	12 153 160 4
-3,-6,l	-1,	18 182 182 3	4 144 151 5	15 -31 33 11	
1	-3,-6,l	21 -21 10 17	0 185 173 4	18 82 81 5	18 -28 17 13
0	85 93 6	24 144 145 4	6 202 203 4	10 -33 27 9	21 -28 17 13
3	-40 37 11	-1,-8,l	12 133 130 5	12,1	2,6,l
6	93 89 8	1 50 89 8	18 116 116 5	20 154 154 5	
9	55 31 8	1 50 89 8	24 71 66 6	2 601 594 6	2 83 88 4
12	86 72 8	4 87 92 8	20 163 148 5	5 315 316 3	5 -28 21 7
15	-27 21 32	7 -26 8 31	0,-5,l	8 436 452 5	8 147 142 5
-3,-5,l	-1,-7,l	8 290 283 5	14 179 186 3	11 40 40 5	
2	70 64 5	0 180 172 3	14 134 144 4	10 222 224 4	17 39 9 9
5	-22 10 13	3 -33 26 11	20 163 148 5	23 49 42 5	20 73 76 5
8	186 181 4	6 44 43 6	0,-4,l	1,3,l	2,7,l
11	-26 5 15	9 55 24 5	2 206 201 4	14 293 296 4	14 63 65 5
14	46 51 7	12 136 132 4	4 690 692 8	1 34 33 4	1 46 35 11
17	-22 1 17	15 -27 18 19	10 44 37 5	4 611 618 6	4 90 92 8
20	107 94 4	18 -35 30 11	16 369 360 6	7 -24 23 5	7 -22 23 7
-3,-4,l	-1,-6,l	22 61 53 6	10 161 161 3	13 -39 19 11	
1	35 37 6	2 137 134 4	0,-3,l	13 -21 7 11	3,4,l
4	285 278 5	5 -36 40 9	0,-2,l	16 321 322 4	
7	47 35 5	8 163 162 4	6 818 825 7	19 -24 0 12	
10	73 75 4	11 -34 30 10	6 209 199 3	22 95 94 4	2 82 89 4
13	-25 26 14	14 103 95 4	12 479 487 6	5 235 235 4	5 28 30 6
16	173 174 4	17 -28 18 15	18 136 134 4	1,4,l	8 245 247 4
19	33 16 7	20 84 89 5	24 192 186 5	3 -19 13 14	11 35 19 5
22	37 44 7	23 32 9	8 0,-2,l	16 184 180 3	14 66 73 5
25	252 269 4	1 101 96 3	14 376 378 5	17 -26 10 15	
3	59 58 4	4 191 195 3	20 222 220 4	24 129 128 4	2 129 126 4
6	224 229 3	7 77 81 4	2 855 816 10	12 295 296 4	23 37 4 9
9	46 46 4	10 189 195 4	8 454 455 5	18 112 112 4	
12	197 196 4	13 53 57 4	4 1369 1374 15	2 234 237 4	13 -26 13 18
15	45 30 7	16 128 133 4	10 289 286 4	5 92 86 3	6 120 126 4
18	124 124 4	19 39 33 9	16 473 466 6	8 177 188 3	19 -28 9 14
21	-28 16 13	22 86 90 5	22 140 138 4	11 66 63 4	
24	98 96 4	-1,-4,l	17 417 417 3	14 147 152 4	3,6,l
-2,-7,l	-1,-4,l	21 -26 15 12	0,0,l	17 45 38 6	
2	56 73 10	3 -23 20 8	6 438 395 7	23 44 19 6	3 -34 37 14
5	66 35 11	6 172 172 3	12 1042 1030 18	14 190 190 4	6 90 85 7
8	73 86 8	9 33 20 7	18 79 64 5	1,6,l	9 -24 30 28
11	47 29 10	12 306 306 4	24 282 282 7	22 47 54 6	12 75 78 8
-2,-6,l	-2,-6,l	15 15 15 12	1 40 44 6	15 -28 20 34	
1	40 23 6	21 -26 9 14	0,1,l	4 181 179 4	4,5,l
4	158 157 4	24 138 133 4	2 297 290 3	7 36 39 6	
7	-30 21 7	-1,-3,l	8 1010 1013 12	13 95 109 4	2 73 82 8
10	71 74 5	2 185 175 3	14 224 224 4	16 120 119 4	8 106 104 7
13	-24 16 13	2 185 175 3	20 331 331 5	19 -19 17 9	11 -11 14 22
16	105 102 4	5 49 51 3	0,2,l	22 47 54 6	14 55 55 9
19	-27 10 15	8 523 535 5	4 556 572 6	1,7,l	4,6,l
-2,-5,l	-1,	11 34 41 4	4 556 572 6		
0	210 212 3	14 138 134 4	10 487 493 6	3 -27 22 15	1 -29 12 14
3	72 76 4	23 33 14 6	16 317 313 5	6 38 48 7	4 54 61 10
6	136 130 3	6 130 130 3	22 171 169 4	9 -32 15 7	
9	70 65 4	-1,-2,l	0,3,l	12 130 126 4	
12	161 166 4	1 378 364 4	6 187 187 3	15 -22 8 8	
15	48 45 6	1 505 513 5	12 503 500 7	18 40 36 6	
18	72 76 5	4 262 259 3	24 195 192 5	2 -39 49 13	
21	-32 26 11	7 411 413 4	5 54 6 8	8 102 84 7	
24	77 78 5	10 411 413 4	8 102 84 7		

\* Structure factors for 332 combined symmetry-averaged reflections, including reflections with intensities less than 2σ.

Structure factors \* for magnesian calcite LS, 6.4 mol% MgCO<sub>3</sub>.

-5,-5,1	18	103	103	3	4	526	533	5	0,4,1	2,3,1							
0	80	81	5	21	42	41	3	7	281	277	3						
3	38	31	6	24	110	109	3	10	467	458	5						
6	97	94	5	-2,-4,1	5	13	152	152	2	16	643	654	6				
-4,-6,1	2	266	270	3	16	314	315	3	14	64	61	2					
2	100	96	5	6	261	259	3	22	204	206	3						
5	27	12	6	11	20	23	4	-1,-1,1	0,5,1	17	67	69	2				
-4,-5,1	14	178	180	3	0	634	656	6	4	362	372	5					
1	-8	20	17	17	21	16	6	3	620	595	6	16	250	262	4		
4	152	143	5	23	21	10	4	9	359	357	3	20	326	325	5		
7	28	16	6	-2,-3,1	12	429	424	4	15	171	174	2	14	252	255	3	
10	86	91	5	1	188	195	2	21	81	83	2	0,6,1	4	255	257	2	
13	-18	10	9	4	340	343	4	24	217	217	3	18	120	190	3		
16	102	99	5	7	167	171	2	16	312	313	3	6	212	216	3		
-4,-4,1	10	283	281	3	0,-8,1	24	174	174	2	24	113	114	3				
0	301	300	4	13	123	122	2	2	26	26	5	0,7,1	22	137	134	3	
3	-14	11	10	19	23	19	75	2	6	199	188	4	2	78	82	3	
6	29	35	4	22	145	143	3	14	23	21	5	0	228	222	4	3	
9	-15	9	6	12	348	350	4	0,-6,1	20	143	133	4	14	60	66	4	
12	236	235	3	-2,-2,1	18	225	225	3	0	201	201	4	0,8,1	12	189	188	3
15	-19	6	7	21	216	212	7	6	16	242	242	4	2	632	630	6	
18	36	36	3	0	472	472	5	4	237	238	4	10	-18	32	12	24	
21	-17	3	10	6	414	413	4	16	163	163	4	4	200	197	4	18	
-3,-7,1	9	335	335	2	12	348	350	4	10	72	75	3	1,2,1	15	42	41	3
1	-17	4	20	15	333	333	22	3	0	201	201	2	5	240	239	5	18
-3,-6,1	21	216	212	7	24	179	184	3	12	150	151	3	6	486	480	5	19
0	120	118	3	9	-1,-8,1	24	179	184	3	16	161	158	3	11	207	211	2
3	53	49	5	12	348	350	4	24	90	86	3	14	336	337	4	11	
6	119	115	5	1	120	111	8	12	176	174	3	17	113	115	2	17	
9	50	42	5	15	157	157	12	176	174	3	16	374	374	5	14		
12	98	93	5	4	128	124	5	15	22	22	7	19	-14	8	17	26	
15	-19	30	22	7	144	39	3	18	44	39	3	22	120	122	2	20	
-3,-4,1	10	45	53	6	6	325	327	4	2	215	217	3	23	58	59	3	20
-3,-5,1	1	41	37	2	-1,-6,1	10	45	53	6	14	164	172	3	1,1,-1,1	5	31	28
2	79	80	3	-1,-7,1	20	190	190	4	14	216	212	2	1,3,1	1	43	47	6
5	-12	6	10	0	216	212	2	0,-4,1	20	157	157	4	1,37	38	2	4	
8	226	222	3	3	-22	30	7	4	748	754	9	4	650	657	6	7	
11	-15	0	6	6	49	54	3	10	442	377	2	10	-15	14	4	10	
14	63	67	3	9	30	31	4	24	237	238	4	13	184	184	2	13	
17	-15	4	6	12	176	174	3	16	433	432	6	13	-14	3	37	26	
20	138	130	3	14	133	127	3	15	22	62	64	3	12	338	343	4	23
19	26	22	4	17	32	27	4	0,-2,1	15	13	8	15	13	8	9	10	
22	58	59	3	20	114	117	3	20	114	117	3	22	141	140	2	22	
-3,-3,1	23	28	15	4	2	876	844	10	24	171	171	4	1,4,1	5	31	28	
4	321	324	4	2	165	165	3	6	235	221	3	3	-13	9	6	11	
7	35	39	3	5	150	152	3	12	532	534	7	6	202	199	3	14	
10	82	90	2	8	185	189	3	18	165	163	3	9	-12	192	2	17	
13	30	32	3	11	47	40	3	24	237	238	4	11	178	179	2	17	
16	225	223	3	14	133	127	3	15	22	62	64	3	12	338	343	4	23
19	26	22	4	17	32	27	4	0,-2,1	18	141	140	2	22	141	140	2	22
22	58	59	3	20	114	117	3	20	114	117	3	21	17	9	4	21	
-2,-7,1	23	28	15	4	2	876	844	10	24	171	171	3	1,4,1	5	31	28	
0	262	279	3	-1,-5,1	14	434	430	5	2	271	270	3	7	-15	18	7	7
3	71	77	2	1	111	110	2	0,-1,1	20	257	256	4	1,5,1	7	17	18	7
6	257	262	3	4	224	223	3	5	108	102	2	13	22	19	4	13	
9	62	63	2	7	98	97	3	6	205	202	2	16	164	164	3	16	
12	228	230	3	10	233	233	3	4	1373	1387	15	8	219	219	3	19	
15	44	45	3	13	73	72	2	10	313	309	4	11	178	179	2	19	
18	157	159	3	16	161	163	3	16	534	523	7	17	155	153	3	17	
21	34	28	3	19	51	46	3	22	169	171	3	20	149	147	3	20	
24	132	130	3	22	127	126	3	23	38	31	3	3	51	49	5	3	
1	-2,-7,1	24	28	15	4	0,0,1	20	401	394	5	3	108	108	3	6	108	5
2	100	94	5	0	456	463	3	6	440	385	7	1,6,1	9	46	42	5	12
5	61	49	5	3	117	20	3	18	73	73	3	7	53	57	3	15	
8	110	113	5	6	190	187	2	24	354	357	7	7	48	53	3	13	
11	51	43	9	9	192	23	3	0,1,1	10	132	138	3	2	75	80	5	3,7,1
14	76	69	5	12	360	359	4	2	316	307	4	13	38	41	3	4,5,1	
-2,-6,1	15	18	20	4	21	121	125	2	8	1060	1060	12	16	156	152	3	17
1	25	25	4	24	182	182	3	14	250	245	3	22	81	77	3	2,102	
4	113	187	3	11	160	155	2	22	203	208	3	15	24	5	6	20	
10	102	98	3	-1,-3,1	17	35	35	2	0,2,1	3	21	23	5	11	-18	17	9
13	-19	20	9	2	203	193	2	16	595	606	7	6	53	62	3	14	
16	134	132	3	5	49	53	2	10	519	524	6	9	-20	14	8	12	
19	-17	13	10	8	575	562	6	16	367	359	5	12	167	162	3	17	
-2,-5,1	11	16	46	2	11	46	2	20	401	394	5	15	24	5	6	17	
0	237	240	2	20	295	300	4	0,3,1	12	559	557	7	16	43	51	3	1,-16
3	94	92	2	23	22	22	4	6	202	203	3	2	63	63	5	1,-16	
6	159	161	3	9	84	84	2	-1,-2,1	12	559	557	7	5	-15	7	9	13
9	84	84	2	12	297	200	3	1	391	382	4	24	250	251	4	1,-16	
15	66	64	3	15	66	64	1	1	16	145	3	6	116	113	5	1	

Structure factors\* for magnesian calcite LB, 12.9 mol% MgCO<sub>3</sub>

-5,-5,l	-2,-4,l	13 135 3	0,4,l	2,3,l
0 49 62 10	2 241 239 3	16 272 281 4	1 26 29 6	
3 -26 23 31	5 -25 28 6	19 68 62 3	2 31 5 5	2 327 330 4
6 80 70 7	8 221 223 3	22 167 160 3	8 574 589 7	5 144 155 3
-4,-6,l	11 -24 22 7	-1,-1,l	14 559 56 4	8 277 276 4
2 72 72 9	20 126 131 4	3 616 585 6	20 258 257 5	11 101 103 3
5 -24 11 30	23 -18 7 9	6 753 747 7	4 314 324 5	23 -32 27 12
-4,-5,l	-2,-3,l	9 333 337 4	10 155 156 4	14 210 211 3
1 -26 19 15	1 174 178 3	0 602 626 6	0,5,l	17 66 66 4
4 116 109 7	4 321 313 5	21 69 66 4	0,6,l	4 231 230 3
7 -26 15 32	7 147 150 3	24 174 174 4	20 109 94 5	3 78 72 4
10 67 71 9	10 249 248 3	10 48 59 7	6 181 188 4	7 -26 23 7
13 -36 10 11	13 103 99 3	0 -8,l	12 148 151 5	13 -26 15 7
16 85 72 8	16 204 208 3	6 18 96 96 5	10 196 202 3	15 -31 33 11
-4,-4,l	19 61 55 4	2 -26 23 18	24 82 78 6	16 148 150 4
21 -26 3 12	22 110 109 4	8 152 141 5	16 198 208 5	19 -26 8 13
0 247 246 4	14 -26 19 23	0,7,l	22 79 76 5	22 92 95 4
3 -21 12 7	-2,-2,l	15 146 152 3	22 79 76 5	2,4,l
6 35 32 6	0 454 453 5	0,-7,l	2 65 66 6	2,5,l
9 -33 10 12	3 50 54 3	4 204 197 5	8 190 179 5	3 78 72 4
12 177 182 4	6 373 373 4	10 48 59 7	14 54 52 6	6 141 135 3
15 -31 6 14	9 37 38 4	16 129 124 5	20 109 94 5	9 49 54 5
18 -29 30 15	12 318 319 4	0,-5,l	5 315 316 3	12 153 160 4
21 -26 3 12	15 -16 21 12	0,-6,l	8 456 452 5	8 147 142 5
-3,-6,l	18 182 182 3	0 185 173 4	4 144 151 5	18 82 81 5
0 85 93 6	21 -21 10 17	6 202 203 4	10 -33 27 9	21 -28 17 13
3 -40 37 11	24 144 145 4	12 133 130 5	22 79 76 5	24 77 74 5
6 93 89 8	0 454 453 5	0,-4,l	1,2,l	2,6,l
9 55 31 8	1 50 8 9	24 71 66 6	2 601 594 6	2 83 88 4
12 86 72 8	4 87 92 8	0,-5,l	5 315 316 3	5 -28 21 7
15 -27 21 32	7 -26 8 31	2 206 201 4	4 456 452 5	8 147 142 5
-3,-5,l	-1,-7,l	8 290 283 5	11 179 186 3	11 40 15 6
2 70 64 5	0 180 172 3	14 134 144 4	14 293 296 4	14 63 65 5
5 -22 10 13	3 -33 26 11	20 163 148 5	20 222 224 4	20 73 76 5
8 186 181 4	6 44 43 6	6 202 203 4	23 49 42 5	2,7,l
11 -26 5 15	9 55 24 5	12 133 130 5	1,3,l	
14 46 51 7	12 136 132 4	4 690 692 8	2 601 594 6	1 46 35 11
17 -22 1 17	15 -27 18 19	10 44 37 5	1 34 33 4	4 90 92 8
20 107 94 4	18 -35 30 11	16 369 360 6	7 -24 23 5	7 -22 28 17
-3,-4,l	-1,-6,l	22 61 53 6	10 161 161 3	13 -39 19 11
1 35 37 6	2 137 134 4	0,-3,l	13 -21 7 11	3,4,l
4 285 278 5	5 -36 40 9	0 818 825 7	19 -24 0 12	2 82 89 4
7 47 35 5	8 163 162 4	6 209 199 3	22 95 94 4	5 28 30 6
10 73 75 4	11 -34 30 10	12 479 487 6	1,4,l	8 245 247 4
13 -25 26 14	14 103 95 4	18 136 134 4	11 35 19 5	11 35 19 5
16 173 174 4	17 -28 18 15	24 192 186 5	3 -19 13 14	14 66 73 5
19 33 16 7	20 84 89 5	8 184 180 3	6 184 180 3	17 -26 10 15
22 37 44 7	23 32 9 8	0,-2,l	9 245 256 4	20 129 126 4
-3,-3,l	-1,-5,l	2 855 816 10	15 -19 1 14	23 37 4 9
0 252 249 4	1 101 94 3	8 456 455 5	16 321 322 4	3,5,l
3 59 58 4	4 191 195 3	14 376 378 5	21 -29 2 12	
6 224 229 3	7 77 81 4	20 222 220 4	24 129 128 4	1 -26 14 14
9 46 46 4	10 189 195 4	0,-1,l	1,5,l	7 -27 15 14
12 197 196 4	13 53 57 5	12 1042 1030 18	4 181 179 4	4 193 199 4
15 45 30 7	16 128 133 4	4 1369 1374 15	7 36 39 6	10 49 57 6
18 124 124 4	19 39 33 9	10 289 286 4	5 92 86 3	13 -26 13 18
21 -28 16 13	22 86 90 5	16 473 466 6	8 177 188 3	16 120 124 4
24 98 96 4	-1,-4,l	22 140 138 4	11 66 63 4	19 -28 9 14
-2,-7,l	0 417 417 3	0,0,l	14 147 152 4	3,6,l
2 56 73 10	3 -23 20 8	6 438 395 7	20 105 113 4	3 -34 37 14
5 46 35 11	6 172 173 3	12 1042 1030 18	23 44 19 6	6 90 85 7
8 73 86 8	9 33 20 7	18 79 64 5	1,6,l	9 -24 30 28
11 47 29 10	12 306 306 4	24 282 282 7	1 40 44 6	12 75 78 8
-2,-6,l	18 99 104 4	0,1,l	4 181 179 4	15 -28 20 34
1 40 23 6	21 -26 9 14	1 40 44 6		
4 158 157 4	24 138 133 4	2 297 290 3	7 36 39 6	
7 -30 21 7	-1,-3,l	8 1010 1013 12	10 95 109 4	2 73 82 8
10 71 74 5	20 243 243 4	14 224 224 4	16 120 119 4	5 -8 18 34
13 -24 16 13	2 185 175 3	20 331 331 5	19 -19 17 9	8 106 104 7
16 105 102 4	5 49 51 3	0,2,l	22 47 54 6	11 -11 14 22
19 -27 10 15	8 523 535 5	14 147 152 4	14 55 55 9	14 55 55 9
-2,-5,l	11 34 41 4	4 554 572 6	1,7,l	4,6,l
9 70 65 4	14 138 134 3	10 487 493 6	15 -22 8 8	
0 210 212 3	17 34 26 5	16 317 313 5	18 40 36 6	4 54 61 10
3 72 76 4	23 33 14 6	22 171 169 4	9 -32 15 7	
6 136 130 3	-1,-2,l	0,3,l	12 130 126 4	
12 161 166 4	1 378 364 4	6 187 187 3	18 40 36 6	
15 48 45 6	4 505 513 5	18 122 123 4	5 54 6 8	
18 72 76 5	7 262 259 3	24 195 192 5	8 102 84 7	

\* Structure factors for 332 combined symmetry-averaged reflections, including reflections with intensities less than 2σ.

Structure factors \* for magnesian calcite LS, 6.4 mol% MgCO<sub>3</sub>.

-5,-5,1	18	103	103	3	4	528	533	5	0,4,1	2,3,1	
0 80 81 5	21	42	41	3	7	281	277	3	16	3	
3 38 31 6	24	110	109	3	10	467	458	5	643	654	
6 97 94 5	-2,-4,1	13	152	152	2	14	64	61	2	160	170
2 100 96 5	5	26	28	3	19	77	76	2	326	325	
5 27 12 6	261	259	3	-1,-1,1	22	204	206	3	0,5,1	14	
1 -8 20 17	14	178	180	3	0	634	656	6	16	250	
4 152 143 5	17	-21	16	6	3	620	595	6	17	252	
7 28 16 6	20	174	171	3	6	794	778	7	22	100	
10 86 91 5	23	21	10	4	9	359	357	3	20	178	
13 -18 10 9	14	178	180	3	0	362	372	5	23	100	
16 102 99 5	17	17	171	2	4	212	216	3	19	178	
-4,-4,1	10	283	261	3	0,-8,1	12	429	424	4	1	32
0 301 300 4	13	123	122	2	2	76	82	3	4	255	
3 -14 11 10	16	243	249	3	2	26	26	5	7	257	
6 29 35 4	19	77	75	2	8	199	188	4	10	22	
9 -15 9 8	22	145	143	3	14	23	21	5	13	3	
12 236 235 3	-2,-2,1	0	0,-7,1	15	171	174	2	228	222	4	
15 -19 6 7	0	472	472	5	4	237	238	4	20	143	
18 36 36 3	0	42	50	1	10	72	75	3	14	66	
21 -17 3 10	3	42	50	1	16	163	163	4	11	189	
-3,-7,1	9	35	36	2	16	163	163	4	15	142	
1 -17 4 20	12	348	350	4	0,-6,1	10	-18	32	12	113	
4 -3,-6,1	15	33	22	3	0	201	201	2	22	137	
7 79 80 3	21	-16	225	3	0	201	201	2	21	134	
0 120 118 3	24	179	184	3	6	242	242	4	2	169	
3 53 49 5	-1,-8,1	12	150	151	3	5	340	339	3	9	64
6 119 115 5	15	72	72	3	16	161	158	3	8	188	
9 50 42 5	1	-20	11	8	0,-5,1	16	163	163	4	11	17
12 98 93 5	4	128	124	5	10	42	37	9	14	93	
15 -19 30 22	7	-17	12	20	16	433	432	6	17	29	
-3,-5,1	10	45	53	6	2	215	217	3	20	102	
2 79 80 3	-1,-7,1	14	164	172	3	8	325	327	4	24	93
5 -12 6 10	21	-16	225	3	0	201	201	2	22	100	
8 226 222 3	0	216	212	2	6	242	242	4	2	22	
11 -15 0 8	3	-22	30	7	0,-4,1	12	150	151	3	5	34
14 63 67 3	6	49	54	3	4	748	754	9	7	40	
17 -15 4 8	9	30	31	4	10	42	37	9	10	38	
20 138 130 3	12	176	174	3	16	433	432	6	8	85	
-3,-4,1	15	15	22	7	22	62	64	3	13	17	
1 41 37 2	-1,-6,1	18	44	39	3	0,-3,1	14	336	337	4	
4 321 324 4	2	165	165	3	0	201	201	2	11	171	
7 35 39 3	5	50	52	3	6	235	221	3	12	171	
10 62 90 2	6	49	54	3	12	150	151	3	13	171	
13 30 32 3	9	30	31	4	18	165	163	3	14	167	
16 225 223 3	11	47	40	3	24	237	238	4	8	167	
19 26 22 4	12	133	127	3	0,-2,1	10	185	184	2	20	170
22 58 59 3	15	32	27	4	16	338	343	4	13	16	
-3,-3,1	18	44	39	3	22	169	171	3	23	102	
1 41 37 2	-1,-6,1	20	114	117	3	2	876	844	10	2	106
4 321 324 4	21	15	4	2	20	201	190	4	5	31	
7 35 39 3	24	179	184	3	6	242	242	4	8	28	
10 62 90 2	27	30	7	0,-4,1	12	150	151	3	11	290	
13 30 32 3	30	233	233	3	18	165	163	3	7	16	
16 225 223 3	31	14	133	127	3	24	237	238	4	13	
19 26 22 4	32	17	32	27	4	10	185	184	2	16	
22 58 59 3	35	19	51	3	16	534	523	7	17	16	
-3,-3,1	23	28	15	4	22	169	171	3	18	106	
1 41 37 2	-1,-6,1	28	15	4	2	876	844	10	24	106	
4 321 324 4	21	15	4	2	20	201	190	4	5	31	
7 35 39 3	24	179	184	3	6	242	242	4	8	28	
10 62 90 2	27	30	7	0,-4,1	12	150	151	3	11	290	
13 30 32 3	30	233	233	3	18	165	163	3	7	16	
16 225 223 3	31	14	133	127	3	24	237	238	4	13	
19 26 22 4	32	17	32	27	4	10	185	184	2	16	
22 58 59 3	35	19	51	3	22	169	171	3	18	106	
-2,-7,1	23	28	15	4	2	876	844	10	24	106	
1 41 37 2	-1,-5,1	26	111	110	2	14	434	430	5	4	238
4 321 324 4	29	224	223	3	0,-1,1	20	257	256	4	7	241
7 35 39 3	32	98	97	2	4	748	754	9	11	290	
10 62 90 2	35	185	189	3	10	42	37	9	12	290	
13 30 32 3	38	73	72	2	10	313	309	4	13	290	
16 225 223 3	41	161	163	3	16	534	523	7	14	290	
19 26 22 4	44	16	163	163	3	22	169	171	3	15	290
22 58 59 3	47	20	46	3	22	169	171	3	16	290	
-2,-6,1	48	121	125	2	2	316	307	4	17	290	
1 41 37 2	-1,-4,1	51	19	14	7	8	1060	1060	12	18	290
4 321 324 4	54	190	187	2	24	354	357	7	19	290	
7 -18 24 5	57	23	23	3	0,1,1	20	401	394	5	20	290
10 102 98 3	60	160	155	2	22	203	208	3	18	290	
13 -19 20 9	63	203	193	2	0,2,1	22	203	208	3	19	290
16 134 132 3	66	49	53	2	4	595	606	7	20	290	
19 -17 13 10	68	575	582	6	10	519	524	6	12	290	
22 22 22 4	71	46	48	2	14	367	359	5	15	290	
-2,-5,1	74	160	155	2	22	203	208	3	18	290	
1 41 37 2	-1,-2,1	77	35	35	2	6	202	203	3	19	290
3 94 92 2	80	295	300	4	0,3,1	20	401	394	5	20	290
6 159 161 3	83	11,-2,1	83	22	20	401	394	5	17	290	
9 84 84 2	86	12	559	557	5	18	142	145	3	8	290
12 197 200 3	89	18	142	145	3	8	116	113	5	4	290
15 66 64 3	92	1 391	382	4	24	250	251	4	7	-14	290

\* Structure factors for 338 combined symmetry-averaged reflections, including reflections with intensities less than 2σ.