

Dreidimensionale Verfeinerung der Kristallstruktur von Dufrenoyisit, $\text{Pb}_8\text{As}_8\text{S}_{20}$ *

Von **B. RIBÁR****, **CH. NICCA** † und **W. NOWACKI**

Abteilung für Kristallographie und Strukturlehre, Universität Bern

(Eingegangen am 19. Dezember 1968)

Abstract

The crystal structure of dufrenoyisit has been refined by means of three-dimensional difference Fourier syntheses and least-squares method utilizing 2966 reflection data obtained diffractometrically. The lattice constants are $a = 7.90$, $b = 25.74$, $c = 8.37 \text{ \AA}$, $\beta = 90^\circ 21'$ and the space group is $C_2^2-P2_1$ with $Z = 2$. Among eight independent Pb atoms four are surrounded by nine S atoms with distances between 2.91 and 3.48 \AA . Three Pb atoms are surrounded by seven S atoms between 2.73 and 3.62 \AA . One Pb atom has a sixfold S coordination between 2.69 and 3.31 \AA ; a seventh S atom lies at a distance of 3.86 \AA . The Pb(7) and Pb(8) atom have a fractional population. Each As atom is coordinated by S atoms in a trigonal-pyramidal configuration with distances ranging from 2.18 to 2.51 \AA . AsS_3 pyramids form finite As_3S_7 and As_4S_9 groups. The R value for all reflections is 9.1%.

Auszug

Die Kristallstruktur von Dufrenoyisit wurde mit Differenz-Fouriersynthesen und nach der Methode der kleinsten Quadrate mit Hilfe von 2966 diffraktometrisch vermessenen Reflexen dreidimensional verfeinert. Die Gitterkonstanten sind $a = 7,90$, $b = 25,74$, $c = 8,37 \text{ \AA}$, $\beta = 90^\circ 21'$ und die Raumgruppe ist $C_2^2-P2_1$ mit $Z = 2$. Vier von acht unabhängigen Pb-Atomen sind von neun S-Atomen in den Abständen 2,91 bis 3,48 \AA umgeben. Drei Pb-Atome haben eine Siebener-Koordination mit Abständen von 2,73 bis 3,62 \AA , ein Pb-Atom eine Sechser-Koordination mit Abständen von 2,69 bis 3,31 \AA . Ein siebentes S-Atom befindet sich im Abstand von 3,86 \AA . Die Pb(7) und die Pb(8)-Position sind nur teilweise besetzt. Alle As-Atome weisen eine trigonal-pyramidale S-Koordination mit Abständen von 2,18 bis 2,51 \AA auf. AsS_3 -Pyramiden sind zu endlichen As_3S_7 - und As_4S_9 -Kettenstücken vereinigt. Der R -Wert für alle Reflexe beträgt 9,1%.

* Mitteilung Nr. 195. Teil 47 über Sulfide und Sulfosalze.

** Jetzige Adresse: Physikalisches Institut, Sarajewo, Vojvode Putnika 43, Jugoslawien.

Einleitung

Die Struktur von Dufrenoyzit, bestimmt von MARUMO und NOWACKI (1967a) aus den (100)- und (001)-Projektionen, ergab für dreidimensionale Daten einen R -Wert von 29%, was darauf hinweist, daß die Parameter noch nicht ganz genau sind. Insbesondere zeigten die Reflexe der ungeraden Schichtlinien um die c -Achse (mit schwachen Reflexen) einen hohen R -Wert von 41%, was andererseits auf eine Überstruktur hinweisen könnte. Um die genauen Parameter zu erhalten und einen Vergleich mit der rathitähnlichen Sulfosalzgruppe (Rathit-I, Rathit-II, Rathit-III, Baumhauerit und Skleroklas) zu ermöglichen, wurde eine dreidimensionale Verfeinerung durchgeführt.

Experimentelles

Als Untersuchungsmaterial diente ein Kristall aus dem Lengenbach im Binnatal (Kt. Wallis, Schweiz). Die Gitterkonstanten sind $a = 7,90 \pm 0,01 \text{ \AA}$, $b = 25,74 \pm 0,05 \text{ \AA}$, $c = 8,37 \pm 0,04 \text{ \AA}$, $\beta = 90^\circ 21' \pm 10'$. Der Zellinhalt beträgt $Z = 2$ Formeleinheiten $\text{Pb}_8\text{As}_8\text{S}_{20}$. Die Raumgruppe ist $C_2^2-P2_1$; die Dichte $d_x = 5,65 \text{ g cm}^{-3}$. Die Ergebnisse der Elektronen-Mikrosondenanalyse (NOWACKI und BAHEZRE, 1963) und die chemische Analyse der Fa. Fresenius (Wiesbaden) sind in Tab. 1 enthalten. Zur Messung der Intensitäten wurde eine Kristallkugel von

Tabelle 1. *Chemische und Elektronen-Mikrosondenanalyse von Dufrenoyzit*

	Pb	As	S	Total
Chemische Analyse	55,72%	19,94%	23,72%	99,38%
Mikrosondenanalyse	54,8	20,6	26,7	102,1
Theoretisch für $\text{Pb}_8\text{As}_8\text{S}_{20}$	57,20	20,68	22,12	100,00

0,15 mm Durchmesser verwendet (hergestellt durch CH. NICCA †). Die Intensitäten wurden mit einem Supper-Pace Autodiffraktometer mit $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung gemessen. Es wurden alle äquivalenten Reflexe der nullten bis zur 7-ten Schichtlinie um die c -Achse und der nullten Schichtlinie um die b -Achse vermessen und nach Korrektion gemittelt (die 0., 1. und 2. Schichtlinie parallel c wurde noch von CH. NICCA gemessen und seine Resultate mit den unsrigen verglichen). Insgesamt wurden 2966 unabhängige Reflexe verwendet. Von diesen waren 400 nicht beobachtet. Die Intensitäten wurden bezüglich des Lorentz-Polarisations- und des Absorptionsfaktors ($\mu R = 7,0$) korrigiert. Die Korrekturen wurden auf der Rechenanlage IBM 1620 der Universität Bern durchgeführt.

Tabelle 2. Koordinaten und Temperaturfaktoren mit Standardabweichungen der Atome von Dufrenoyzit
 $T = \exp - (h^2 B_{11} + k^2 B_{22} + l^2 B_{33} + 2hk B_{12} + 2hl B_{13} + 2kl B_{23})$ [alle Zahlen wurden mit 10^4 multipliziert]

	x	$\sigma(x)$	y	$\sigma(y)$	z	$\sigma(z)$	B_{11}	$\sigma(B_{11})$	B_{22}	$\sigma(B_{22})$	B_{33}	$\sigma(B_{33})$	$2 B_{12}$	$\sigma(2B_{12})$	$2 B_{13}$	$\sigma(2B_{13})$	$2 B_{23}$	$\sigma(2B_{23})$
Pb(1)	142	3	4	1	8758	4	123	5	10	1	80	6	13	2	82	6	10	2
Pb(2)	9751	3	4975	1	6322	4	79	4	10	1	88	6	1	2	8	5	11	2
Pb(3)	5253	4	944	1	8759	5	142	5	11	1	124	7	15	2	104	8	6	2
Pb(4)	5153	3	951	1	3819	4	101	4	9	1	79	6	3	2	35	6	6	2
Pb(5)	1897	3	2250	1	8799	3	87	4	6	1	68	5	0	1	8	5	3	2
Pb(6)	3193	3	3723	1	1384	3	70	4	7	1	71	5	1	1	3	5	1	2
Pb(7)	6667	3	2550	1	6448	4	25	4	8	1	41	5	0	2	10	5	11	2
Pb(8)	2141	3	2281	1	3994	4	69	4	5	1	51	6	2	2	14	5	5	2
As(1)	9567	7	1426	2	1687	9	60	8	7	1	68	13	3	3	2	13	4	4
As(2)	9448	7	1345	2	6333	9	66	8	4	1	81	13	2	3	14	13	7	4
As(3)	5590	7	4607	2	8887	10	62	8	5	1	107	14	3	3	17	14	10	4
As(4)	5422	6	4514	2	4414	8	55	7	6	1	46	11	2	3	49	12	14	4
As(5)	8837	7	3626	2	3748	9	46	8	6	1	82	13	6	3	4	13	8	4
As(6)	8837	7	3518	2	9501	9	69	8	6	1	66	12	4	4	20	13	9	4
As(7)	2987	6	3530	3	6391	9	32	7	17	1	26	12	12	4	35	12	24	6
As(8)	6356	7	2343	2	1199	9	62	8	7	1	76	13	14	4	9	13	12	5

Verfeinerung der Kristallstruktur von Dufrenoyzit

Tabelle 2. (Fortsetzung)

	x	$\sigma(x)$	y	$\sigma(y)$	z	$\sigma(z)$	B_{11}	$\sigma(B_{11})$	B_{22}	$\sigma(B_{22})$	B_{33}	$\sigma(B_{33})$	$2B_{12}$	$\sigma(2B_{12})$	$2B_{13}$	$\sigma(2B_{13})$	$2B_{23}$	$\sigma(2B_{23})$
S(1)	2714	15	310	5	1193	22	65	17	7	2	120	33	7	8	21	32	27	11
S(2)	7950	16	720	4	1310	19	91	18	7	1	32	26	11	8	93	29	5	9
S(3)	1192	13	1100	5	8220	18	39	14	8	2	41	25	5	7	34	25	4	9
S(4)	4053	15	1817	5	1250	20	72	16	7	2	71	28	2	8	35	28	2	9
S(5)	7741	16	1958	5	9150	20	88	19	9	2	51	28	19	9	45	31	12	10
S(6)	4400	16	3081	5	4091	22	66	16	9	2	83	29	5	8	73	30	17	10
S(7)	4488	17	3066	4	8535	23	86	18	5	1	128	34	16	8	43	35	10	9
S(8)	616	16	2976	6	6326	20	72	17	13	2	44	29	9	9	8	30	18	11
S(9)	430	16	2998	4	1150	21	84	17	3	1	111	31	3	7	86	32	7	9
S(10)	752	14	4136	5	8967	18	56	15	8	2	36	23	3	8	10	25	1	9
S(11)	3926	12	4850	4	875	16	55	14	3	1	46	23	4	6	11	25	0	7
S(12)	7385	14	3977	5	1533	19	53	15	9	2	56	26	1	8	76	27	0	10
S(13)	7306	14	4027	4	5885	19	73	16	4	1	77	28	6	7	35	29	19	9
S(14)	3012	14	217	4	6038	19	67	15	7	2	40	25	9	8	65	26	19	9
S(15)	7698	16	660	5	6316	23	70	17	6	1	119	34	6	8	26	33	2	10
S(16)	1061	16	1134	5	3963	21	64	16	7	1	95	29	5	8	90	31	3	9
S(17)	4248	14	1822	5	6167	18	64	15	8	2	35	25	7	8	5	26	14	9
S(18)	7782	16	1926	6	3187	24	68	18	10	2	123	35	4	9	6	33	11	11
S(19)	1049	16	4187	5	3755	21	75	18	6	1	98	32	3	8	128	33	11	9
S(20)	3920	15	4819	4	6663	20	69	15	6	1	64	27	2	7	10	28	16	9

Tabelle 3. Werte von (hkl) , $|F_o|$ und $|F_c|$ für Dufrenoyzit

h k l	$ F_o $	$ F_c $	h k l	$ F_o $	$ F_c $	h k l	$ F_o $	$ F_c $	h k l	$ F_o $	$ F_c $	h k l	$ F_o $	$ F_c $
0 0 2	112.6	68.4	1 10 0	303.6	302.5	1 22 0	80.4	78.6	3 5 1	122.5	131.7	6 15 1	29.6*	35.9
4	982.6	1265.6	2	451.9	435.5	2	195.5	190.8	4	88.7	82.1	7	65.0	69.9
6	18.4*	3.7	3	151.5	144.7	3	101.7	90.5	5	98.2	90.4	8	87.5	84.5
8	360.6	434.8	4	308.8	336.5	4	174.1	186.4	6	184.6	165.8	0 16 1	70.4	64.7
10	31.9	28.8	5	172.9	180.4	5	94.5	97.5	7	34.5	30.7	1	168.0	169.3
1 0 0	60.0	10.6	6	63.4	65.4	6	73.6	79.5	8	67.7	69.2	2	21.8*	22.9
2	297.6	259.7	7	77.9	80.2	1 23 0	40.6	47.1	9	38.8	44.5	3	108.9	114.4
3	118.0	75.3	8	122.6	131.3	2	26.2*	23.7	0 6 1	174.7	189.7	4	92.2	93.1
4	350.4	305.8	9	76.6	83.5	3	130.6	134.1	1	55.4	56.4	5	85.1	86.5
5	49.8	41.7	1 11 0	258.8	270.4	4	189.9	200.0	2	120.8	104.6	6	32.8*	26.0
6	212.9	192.6	2	142.1	132.6	5	137.5	146.2	3	74.9	84.7	7	104.1	96.4
7	90.6	65.6	3	83.4	83.1	6	149.5	157.5	4	139.9	149.6	8	45.9	47.8
8	82.1	76.1	4	442.5	484.7	0 24 0	128.1	117.2	5	82.3	71.1	0 17 1	56.9	59.1
9	136.2	133.9	5	117.0	129.2	1	94.9	91.0	6	115.7	107.8	1	150.9	145.5
1 1 0	189.1	134.9	6	132.8	144.4	2	215.5	218.6	7	34.2	50.0	2	118.4	124.2
2	237.2	196.3	7	40.7	39.3	3	224.4	228.3	8	15.8*	15.2	3	19.7*	17.7
3	203.6	163.1	8	252.5	250.8	4	70.6	73.5	9	45.5	41.5	4	97.0	104.0
4	154.5	121.0	9	36.1	42.5	5	65.5	66.6	0 7 1	74.9	75.7	5	30.1	45.6
5	68.5	48.2	0 12 0	179.2	153.3	6	119.2	122.6	1	88.7	83.0	6	29.6*	32.6
6	65.9	78.8	1	233.8	239.2	1 25 0	91.5	90.7	2	42.6	25.8	7	61.8	68.6
7	60.0	53.6	2	294.7	305.4	2	75.0	73.4	3	89.1	96.4	8	97.0	97.0
8	132.0	138.5	3	118.3	121.8	3	94.5	99.7	4	122.9	129.9	0 18 1	28.0*	21.7
9	191.6	194.2	4	132.8	147.0	4	100.0	105.3	5	120.4	135.7	1	141.4	141.8
0 2 0	17.3*	105.1	5	338.9	363.2	5	109.5	111.9	6	81.2	75.9	2	76.8	75.9
1	178.9	126.6	6	136.2	161.0	0 26 0	238.9	239.3	7	108.2	101.1	3	59.0	77.2
2	689.6	651.5	7	99.1	105.6	5	172.9	174.3	8	15.1	30.3	4	101.8	75.0
3	382.9	345.1	8	162.2	160.6	2	61.3	63.8	9	39.0	64.4	5	81.2	84.1
4	411.4	361.9	1 13 0	213.7	214.8	3	46.8	44.7	0 8 1	57.3	62.5	6	38.4	38.7
5	171.1	149.0	2	255.1	245.0	4	28.8	33.2	1	177.5	180.6	7	76.8	83.0
6	70.2	43.7	3	175.0	176.2	5	172.5	182.7	2	133.8	127.9	0 19 1	37.9*	30.8
7	271.8	267.1	4	44.2*	30.6	1 27 0	177.1	174.3	3	37.0	37.0	1	153.1	160.5
8	158.7	161.5	5	55.3	51.6	2	75.3	72.5	4	161.3	170.9	2	38.4*	41.9
9	103.4	102.1	6	166.5	172.7	3	100.4	98.0	5	74.5	76.8	3	100.5	99.1
1 3 0	189.9	137.3	7	247.0	249.5	4	31.5	36.7	6	13.7*	24.0	4	76.4	95.0
2	338.1	282.7	8	90.6	96.0	5	56.6	61.1	7	85.1	80.2	5	164.0	169.2
3	91.5	91.9	0 14 0	493.8	489.7	0 28 0	73.2	65.8	8	72.1	65.4	6	78.5	77.5
4	597.0	544.4	1	568.6	598.5	1	177.1	172.3	9	29.6	26.7	7	22.2*	21.3
5	497.0	462.1	2	75.3	75.7	2	196.6	198.8	0 9 1	95.8	90.2	0 20 1	82.8	75.2
6	38.3*	41.4	3	244.4	249.0	3	88.1	91.4	1	191.7	195.4	1	121.9	118.6
7	330.0	316.2	4	174.1	180.9	4	48.9	50.8	2	142.2	149.9	2	125.2	126.6
8	83.8	82.8	5	158.4	171.5	1 29 0	73.2	62.9	3	27.2*	10.6	3	65.4	62.1
9	91.1	88.3	6	164.0	173.2	2	75.7	79.7	4	105.3	113.0	4	74.5	79.4
0 4 0	185.1	100.7	7	50.2	59.1	3	68.9	69.9	5	63.3	66.7	5	90.6	95.8
1	259.8	236.8	8	71.0	71.4	0 30 0	191.1	195.5	6	69.2	64.0	6	133.8	135.9
2	204.0	193.0	1 15 0	352.6	348.4	1	73.2	70.1	7	70.1	65.5	7	28.0	30.9
3	234.6	254.2	2	76.2	61.2	2	49.8	42.7	8	86.8	78.6	0 21 1	144.7	145.2
4	111.1	118.9	3	240.2	248.3	3	115.7	119.4	9	7.8*	16.6	1	72.9	69.0
5	634.2	590.1	4	51.5	56.7	3 31 0	46.2	40.0	0 10 1	90.3	78.4	2	33.6*	35.0
6	170.7	154.9	5	32.2*	28.5	0 0 1	61.6	23.9	1	152.6	169.1	3	119.6	114.4
7	3.7*	14.5	6	79.6	89.3	1	69.0*	24.7	2	132.7	130.3	4	30.5*	30.6
8	52.2	66.0	7	54.8	33.8	2	166.4	159.8	3	52.2	35.6	5	105.0	109.1
9	59.1	67.5	8	65.1	63.9	3	16.8*	29.0	4	28.4*	34.4	6	5.8*	18.6
1 5 0	252.9	229.4	0 16 0	220.2	217.7	4	135.0	213.8	5	56.6	55.3	7	47.4	47.3
2	564.8	532.7	1	219.3	231.0	5	101.7	109.1	6	36.0*	34.0	0 22 1	80.0	72.5
3	56.6	47.3	2	75.7	73.7	6	48.0	46.1	7	114.8	107.1	1	83.2	77.6
4	118.0	97.0	3	425.0	449.9	7	59.3*	18.5	8	110.5	104.9	2	41.1	36.7
5	174.1	166.1	4	121.3	134.3	8	54.8	48.5	9	70.1	66.4	3	168.0	162.3
6	189.1	176.3	5	95.7	107.5	9	24.2	28.6	0 11 1	68.5	62.1	4	63.7	71.0
7	347.0	327.2	6	67.6	66.3	1 1 1	101.5	88.2	1	89.1	93.8	5	37.6	38.1
8	74.5	68.6	7	79.1	80.1	2	102.7	113.2	2	137.1	142.3	6	98.2	101.9
9	23.7*	8.4	8	60.0	35.3	3	43.6*	49.0	3	127.1	123.4	0 23 1	134.3	129.2
0 6 0	232.5	171.1	1 17 0	139.6	135.2	4	118.1	90.0	4	19.3*	40.5	1	72.9	68.5
1	520.0	492.2	2	279.9	301.1	5	95.1	90.0	5	127.1	143.9	2	83.9	84.8
2	727.8	720.2	3	153.6	174.8	6	74.0	65.3	6	79.7	66.8	3	66.2	68.2
3	415.2	440.7	4	30.2*	32.4	7	135.4	125.5	7	42.6	42.6	4	61.8	75.7
4	53.6	58.9	5	183.1	202.8	8	77.2	74.7	8	131.2	117.2	5	50.8*	30.1
5	195.5	195.4	6	226.5	241.9	9	61.8	56.7	9	26.0	30.3	6	28.0	31.1
6	112.8	106.5	7	155.8	159.1	0 2 1	42.6	50.0	0 12 1	121.2	120.3	0 24 1	29.6*	26.2
7	291.4	272.1	8	30.2	32.1	1	80.0	76.8	1	85.5	98.4	1	149.7	146.4
8	25.9*	32.7	0 18 0	56.1	16.7	2	156.5	139.2	2	66.2	63.2	2	48.6	44.7
9	60.0	60.5	1	240.6	242.0	3	52.6	76.2	3	120.8	119.6	3	102.2	110.1
1 7 0	175.5	150.4	2	133.6	138.5	4	113.3	112.3	4	58.6	51.6	4	6.5*	7.3
2	376.0	351.8	3	60.4	61.7	5	73.3	69.1	5	107.7	106.1	5	51.9	44.7
3	283.6	289.3	4	117.0	128.5	6	46.7*	47.0	6	168.8	167.2	6	15.0*	15.9
4	101.3	96.2	5	261.9	288.0	7	126.7	119.1	7	29.6*	33.0	0 25 1	57.3	54.6
5	109.5	113.0	6	166.9	170.4	8	82.8	83.0	8	66.2	72.4	1	93.0	85.3
6	74.5	65.9	7	37.7	41.6	9	69.7	64.7	0 13 1	168.4	166.5	2	65.4	65.6
7	106.5	93.1	1 19 0	272.9	275.8	0 3 1	141.4	150.9	1	23.7*	15.7	3	5.4*	3.2
8	39.5	35.1	2	47.6*	24.1	1	30.5*	30.6	2	9.0*	13.3	4	57.8	64.1
9	173.6	181.8	3	106.8	111.6	2	142.2	158.0	3	201.7	200.5	5	53.1	50.7
0 8 0	834.4	801.4	4	139.6	177.0	3	73.3	67.1	4	78.0	75.7	0 26 1	80.4	77.9
1	436.1	434.9	5	47.6	59.0	4	51.0	34.2	5	109.8	123.8	1	47.1	44.9
2	57.0*	68.4	6	46.8	54.9	5	26.0*	31.4	6	71.6	61.5	2	40.0	50.6
3	598.8	616.8	7	85.9	92.4	6	160.9	151.9	7	59.0	59.2	3	44.8	45.0
4	85.1	74.0	0 20 0	183.5	164.7	7	73.3	61.9	8	51.5	51.7	4	79.2	86.9
5	52.7	43.0	1	41.7	38.1	8	117.7	112.3	0 14 1	120.8	111.5	5	67.7	70.9
6	298.1	298.1	2	371.8	392.6	9	51.5	52.9	1	82.8	81.0	0 27 1	44.3	46.3
7	93.6	91.0	3	64.2	61.6	0 4 1	118.8	69.8	2	44.8*	42.7	1	126.7	129.5
8	33.6*	36.7	4	191.6	203.4	1	34.8*	57.8	3	197.4	199.4	2	68.1	70.0
9	87.2	77.7	5	128.9	132.2	2	83.5	71.6	4	70.8	68.4	3	63.7	61.7
1 9 0	221.9	214.6	6	35.3	63.3	3	105.9</							

Tabelle 3. (Fortsetzung)

h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c
0 30 1	52.6	50.0	-6 10 1	48.3	52.1	-6 23 1	109.8	114.7	1 7 2	27.4*	21.6	0 18 2	117.1	106.8			
1	70.4	69.1	-7	111.7	111.5	-1 24 1	87.5	83.3	2	225.2	211.7	1	225.6	228.0			
2	12.9*	17.0	-8	48.3	54.9	-2	90.6	89.2	3	533.4	525.0	2	132.2	135.6			
0 31 1	63.0	63.0	-9	63.3	64.6	-3	48.6	53.1	4	162.9	149.0	3	103.0	100.8			
1	37.2	39.6	-1 11 1	120.0	115.0	-4	136.2	135.5	5	94.1	103.5	4	83.0	74.1			
-1 0 1	70.7	95.4	-2	183.4	182.0	-5	32.6	32.0	6	99.9	83.7	5	54.5	53.3			
-2	158.9	166.2	-3	110.1	108.8	-6	30.5	30.9	7	215.4	198.7	6	98.5	96.7			
-3	35.2*	3.6	-4	76.8	79.7	-1 25 1	148.2	148.1	8	114.0	103.9	7	39.0	29.7			
-4	127.0	57.8	-5	89.1	87.5	-2	38.4	30.4	9	129.2	122.8	0 19 2	223.8	226.1			
-5	101.2	110.8	-6	82.3	84.8	-3	82.8	83.8	0 8 2	125.1	123.7	1	286.0	287.1			
-6	35.4*	19.7	-7	4.2*	7.3	-4	92.2	87.5	1	131.0	127.3	2	385.0	371.5			
-7	66.2	99.0	-8	65.0	70.6	-5	58.2	54.3	2	199.8	195.0	3	110.5	107.9			
-8	51.1	64.5	-9	55.7	61.3	-1 26 1	77.2	74.2	3	291.8	295.5	4	104.8	112.0			
-9	30.9*	23.7	-1 12 1	127.6	126.7	-2	140.7	139.7	4	100.7	84.1	5	99.9	104.6			
-1 1 1	62.1	69.8	-2	171.5	183.4	-3	20.1*	14.6	5	193.9	214.3	6	45.3	44.7			
-2	70.4	42.2	-3	69.2	73.6	-4	70.4	74.4	6	333.5	324.6	7	62.1	66.8			
-3	25.3*	35.8	-4	39.5*	52.6	-5	36.5	38.2	7	120.8	117.4	0 20 2	47.4*	13.9			
-4	86.4	98.5	-5	36.5*	40.1	-1 27 1	91.8	94.0	8	79.9	75.5	1	81.7	78.3			
-5	120.8	114.5	-6	55.0	65.5	-2	71.6	70.4	9	94.9	92.4	2	118.5	117.1			
-6	45.1*	44.1	-7	45.9	54.3	-3	32.4	31.1	0 9 2	271.9	297.0	3	25.7*	3.0			
-7	135.0	142.1	-8	59.4	56.3	-4	16.1*	17.3	1	290.4	271.2	4	238.5	245.8			
-8	65.4	76.5	-1 13 1	66.6	74.9	-1 28 1	12.9*	11.7	2	168.8	178.0	5	82.1	75.5			
-9	46.7	50.3	-2	105.7	112.9	-2	47.8	51.1	3	171.8	160.0	6	59.4	55.3			
-1 2 1	89.9	80.7	-3	183.9	182.2	-3	42.3	41.1	4	280.3	284.4	7	43.9	42.3			
-2	70.4	69.2	-4	15.4*	22.1	-4	92.7	93.0	5	251.1	242.0	0 21 2	232.1	101.0			
-3	139.1	141.1	-5	70.4	72.5	-1 29 1	57.8	56.8	6	245.6	237.3	1	28.6*	36.7			
-4	39.5*	48.0	-6	163.2	167.0	-2	57.8	55.0	7	68.3	60.9	2	140.2	128.4			
-5	134.5	141.9	-7	53.4	50.3	-3	26.9	30.4	8	55.8	56.1	3	100.3	101.1			
-6	32.8*	23.2	-8	37.6	29.0	-1 30 1	42.6	34.2	9	112.7	115.8	4	268.2	272.5			
-7	41.5	35.8	-1 14 1	86.8	75.4	-2	13.3*	13.3*	0 10 2	85.2	76.3	5	72.7	79.7			
-8	56.9	51.8	-2	108.6	116.8	-1 31 1	34.0	30.8	1	344.3	342.0	6	125.6	129.8			
-9	72.1	76.0	-3	70.4	66.7	1 0 2	92.8	88.6	2	119.4	124.0	0 22 2	59.0	47.1			
-1 3 1	49.0*	53.0	-4	34.8*	22.6	2	405.5	398.8	3	175.2	181.1	1	97.5	95.2			
-2	107.6	84.3	-5	42.6	41.4	3	249.6	229.1	4	114.4	115.2	2	170.1	163.9			
-3	84.4	74.4	-6	121.6	123.6	4	93.8	87.5	5	69.5	66.1	3	94.1	94.2			
-4	89.5	101.8	-7	70.4	78.4	5	25.7*	3.0	6	99.5	104.9	4	59.0	63.0			
-5	155.7	148.8	-8	48.3	47.6	6	433.0	398.3	7	87.4	86.2	5	67.0	70.6			
-6	115.7	116.5	-1 15 1	113.3	109.6	7	78.1	76.4	8	134.9	134.8	6	226.0	227.1			
-7	47.1	44.7	-2	59.4	68.9	8	34.5*	36.8	0 11 2	291.4	301.0	0 23 2	242.0	226.3			
-8	31.7	39.4	-3	78.0	84.9	9	38.1	60.0	1	167.8	180.5	1	83.8	81.7			
-9	7.5*	11.1	-4	70.1	60.1	1 1 2	70.5	65.6	2	659.6	640.9	2	114.0	108.8			
-1 4 1	89.1	73.4	-5	53.1	53.2	2	262.0	261.1	3	112.7	134.1	3	154.1	158.8			
-2	116.1	136.9	-6	88.0	85.8	3	691.7	624.6	4	214.5	233.3	4	145.2	149.6			
-3	51.8	44.7	-7	84.4	79.9	4	379.8	313.9	5	12.7*	5.6	5	66.6	61.8			
-4	53.8	42.4	-8	135.2	141.0	5	104.3	92.4	6	97.2	92.4	6	195.2	197.0			
-5	120.0	134.2	-1 16 1	135.0	129.4	6	364.2	316.5	7	87.9	84.8	0 24 2	38.6	37.5			
-6	29.6*	40.6	-2	107.7	107.1	7	85.6	79.3	8	201.5	199.4	1	134.5	127.7			
-7	46.7	44.3	-3	49.8	54.2	8	135.9	128.8	0 12 2	37.6*	30.9	2	40.7*	32.3			
-8	37.6	36.3	-4	209.6	202.5	9	52.7	55.9	1	446.5	443.5	3	111.4	115.1			
-9	56.6	63.6	-5	106.9	108.8	0 2 2	39.9	46.4	2	107.8	97.3	4	117.1	119.6			
-1 5 1	86.4	94.9	-6	102.7	103.0	1	412.6	392.4	3	48.7*	47.4	5	55.4	52.6			
-2	33.6*	42.0	-7	100.2	104.0	2	311.3	309.3	4	256.7	269.8	6	43.9	45.0			
-3	118.1	112.9	-8	26.5	27.7	3	120.3	118.5	5	193.8	196.0	0 25 2	117.7	110.7			
-4	59.8	50.6	-1 17 1	99.8	106.2	4	357.3	337.9	6	35.5*	33.7	7	234.5	233.5			
-5	46.7*	39.4	-2	85.1	72.2	5	160.8	148.8	7	143.5	138.8	2	129.2	129.2			
-6	63.7	70.1	-3	90.6	100.0	6	115.0	110.8	8	67.9	69.8	3	239.3	233.4			
-7	53.8	52.9	-4	156.5	152.9	7	84.8	81.1	0 13 2	314.9	301.7	4	30.5	29.8			
-8	54.2	47.9	-5	31.7	18.5	8	152.7	154.3	1	92.3	93.5	5	22.5*	36.5			
-9	120.0	125.4	-6	227.2	229.5	9	120.3	135.8	2	283.2	281.6	0 26 2	41.7	33.9			
-1 6 1	88.3	86.0	-7	43.2	43.2	0 3 2	97.2	101.9	3	80.3	68.6	1	118.9	113.0			
-2	101.8	115.0	-8	10.2*	5.5	1	468.1	479.3	4	283.4	284.8	2	139.4	137.5			
-3	64.4	64.6	-1 18 1	80.8	76.8	2	769.9	760.0	5	254.0	263.7	3	58.1	61.8			
-4	49.8	51.9	-2	187.0	184.4	3	227.0	238.0	6	138.1	143.7	4	87.0	86.7			
-5	41.5*	52.3	-3	35.5*	26.7	4	150.0	124.4	7	147.4	141.1	5	30.2	29.5			
-6	97.4	100.8	-4	150.9	145.6	5	386.9	352.7	8	69.7	69.4	0 27 2	121.2	122.4			
-7	53.4	51.2	-5	127.6	123.0	6	45.6	44.1	0 14 2	65.2	58.3	1	222.4	214.0			
-8	120.0	119.1	-6	99.0	90.2	7	98.5	89.2	1	29.2*	53.6	2	98.5	103.3			
-9	78.8	80.2	-7	86.8	87.4	8	170.9	165.2	2	39.9	96.8	3	25.7	18.7			
-1 7 1	123.2	147.0	-1 19 1	143.4	140.9	9	140.7	35.3	3	174.0	168.9	4	81.7	79.7			
-2	89.1	85.0	-2	99.8	91.1	0 4 2	58.5*	66.3	4	295.4	288.6	0 28 2	53.7	46.9			
-3	59.8	76.1	-3	76.4	69.3	1	398.0	378.4	5	231.4	246.9	1	106.1	104.4			
-4	90.3	94.4	-4	70.1	70.1	2	230.5	220.7	6	252.7	257.3	2	55.0	45.0			
-5	59.4	57.1	-5	54.5	59.3	3	86.1	66.6	7	175.4	173.3	3	34.8	32.2			
-6	13.7*	23.0	-6	18.5*	25.4	4	180.2	160.7	8	92.3	90.2	4	130.1	130.6			
-7	108.2	105.1	-7	24.1*	33.9	5	97.5	81.3	0 15 2	202.1	195.9	0 29 2	39.0	47.2			
-8	37.9	41.5	-1 20 1	105.3	106.8	6	17.7*	22.8	1	159.0	164.2	1	81.7	81.4			
-9	87.5	90.5	-2	86.4	80.0	7	290.0	273.9	2	107.3	109.9	2	123.0	119.8			
-1 8 1	103.8	111.7	-3	9.8*	23.2	8	111.6	139.4	3	461.5	397.3	3	145.2	143.9			
-2	84.7	92.2	-4	80.8	85.2	9	27.8	24.6	4	45.6	39.9	0 30 2	36.3	27.3			
-3	24.5*	17.2	-5	3.9*	7.8	0 5 2	220.3	236.8	5	134.5	135.8	1	82.1	76.3			
-4	171.5	168.9	-6	57.8	49.3	1	744.4	748.1	6	114.0	116.8	-2	29.2	18.6			
-5	127.9	135.6	-7	37.2	39.9	2	58.5	48.5	7	183.3	182.8	-1 0 2	161.2	189.9			
-6	37.2*	43.7	-1 21 1	62.5	62.8	3	250.9	235.5	8	23.0*	20.6	-2	328.7	370.3			
-7	157.7	162.0	-2	143.4	143.5	4	178.5	173.0	0 16 2	89.1	89.5	-3	42.5*	25.2			
-8	71.3	73.7	-3	147.8	134.8	5	434.4	415.7	1	100.3	106.4	-4	75.9	70.3			
-9	30.8	31.9	-4	83.2	80.8	6	32.8*	20.5	2	49.2	36.2	-5	9.6*	8.2			
-1 9 1	99.8	109.4	-5	18.9*	24.6	7	49.2	32.9	3	174.9	181.9	-6	476.6	478.2			
-2	67.3	65.0	-6	103.4	104.1	8	149.3	142.0	4	203.9	201.7	-7	43.4	38.7			
-3	35.2*	23.2	-7	24.5	21.6	9	41.2	43.0	5	143.8	154.9	-8	12.7*	7.7			
-4	128.3	139.0	-1 22 1	40.0	47.2	0 6 2	27.8*	39.0	6	79.9	74.1	-9	17.7*	15.5			
-5	50.7	34.2	-2	44.8	46.0												

Tabelle 3. (Fortsetzung)

h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c
-2 2 2	300.7	300.1	-6 13 2	113.2	109.3	-2 30 2	29.2	23.8	3 10 3	92.3	86.2	3 22 3	88.4	89.9
-3	69.2	70.0	-7	70.5	74.4	0 0 3	88.5	53.9	4	83.4	99.9	4	89.4	90.4
-4	222.0	232.6	-8	69.7	72.2	1	115.7	66.6	5	154.0	162.1	5	78.7	79.4
-5	214.9	211.3	-14 2	53.2	41.6	2	57.0	36.9	6	9.7*	14.4	6	70.5	75.1
-6	39.4*	43.7	-2	148.7	140.6	3	53.7	34.3	7	83.4	79.0	0 23 3	89.4	78.9
-7	104.3	95.4	-3	151.4	153.7	4	89.5	120.0	8	38.4	40.8	1	66.3	57.3
-8	194.1	193.5	-4	205.5	205.1	5	115.0	152.5	0 11 3	49.5*	52.1	2	85.1	73.1
-9	89.1	90.4	-5	285.4	287.1	6	29.4*	53.7	1	35.1*	42.4	3	82.0	76.5
-1 3 2	505.1	513.7	-6	241.1	237.9	7	29.6*	19.3	2	92.3	91.2	4	100.0	90.8
-2	715.7	724.7	-7	163.4	164.8	8	58.8	65.9	3	73.1	84.2	5	31.1	40.1
-3	203.4	214.6	-8	56.8	56.6	9	29.3*	21.5	4	119.4	130.6	0 24 3	44.3	36.2
-4	115.9	102.4	-1 15 2	176.3	161.2	1	199.8	241.9	5	110.7	109.2	1	45.2	35.5
-5	337.0	354.2	-2	94.1	107.5	2	20.4*	21.8	6	85.0	72.9	2	72.2	72.8
-6	129.6	128.6	-3	448.6	449.9	3	20.4*	42.1	7	43.9	37.0	3	34.2	33.3
-7	113.2	105.0	-4	53.7	48.7	4	105.5	107.2	8	10.6*	22.7	4	63.6	66.8
-8	194.1	200.9	-5	59.9	64.8	5	161.2	135.4	0 12 3	225.9	230.0	5	109.5	113.4
-9	39.0	37.1	-6	133.2	132.7	6	19.1*	15.3	1	88.9	82.1	0 25 3	51.3	42.2
-1 4 2	422.4	422.2	-7	164.4	165.1	7	114.3	109.0	2	132.1	140.9	1	108.2	100.5
-2	198.4	194.8	-8	20.9	11.7	8	142.8	139.3	3	101.8	88.5	2	85.1	80.2
-3	63.0	60.0	-16 2	54.1*	56.2	9	75.6	70.5	4	27.7*	26.2	3	45.6	45.7
-4	99.9	100.0	-2	118.9	111.4	0 2 3	52.2	53.3	5	85.5	78.0	4	119.8	120.3
-5	144.3	126.3	-3	198.0	200.0	1	104.8	120.1	6	92.8	104.1	5	23.0*	22.1
-6	30.5*	27.2	-4	179.4	170.3	2	95.0	121.6	7	18.7	20.2	0 26 3	88.4	85.7
-7	280.6	273.5	-5	101.5	111.1	3	149.7	136.2	8	69.7	66.9	1	85.7	89.0
-8	87.0	86.2	-6	61.1	51.6	4	67.1	81.3	0 13 3	102.7	108.3	2	97.0	89.9
-9	28.3	34.1	-7	90.1	93.3	5	159.5	155.5	1	77.0	87.8	3	37.1	37.2
-1 5 2	711.7	784.0	-8	68.8	68.1	6	31.6*	35.7	2	77.9	75.4	4	69.2	71.8
-2	59.0	75.7	-1 17 2	367.4	364.4	7	11.4*	7.8	3	139.5	156.8	0 27 3	70.1	65.8
-3	268.2	263.5	-2	43.3	71.7	8	43.3	71.7	4	23.7*	28.4	1	85.8	85.7
-4	244.6	233.8	-3	155.3	143.2	9	80.3	90.6	5	22.6*	37.1	2	68.0	65.1
-5	403.8	398.7	-4	75.4	71.7	0 3 3	20.4*	59.2	6	47.0	50.2	3	74.8	75.4
-6	30.2*	15.0	-5	113.6	104.1	1	56.4	54.2	7	119.8	118.3	4	43.9	49.8
-7	59.4	56.8	-6	168.8	160.8	2	79.5	81.8	8	56.4	62.1	0 28 3	57.6	56.3
-8	183.3	186.8	-7	119.9	124.8	3	125.8	133.9	0 14 3	240.0	256.3	1	54.7	50.2
-9	60.8	67.6	-1 18 2	260.7	252.6	4	107.3	105.5	1	121.1	128.9	2	58.1	51.1
-1 6 2	452.2	462.3	-2	143.0	134.7	5	92.8	89.4	2	78.2	76.1	3	45.6	50.5
-2	88.3	68.2	-3	123.8	119.3	6	165.6	127.8	3	69.2	68.1	0 29 3	79.5	75.2
-3	187.8	197.6	-4	104.3	96.4	7	68.4	69.5	4	35.8*	36.2	1	56.4	53.9
-4	347.8	343.2	-5	34.5*	51.2	8	29.4	26.6	5	77.0	78.9	2	6.8*	8.4
-5	302.0	292.8	-6	60.8	61.4	9	18.7*	11.8	6	183.4	155.0	0 30 3	91.5	93.8
-6	141.2	141.3	-7	30.9	32.3	0 4 3	99.6	124.9	7	65.8	64.0	-1 0 3	127.9	237.0
-7	139.9	143.5	-1 19 2	319.8	308.6	1	62.7	50.7	8	74.8	78.2	-2	49.9	43.5
-8	103.5	102.4	-2	339.8	329.7	2	51.7	44.1	0 15 3	233.4	231.7	-3	65.3	44.6
-9	328.7	339.4	-3	145.7	132.2	3	251.6	253.3	1	96.7	100.7	-4	79.1	14.7
-1 7 2	81.3	68.3	-4	101.6	99.4	4	27.2*	25.1	2	135.1	134.0	-5	85.7	81.1
-2	210.9	231.2	-5	120.3	121.6	5	101.8	109.1	3	47.0	57.0	-6	26.3*	32.3
-3	580.1	578.5	-6	77.2	64.7	6	53.0	58.3	4	127.0	127.9	-7	55.7	58.5
-4	147.4	139.6	-7	77.2	75.2	7	33.3*	34.4	5	37.5	31.6	-8	70.2	25.0
-5	39.2*	186.6	-1 20 2	22.1*	32.1	8	43.6	42.4	6	34.6*	44.3	-9	48.0	53.6
-6	59.0	45.7	-2	216.3	213.2	9	55.1	48.3	7	80.7	73.4	-1 1 3	94.5	104.9
-7	175.4	171.0	-3	63.0	54.4	0 5 3	31.6*	48.1	8	22.6	25.4	-2	34.2*	36.5
-8	56.4	61.8	-4	296.2	281.7	1	73.9	100.7	0 16 3	65.0	45.4	-3	83.0	75.0
-9	106.1	108.8	-5	32.8*	19.7	2	32.0*	47.9	1	47.0	48.4	-4	101.4	101.4
-1 8 2	64.8	67.7	-6	30.5*	33.8	3	103.9	126.2	2	73.5	72.3	-5	132.1	124.8
-2	179.8	204.3	-7	36.8	38.6	4	28.6*	22.8	3	72.6	33.3	-6	71.8	63.2
-3	246.6	236.3	-1 21 2	58.1	71.2	5	47.0	38.6	4	103.5	95.1	-7	99.1	99.1
-4	102.1	90.9	-2	101.2	93.9	6	132.6	120.9	5	100.4	103.5	-8	6.3*	28.8
-5	172.7	183.1	-3	92.3	94.5	7	108.2	110.3	6	66.3	73.7	-9	32.0	32.8
-6	359.4	362.4	-4	241.1	230.5	8	41.9*	28.0	7	127.9	128.7	-1 2 3	118.4	153.4
-7	115.9	121.5	-5	102.1	105.4	9	101.8	94.0	0 17 3	26.8*	25.9	-2	45.2	51.2
-8	33.3*	41.6	-6	96.8	102.1	0 6 3	61.1	100.6	1	131.8	120.5	-3	95.4	108.3
-9	133.6	140.2	-1 22 2	115.0	116.5	1	18.3	67.6	2	169.8	170.1	-4	68.0	72.4
-1 9 2	262.4	266.1	-2	197.2	193.3	2	135.5	153.2	3	34.2*	33.5	-5	100.4	96.6
-2	183.8	185.0	-3	32.8*	24.9	3	194.6	178.5	4	167.6	175.1	-6	43.6	34.5
-3	255.8	252.2	-4	46.0	40.2	4	25.6*	33.1	5	11.0*	10.3	-7	57.2	55.2
-4	263.8	277.4	-5	70.5	72.2	5	11.9*	25.2	6	48.3	39.0	-8	128.7	121.9
-5	250.9	249.8	-6	230.1	226.9	6	145.9	141.4	7	14.4*	11.5	-9	77.0	80.8
-6	219.3	213.2	-1 23 2	69.2	68.4	7	77.9	69.7	0 18 3	107.8	104.9	-1 3 3	93.6	111.2
-7	114.6	112.0	-2	42.1	38.2	8	101.0	102.4	1	80.3	82.5	-2	78.7	84.1
-8	62.1	60.3	-3	189.1	183.0	9	69.2	71.6	2	145.9	142.5	-3	75.6	81.8
-9	60.8	63.6	-4	145.7	136.8	0 7 3	78.3	102.0	3	59.0	57.0	-4	19.1*	40.7
-1 10 2	358.0	369.0	-5	51.8	45.6	4	140.7	160.3	4	64.1	56.5	-5	76.0	90.3
-2	182.9	186.3	-6	200.3	198.2	2	115.9	119.0	5	122.3	126.2	-6	120.2	121.0
-3	108.7	122.1	-1 24 2	101.6	102.8	3	91.1	108.7	6	44.8	40.8	-7	85.9	74.9
-4	113.6	112.1	-2	35.0*	41.8	4	56.4	66.3	7	92.3	93.6	-8	116.5	112.5
-5	48.4*	39.2	-3	104.3	107.9	5	51.3	55.9	0 19 3	79.9	82.6	-9	12.7*	23.8
-6	123.4	117.7	-4	103.8	102.3	6	53.8	59.3	1	77.9	75.9	-1 4 3	86.8	120.3
-7	76.7	88.3	-5	63.9	63.4	7	163.9	164.9	2	119.8	114.7	-2	67.1	73.1
-8	153.8	159.9	-1 25 2	221.1	210.5	8	85.1	85.1	3	79.1	76.8	-3	160.3	178.7
-9	121.7	126.3	-2	169.2	155.8	0 8 3	44.3*	27.3	4	85.1	86.8	-4	46.6	43.6
-1 11 2	571.3	589.2	-3	239.3	219.3	1	120.6	118.4	5	57.6	54.3	-5	42.3	48.8
-2	60.8	75.4	-4	87.0	85.7	2	92.8	112.7	6	73.5	75.2	-6	132.6	129.2
-3	250.0	243.8	-5	90.1	90.2	3	54.7	48.0	7	67.5	67.9	-7	78.3	70.5
-4	110.5	108.6	-1 26 2	120.3	121.5	4	123.9	135.5	0 20 3	111.6	108.1	-8	59.4	55.6
-5	69.7	68.9	-2	142.0	135.0	5	94.5	100.3	1	44.8	42.3	-9	70.5	77.6
-6	79.3	74.3	-3	61.6	49.3	6	47.0	53.4	2	162.6	158.1	-1 5 3	30.7*	38.5
-7	207.8	209.7	-4	87.4	84.6	7	105.2	108.4	3	22.2*	31.8	-2	35.1	54.9
-1 12 2	445.0	448.1	-5	27.8*	34.8	8	103.9	93.7	4	33.3*	40.1	-3	141.5	149.1
-2	130.0	133.8	-1 27 2	262.8	243.8	0 9 3	26.8*	5.8	5	6.3*	15.9	-4	120.6	107.6
-3	66.6	45.5	-2	64.2	63.2	1	120.6	129.0	6	87.2	90.3	-5	68.4	72.8
-4	295.4	298.2	-3	66.2	58.6	2	167.2	166.9	0 21 3	84.2	74.6	-		

Tabelle 3. (Fortsetzung)

h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c
-7 6 3	58.2	63.5	-6 19 3	68.8	67.4	0 6 4	152.7	161.3	5 17 4	119.8	124.5	-5 4 4	454.7	435.7
-8	58.6	53.0	-7	68.4	70.2	1	310.8	344.0	6	120.2	119.4	-6	144.8	135.0
-9	53.4	52.5	-1 20 3	16.7*	14.2	2	417.9	451.0	7	104.6	103.6	-7	66.7	56.7
-1 7 3	122.8	144.8	-2	116.7	119.5	3	337.3	350.0	0 18 4	43.6	28.2	-8	52.0	48.4
-2	148.8	153.9	-3	95.8	94.1	4	45.6*	58.9	1	177.3	170.3	-1 5 4	161.1	186.7
-3	147.1	149.2	-4	77.4	68.1	5	192.5	181.9	2	117.2	120.7	-2	328.5	342.9
-4	107.3	99.5	-5	97.9	97.3	6	40.6	44.5	3	49.5	35.6	-3	58.3	78.8
-5	101.8	115.9	-6	122.3	121.6	7	228.4	219.4	4	86.4	84.3	-4	164.0	158.0
-6	47.0	43.6	-1 21 3	73.9	73.9	8	44.1	44.0	5	282.8	276.3	-5	129.5	122.4
-7	83.8	88.2	-2	112.0	109.3	0 7 4	78.9	88.5	6	178.8	178.0	-6	107.6	101.5
-8	16.2*	17.7	-3	39.4	49.6	1	154.2	152.2	0 19 4	45.6	54.6	-7	248.5	227.1
-1 8 5	61.5	65.9	-4	56.8	42.4	2	181.2	197.4	1	187.1	185.1	-8	64.2	64.2
-2	31.6*	47.7	-5	42.7	36.9	3	240.1	220.9	2	84.4	91.5	-1 6 4	281.4	305.1
-3	83.0	87.4	-6	9.3*	15.2	4	47.1	51.0	3	102.6	96.0	-2	404.1	434.6
-4	57.6	59.1	-1 22 3	61.1	56.9	5	152.7	153.0	4	124.2	120.9	-3	317.7	332.1
-5	35.4*	16.0	-2	0.3*	13.8	6	116.8	119.4	5	42.1	37.2	-4	53.5	47.6
-6	62.3	55.8	-3	187.8	186.7	7	94.1	84.7	6	106.5	98.7	-5	142.9	142.2
-7	65.4	55.9	-4	39.8	36.7	8	22.0*	25.0	0 20 4	77.0	64.3	-6	139.4	124.9
-8	32.4	28.6	-5	79.9	76.6	0 8 4	500.0	539.2	1	108.0	107.3	-7	276.4	263.0
-1 9 3	123.9	128.0	-6	83.0	85.3	1	290.7	296.8	2	301.5	293.8	-8	61.8	55.4
-2	169.8	186.0	-1 23 3	121.5	112.8	2	74.6	90.0	3	128.2	128.6	-1 7 4	101.6	105.1
-3	30.7*	38.0	-2	121.1	122.9	3	386.0	354.2	4	169.3	167.7	-2	236.9	272.6
-4	127.5	129.6	-3	26.3*	29.9	4	147.3	133.0	5	92.2	95.6	-3	232.0	235.0
-5	91.5	91.3	-4	77.0	77.1	5	52.0	50.1	6	65.2	65.6	-4	56.4	64.2
-6	107.8	104.6	-5	43.6	45.4	6	270.1	257.3	0 21 4	35.8*	24.1	-5	132.5	122.6
-7	131.3	124.0	-1 24 3	91.5	87.2	7	112.9	109.1	1	172.3	163.1	-6	45.1	31.0
-8	89.8	95.6	-2	51.3	41.0	8	25.4*	21.9	2	53.0	39.3	-7	25.4	23.3
-9	110.3	112.9	-3	122.3	118.4	0 9 4	174.3	182.1	3	146.1	140.8	-8	20.0	20.0
-1 10 3	131.3	132.9	-4	41.9	30.1	1	131.5	131.7	4	95.2	95.3	-1 8 4	210.2	235.6
-2	41.0*	47.8	-5	53.8	50.4	2	250.4	264.8	5	31.3*	23.4	-2	4.3*	16.3
-3	41.0*	32.4	-1 25 3	65.8	67.5	3	306.9	297.7	6	80.4	79.5	-3	426.7	427.5
-4	126.6	122.6	-2	78.3	70.1	4	102.6	95.9	0 22 4	325.1	302.3	-4	141.9	131.0
-5	18.3	42.3	-3	51.7	56.8	5	56.8	58.7	1	116.3	108.7	-5	30.8	31.1
-6	68.4	74.2	-4	109.5	106.7	6	137.5	135.8	2	153.1	145.5	-6	283.3	271.4
-7	76.0	68.6	-5	70.9	78.0	7	46.6	45.4	3	46.6	33.2	-7	65.7	51.8
-1 11 3	101.4	104.5	-1 26 3	16.2*	24.2	8	54.0	44.5	4	106.5	106.8	-8	39.1	31.2
-2	36.2*	26.5	-2	41.0	49.1	0 10 4	217.5	246.6	5	124.7	123.8	-1 9 4	163.0	179.8
-3	49.5	45.4	-3	19.5*	15.4	1	149.2	168.5	0 23 4	69.2	70.1	-2	221.9	216.7
-4	125.8	121.4	-4	74.8	69.4	2	407.6	389.9	1	89.4	96.0	-3	290.7	275.4
-5	190.4	191.4	-1 27 3	85.5	83.7	3	172.8	166.9	2	48.1	35.3	-4	95.2	98.1
-6	68.0	52.7	-2	57.2	56.7	4	256.9	254.8	3	138.4	128.0	-5	45.1*	34.0
-7	79.9	77.5	-3	11.4*	21.1	5	120.8	123.8	4	143.8	136.0	-6	235.7	216.1
-8	98.3	95.2	-4	15.8*	16.9	6	96.6	97.1	5	63.5	60.3	-7	61.3	52.5
-1 12 3	117.6	122.2	-1 28 3	73.9	77.3	7	72.1	54.8	0 24 4	112.9	109.6	-8	32.8*	44.9
-2	47.8*	43.2	-2	59.9	59.3	8	144.4	139.8	1	117.8	109.2	-1 10 4	233.8	246.7
-3	130.0	119.0	-3	85.9	87.8	0 11 4	61.3	69.6	2	160.6	151.4	-2	366.4	383.6
-4	69.7	65.9	-1 29 3	88.9	88.1	1	215.6	230.6	3	167.9	162.8	-3	106.5	111.1
-5	153.5	147.4	-2	29.9	18.9	2	30.8	24.3	4	126.2	125.2	-4	282.3	266.8
-6	111.6	103.3	0 4	18.5*	10.2	3	65.2	48.9	0 25 4	58.3	53.7	-5	148.7	145.1
-7	20.0*	10.2	2	136.4	172.4	4	302.0	309.3	1	116.8	107.1	-6	27.4*	16.6
-8	71.4	77.4	3	284.8	265.6	5	101.1	100.1	2	76.5	65.9	-7	94.7	87.0
-1 13 3	58.6	58.6	4	294.6	267.1	6	113.3	108.0	3	58.3	56.7	-8	74.6	76.4
-2	81.2	88.7	5	45.6	60.0	7	78.3	72.2	4	59.8	62.5	-1 11 4	148.2	166.6
-3	82.0	78.6	6	153.1	143.3	8	181.7	177.4	0 26 4	183.7	166.6	-2	146.8	148.6
-4	23.0*	17.7	7	32.3*	18.3	0 12 4	156.6	153.4	1	107.6	103.1	-3	36.3*	34.4
-5	85.1	76.1	8	80.4	75.6	1	125.2	123.0	2	88.8	85.2	-4	386.9	368.6
-6	57.2	56.7	1 1 4	106.1	145.1	2	234.7	236.7	3	77.0	73.6	-5	151.6	140.4
-7	26.3*	27.0	2	98.6	126.7	3	65.2	35.4	0 27 4	35.8	32.8	-6	77.0	65.3
-8	32.4	34.6	3	85.8	91.9	4	204.2	208.1	1	137.5	129.7	-7	59.8	51.0
-1 14 3	38.4	39.1	4	92.7	87.3	5	264.6	259.8	2	40.6	33.9	-8	159.1	167.9
-2	57.6	57.8	5	77.4	86.3	6	140.9	137.5	3	100.1	97.2	-1 12 4	270.6	278.2
-3	159.9	149.8	6	112.3	104.4	7	66.3	68.0	0 28 4	34.3	24.5	-2	259.8	274.1
-4	52.2	52.3	7	80.4	70.2	8	98.1	98.0	1	149.2	145.8	-3	81.9	82.2
-5	43.9	57.6	8	147.7	139.9	0 13 4	64.2	97.9	2	170.3	166.1	-4	107.6	109.6
-6	120.2	106.0	0 2 4	83.9	118.9	1	152.1	142.9	-1 0 4	13.1*	4.3	-5	267.1	251.7
-7	69.2	70.9	1	137.9	192.9	2	166.8	160.5	-2	141.9	156.3	-6	145.9	135.6
-8	74.8	80.6	2	399.3	426.9	3	125.6	119.2	-3	46.6	67.9	-7	97.1	102.8
-1 15 3	133.0	139.3	3	295.5	287.5	4	53.0	59.6	-4	206.6	205.4	-8	139.4	151.5
-2	99.1	99.4	4	278.9	270.5	5	89.4	83.9	-5	47.5	40.0	-1 13 4	153.6	159.7
-3	73.1	67.8	5	115.9	121.8	6	144.8	142.7	-6	236.2	226.4	-2	182.7	177.8
-4	136.0	125.4	6	38.2*	45.4	7	258.7	237.1	-7	131.0	116.2	-3	61.8	53.0
-5	88.0	87.9	7	205.2	192.5	0 14 4	313.7	314.5	-8	82.4	76.4	-4	49.5	56.0
-6	67.5	65.9	8	167.4	162.2	1	394.8	397.4	-1 1 4	128.5	156.1	-5	36.3*	24.5
-7	72.2	69.7	0 3 4	1.9*	48.5	2	114.4	122.2	-2	184.5	186.8	-6	168.3	137.4
-1 16 3	125.3	120.3	1	72.1	108.0	3	187.5	187.3	-3	127.7	113.4	-7	239.5	224.3
-2	77.0	78.9	2	147.7	153.4	4	139.4	134.9	-4	100.1	92.9	-1 14 4	397.8	403.5
-3	74.8	65.0	3	96.2	96.5	5	173.8	171.1	-5	47.5	37.2	-2	39.1*	53.2
-4	106.0	97.4	4	398.3	393.5	6	121.3	116.3	-6	97.1	84.0	-3	202.3	191.1
-5	23.5*	20.4	5	310.8	299.1	7	48.6	54.1	-7	49.0	55.5	-4	145.9	135.8
-6	78.7	75.8	6	82.4	70.2	0 15 4	0.4*	30.0	-8	148.7	144.6	-5	142.9	132.9
-7	51.7	43.4	7	225.4	210.5	1	318.7	301.5	-1 2 4	113.8	141.0	-6	181.7	172.3
-1 17 3	103.5	92.0	8	99.6	90.7	2	55.8	53.2	-2	400.2	427.0	-7	63.7	61.2
-2	179.6	167.2	0 4 4	101.1	118.0	3	225.8	213.9	-3	293.2	296.7	-1 15 4	214.1	217.7
-3	55.1	47.3	1	220.9	269.0	4	19.0*	13.4	-4	314.8	300.6	-2	61.8	57.2
-4	103.1	107.8	2	229.7	254.5	5	34.3	27.7	-5	131.0	122.8	-3	126.2	128.8
-5	75.6	75.9	3	168.9	164.1	6	48.1	47.5	-6	20.5*	20.0	-4	41.7*	51.5
-6	50.0	47.4	4	180.2	179.5	7	17.1*	14.5	-7	224.3	203.3	-5	96.6	79.5
-7	143.2	138.5	5	433.1	410.5	0 16 4	177.3	176.1	-8	130.5	125.5	-6	80.0	83.2
-1 18 3	65.6	56.5	6	124.2	118.3	1	243.5	233.1	-1 3 4	77.0	94.5	-7	30.8	30.3
-2	109.9	109.2	7	87.9	74.2	2	38.7*	39.5	-2	300.5	319.0	-1 16 4	215.0	207.9</

Tabelle 3. (Fortsetzung)

h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c
-5 17 4	144.4	140.0	3 5 5	106.5	128.7	4 17 5	98.4	88.7	-8 5 5	13.6*	10.9	-1 21 5	61.3	74.7
-6	213.1	202.1	4	53.4*	41.5	5	26.9*	25.3	-1 6 5	66.6	75.7	-2	79.2	78.8
-7	101.1	100.6	5	99.5	82.8	6	28.4	32.5	-2	72.4	97.1	-3	123.6	115.5
-1 18 4	254.9	247.3	6	170.8	142.0	0 18 5	19.2*	20.3	-3	59.3	69.4	-4	78.3	63.8
-2	106.1	101.2	7	35.1	32.7	1	134.8	137.7	-4	76.0	72.5	-5	24.5*	26.8
-3	55.4	52.4	8	49.9	58.1	2	58.9	46.2	-5	78.3	68.7	-1 22 5	52.7	46.2
-4	107.6	109.2	0 6 5	52.8	86.7	3	99.5	92.3	-6	92.8	89.4	-2	44.9	25.5
-5	270.1	254.4	1	72.5	98.5	4	92.0	98.5	-7	42.4	35.0	-3	71.8	71.0
-6	116.3	106.0	2	80.7	113.8	5	90.5	93.6	-8	123.1	132.2	-4	46.6	43.2
-1 19 4	155.1	160.4	3	22.0*	46.4	6	92.3	81.8	-1 7 5	77.2	107.2	-1 23 5	16.2*	6.8
-2	50.0	52.3	4	167.6	163.6	0 19 5	40.1*	31.3	-2	69.1	72.7	-2	60.5	51.6
-3	25.0*	25.5	5	38.9	26.7	1	134.1	120.9	-3	1.4*	43.9	-3	93.1	90.2
-4	209.6	200.3	6	97.3	78.5	2	51.3	49.6	-4	72.1	69.8	-4	62.7	66.4
-5	81.5	85.0	7	35.4	35.9	3	100.8	86.9	-5	41.6*	30.5	-1 24 5	161.7	153.4
-6	51.5	43.1	8	48.4	49.0	4	94.8	86.3	-6	72.4	77.1	-2	22.0*	39.0
-1 20 4	85.4	92.2	0 7 5	33.1*	82.5	5	113.1	101.4	-7	12.6*	28.7	-3	39.9	28.1
-2	289.8	275.9	1	47.1*	43.8	6	41.1	44.9	-8	58.1	35.1	-1 25 5	87.5	85.8
-3	71.2	70.5	2	27.1	41.3	0 20 5	47.6	59.2	-1 8 5	123.4	156.9	-2	38.7	37.3
-4	168.3	155.4	3	36.3	36.9	1	76.6	70.9	-2	95.1	104.0	-3	41.8	34.9
-5	72.1	71.2	4	90.7	109.3	2	126.2	113.0	-3	22.6*	31.9	-1 26 5	83.6	83.8
-6	54.4	59.5	5	161.8	152.8	3	30.6*	16.3	-4	113.7	112.2	-2	100.1	98.3
-1 21 4	143.3	144.9	6	96.0	90.2	4	143.1	126.4	-5	169.1	161.2	-1 27 5	67.0	56.0
-2	35.3*	47.5	7	127.7	124.2	5	65.8	66.1	-6	80.1	70.4	1 0 6	33.9*	50.6
-3	126.2*	115.9	8	12.1*	23.9	0 21 5	115.7	112.6	-7	179.2	175.7	2	142.2	206.8
-4	62.7	33.1	0 8 5	38.8*	56.6	1	106.8	97.3	-1 9 5	116.3	100.3	3	163.3	203.8
-5	85.4	77.8	1	122.5	153.8	2	33.4*	38.9	-2	37.4*	18.0	4	0.1*	15.5
-6	89.4	90.2	2	102.0	116.9	3	147.9	141.7	-3	102.4	97.9	5	40.3	72.0
-1 22 4	123.7	122.9	3	73.1	88.3	4	29.8*	33.2	-4	18.8*	35.4	6	202.8	174.0
-2	162.6	151.3	4	142.9	136.3	5	89.9	86.8	-5	28.6*	36.8	7	28.6*	36.8
-3	144.4	141.8	5	80.4	87.5	0 22 5	40.1	25.2	-6	16.6*	24.4	1 1 6	30.9	72.4
-4	128.5	124.3	6	22.5*	24.6	1	74.7	71.7	-7	68.3	63.6	2	197.8	240.7
-5	93.2	90.1	7	75.4	65.6	2	14.4*	8.2	-1 10 5	87.7	89.8	3	278.3	293.9
-1 23 4	35.8*	21.6	8	96.2	82.1	3	50.9	54.3	-2	126.6	145.3	4	230.1	212.5
-2	197.9	186.2	0 9 5	39.0	121.1	4	49.2	41.9	-3	60.5	69.0	5	166.8	75.2
-3	59.8	59.2	1	85.6	108.2	0 23 5	102.0	102.2	-4	67.9	66.9	6	278.0	227.9
-4	172.8	162.1	2	111.6	128.0	1	63.0	64.3	-5	93.9	84.6	7	50.4	65.4
-5	110.3	109.4	3	27.6*	16.2	2	89.4	76.4	-6	45.5	38.9	1 2 6	127.7	223.0
-1 24 4	135.0	120.7	4	96.1	106.0	3	92.2	92.0	-7	101.9	97.1	2	84.7	120.5
-2	107.9	106.2	5	64.3	42.3	4	36.6	40.3	-1 11 5	133.3	140.5	3	162.8	180.7
-3	231.8	217.2	6	29.5*	30.0	0 24 5	62.0	52.8	-2	68.4	84.7	4	166.7	167.3
-4	64.2	61.4	7	31.1*	29.2	1	147.7	131.4	-3	130.0	137.0	5	125.5	107.5
-1 25 4	65.7	61.4	0 10 5	71.8	73.3	2	39.5	39.6	-4	60.2	56.1	6	138.7	126.4
-2	107.0	100.6	1	166.0	189.1	3	30.5	27.4	-5	111.7	108.1	7	37.0	29.1
-3	99.6	91.4	2	128.4	142.9	4	46.9	46.6	-6	48.4	48.6	0 3 6	61.1*	34.0
-4	66.3	68.8	3	77.8	80.7	0 25 5	60.7	63.5	-7	48.4	43.3	1	135.3	214.3
-1 26 4	160.0	134.8	4	5.5*	15.9	1	58.9	48.3	-1 12 5	86.6	102.3	2	240.8	336.6
-2	46.0	33.6	5	87.5	96.3	2	102.9	98.5	-2	161.8	164.9	3	103.0	113.8
-3	22.0*	4.8	6	64.4	50.7	3	26.6	7.9	-3	41.2*	33.4	4	127.5	109.3
-1 27 4	157.0	168.7	7	116.0	103.0	0 26 5	47.8	43.4	-4	144.1	146.0	6	19.7*	25.8
-2	68.2	68.4	0 11 5	52.8	77.7	1	94.7	90.7	-5	50.8	44.9	6	48.2	45.0
-3	52.0	47.3	1	100.0	107.2	2	41.9	44.6	-6	27.2*	12.2	7	105.9	87.9
-1 28 4	110.0	106.0	2	167.2	182.6	0 27 5	23.8*	16.5	-7	49.2	51.6	0 4 6	60.2	109.0
-2	123.2	115.9	3	96.3	101.4	3	81.2	73.9	-1 13 5	52.8	56.4	1	170.3	256.5
0 0 5	75.9	75.9	4	69.1	55.9	1 0 5	59.6	46.3	-2	105.3	107.8	2	117.9	107.9
1	33.6*	10.9	5	111.2	101.7	-2	165.0	204.3	-3	212.5	196.8	3	23.8*	38.8
2	131.1	156.6	6	105.0	95.6	-3	51.4	61.9	-4	108.7	100.5	4	38.1	59.1
3	26.1*	43.9	7	80.3	67.9	-4	112.6	96.9	-5	48.2	41.5	5	63.5	54.8
4	119.2	162.8	0 12 5	30.7	53.8	-5	134.8	110.8	-6	144.1	146.0	6	19.7*	25.8
5	136.5	162.3	1	86.5	97.1	-6	37.0*	27.1	-7	73.2	49.8	7	245.9	202.4
6	46.2	57.3	2	55.3	54.9	-7	131.2	143.4	-1 14 5	102.4	109.3	0 5 6	81.9	127.0
7	110.0	101.6	3	47.6*	26.5	-8	98.9	91.2	-2	52.2	71.5	1	279.4	421.2
8	35.9	44.9	4	169.9	152.4	-1 1 5	59.2	70.4	-3	61.8	49.4	2	20.0*	27.2
1 1 5	65.3	147.6	5	82.0	82.4	-2	66.5	78.3	-4	25.6*	12.9	3	140.8	157.1
2	43.2	100.6	6	161.6	149.0	-3	28.3*	10.2	-5	46.2	52.5	4	121.6	96.8
3	17.5*	42.9	7	63.9	67.3	-4	130.3	129.2	-6	89.0	85.4	5	227.0	220.0
4	21.1*	48.2	0 13 5	98.1	90.7	-5	76.6	69.8	-7	50.1	58.9	6	18.4*	28.5
5	131.4	120.6	1	40.8*	19.7	-6	51.5	46.1	-1 15 5	34.8*	46.6	7	23.2*	42.9
6	59.1	64.4	2	29.6*	19.5	-7	33.6*	43.6	-2	28.2*	25.4	0 6 6	37.6*	63.7
7	75.3	75.8	3	199.1	188.5	-8	20.8*	32.8	-3	127.2	144.2	1	173.3	252.2
8	154.7	135.0	4	64.0	65.9	-1 2 5	11.9*	43.7	-4	60.8	63.3	2	67.6	81.5
0 2 5	37.1	56.5	5	103.3	97.8	-2	122.1	135.3	-5	85.5	81.3	3	136.3	153.5
1	22.4*	61.2	6	67.7	64.8	-3	27.8*	30.5	-6	69.5	65.1	4	190.9	174.1
2	95.5	168.7	7	46.9	42.2	-4	72.0	53.2	-1 16 5	169.9	174.0	5	148.1	126.2
3	33.8	48.5	0 14 5	14.4*	27.5	-5	161.4	147.9	-2	73.4	81.6	6	86.1	88.6
4	132.1	124.9	1	78.5	82.9	-6	76.3	78.4	-3	34.2*	26.5	7	89.5	92.9
5	66.3	65.1	2	69.9	65.6	-7	75.3	64.3	-4	189.2	172.0	0 7 6	109.1	144.2
6	37.8*	43.6	3	84.8	84.0	-8	50.6	57.6	-5	105.2	98.1	1	102.2	125.6
7	166.8	146.6	4	75.8	73.1	-1 3 5	17.7*	27.2	-6	85.0	72.8	2	122.3	137.3
8	47.8	37.0	5	52.8	55.7	-2	104.9	105.4	-1 17 5	37.2*	41.2	3	310.5	324.4
0 3 5	103.8	199.5	6	118.5	124.2	-3	122.9	108.2	-2	32.4*	30.9	4	169.5	161.9
1	58.8	92.2	7	67.0	67.0	-4	101.9	100.7	-3	152.8	141.4	5	60.7	57.7
2	113.1	171.7	0 15 5	36.3	57.6	-5	110.3	102.8	-4	61.9	66.9	6	99.7	99.9
3	51.6	81.0	1	48.7	45.8	-6	70.9	61.3	-5	23.2*	9.5	7	99.6	96.2
4	81.2	83.2	2	119.0	114.3	-7	79.5	63.3	-6	26.2	24.7	0 8 6	106.1	143.3
5	22.0*	39.4	3	107.6	92.9	-8	64.3	75.7	-1 18 5	133.4	124.0	1	46.8*	69.2
6	153.1	152.6	4	127.6	117.5	-1 4 5	68.5	80.5	-2	150.9	128.0	2	93.9	110.7
7	77.9	73.0	5	119.4	106.9	-2	110.3	127.3	-3	64.6	61.6	3	132.7	145.4
8	101.2	102.5	6	9.2*	23.1	-3	44.8*	56.1	-4	123.1	113.1	4	53.7	55.8
0 4 5	93.3	167.0	7	35.6	38.1	-4	55.6	47.6	-5	115.2	107.2	5	103.3	97.1
1	11.2*	34.5	0 16 5	16.0*	14.1	-5	29.6*	24.3	-6	75.4	73.1	6	205.0	181.4
2	30.2	59.3	1	161.7	163.0	-6	92.5	90.1	-1 19 5	125.6	112.1</			

Tabelle 3. (Fortsetzung)

h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c	h k l	F _o	F _c
1 10 6	153.9	169.0	-5 0 6	100.0	83.5	-4 14 6	199.0	192.1	2 7 7	44.7	70.8	-5 2 7	79.6	62.7
2	94.0	106.7	-6	372.7	320.0	-5	161.0	146.2	3	55.5	64.7	-6	65.6	65.8
3	100.6	88.3	-7	32.8	24.0	-6	87.2	84.7	4	18.4*	29.7	-1 3 7	31.6	67.6
4	78.4	81.7	-1 6	61.3	92.4	-1 15 6	128.9	128.3	5	15.3*	34.9	-2	26.6*	44.1
5	15.9*	2.8	-2	179.2	192.6	-2	37.4*	37.0	6	0.0*	38.0	-3	26.9	45.2
6	117.5	103.4	-3	334.6	316.5	-3	323.7	316.1	0 8 7	47.8	43.7	-4	31.5*	21.0
7	48.0	48.9	-4	250.1	217.6	-4	66.4	59.3	1	10.5*	29.4	-5	93.6	81.2
0 11 6	120.2	105.5	-5	94.1	85.5	-5	42.1	47.6	2	54.2	64.3	-6	101.5	82.0
1	127.8	150.8	-6	206.3	178.9	-6	88.0	90.6	3	49.7	39.1	-1 4 7	73.1	112.0
2	356.4	363.3	-7	37.6	43.7	-1 16 6	41.8	48.4	4	98.4	87.1	-2	16.4*	32.9
3	85.1	101.0	-1 2 6	117.2	190.9	-2	110.7	105.6	5	93.1	87.5	-3	144.2	145.5
4	138.2	130.0	-2	96.3	108.7	-3	100.4	97.2	6	34.9	43.5	-4	60.5	54.1
5	81.2	79.0	-3	118.9	122.7	-4	71.6	72.1	0 9 7	10.7*	18.2	-5	36.0*	37.6
6	82.6	85.8	-4	222.5	201.1	-5	128.5	113.9	1	70.9	89.1	-6	83.0	87.2
0 12 6	51.0	19.2	-5	233.0	213.3	-1 17 6	175.2	169.0	2	138.4	152.4	-1 5 7	30.4	51.8
1	206.0	206.8	-6	36.8	43.0	-2	11.9*	2.5	3	24.6*	14.0	-2	41.5	51.4
2	121.5	109.3	-7	52.7	52.4	-3	109.8	100.6	4	187.2	178.0	-3	15.0*	25.0
3	61.5	59.1	-1 3 6	183.0	295.4	-4	61.3	58.0	5	101.0	99.4	-4	70.6	67.0
4	223.0	209.6	-2	315.6	370.5	-5	86.5	92.0	6	116.3	106.3	-5	37.4	52.2
5	100.6	94.3	-3	113.9	107.8	-1 18 6	146.9	134.2	0 10 7	49.3	66.1	-6	34.1	22.3
6	52.4	49.1	-4	32.4*	26.5	-2	103.4	88.8	1	9.4*	34.9	-1 6 7	33.7*	61.9
0 13 6	238.5	225.4	-5	179.2	167.0	-3	60.4	56.6	2	47.0	61.0	-2	51.5	67.9
1	169.8	159.9	-6	75.7	75.3	-4	58.1	64.7	3	67.1	75.4	-3	244.9	229.8
2	224.1	217.7	-7	96.4	89.2	-5	46.1	42.6	4	23.5	17.7	-4	80.3	61.7
3	85.0	78.3	-1 4 6	147.7	224.8	-1 10 6	171.2	167.9	5	177.1	156.7	-5	39.1	59.1
4	185.6	172.9	-2	73.6	84.5	-2	211.6	190.2	6	26.3*	20.4	-6	63.4	61.5
5	137.0	123.3	-3	14.3*	28.5	-3	40.9*	43.1	0 11 7	11.3*	15.3	-1 1 7	70.7	98.8
6	80.6	75.0	-4	39.4	39.6	-4	136.4	130.5	1	49.1	51.7	-2	97.1	130.5
0 14 6	80.0	89.4	-5	179.6	186.3	-5	104.3	94.0	2	43.5	59.7	-3	0.0*	38.8
1	46.8	48.1	-6	58.5	52.9	-1 20 6	67.9	67.0	3	23.5	38.5	-4	70.8	58.4
2	21.8*	25.6	-2	214.8	204.9	-2	146.7	152.2	4	131.7	123.1	-5	104.1	89.9
3	133.8	119.6	-1 5 6	307.8	456.6	-3	46.7	50.2	5	52.1	38.4	-6	18.3	27.0
4	192.8	182.4	-2	42.8*	63.1	-4	159.7	151.4	0 12 7	141.7	158.3	-1 8 7	0.0*	19.7
5	158.5	129.0	-3	179.6	186.3	-1 21 6	36.5	64.0	6	37.7	56.8	-2	106.3	109.4
6	147.5	132.1	-4	105.2	99.5	-2	169.4	149.2	2	102.0	109.0	-3	62.7	54.0
0 15 6	168.2	161.5	-5	252.0	225.7	-3	112.8	97.5	3	112.1	106.7	-4	49.7	33.9
1	146.7	141.9	-6	35.3*	13.9	-4	128.8	118.2	4	47.6	39.8	-5	35.4	27.3
2	120.4	112.7	-7	60.2	43.1	-1 22 6	83.2	80.4	5	55.7	40.1	-6	68.1	32.6
3	275.6	246.8	-1 6 6	105.4	151.5	-2	141.5	132.1	0 13 7	48.6	51.9	-1 9 7	94.6	101.3
4	94.7	102.6	-2	104.5	102.2	-3	41.8	44.2	1	71.5	71.9	-2	61.9	96.0
5	105.4	96.0	-3	50.2*	66.3	-1 23 6	33.3*	21.8	2	94.6	98.8	-3	41.5	50.1
6	73.2	70.9	-4	218.1	192.9	-2	23.2*	21.5	3	93.1	81.0	-4	104.7	106.5
0 16 6	150.6	140.3	-5	188.9	164.3	-3	82.6	83.9	4	51.6	41.0	-5	73.0	62.5
1	44.9*	54.7	-6	131.8	125.4	-1 24 6	94.4	79.9	5	49.2	38.4	-6	60.6	44.7
2	13.9*	23.1	-7	42.6	49.1	-2	71.5	78.3	0 14 7	203.3	191.6	-1 10 7	72.1	75.0
3	50.9	56.2	-1 7 6	95.3	135.9	0 0 7	29.6	26.7	1	92.7	95.2	-2	104.8	112.5
4	51.4	70.3	-2	91.3	120.4	1	63.3	42.9	2	88.8	79.9	-3	34.3	55.8
5	157.5	137.2	-3	337.2	377.0	2	5.9*	70.2	3	44.9	47.2	-4	54.2	45.8
6	81.7	78.0	-4	161.4	154.1	3	62.9	59.2	4	46.7	23.8	-5	43.1	41.8
0 17 6	274.0	243.6	-5	10.7*	3.0	4	65.9	36.9	5	85.1	69.1	-1 11 7	105.9	94.6
1	184.4	168.9	-6	15.8*	18.8	5	179.3	181.0	0 15 7	173.1	156.0	-2	66.0	71.9
2	69.8	77.6	-7	132.2	122.6	6	21.9*	33.3	1	72.0	56.2	-3	0.0*	9.2
3	158.3	152.7	-1 8 6	53.4	89.2	1 1 7	88.1	166.2	2	78.4	84.0	-4	71.2	66.0
4	150.1	139.6	-2	103.1	115.5	2	7.1*	17.8	3	61.3	64.6	-5	178.4	158.9
5	99.3	87.3	-3	209.9	199.6	3	49.3	39.1	4	132.5	119.5	-1 12 7	102.7	108.5
0 18 6	145.9	132.7	-4	74.2	77.3	4	96.0	84.3	0 16 7	31.2	32.0	-2	92.2	79.7
1	145.4	127.3	-5	112.8	102.2	5	112.3	120.3	1	9.1*	16.8	-3	77.1	71.1
2	24.5*	36.3	-6	266.8	239.0	6	24.0*	18.2	2	78.3	87.8	-4	54.3	57.5
3	45.8	30.2	-7	76.6	70.4	1 2 7	39.1	85.5	3	27.3	38.3	-5	98.7	87.4
4	57.5	55.8	-1 9 6	161.7	191.3	2	80.7	121.2	4	4.6*	7.4	-1 13 7	57.3	69.6
5	74.0	75.9	-2	106.4	107.8	3	117.6	142.6	0 17 7	32.2	38.6	-2	36.0	55.3
0 19 6	209.9	183.1	-3	109.8	121.9	4	13.3*	29.2	1	147.7	121.5	-3	29.8*	33.9
1	177.4	151.3	-4	151.9	150.6	5	141.4	136.5	2	108.8	105.8	-4	15.9*	19.2
2	293.2	259.6	-5	239.5	217.8	6	28.3*	25.3	3	48.4	35.8	-5	13.8*	33.2
3	62.7	62.8	-6	169.4	147.5	0 3 7	45.0	37.3	4	146.5	128.3	-1 14 7	17.1*	46.2
4	87.2	87.8	-7	69.7	68.7	1	66.0	102.4	0 18 7	107.1	93.6	-2	21.4*	27.7
5	70.8	65.3	-1 10 6	159.2	180.0	2	65.2	82.3	1	25.7	38.0	-3	53.4	54.7
0 20 6	42.0	30.6	-2	131.1	148.1	3	132.8	154.2	2	18.6*	27.6	-4	79.6	55.0
1	72.6	59.8	-3	111.5	122.3	4	107.0	97.8	3	66.0	64.1	-5	52.0	53.0
2	65.5	60.1	-4	113.2	93.1	5	33.2	37.4	0 19 7	60.1	57.1	-1 15 7	147.1	136.8
3	16.1*	19.5	-5	84.6	67.6	6	87.5	74.3	1	93.7	93.1	-2	111.6	105.0
4	149.4	127.4	-6	39.6	21.4	0 4 7	3.2*	71.8	2	100.8	90.2	-3	33.6	33.4
0 21 6	212.9	191.4	-7	82.3	86.4	1	40.6	62.3	3	89.7	80.1	-4	100.8	89.3
1	69.3	52.3	-1 11 6	125.4	145.0	2	14.5*	52.0	0 20 7	112.1	100.1	-1 16 7	71.0	64.3
2	163.1	145.5	-2	289.0	284.6	3	119.0	139.5	1	24.4*	27.5	-2	38.7*	38.0
3	78.9	66.5	-3	57.2	69.9	4	2.8*	31.2	2	106.1	92.5	-3	37.2	32.1
4	199.8	186.5	-4	166.1	158.7	5	86.7	78.4	0 21 7	4.6*	8.3	-4	59.9	49.9
0 22 6	63.8	61.3	-5	105.5	100.6	6	85.1	69.1	1	127.2	103.0	-1 17 7	15.2*	29.2
1	71.0	73.1	-6	30.1*	31.9	0 5 7	49.2	99.3	-1 0 7	63.8	111.5	-2	120.2	111.9
2	86.7	77.2	-1 12 6	207.5	216.9	1	32.7	63.0	-2	30.4*	16.3	-3	0.0*	12.5
3	84.4	73.8	-2											

Tabelle 4. Die Richtungscosinus der Hauptachsen der Temperaturellipsoid

	B_{180}	Achse	B	Länge	$\cos \alpha_1$	$\cos \alpha_2$	$\cos \alpha_3$
Pb(1)	2,64 Å ⁻²	1	1,47 Å ²	0,136 Å	0,547	-0,078	0,833
		2	4,14	0,228	-0,745	0,407	0,528
		3	2,32	0,171	-0,380	-0,909	0,164
Pb(2)	2,32	1	1,94	0,157	0,925	-0,182	-0,330
		2	2,04	0,160	0,365	0,652	0,663
		3	2,97	0,194	0,094	-0,735	0,670
Pb(3)	3,33	1	5,03	0,252	0,701	0,287	0,652
		2	2,07	0,161	-0,712	0,290	0,638
		3	2,87	0,190	-0,005	-0,912	0,408
Pb(4)	2,34	1	1,72	0,147	0,504	-0,469	0,724
		2	2,42	0,175	0,359	0,877	0,317
		3	2,87	0,190	-0,785	0,100	0,611
Pb(5)	1,88	1	2,21	0,167	0,930	-0,059	-0,362
		2	1,52	0,139	-0,061	0,947	-0,314
		3	1,88	0,154	0,362	0,314	0,877
Pb(6)	1,88	1	1,73	0,148	0,975	0,280	-0,067
		2	1,88	0,154	-0,236	0,897	0,372
		3	2,01	0,159	0,164	-0,340	0,925
Pb(7)	1,28	1	0,58	0,085	0,949	-0,080	0,301
		2	2,25	0,169	-0,044	0,920	0,387
		3	1,00	0,112	-0,309	-0,381	0,870
Pb(8)	1,49	1	1,84	0,152	0,799	0,323	0,505
		2	1,47	0,136	-0,590	0,578	0,563
		3	1,14	0,120	-0,109	-0,748	0,653
As(1)	1,73	1	1,42	0,134	0,891	0,411	-0,189
		2	2,04	0,161	-0,103	0,592	0,799
		3	1,71	0,147	0,440	-0,692	0,570
As(2)	1,69	1	1,60	0,142	0,965	0,000	-0,260
		2	1,09	0,117	-0,062	0,971	-0,230
		3	2,38	0,173	0,252	0,239	0,937
As(3)	1,95	1	1,52	0,138	0,961	0,177	0,209
		2	1,18	0,122	-0,218	0,957	0,188
		3	3,12	0,198	-0,167	-0,227	0,959

Tabelle 4. (Fortsetzung)

	B_{Iso}	Achse	B	Länge	$\cos \alpha_1$	$\cos \alpha_2$	$\cos \alpha_3$
As(4)	1,42	1	0,43 Å ²	0,074 Å	0,537	0,431	0,724
		2	1,57	0,141	-0,713	0,691	0,117
		3	2,24	0,168	-0,449	-0,579	0,679
As(5)	1,70	1	1,03	0,114	0,890	-0,433	-0,136
		2	1,62	0,143	0,451	0,811	0,371
		3	2,44	0,176	-0,050	-0,392	0,918
As(6)	1,74	1	1,57	0,141	0,884	0,391	-0,252
		2	1,35	0,130	-0,148	0,750	0,643
		3	2,28	0,170	0,441	-0,532	0,722
As(7)	2,06	1	0,25	0,057	0,572	-0,121	0,810
		2	4,97	0,251	-0,145	0,958	0,246
		3	0,95	0,110	-0,807	-0,259	0,530
As(8)	1,88	1	2,76	0,187	0,379	0,684	0,622
		2	1,07	0,116	-0,741	0,627	-0,238
		3	1,78	0,150	-0,553	-0,370	0,745
S(1)	2,32	1	1,05	0,115	0,575	0,704	-0,413
		2	1,88	0,154	-0,816	0,516	-0,256
		3	4,02	0,225	0,032	0,485	0,873
S(2)	1,67	1	1,67	0,145	0,291	0,937	0,191
		2	3,14	0,199	-0,810	0,348	-0,471
		3	0,17	0,047	-0,508	-0,018	0,860
S(3)	1,42	1	1,50	0,138	0,627	0,010	0,778
		2	2,20	0,167	-0,137	0,985	0,096
		3	0,55	0,083	-0,766	-0,167	0,620
S(4)	1,85	1	1,40	0,133	0,774	0,013	0,631
		2	1,74	0,148	0,116	0,979	-0,164
		3	2,40	0,174	-0,621	0,201	0,757
S(5)	2,03	1	3,11	0,198	0,639	0,768	0,012
		2	2,29	0,170	-0,569	0,461	0,680
		3	0,68	0,092	0,517	-0,442	0,733
S(6)	2,12	1	0,89	0,106	0,745	-0,221	0,629
		2	3,49	0,210	-0,442	0,542	0,714
		3	1,95	0,157	-0,499	-0,810	0,306

Tabelle 4. (Fortsetzung)

	B_{iso}	Achse	B	Länge	$\cos \alpha_1$	$\cos \alpha_2$	$\cos \alpha_3$
S(7)	2,35	1	2,17 Å ²	0,166 Å	0,812	-0,394	-0,429
		2	0,93	0,108	0,455	0,889	0,046
		3	3,92	0,223	0,363	-0,232	0,902
S(8)	2,18	1	1,72	0,147	0,983	0,171	0,056
		2	3,83	0,220	-0,180	0,938	0,292
		3	0,99	0,112	-0,003	-0,298	0,954
S(9)	2,03	1	3,86	0,221	0,534	0,109	0,838
		2	0,83	0,102	0,042	0,986	-0,155
		3	1,38	0,132	-0,843	0,119	0,522
S(10)	1,54	1	1,42	0,134	0,944	0,144	-0,293
		2	2,25	0,168	-0,132	0,989	0,059
		3	0,95	0,109	0,299	-0,017	0,953
S(11)	1,13	1	1,18	0,122	0,516	-0,186	0,835
		2	0,68	0,093	0,240	0,968	0,067
		3	1,51	0,138	-0,821	0,166	0,545
S(12)	1,73	1	0,42	0,073	0,745	-0,017	0,665
		2	2,29	0,170	-0,086	0,988	0,123
		3	2,46	0,176	-0,660	-0,149	0,735
S(13)	1,68	1	2,82	0,189	0,442	-0,424	0,789
		2	0,64	0,090	0,000	0,880	0,473
		3	1,55	0,140	-0,896	-0,209	0,389
S(14)	1,58	1	0,07	0,029	0,506	0,424	0,750
		2	2,17	0,165	-0,785	0,586	0,198
		3	2,48	0,177	-0,355	-0,689	0,630
S(15)	2,23	1	1,37	0,131	0,648	0,746	0,148
		2	1,90	0,155	-0,731	0,665	-0,147
		3	3,41	0,207	-0,209	-0,013	0,977
S(16)	2,04	1	3,43	0,208	0,538	0,134	0,831
		2	1,88	0,154	0,009	0,986	-0,165
		3	0,81	0,101	-0,842	0,097	0,530
S(17)	1,58	1	1,52	0,139	0,954	0,249	-0,163
		2	2,47	0,176	-0,293	0,883	-0,365
		3	0,73	0,096	0,053	0,396	0,916

Tabelle 4. (Fortsetzung)

	B_{iso}	Achse	B	Länge	$\cos \alpha_1$	$\cos \alpha_2$	$\cos \alpha_3$
S(18)	2,58	1	1,66 Å ²	0,145 Å	0,977	-0,196	-0,081
		2	2,42	0,175	0,212	0,893	0,396
		3	3,64	0,214	-0,004	-0,404	0,914
S(19)	2,09	1	4,07	0,227	0,591	-0,131	0,795
		2	1,74	0,148	0,322	0,942	-0,084
		3	0,44	0,074	-0,739	0,306	0,599
S(20)	1,72	1	1,74	0,148	0,975	-0,212	-0,049
		2	0,99	0,112	0,191	0,728	0,657
		3	2,40	0,174	-0,103	-0,651	0,751

Strukturverfeinerung

Da die Struktur nicht genügend genau bekannt war, konnte die Verfeinerung nicht mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate begonnen werden. Mit Hilfe von fünf sukzessiven Differenz-Fourier-summationen konnte der R -Wert auf 19,6% gesenkt werden. Im Laufe dieser Differenz-Fouriersynthesen zeigte es sich, daß die Atome Pb(7) und Pb(8) nur je zu 78% besetzt sind. Weitere Verfeinerungen wurden dann mittels der Methode der kleinsten Quadrate durchgeführt. Nach sieben Verfeinerungszyklen mit isotropen Temperaturfaktoren sank der R -Wert auf 12%. Von jetzt an wurde die anomale Streuung für jedes Atom berücksichtigt. Die $\Delta f'$ - und $\Delta f''$ -Werte von CROMER (1965) wurden verwendet. Für den R -Wert ergab sich keine wesentliche Verbesserung. Es wurden nun noch anisotrope Temperaturfaktoren eingeführt. Der R -Wert reduzierte sich für alle Reflexe auf 9,1%. Diese Berechnungen wurden auf der Rechananlage Bull Gamma 30S der Universität Bern und mit Hilfe der kristallographischen Programme von P. ENGEL (Bern) ausgeführt. Die benutzte Gewichtsfunktion ist

$$w = 1/\sigma^2(F_o), \quad \text{wobei} \quad \sigma^2(F_o) = \frac{\sigma^2(F_o^2)}{4 F_o^2};$$

$$\sigma^2(F_o^2) = \left(\frac{\partial F_o^2}{\partial P}\right)^2 \sigma^2(P) + \left(\frac{\partial F_o^2}{\partial B}\right)^2 \sigma^2(B) + \left(\frac{\partial F_o^2}{\partial Lp^{-1}}\right)^2 \sigma^2[(Lp)^{-1}]$$

$$+ \left(\frac{\partial F_o^2}{\partial T}\right)^2 \sigma^2(T),$$

mit P = peak count, B = background count, Lp = Lorentz-Polarisations- und T = Transmissions-Faktor. In Tab. 2 sind die Atom-

parameter und anisotropen Temperaturkoeffizienten, in Tab. 3 die $|F_o|$ - und $|F_c|$ -Werte, in Tab. 4 die Richtungscosinus der Hauptachsen der Temperaturellipsoide und in Tab. 5 die Bindungsabstände und -winkel aufgeführt.

Tabelle 5. *Atomabstände und Bindungswinkel in Dufrenoyzit*

	Pb(1)		Pb(2)		Pb(3)		Pb(4)
S(1)	2,98 Å	S(1)	2,99 Å	S(11)	2,91 Å	S(15)	2,99 Å
S(3)	2,98	S(14)	3,00	S(15)	2,92	S(20)	3,03
S(10)	3,02	S(16)	3,06	S(2)	3,06	S(17)	3,07
S(19)	3,12	S(19)	3,13	S(4)	3,21	S(2)	3,12
S(11)	3,25	S(13)	3,13	S(17)	3,23	S(14)	3,15
S(14)	3,27	S(10)	3,19	S(3)	3,26	S(4)	3,21
S(15)	3,27	S(2)	3,30	S(5)	3,28	S(16)	3,27
S(12)	3,30	S(20)	3,33	S(1)	3,30	S(18)	3,30
S(2)	3,32	S(15)	3,48	S(14)	3,43	S(1)	3,35
Mittel	3,17		3,18		3,18		3,17
	Pb(5)		Pb(6)		Pb(7)		Pb(8)
S(4)	2,88 Å	S(19)	2,88 Å	S(17)	2,69 Å	S(6)	2,73 Å
S(7)	2,94	S(9)	2,88	S(7)	2,80	S(17)	2,73
S(8)	2,96	S(6)	2,96	S(5)	2,85	S(8)	2,91
S(9)	2,99	S(10)	2,98	S(6)	2,99	S(4)	3,00
S(3)	3,05	S(11)	2,99	S(18)	3,29	S(16)	3,07
S(17)	3,09	S(7)	3,10	S(8)	3,31	S(9)	3,30
S(5)	3,38	S(12)	3,38	[S(13)	3,86]	S(18)	3,62
	3,04		3,02		2,99		3,05
	As(1)		As(2)		As(3)		As(4)
S(2)	2,24 Å	S(3)	2,18 Å	S(11)	2,22 Å	S(14)	2,23 Å
S(18)	2,29	S(15)	2,24	S(1)	2,25	S(13)	2,30
S(16)	2,36	S(16)	2,43	S(20)	2,34	S(20)	2,37
Mittel	2,30		2,28		2,27		2,30
	As(5)		As(6)		As(7)		As(8)
S(19)	2,27 Å	S(10)	2,24 Å	S(8)	2,35 Å	S(5)	2,27 Å
S(12)	2,35	S(9)	2,29	S(7)	2,46	S(4)	2,27
S(13)	2,40	S(12)	2,37	S(6)	2,51	S(18)	2,27
	2,34		2,30		2,44		2,27

Tabelle 5. (Fortsetzung)

Pb(1)-Polyeder		Pb(2)-Polyeder	
S(1)–Pb(1)–S(3)	70,3°	S(1)–Pb(2)–S(14)	85,6°
S(1)–Pb(1)–S(10)	85,7	S(1)–Pb(2)–S(16)	68,6
S(1)–Pb(1)–S(14)	87,7	S(1)–Pb(2)–S(13)	84,4
S(1)–Pb(1)–S(12)	82,0	S(1)–Pb(2)–S(10)	82,6
S(1)–Pb(1)–S(2)	76,6	S(1)–Pb(2)–S(2)	76,8
S(3)–Pb(1)–S(14)	62,6	S(14)–Pb(2)–S(16)	66,1
S(3)–Pb(1)–S(15)	65,2	S(14)–Pb(2)–S(19)	85,6
S(3)–Pb(1)–S(2)	73,6	S(14)–Pb(2)–S(13)	68,9
S(10)–Pb(1)–S(19)	81,7	S(14)–Pb(2)–S(15)	84,2
S(10)–Pb(1)–S(11)	67,4	S(16)–Pb(2)–S(2)	66,1
S(10)–Pb(1)–S(12)	66,1	S(16)–Pb(2)–S(15)	65,1
S(10)–Pb(1)–S(2)	83,1	S(19)–Pb(2)–S(13)	67,6
S(19)–Pb(1)–S(11)	71,8	S(19)–Pb(2)–S(10)	87,5
S(19)–Pb(1)–S(14)	81,4	S(19)–Pb(2)–S(20)	69,7
S(19)–Pb(1)–S(15)	75,6	S(19)–Pb(2)–S(15)	72,5
S(19)–Pb(1)–S(12)	65,5	S(13)–Pb(2)–S(10)	72,8
S(11)–Pb(1)–S(15)	62,8	S(10)–Pb(2)–S(2)	81,0
S(11)–Pb(1)–S(2)	59,2	S(10)–Pb(2)–S(20)	67,5
S(14)–Pb(1)–S(15)	83,5	S(2)–Pb(2)–S(20)	58,5
S(14)–Pb(1)–S(12)	70,7	S(2)–Pb(2)–S(15)	76,6
S(15)–Pb(1)–S(2)	78,9	S(20)–Pb(2)–S(15)	62,5
Pb(3)-Polyeder		Pb(4)-Polyeder	
S(11)–Pb(3)–S(15)	71,5°	S(15)–Pb(4)–S(20)	71,9°
S(11)–Pb(3)–S(2)	65,8	S(15)–Pb(4)–S(17)	83,9
S(11)–Pb(3)–S(1)	65,9	S(15)–Pb(4)–S(2)	86,9
S(11)–Pb(3)–S(14)	69,8	S(15)–Pb(4)–S(14)	78,4
S(15)–Pb(3)–S(2)	88,9	S(15)–Pb(4)–S(18)	83,2
S(15)–Pb(3)–S(17)	82,3	S(20)–Pb(4)–S(2)	63,1
S(15)–Pb(3)–S(5)	82,6	S(20)–Pb(4)–S(14)	68,5
S(15)–Pb(3)–S(14)	74,9	S(20)–Pb(4)–S(1)	65,0
S(2)–Pb(3)–S(4)	83,5	S(17)–Pb(4)–S(14)	86,1
S(2)–Pb(3)–S(5)	70,5	S(17)–Pb(4)–S(4)	81,9
S(2)–Pb(3)–S(1)	84,2	S(17)–Pb(4)–S(16)	68,7
S(4)–Pb(3)–S(17)	82,8	S(17)–Pb(4)–S(18)	72,3
S(4)–Pb(3)–S(3)	73,1	S(2)–Pb(4)–S(4)	82,6
S(4)–Pb(3)–S(5)	63,8	S(2)–Pb(4)–S(18)	65,7
S(4)–Pb(3)–S(1)	76,3	S(2)–Pb(4)–S(1)	82,6
S(17)–Pb(3)–S(3)	65,4	S(14)–Pb(4)–S(16)	62,0
S(17)–Pb(3)–S(5)	69,8	S(14)–Pb(4)–S(1)	77,4
S(17)–Pb(3)–S(14)	79,2	S(4)–Pb(4)–S(16)	70,2
S(3)–Pb(3)–S(1)	63,0	S(4)–Pb(4)–S(18)	62,2
S(3)–Pb(3)–S(14)	58,2	S(4)–Pb(4)–S(1)	75,6
S(1)–Pb(3)–S(14)	80,0	S(16)–Pb(4)–S(1)	62,0

Tabelle 5. (Fortsetzung)

Pb(5)-Polyeder		Pb(6)-Polyeder	
S(4)–Pb(5)–S(7)	85,5°	S(19)–Pb(6)–S(9)	82,3°
S(4)–Pb(5)–S(9)	90,6	S(19)–Pb(6)–S(6)	83,8
S(4)–Pb(5)–S(3)	81,1	S(19)–Pb(6)–S(10)	86,5
S(4)–Pb(5)–S(17)	90,8	S(19)–Pb(6)–S(11)	79,1
S(7)–Pb(5)–S(8)	74,5	S(9)–Pb(6)–S(6)	86,0
S(7)–Pb(5)–S(9)	82,1	S(9)–Pb(6)–S(10)	72,4
S(7)–Pb(5)–S(17)	77,3	S(9)–Pb(6)–S(7)	81,2
S(8)–Pb(5)–S(9)	85,5	S(6)–Pb(6)–S(7)	100,3
S(8)–Pb(5)–S(17)	86,1	S(6)–Pb(6)–S(12)	76,6
S(8)–Pb(5)–S(5)	82,7	S(10)–Pb(6)–S(11)	71,5
S(9)–Pb(5)–S(5)	72,9	S(10)–Pb(6)–S(7)	83,6
S(3)–Pb(5)–S(17)	69,6	S(11)–Pb(6)–S(12)	68,1
S(3)–Pb(5)–S(5)	67,8	S(7)–Pb(6)–S(12)	78,8

Pb(7)-Polyeder		Pb(8)-Polyeder	
S(17)–Pb(7)–S(7)	86,9°	S(6)–Pb(8)–S(17)	84,9°
S(17)–Pb(7)–S(5)	84,5	S(6)–Pb(8)–S(8)	77,9
S(17)–Pb(7)–S(6)	80,7	S(6)–Pb(8)–S(4)	89,5
S(17)–Pb(7)–S(18)	77,3	S(6)–Pb(8)–S(9)	82,2
S(7)–Pb(7)–S(5)	86,5	S(17)–Pb(8)–S(8)	94,2
S(7)–Pb(7)–S(6)	80,0	S(17)–Pb(8)–S(4)	91,7
S(7)–Pb(7)–S(8)	116,5	S(17)–Pb(8)–S(16)	76,0
S(5)–Pb(7)–S(18)	108,5	S(8)–Pb(8)–S(9)	88,3
S(5)–Pb(7)–S(8)	85,7	S(8)–Pb(8)–S(18)	83,3
S(6)–Pb(7)–S(18)	80,7	S(4)–Pb(8)–S(16)	75,7
S(6)–Pb(7)–S(8)	112,9	S(4)–Pb(8)–S(9)	82,9
S(18)–Pb(7)–S(8)	83,1	S(16)–Pb(8)–S(18)	59,5
		S(9)–Pb(8)–S(18)	67,8

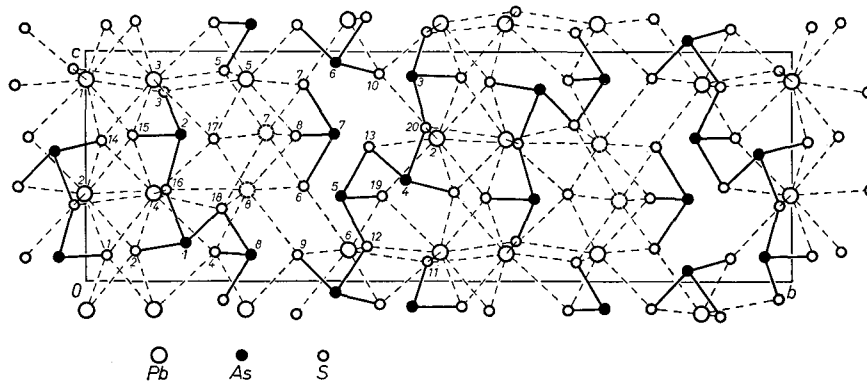
As(1)-Pyramide		As(2)-Pyramide	
As(2)–As(1)–S(18)	100,4°	S(3)–As(2)–S(15)	99,4°
S(2)–As(1)–S(16)	97,9	S(3)–As(2)–S(16)	101,2
S(18)–As(1)–S(16)	92,5	S(15)–As(2)–S(16)	98,4

As(3)-Pyramide		As(4)-Pyramide	
S(11)–As(3)–S(1)	98,7°	S(14)–As(4)–S(13)	100,1°
S(11)–As(3)–S(20)	101,4	S(14)–As(4)–S(20)	98,5
S(1)–As(3)–S(20)	97,0	S(13)–As(4)–S(20)	94,7

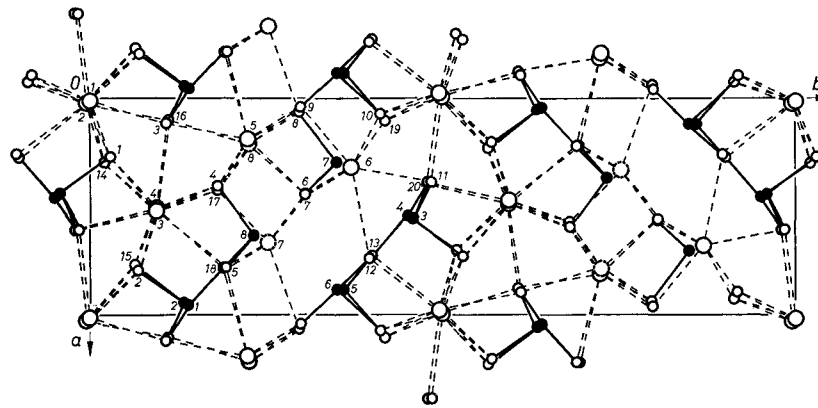
Tabelle 5. (Fortsetzung)

As(5)-Pyramide		As(6)-Pyramide	
S(19)–As(5)–S(12)	97,4°	S(10)–As(6)–S(9)	99,5°
S(19)–As(5)–S(13)	96,7	S(10)–As(6)–S(12)	96,9
S(12)–As(5)–S(13)	100,2	S(9)–As(6)–S(12)	97,2

As(7)-Pyramide		As(8)-Pyramide	
S(8)–As(7)–S(7)	95,9°	S(5)–As(8)–S(4)	98,3°
S(8)–As(7)–S(6)	93,5	S(5)–As(8)–S(18)	96,2
S(7)–As(7)–S(6)	97,0	S(4)–As(8)–S(18)	95,6



(a)



(b)

Fig. 1. (a) Projektion der Dufrenoyitstruktur $\parallel a, (b) \parallel c$

Beschreibung der Struktur

Die Struktur, auf (100) und (001) projiziert, ist in den Fig. 1(a) und (b) dargestellt. Sie besteht aus zwei Arten von Schichtpaketen $\parallel(010)$: eine Schicht mit Pb(1, 2, 3 und 4) in Neunerkoordination, der Zusammensetzung PbS_4 (Fig. 2), wie bei Skleroklas, Rathit-I und Baumhauerit, und eine zweite mit Pb(5, 6, 7 und 8) in Siebenerkoordination und den As_xS_y -Gruppen. Die zweite Schicht ist eine deformierte PbS -Struktur aus Pb-, As- und S-Atomen. Sechs der neun S-Atome bei Pb(1, 2, 3 und 4) bilden die Ecken eines trigonalen Prismas und weitere drei S-Atome liegen ungefähr auf den Normalen vom Pb auf die

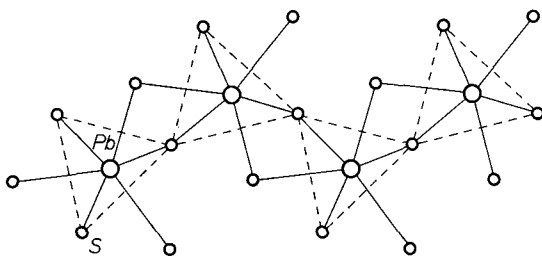


Fig. 2. Die Einzelschicht der Zusammensetzung $\text{Pb}^{\text{IX}}\text{S}_4$

drei Seitenflächen des Prismas. Die Koordinationspolyeder von Pb(1) und Pb(2) haben eine gemeinsame Basisfläche ihrer trigonalen Prismen; ebenso die Pb(3) und Pb(4). Diese Koordinationspolyeder sind zu prismatischen Säulen der Zusammensetzung $\text{PbS}_{6,2} \parallel c$ zusammengefügt. Die prismatischen Säulen um Pb(1), Pb(2) und Pb(3), Pb(4) berühren sich jeweils längs einer Kante (Fig. 2). Pb(5), (6) und (8) sind von sieben S-Atomen umgeben. Pb(7) weist eine Sechser-Koordination auf. Ein siebentes S-Atom [S(13)] befindet sich im Abstand von 3,86 Å. Die (Pb—S)-Abstände variieren von 2,73 bis 3,62 Å. Die mittleren (Pb—S)-Abstände und Temperaturfaktoren sind bei Neunerkoordination größer als bei Siebener- und Sechserkoordination. Alle As-Atome besitzen eine trigonal-pyramidale S-Koordination, mit Abständen von 2,18 bis 2,51 Å. Der mittlere (As—S)-Abstand bei der As(7)-Pyramide ist bedeutend größer (2,44 Å) als bei normaler kovalenter Bindung, ähnlich wie beim entsprechenden Atom in Rathit-I [As(5''b)] und Baumhauerit [As(5a), As(5b)]. Die (S—S)-Abstände in der As-Pyramide variieren von 3,36 bis 3,72 Å. Der Dufrenoyisit gehört zur Gruppe III der Sulfosalze mit $\varphi = \text{S}:(\text{As}, \text{Sb}, \text{Bi})$ zwischen

2 und 3 (Strukturtyp III, a_2), entsprechend der Klassifikation von NOWACKI (1968/9). Für $2 < \varphi < 3$ sind (As, Sb, Bi)S₃-Pyramiden zu Kettenstücken (As, Sb, Bi)_nS_{2n+1} endlicher Länge verbunden, indem sie jeweils ein gemeinsames Schwefelatom besitzen. As(1), (2) und (8) bilden mit den zugehörigen S-Atomen ein As₃S₇-Kettenstück; andererseits sind die As(3), (4), (5) und (6)-Pyramiden zu As₄S₉-Kettenstücken

Tabelle 6

Vergleich der Atomkoordinaten von Dufrenoyisit, Rathit-I und Baumhauerit
(alle Koordinatenwerte wurden mit 10³ multipliziert)

Dufrenoyisit $P 2_1$	Rathit-I $P 2_1/a$	Baumhauerit $P 1$	Dufre- noyisit	Rathit-I	Baumhau- erit
Pb(1)	Pb(1)	Pb(11)	x 1014 y 1000 z 876	x'_R 996 y'_R 1005 z'_R 756	y'_B 901 x'_B 961 z'_B 903
KZ: 9	9	9			
Pb(2)	Pb(1''')	Pb(7)	975 497 632	1004 505 756	1072 537 644
KZ: 9	9	9			
Pb(3)	Pb(1'')	Pb(1)	525 94 876	496 95 804	456 67 897
KZ: 9	9	9			
Pb(4)	Pb(2')	Pb(2)	515 95 382	500 97 301	446 58 399
KZ: 9	9	9			
Pb(5)	As (5''' a) (= 57% Ag)	50% As (4a)	190 225 880	235 226 864	277 229 855
KZ: 7	6	3			
Pb(5)	40% As (5''' b)	As (4b) (= 40% Ag)	190 225 880	218 250 853	220 226 872
KZ: 7	3	6			
Pb(6)	Pb(3'')	Pb(5)	319 372 138	338 372 184	364 390 125
KZ: 7	7	7			
78% Pb(7)		62% Pb(4)	667 255 645		667 266 610
KZ: 6		7			

KZ = Koordinationszahl.

Tabelle 6. (Fortsetzung)

Dufrenoyisit $P 2_1$	Rathit-I $P 2_1/a$	Baumhauerit $P 1$	Dufre- noysit	Rathit-I	Baumhau- erit
78 ⁰ / ₀ Pb(7)	As(3')	40 ⁰ / ₀ As(3')	667	596	616
			255	257	244
KZ: 6	4	3	645	593	578
78 ⁰ / ₀ Pb(8)	Pb(3''')	Pb(3)	214	162	164
			228	228	220
KZ: 7	7	7	399	376	381
As(1)	As(2)	As(1)	957	918	912
			143	152	131
KZ: 3	3	3	169	30	85
As(2)	As(1)	As(2)	945	900	884
			135	141	119
KZ: 3	3	3	633	579	639
As(3)	As(1')	As(8)	559	600	622
			461	459	476
KZ: 3	3	3	889	981	827
As(4)	As(2')	As(9)	542	582	646
			451	448	487
KZ: 3	3	3	441	530	387
As(5)	As(4)	As(7)	884	918	921
			363	360	361
KZ:	3	3	375	419	316
As(6)	As(3)	As(6)	884	904	928
			352	343	375
KZ: 3	3	3	950	967	898
As(7)	As(5'' a)	50 ⁰ / ₀	299	265	335
	(= 57 ⁰ / ₀ Ag)	As(5a)	353	374	360
KZ: 3	6	3	639	699	645
As(7)	40 ⁰ / ₀ As(5'' b)	40 ⁰ / ₀ As(5b)	299	282	296
			353	350	370
KZ: 3	3	3	639	707	600
As(8)	As(4')	As(3)	636	582	623
			234	240	235
KZ: 3	3	3	120	141	143

Tabelle 6. (Fortsetzung)

Dufrenoyisit $P 2_1$	Rathit-I $P 2_1/a$	Baumhauerit $P 1$	Dufre- noysit	Rathit-I	Baumhau- erit
S(1)	S(1''')	S(33)	271	248	183
			31	36	999
			119	22	151
S(2)	S(2)	S(35)	795	871	727
			72	76	51
			131	129	129
S(3)	S(3''')	S(1)	119	71	46
			110	125	99
			822	785	860
S(4)	S(6'')	S(5)	405	370	372
			182	180	179
			125	111	120
S(5)	S(7')	S(3)	774	732	755
			196	202	190
			915	913	938
S(6)	S(10'')	S(10)	440	433	460
			308	309	315
			409	460	416
S(7)	S(9'')	S(9)	449	450	463
			307	312	312
			854	867	857
S(8)	S(9''')	S(8)	62	50	78
			298	288	299
			633	693	637
S(9)	S(10''')	S(7)	43	67	58
			300	291	304
			115	100	152
S(10)	S(5''')	S(13)	75	69	168
			414	461	441
			897	975	891
S(11)	S(4'')	S(15)	393	420	481
			485	480	514
			88	186	191

Tabelle 6. (Fortsetzung)

Dufrenoyisit $P 2_1$	Rathit-I $P 2_1/a$	Baumhauerit $P 1$	Dufre- noyisit	Rathit-I	Baumhau- erit
S(12)	S(8)	S(11)	739	758	800
			398	393	416
			153	239	116
S(13)	S(7)	S(12)	731	768	789
			403	398	420
			588	647	689
S(14)	S(2'')	S(34)	301	271	210
			1022	1024	993
			604	529	654
S(15)	S(1')	S(36)	770	748	691
			66	64	37
			632	538	649
S(16)	S(4''')	S(2)	106	80	45
			113	120	92
			396	374	446
S(17)	S(5'')	S(6)	425	411	397
			182	187	178
			617	585	651
S(18)	S(8')	S(4)	778	742	729
			193	207	191
			319	320	360
S(19)	S(6''')	S(14)	105	130	140
			419	420	431
			376	449	382
S(20)	S(3'')	S(16)	392	429	484
			482	475	5 9
			666	775	606

vereinigt. Ähnliche Kettenstücke As_3S_7 und As_4S_9 existieren auch in Baumhauerit (ENGEL und NOWACKI, 1969) (bei diesem daneben auch noch As_5S_{11} und As_xS_y). In Rathit-I (MARUMO und NOWACKI, 1965) sind As_3S_7 - bzw. As_4S_9 -, in Hatchit (MARUMO und NOWACKI, 1967b) As_2S_5 - und in Jamesonit (NIZEKI und BUERGER, 1957) Sb_3S_7 -Ketten-

stücke vorhanden. Die $\text{As}(7)\text{S}_3$ -Pyramide ist isoliert, d.h. sie hat mit den endlichen As_3S_7 - und As_4S_9 -Gruppen keine gemeinsamen S-Atome. S(17) ist ein zusätzliches Schwefelatom, d.h. es gehört nicht zu AsS_3 -Pyramiden. Die kleinsten (Metall-Metall)-Abstände [$\text{As}(1)\text{—As}(8) = 3,49 \text{ \AA}$, $\text{Pb}(8)\text{—As}(1) = 3,56 \text{ \AA}$, $\text{Pb}(5)\text{—Pb}(8) = 4,03 \text{ \AA}$] sind um etwa $0,5 \text{ \AA}$ größer als die Summe der metallischen Radien. Die große Strukturähnlichkeit von Dufrenoyzit, Rathit-I und Baumhauerit wird veranschaulicht, wenn man nach entsprechender Transformation für Rathit-I und Baumhauerit die Koordinaten der drei Sulfosalze miteinander vergleicht. Die entsprechende Transformation für Rathit-I ist $x'_R = y_R - 0,250$, $y'_R = 0,800 - x_R$, $z'_R = 1,280 - z_R$ und für Baumhauerit $x'_B = z_B + 0,454$, $y'_B = x_B + 0,070$, $z'_B = y_B + 0,885$. Die auf diese Weise erhaltenen Koordinaten sind in Tab. 6 vereinigt.

Die Bleilage Pb(5) des Dufrenoyzits ist in Rathit-I durch eine aufgespaltene Silberlage As(5''a) (= Ag) und Arsenlage As(5''b), in Baumhauerit durch eine aufgespaltene Arsenlage As(4a) und Silberlage As(4b) (= 40% Ag) ersetzt. Die Pb(7)-Lage des Dufrenoyzits ist nur zu 78% besetzt. Die entsprechende Lage in Rathit-I ist ganz von Arsen [As(3')] belegt, während sie in Baumhauerit durch die aufgespaltene Pb(4)- und As(3')-Lage eingenommen wird. Auch die Pb(8)-Lage ist nur zu 78% besetzt. Die entsprechende Lage ist in Rathit-I und Baumhauerit ganz von Blei [Pb(3'') bzw. Pb(3)] belegt. Die As(7)-Lage des Dufrenoyzits ist in Rathit-I durch die aufgespaltene As(5'')-Lage mit Ag in As(5''a) und As in As(5''b), in Baumhauerit durch die aufgespaltene As(5a)- und As(5b)-Lage ersetzt. Der Unterschied folgt aus der etwas anderen chemischen Zusammensetzung und besteht in kleinen Atomverschiebungen. Die deformierten Bleiglanzstrukturschichten bestehen aus Bleiglanzlamellen einer Breite von $a(\text{PbS})$. Die Ebene (223) von Bleiglanz liegt parallel der Schichtebene (010) von Dufrenoyzit. Die einzelnen Lamellen sind gegeneinander in Richtung [011] von PbS um $a(\text{PbS})/2\sqrt{2}$ verschoben. Daraus ergibt sich für die Bleilage eine Siebenerkoordination [bei Pb(7) Sechserkoordination] durch die Schwefelatome. Wegen der großen Abweichung von der idealen Atomanordnung, verursacht durch die chemische Verschiedenheit von Blei und Arsen, haben die Arsenatome eine trigonal-pyramidale Koordination von drei Schwefelatomen.

In Abänderung des Formalismus von LEBIHAN (1962) ist es jetzt möglich, auf Grund der genauen Strukturbestimmungen eine *einheit-*