

Table 5. Observed and calculated structure factors  
for fuenzalidaite. Reflections marked with \* were  
excluded from least squares analysis. (3 pages.)

H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL
0	0	6	67	95	2	0	-14	121	-118	5	0	2	258	237	1	1	1	139	175	2	1	-4	113	101
0	0	8	414	-396	2	0	-16	318	-299	5	0	4	232	220	1	1	2*		11	2	1	-5*		49
0	0	10	325	-333	2	0	-18	368	-345	5	0	6	215	-209	1	1	3	66	85	2	1	-6*		-62
0	0	12	415	-369	2	0	-20	258	-267	5	0	8	120	-128	1	1	4	78	-120	2	1	-7	81	83
0	0	14	620	-612	2	0	-22	210	-209	5	0	10	347	-334	1	1	5	126	-129	2	1	-8	61	-46
0	0	16	128	115	2	0	-24*		46	5	0	12	313	-299	1	1	6	11	26	2	1	-9	145	-139
0	0	18	242	180	3	0	0	61	109	5	0	14	201	-195	1	1	7	326	328	2	1	-10*		-48
0	0	20	421	401	3	0	2	227	-215	5	0	16*		77	1	1	8	122	146	2	1	-11	95	-95
0	0	22	439	456	3	0	4	210	187	5	0	18*		47	1	1	9	26	-64	2	1	-12	163	-166
0	0	24	410	405	3	0	6	285	266	5	0	20	175	190	1	1	10	67	71	2	1	-13	185	-183
0	0	26*		47	3	0	8	408	380	5	0	-2	272	266	1	1	11	76	84	2	1	-14	146	-147
1	0	0	213	27	3	0	10	68	87	5	0	-4	254	242	1	1	12	71	62	2	1	-15	108	-85
1	0	4	119	-157	3	0	12	111	107	5	0	-6	61	-59	1	1	13	28	-32	2	1	-16	60	74
1	0	6	152	-153	3	0	14	116	-136	5	0	-8*		-29	1	1	14	155	151	2	1	-17	36	31
1	0	8	161	-129	3	0	16	96	-79	5	0	-10	393	-390	1	1	15	134	-129	2	1	-18*		36
1	0	10*		-26	3	0	18	203	-199	5	0	-12	266	-255	1	1	16	21	12	2	1	-19*		23
1	0	12	39	-19	3	0	20	286	-279	5	0	-14	181	-177	1	1	17	61	-64	2	1	-20	141	126
1	0	14	143	120	3	0	22	125	-145	5	0	-16	72	-76	1	1	18*		-14	2	1	-21	51	57
1	0	16	210	211	3	0	24*		82	5	0	-18*		44	1	1	19	79	85	2	1	-22	199	183
1	0	18	127	127	3	0	-2	380	-382	5	0	-20	282	275	1	1	20	44	-16	2	1	-23	117	105
1	0	20	139	142	3	0	-4	476	-464	6	0	0	284	296	1	1	21	101	-108	2	1	-24	136	136
1	0	22*		7	3	0	-6	79	-85	6	0	2*		17	1	1	22	57	-40	2	1	-25	24	12
1	0	24*		-29	3	0	-8	46	-31	6	0	4	52	-56	1	1	23*		21	3	1	0*		-11
1	0	26*		-16	3	0	-10	111	-108	6	0	6*		20	1	1	24	68	-73	3	1	1*		-23
1	0	-4	142	167	3	0	-12	341	331	6	0	8*		5	1	1	25	41	56	3	1	2	36	-52
1	0	-6	189	181	3	0	-14	114	116	6	0	10	80	26	1	1	26*		-34	3	1	3	51	44
1	0	-8	199	207	3	0	-16	414	410	6	0	12	127	114	2	1	0	286	294	3	1	4	47	-49
1	0	-10*		25	3	0	-18	205	198	6	0	14	71	-104	2	1	1	181	167	3	1	5	126	-111
1	0	-12	167	-166	3	0	-20*		-57	6	0	16*		38	2	1	2	206	216	3	1	6*		4
1	0	-14	124	-116	3	0	-22	83	-66	6	0	-2*		24	2	1	3*		19	3	1	7	205	-190
1	0	-16	51	-55	3	0	-24	68	-103	6	0	-4*		-67	2	1	4	133	124	3	1	8	98	142
1	0	-18	148	-146	4	0	0*		-43	6	0	-6	79	74	2	1	5	40	-57	3	1	9	202	-192
1	0	-20	193	-197	4	0	2*		48	6	0	-8*		26	2	1	6	25	-49	3	1	10	183	179
1	0	-22*		-65	4	0	4*		61	6	0	-10*		3	2	1	7	159	-160	3	1	11	35	-33
1	0	-24	91	113	4	0	6	248	241	6	0	-12	100	106	2	1	8*		-12	3	1	12	67	46
1	0	-26	99	109	4	0	8	243	259	6	0	-14	44	-97	2	1	9	191	-186	3	1	13*		15
2	0	0	230	-238	4	0	10	187	157	6	0	-16*		22	2	1	10	193	-190	3	1	14*		23
2	0	2	462	-470	4	0	12*		52	7	0	0*		-3	2	1	11	107	-108	3	1	15	133	123
2	0	4	429	-417	4	0	14	64	-78	7	0	2	194	-182	2	1	12	170	-167	3	1	16	62	48
2	0	6	565	-522	4	0	16	85	-99	7	0	4	184	-178	2	1	13	70	-48	3	1	17*		69
2	0	8	91	-58	4	0	18	95	-95	7	0	6	115	-91	2	1	14	85	-92	3	1	18	18	3
2	0	10	156	156	4	0	20	154	-150	7	0	8	84	-80	2	1	15	122	-127	3	1	19	111	104
2	0	12	300	276	4	0	22*		-71	7	0	10*		37	2	1	16	69	-78	3	1	20	133	-120
2	0	14	365	349	4	0	-2	114	-119	7	0	12	97	125	2	1	17	95	70	3	1	21	80	95
2	0	16	473	468	4	0	-4	258	-254	7	0	-2*		-2	2	1	18	88	83	3	1	22*		-28
2	0	18	173	174	4	0	-6	166	-160	7	0	-4	119	108	2	1	19	44	45	3	1	23	108	88
2	0	20	82	39	4	0	-8*		24	7	0	-6	196	204	2	1	20	186	168	3	1	-1	208	209
2	0	22	117	-137	4	0	-10	81	79	7	0	-8	195	181	2	1	21	67	78	3	1	-2*		-41
2	0	24	202	-232	4	0	-12*		111	7	0	-10	152	150	2	1	22	112	104	3	1	-3	138	136
2	0	-2*		34	4	0	-14	150	141	7	0	-12*		9	2	1	23	32	70	3	1	-4	141	-147
2	0	-4	314	306	4	0	-16	138	223	8	0	0*		52	2	1	24	178	183	3	1	-5	207	214
2	0	-6	411	416	4	0	-18	159	161	8	0	2*		-10	2	1	25	22	16	3	1	-6	56	57
2	0	-8	575	579	4	0	-20	85	-95	8	0	-2	43	-15	2	1	-1*		10	3	1	-7	135	141
2	0	-10	208	215	4	0	-22*		-49	2	1	-2			2	1	-2	225	225	3	1	-8	48	50
2	0	-12	182	162	5	0	0	251	270	1	1	0	76	-68	2	1	-3*		30	3	1	-9*		45

H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL
3	1	-10	33	78	4	1	-20	28	-31	6	1	14	27	61	2	2	18	58	67	4	2	3*		-7
3	1	-11	57	-64	4	1	-21	87	-68	6	1	15	159	-151	2	2	19*		-47	4	2	4*		-59
3	1	-12	79	96	5	1	0	12	-20	6	1	-1*		15	2	2	20	200	174	4	2	5	50	-79
3	1	-13	44	-67	5	1	1	102	-82	6	1	-2	115	-113	2	2	21	89	66	4	2	6	36	-30
3	1	-14*		4	5	1	2	96	104	6	1	-3	250	-246	2	2	22	164	172	4	2	7	67	-68
3	1	-15	187	-175	5	1	3	80	-81	6	1	-4	19	-4	2	2	23*		-32	4	2	8	14	1
3	1	-16	51	50	5	1	4	189	192	6	1	-5	146	-145	2	2	24	155	168	4	2	9*		-28
3	1	-17	45	-69	5	1	5	55	36	6	1	-6*		33	3	2	0	157	-143	4	2	10	94	77
3	1	-18*		37	5	1	6	126	107	6	1	-7	203	-206	3	2	1*		9	4	2	11	163	-149
3	1	-19*		-39	5	1	7	133	123	6	1	-8	87	88	3	2	2	289	-284	4	2	12*		4
3	1	-20*		-62	5	1	8	107	95	6	1	-9	139	-143	3	2	3	51	50	4	2	13*		20
3	1	-21*		39	5	1	9	200	185	6	1	-10	122	134	3	2	4	238	-239	4	2	14	78	71
3	1	-22*		-43	5	1	10*		-15	6	1	-11*		-3	3	2	5	153	147	4	2	15*		-55
3	1	-23	83	73	5	1	11	173	165	6	1	-12	100	100	3	2	6	224	-216	4	2	16	68	91
4	1	0	129	132	5	1	12	66	-66	6	1	-13	121	133	3	2	7	46	41	4	2	17*		39
4	1	1	142	-139	5	1	13	132	135	6	1	-14	100	90	3	2	8	44	66	4	2	18	21	13
4	1	2	64	-65	5	1	14	98	-81	6	1	-15	97	103	3	2	9*		-4	4	2	19	79	83
4	1	3	245	-242	5	1	15*		-28	7	1	0	155	150	3	2	10*		42	4	2	20*		-22
4	1	4	224	-223	5	1	16	111	-106	7	1	1	206	184	3	2	11	20	16	4	2	-1*		-39
4	1	5	189	-181	5	1	17	38	-59	7	1	2	90	76	3	2	12	259	256	4	2	-2*		-7
4	1	6	162	-156	5	1	18	90	-95	7	1	3	114	94	3	2	13	124	-128	4	2	-3	108	118
4	1	7	34	23	5	1	19	95	-96	7	1	4*		0	3	2	14	265	268	4	2	-4*		70
4	1	8	118	-103	5	1	-1	255	-254	7	1	5	78	61	3	2	15	43	-50	4	2	-5*		22
4	1	9*		33	5	1	-2	28	-25	7	1	6	146	-53	3	2	16	197	194	4	2	-6	77	74
4	1	10	27	-40	5	1	-3	190	-187	7	1	7*		8	3	2	17	102	-106	4	2	-7	52	9
4	1	11	185	172	5	1	-4	53	-52	7	1	8	98	-39	3	2	18	99	94	4	2	-8	49	42
4	1	12*		21	5	1	-5	69	-67	7	1	9	143	-127	3	2	19	122	-114	4	2	-9	31	-29
4	1	13	214	206	5	1	-6	172	-170	7	1	-1	136	140	3	2	20	59	57	4	2	-10	113	108
4	1	14	177	165	5	1	-7*		-6	7	1	-2	127	129	3	2	21	41	23	4	2	-11	57	-48
4	1	15	153	150	5	1	-8	38	-72	7	1	-3	93	111	3	2	22	167	-178	4	2	-12*		-11
4	1	16	193	177	5	1	-9	50	63	7	1	-4*		59	3	2	-1	24	3	4	2	-13	152	-146
4	1	17	98	87	5	1	-10	101	-106	7	1	-5*		39	3	2	-2	45	-62	4	2	-14	30	1
4	1	18	131	132	5	1	-11	181	173	7	1	-6*		20	3	2	-3	125	-116	4	2	-15*		31
4	1	19	92	99	5	1	-12*		-61	7	1	-7	128	-135	3	2	-4	217	215	4	2	-16	36	-30
4	1	20	113	140	5	1	-13	105	116	7	1	-8*		3	3	2	-5	148	-137	4	2	-17	50	-65
4	1	21	118	-132	5	1	-14	89	87	7	1	-9	172	-175	3	2	-6	125	123	4	2	-18*		-51
4	1	-1	123	-129	5	1	-15	154	164						3	2	-7	124	-111	4	2	-19*		-11
4	1	-2	128	135	5	1	-16	131	141	2	2	0	174	177	3	2	-8	343	348	4	2	-20*		13
4	1	-3	56	-56	5	1	-17*		38	2	2	1*		-46	3	2	-9	37	-49	5	2	0*		-11
4	1	-4	163	150	5	1	-18	73	79	2	2	2	242	240	3	2	-10	333	336	5	2	1*		20
4	1	-5	249	256	5	1	-19	53	-81	2	2	3	186	-178	3	2	-11	36	-55	5	2	2	73	77
4	1	-6	197	192	6	1	0	131	-138	2	2	4	102	96	3	2	-12	130	124	5	2	3	49	9
4	1	-7	65	59	6	1	1*		5	2	2	5	81	104	3	2	-13*		31	5	2	4	124	116
4	1	-8	199	192	6	1	2	53	-59	2	2	6*		-20	3	2	-14	62	-56	5	2	5*		9
4	1	-9	223	229	6	1	3	167	166	2	2	7	34	60	3	2	-15*		20	5	2	6	241	236
4	1	-10	50	79	6	1	4	102	-114	2	2	8	90	-96	3	2	-16*		-44	5	2	7	157	-155
4	1	-11	200	207	6	1	5	236	223	2	2	9	90	100	3	2	-17	91	101	5	2	8	270	269
4	1	-12*		-66	6	1	6	47	59	2	2	10	340	-336	3	2	-18	297	-287	5	2	9*		-36
4	1	-13*		12	6	1	7	189	182	2	2	11*		-22	3	2	-19	122	140	5	2	10	95	99
4	1	-14	24	-62	6	1	8	100	90	2	2	12	303	-296	3	2	-20	195	-170	5	2	11*		-19
4	1	-15*		26	6	1	9	34	51	2	2	13	69	-72	3	2	-21*		14	5	2	12	61	49
4	1	-16	137	-149	6	1	10	105	93	2	2	14*		-45	3	2	-22	130	-139	5	2	13*		-49
4	1	-17	133	-119	6	1	11*		68	2	2	15	25	12	4	2	0*		5	5	2	14	48	-62
4	1	-18	138	-135	6	1	12	109	109	2	2	16*		-19	4	2	1	107	114	5	2	15	59	65
4	1	-19	249	-251	6	1	13	152	-149	2	2	17	76	107	4	2	2*		-43	5	2	16	123	-133

H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL	H	K	L	FREL	FCAL
5	2	-1	121	118	6	2	-4	104	111	4	3	1	103	95	4	3	-15	84	-97	6	3	1	165	-172
5	2	-2	183	-183	6	2	-5*		-4	4	3	2	166	154	4	3	-16	118	114	6	3	2*		-21
5	2	-3	68	56	6	2	-6*		-30	4	3	3	117	126	4	3	-17*		-73	6	3	3	126	-146
5	2	-4	210	-208	6	2	-7	141	134	4	3	4	130	119	5	3	0	40	-49	6	3	-1	97	-103
5	2	-5	50	30	6	2	-8	59	61	4	3	5	74	-70	5	3	1*		-45	6	3	-2*		47
5	2	-6	228	-224	6	2	-9	83	81	4	3	6	118	116	5	3	2	133	-149	6	3	-3*		-14
5	2	-7	142	138	6	2	-10	28	14	4	3	7	76	-66	5	3	3	111	-122					
5	2	-8	39	-51	6	2	-11	117	110	4	3	8*		-32	5	3	4*		16	4	4	0	59	-77
5	2	-9*		-19						4	3	9	116	-99	5	3	5	77	-53	4	4	1	129	126
5	2	-10*		-2	3	3	0	270	278	4	3	10	93	-89	5	3	6	213	-213	4	4	2*		-54
5	2	-11*		-46	3	3	1	15	5	4	3	11	165	-163	5	3	7*		-64	4	4	3	174	167
5	2	-12	107	106	3	3	2*		-22	4	3	12	152	-149	5	3	8	20	61	4	4	4*		-44
5	2	-13*		-40	3	3	3	109	113	4	3	13	102	-117	5	3	9*		-17	4	4	5	158	161
5	2	-14	215	216	3	3	4*		17	4	3	14	188	-192	5	3	10	144	134	4	4	6*		20
5	2	-15	80	-91	3	3	5	119	115	4	3	15	44	37	5	3	11	14	9	4	4	7	144	145
5	2	-16	194	202	3	3	6	82	84	4	3	16	75	-84	5	3	12	74	76	4	4	8	67	87
6	2	0*		29	3	3	7	91	84	4	3	17*		32	5	3	13*		-20	4	4	9*		40
6	2	1	129	-198	3	3	8	79	-68	4	3	-1	224	218	5	3	-1*		26	4	4	10*		15
6	2	2*		28	3	3	9*		61	4	3	-2	86	95	5	3	-2*		27	4	4	11*		21
6	2	3	109	-110	3	3	10	155	-146	4	3	-3	190	190	5	3	-3*		40	4	4	12*		22
6	2	4*		-3	3	3	11*		-7	4	3	-4	80	-73	5	3	-4*		50	4	4	13*		-30
6	2	5*		-30	3	3	12	28	-34	4	3	-5	72	69	5	3	-5*		46	5	4	0	103	-103
6	2	6	61	-73	3	3	13	63	-46	4	3	-6	76	-74	5	3	-6	93	89	5	4	1	88	144
6	2	7*		-52	3	3	14	121	-111	4	3	-7	43	-45	5	3	-7*		34	5	4	2	40	-81
6	2	8	52	-4	3	3	15	71	-75	4	3	-8	171	-156	5	3	-8	244	239	5	4	3*		62
6	2	9	69	74	3	3	16	73	83	4	3	-9*		-56	5	3	-9	47	56	5	4	4	58	-50
6	2	10	122	-105	3	3	17	116	-116	4	3	-10	103	-85	5	3	-10*		22	5	4	5	46	128
6	2	11	60	89	3	3	18*		39	4	3	-11	190	-193	5	3	-11*		6	5	4	6*		-54
6	2	-1*		-34	3	3	19*		-72	4	3	-12	104	-100	5	3	-12	119	115	5	4	-1*		-33
6	2	-2	34	58	3	3	20*		20	4	3	-13	110	-101	5	3	-13*		-31	5	4	-2*		5
6	2	-3*		-36	4	3	0	253	252	4	3	-14	106	-100	6	3	0	114	104	5	4	-3*		-43