AM-91-446

Grandreefite, $Pb_2F_2SO_4$: Crystal structure and relationship to the lanthanide oxide sulfates, $Ln_2O_2SO_4$

A. R. Kampf

For deposit: Table 2

American Mineralogist, 76, 1-2, 278-282.

Table 2. Observed and calculated structure factors for grandreefite.

H	L	F_o	F_c
**** K = 0 ****			
-12	4	168	155
-12	6	404	443
-10	2	435	474
-10	4	206	192
-10	6	283	256
-10	8	494	493
-10	12	383	395
-10	14	357	349
-8	2	195	193
-8	4	697	713
-8	6	126	132
-8	8	351	357
-8	10	512	500
-8	12	143	144
-8	14	439	445
-8	16	363	358
-8	18	280	270
-6	2	272	260
-6	4	326	317
-6	6	774	755
-6	10	527	511
-6	12	528	515
-6	14	275	271
-6	16	466	458
-6	18	264	237
-4	2	919	999
-4	4	335	320
-4	6	554	556
-4	8	599	588
-4	10	120	128
-4	12	617	608
-4	14	447	432
-4	16	283	280
-4	18	427	449
-2	2	415	418
-2	4	907	985
-2	6	150	140
-2	8	696	678
-2	10	621	609
-2	12	296	278
-2	14	538	546
-2	16	250	254
-2	18	314	334
0	2	267	250
0	4	482	485
0	6	769	775
0	8	229	225
0	10	601	592
0	12	528	533
0	14	335	314
0	16	423	433
0	18	153	126
2	0	381	385
2	2	885	979
2	4	156	143
2	6	638	640
2	8	626	632
2	10	285	268
2	12	511	510
2	14	265	267
2	16	324	323
4	0	375	372
4	2	528	523
4	4	590	581
4	6	95	91
4	8	570	568
4	10	443	428
4	12	217	228
4	14	411	415
4	16	129	99
6	0	697	725
6	2	83	92
6	4	469	467
6	6	517	516
6	8	182	200
6	10	413	410
6	12	213	229
8	0	305	300
8	2	502	498
8	4	107	98
8	6	376	372
8	8	357	363
8	10	173	198
10	2	349	327
10	4	365	361
10	6	165	122
**** K = 1 ****			
-12	5	152	153
-12	7	184	197
-10	1	287	294
-10	3	127	134
-10	5	469	495
-10	9	351	350
-10	11	441	444
-10	15	356	362
-9	7	106	41
-8	1	543	583
-8	3	234	240
-8	5	287	280
-8	7	596	583
-8	11	468	452
-8	13	436	431
-8	15	190	205
-8	17	396	406
-6	1	163	166
-6	3	692	713
-6	5	125	116
-6	7	511	510
-6	9	651	631
-6	11	91	76
-6	13	475	466
-6	15	339	341
-6	17	314	311
-6	19	404	427
-4	1	341	349
-4	3	376	372
-4	5	820	819
-4	7	69	56
-4	9	616	596
-4	11	573	566
-4	13	258	243
-4	15	488	491
-4	17	245	232
-4	19	309	346
-2	1	891	971
-2	3	148	137
-2	5	693	682
-2	7	816	816
-2	9	80	59
-2	11	535	534
-2	13	421	401
-2	15	360	342
-2	17	476	477
-2	19	169	139
0	1	410	419
0	3	904	985
0	5	121	98
0	7	661	657
0	9	627	633
0	11	271	249
0	13	525	518
0	15	259	254
0	17	357	345
1	1	71	26
2	1	165	160
2	3	667	663
2	5	783	815
2	9	525	510
2	11	399	400
2	13	319	319
2	15	449	459
2	17	171	146
4	1	776	821
4	3	116	102
4	5	560	544
4	7	560	559
4	9	224	209
4	11	465	457
4	13	242	239
4	15	299	299
6	1	466	464
6	3	637	627
6	7	417	407
6	9	339	338
6	11	251	252
6	13	362	378
8	1	89	81
8	3	380	379
8	5	425	422
8	7	164	149
8	9	329	350
10	1	455	439
10	5	309	290
**** K = 2 ****			
-10	2	448	461
-10	4	160	181
-10	6	213	235
-10	8	470	474
-10	12	326	335
-8	2	213	222
-8	4	555	568
-8	6	189	180
-8	8	350	356
-8	10	471	452
-8	12	119	100
-8	14	458	452
-8	16	297	292
-6	2	306	306
-6	4	354	357
-6	6	635	633
-6	10	486	475
-6	12	453	430
-6	14	199	190
-6	16	461	463
-6	18	177	204
-4	2	844	865
-4	4	221	216
-4	6	421	393
-4	8	668	638
-4	10	173	164
-4	12	542	532
-4	14	394	397
-4	16	273	282
-4	18	362	385
-2	2	414	415
-2	4	830	839
-2	8	544	541
-2	10	562	544
-2	12	243	228
-2	14	503	499
-2	16	240	256
-2	18	318	337
-1	2	67	72
0	0	838	899
0	2	401	390
0	4	531	516
0	6	639	629
0	8	118	102
0	10	630	625
0	12	390	392
0	14	248	249
0	16	408	421
0	18	122	98
1	2	68	103
2	0	398	395
2	2	799	826
2	4	87	63
2	6	548	537
2	8	535	531
2	10	209	196
2	12	484	489
2	14	242	245
2	16	281	306
3	2	57	87
4	0	250	242
4	2	368	356
4	4	640	635
4	6	153	137
4	8	517	492
4	10	394	400
4	12	244	248
4	14	353	346
6	0	608	625
6	2	84	71
6	4	438	429
6	6	434	436
6	8	155	148
6	10	397	399
6	12	204	213
8	0	309	307
8	2	442	439
8	6	419	399
8	8	271	285
10	2	286	287
10	4	353	334
**** K = 3 ****			
-10	1	218	252
-10	3	118	130
-10	5	377	398
-10	9	311	295
-8	1	475	486
-8	3	229	242
-8	5	273	271
-8	7	488	481
-8	11	389	372
-8	13	376	356
-6	1	173	166
-6	3	528	533
-6	5	152	147
-6	7	404	393
-6	9	549	536
-6	11	94	63
-6	13	419	431
-6	15	257	266
-4	1	336	338
-4	3	351	356
-4	5	628	627
-4	9	459	461
-4	11	457	439
-4	13	142	158
-4	15	429	445
-4	17	197	203
-2	1	642	640
-2	3	187	186
-2	5	481	472
-2	7	659	652
-2	9	72	55
-2	11	486	491
-2	13	302	302
-2	15	261	273
-2	17	371	398
0	1	397	392
0	3	702	707
0	7	525	489
0	9	479	473
0	11	166	159
0	13	460	461
0	15	212	220
2	1	195	193
2	3	467	457
2	5	661	648
2	9	481	474
2	11	306	300
2	13	252	260
2	15	373	381
4	1	650	632
4	5	435	431
4	7	426	424
4	9	136	136
4	11	415	413
4	13	197	205
6	1	359	357
6	3	531	525
6	7	392	390
6	9	256	259
8	3	342	325
8	5	331	334
10	1	399	381
**** K = 4 ****			
-8	2	161	149
-8	4	444	440
-8	6	146	140
-8	8	295	269
-8	10	390	386
-6	2	238	250
-6	4	272	270
-6	6	475	484
-6	10	351	355
-6	12	339	345
-6	14	129	137
-4	2	509	516
-4	4	225	224
-4	6	352	357
-4	8	441	443
-4	12	450	459
-4	14	241	258
-2	2	335	332
-2	4	557	553
-2	8	418	422
-2	10	371	375
-2	12	119	130
-2	14	420	425
0	0	624	619
0	2	213	200
0	4	326	329
0	6	520	520
0	8	94	95
0	10	458	450
0	12	307	301
0	14	204	218
2	0	335	322
2	2	569	554
2	6	401	407
2	8	379	377
2	10	131	129
2	12	401	401
4	0	240	230
4	2	340	341
4	4	444	431
4	8	439	438
4	10	261	248
6	0	500	475
6	4	356	338
6	6	328	325
8	0	238	239
8	2	386	372
**** K = 5 ****			
-6	1	134	136
-6	3	371	385
-6	5	118	138
-6	7	292	297
-6	9	349	358
-4	1	232	246
-4	3	247	247
-4	5	412	420
-4	9	362	352
-4	11	272	307
-2	1	427	443
-2	3	158	156
-2	5	336	337
-2	7	407	407
-2	11	363	372
0	1	247	268
0	3	458	448
0	5	99	61
0	7	367	372
0	9	318	318
0	11	114	109
2	1	170	155
2	3	342	333
2	5	393	401
2	9	356	363
4	1	425	417
4	5	325	338
4	7	270	292
6	1	278	286
6	3	366	344
**** K = 6 ****			
-2	2	208	209
-2	4	342	351
0	0	367	366
0	2	155	163
0	4	272	294
2	0	217	212
2	2	349	344