

IEN/DQUI

COMUNICAÇÃO TÉCNICA

828816394

DIAPQ - 5/85

DATA

25/09/85

DE

Neysa Rocha Baptista e Augusto Baptista

PARA

Distribuição

ASSUNTO

ESTUDO RADIOCRISTALOGRAFICO DA WOLFEITA DO PEGMATITO DE BELA VISTA,
ESTADO DE MINAS GERAIS

1/18

Relatam-se, nesta comunicação, as conclusões a que se chegou através do estudo de mono-cristal do mineral wolfeíta, $(\text{Fe}, \text{Mn})_2(\text{PO}_4)(\text{OH})$, proveniente do pegmatito de Bela Vista, Estado de Minas Gerais. Foram determinados os parâmetros reticulares e, através da análise dos índices das reflexões presentes nos diversos níveis recíprocos fotografados, confirmou-se o grupo espacial citado na literatura.

*Neysa Rocha Baptista
Augusto Baptista*

Distribuição:

DQUI

DIQUI

DIAPQ

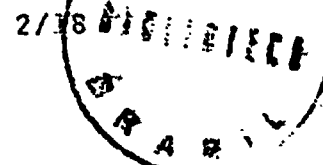
DINFO

Prof. J.P. Cassedanne, Inst. Geoc. UFRJ



Aprovação: *Ivone J. de Almeida*

ivs:



1. INTRODUÇÃO

Recentemente⁽¹⁾, foram efetuados na DIAPQ os estudos térmicos de algumas amostras de fosfatos de ferro e manganês, provenientes do pegmatito de Bela Vista, no Estado de Minas Gerais. O estudo térmico foi complementado pelo estudo radiocristalográfico dos diversos resíduos então obtidos.

Entre os minerais estudados encontra-se a wolfeíta, $(\text{Fe}, \text{Mn})_2(\text{PO}_4)\text{OH}$, mineral cuja existência em território nacional era até então desconhecida, o que justificou a realização de um estudo pelo método do pó, complementado por um estudo de mono-cristal, cujo objetivo foi a determinação das constantes reticulares do mineral dessa nova ocorrência, a quinta conhecida no mundo.

As conclusões a que se chegou são relatadas na presente Comunicação Técnica.

2. ESTUDO RADIOCRISTALOGRAFICO

O mineral apresenta-se sob a forma de pequenos blocos de grãos irregulares, de cor castanho-avermelhada, translúcidos em fragmentos finos. Foi identificado⁽²⁾ por meio de suas características físicas e pela análise química. Essa identificação foi confirmada pelo estudo pelo método do pó.

Para a análise difratométrica, foi empregada a radiação proveniente de um tubo com anodo de cobre, devidamente filtrada com folha de níquel, tendo-se adotado uma janela de 0,75V no analisador de altura de pulso, a fim de diminuir a radiação de fundo. Como esse ajuste poderia conduzir à perda de reflexões fracas, foi também feito um filme com a câmara de Debye-Scherrer de 114 mm utilizando-se radiação $\text{FeK}\alpha/\text{Mn}$ em uma exposição de 45 horas. A Tabela 1 apresenta os resultados dessas duas análises, comparados com os dados disponíveis na literatura⁽³⁾; acrescentaram-se também os prováveis índices de Miller atribuídos às reflexões registradas nas análises.

O estudo de mono-cristal foi efetuado com o auxílio de uma câmara de precessão, tendo sido fotografados os níveis recíprocos

3/18

(hk0), (h0l), (h1l), (h2l), (h3l), (h4l), (hk1) e (hk2), (hk3), para o que se empregou radiação $\text{MoK}\alpha/\text{Zr}$.

A partir das medições efetuadas sobre as fotografias de nível zero, foram calculadas as dimensões reticulares do mineral da presente ocorrência, cujos valores são $a_0 = 12,151 \text{ \AA}$, $b_0 = 13,008 \text{ \AA}$, $c_0 = 9,742 \text{ \AA}$, e $\beta = 108925'$, em bom acordo com os valores fornecidos pela literatura⁽⁴⁾.

As reflexões registradas nas fotografias dos diversos níveis recíprocos, foram indicadas por inspeção direta; seus índices, intensidades, e os valores calculados dos espaçamentos interplanares, são apresentados na Tabela 2. Esses dados foram utilizados na indicação dos espaçamentos interplanares determinados pelo método do pó, e na determinação do grupo espacial. Assim, a análise das reflexões presentes conduz às seguintes regras de não-extinção:

reflexões do tipo (hki): todas as ordens presentes;

reflexões do tipo (h0l): presentes quando h e $l = 2n$;

reflexões do tipo (0k0): presentes quando $k = 2n$.

Essas regras conduzem ao grupo espacial $P2_1/c$, já citado na literatura⁽³⁾.

3. AGRADECIMENTOS

Os autores desejam deixar aqui expressos seus agradecimentos ao Prof. Jacques P. Cassedanne, do Instituto de Geociências da UFRJ, que coletou o mineral, e gentilmente cedeu amostras do mesmo para o presente estudo.

REFERÊNCIAS

1. Baptista, N.R., Baptista, A., Comunicação Técnica DIAPQ - 8/84 (1984).
2. Cassedanne, J.P., Comunicação Pessoal.
3. Padrão JCPDS nº 5-0612.
4. Frondel, C., Am. Mineralogist, 34, nºs 9-10, pgs. 692/705 (1949).

4/18

Tabela 1 - Wolfeita: estudo pelo método do pó.

Wolfeita New Hampshire JCPDS 5-0612			Wolfeita, Bela Vista				
			Difratometria CuK α /Ni		Debye-Scherrer FeK α /Mn		Índices Prováveis
d(med)	I	hkl	d(med)	I	d(med)	I	hkl
			5,72	9	5,81	dif	200
					5,26	dif	210
			4,62	3	4,67	dif	002
3,47	30	220, $\bar{2}21$	4,364	17	4,330	md	012, 20 $\bar{2}$
			4,142	3			21 $\bar{2}$
			3,934	3			031
			3,900	9			13 $\bar{1}$
3,63	40	131	3,619	31	3,624	i	131
			3,507	5	3,492	dif	23 $\bar{1}$
3,37	50	122	3,363	31	3,361	i	-
					3,275	mmf	040
3,18	80	140	3,170	66	3,164	mi	202
3,09	90	212, 213	3,079	100	3,071	mmi	041, 21 $\bar{3}$
2,93	100	330, 321	2,912	63	2,912	mmi	40 $\bar{2}$
2,87	10	240	2,862	9	2,856	md	321, 22 $\bar{3}$
2,80	40	023	2,801	57	2,792	mi	410, 023
2,69	10	042	2,679	9	2,684	md	042
2,63	10	$\bar{2}42$	2,625	14	2,619	md	24 $\bar{2}$
2,57	50	$\bar{3}41$	2,560	29	2,550	i	232
			2,532	5			312
			2,481	2			411
2,45	30	$\bar{2}04$	2,430	17	2,439	md	20 $\bar{4}$
			2,411	3			151, 43 $\bar{2}$
			2,383	9	2,377	mf	21 $\bar{4}$, 25 $\bar{1}$, 51 $\bar{1}$, 250
2,33	10	004	2,309	14	2,318	f	004
2,29	50	$\bar{1}24$	2,279	23	2,277	md	014, 52 $\bar{1}$
			2,233	5	2,252	f	251
2,19	10	$\bar{4}42, 402$	2,181	6	2,180	f	51 $\bar{3}$
2,14	50	051, 143	2,132	23	2,124	md	160
2,06	10	$\bar{2}51$	2,053	11	2,055	f	33 $\bar{4}$
2,04	10	$\bar{6}02$	2,029	9	2,027	f	351
2,01	10	$\bar{1}62$	2,002	9	1,995	mf	441

(continua)

5/18

Tabela 1 - continuação

d(med)	I	hkl	d(med)	I	d(med)	I	hkl
1,96	30	204	1,943	29	1,955	i	204,452
1,95	30	621			1,934	i	621
			1,856	3	1,864	mmf	225
			1,845	5	1,837	mf	623
1,82	10	444	1,821	9	1,819	mf	453
1,79	60	461	1,787	23	1,783	i	063,604,271, 270,025
1,75	10		1,734	6	1,730	dif	314
1,71	20	324	1,702	6	1,700	f	435
			1,576	6	1,653	f	244,362
			1,529	11	1,626	f	561,206
			1,616	9	1,613	f	135,371
			1,605	9	1,600	mf	215,513,602
			1,583	12			406
			1,572	23	1,576	md	280,281
			1,538	6	1,533	dif	730,006,145
			1,514	9	1,512	f	533,336
			1,499	9	1,490	mf	721
			1,463	15			823
			1,461	20	1,462	f	183
			1,454	15	1,452	f	246,731,282
			1,440	14			481,642
			1,419	20			444
			1,415	23	1,413	md	831,335
			1,391	15			524
			1,382	9	1,383	dif	206,317
			1,358	6	1,361	mmf	801,762
			1,342	7	1,321	mmf	425,673
			1,332	6			726
			1,322	6			646,944
			1,316	6			760,852,017
			1,306	6	1,305	mmf	
			1,256	6	1,251	mmf	841

5/13

Tabela 2 - Wolfeita: reflexões registradas nas fotografias de precessão

hk \bar{l}	I	d(calc)	hk \bar{l}	I	d(calc)
200	dif	5,765	240	mmi	2,846
210	i	5,275	31 $\bar{3}$	mmf	2,822
002	f	4,622	410	i	2,815
121	mmi	4,540	023	mmi	2,788
012	mmf	4,358	42 $\bar{1}$	mmi	2,755
20 $\bar{2}$	mi	4,336	042	mmi	2,570
21 $\bar{2}$	dif	4,116	24 $\bar{2}$	mmi	2,612
211	mmf	4,100	241	mmi	2,608
031	dif	3,945	331	dif	2,584
13 $\bar{1}$	dif	3,897	232	f	2,555
31 $\bar{1}$	mmf	3,850	312	mf	2,532
310	i	3,687	15 $\bar{1}$	dif	2,506
131	dif	3,588	43 $\bar{1}$	mmf	2,493
23 $\bar{1}$	mmf	3,482	411	mmf	2,487
230	mmf	3,479	20 $\bar{4}$	mmi	2,426
31 $\bar{2}$	dif	3,434	151	dif	2,418
32 $\bar{1}$	mmi	3,430	43 $\bar{2}$	dif	2,409
320	mmf	3,314	430	mmf	2,405
040	mi	3,272	322	f	2,401
202	mmi	3,152	21 $\bar{4}$	mmf	2,385
32 $\bar{2}$	mmi	3,126	25 $\bar{1}$	mmf	2,384
311	mf	3,115	51 $\bar{1}$	mmf	
041	mmi	3,084	250	dif	2,383
21 $\bar{3}$	mmf	3,076	42 $\bar{3}$	i	2,371
33 $\bar{1}$	mmf	2,960	42 $\bar{1}$	i	2,363
41 $\bar{1}$	mmf	2,959	51 $\bar{2}$	mf	2,348
40 $\bar{2}$	mmi	2,890	004	mi	2,311
330	mmf	2,884	15 $\bar{2}$	dif	2,304
400	mi	2,882	31 $\bar{4}$	mmf	2,296
321	mmi	2,880	014	mmf	2,276
22 $\bar{3}$	i	2,849	52 $\bar{1}$	mf	2,273
241	mmf	2,847	510	dif	2,271

(continua)

7/15

Tabela 2 - continuação

hkt	I	d(calcul)	hkt	I	d(calcul)
242	md	2,270	204	mmi	1,943
273	mi	2,268	452	mf	1,940
124	mmi		450	dif	1,938
322	i	2,242	432	dif	1,935
252	dif	2,241	212	dif	1,927
251	dif	2,238	603	mf	1,926
441	mf	2,226	621	mmi	1,923
332	dif	2,221	800	i	1,922
324	md	2,197	214	i	
431	mf	2,191	361	md	1,918
513	dif	2,180	613	dif	1,906
520	dif	2,175	162	mf	1,902
252	dif	2,171	360	md	1,897
404	md	2,168	333	dif	1,893
442	i	2,166	044	mmi	1,888
350	mmf	2,163	531	dif	1,883
440	mmf		223	md	1,867
402	md	2,159	362	mmf	1,860
160	f	2,143	623	i	1,848
531	mmf	2,119	071	f	1,833
161	mmi	2,115	543	i	1,832
233	dif		015	mmf	1,830
134	mf		171	md	1,828
114	md	2,111	631	dif	1,827
352	mmf	2,102	512	mmf	1,826
511	mf	2,062	413	dif	1,825
181	mmi	2,061	453	f	1,824
334	dif	2,057	451	dif	1,820
530	dif	2,039	413	mf	1,818
251	dif	2,028	444	mmi	1,807
602	mi	2,014	361	mmi	1,804
441	mf	2,003	442	mf	1,802
612	f	1,991	534	dif	1,798
611	f	1,989	171	f	1,793
521	mmf		063	f	1,790
242	md				

(continua)

Tabela 2 - continuação

hkt	I	d(calc)	hkt	I	d(calc)
606	md	1,779	531	mmf	1,643
271	mmf		080	md	1,636
270	dif		551	dif	1,632
025	mi		561	mf	1,622
522	mmf	208	f		
224	dif	1,775	173	mmf	1,620
428	i		263	mmf	
343	i	1,774	135	mmf	1,617
423	md	1,768	371	f	1,615
552	dif	1,767	732	mmf	1,612
616	dif		081	md	1,611
541	mi	1,763	562	dif	1,610
135	mmf	1,760	215	f	1,606
335	dif	1,759	513	dif	1,605
314	md	1,757	802	mmi	1,604
550	dif	1,736	731	dif	1,598
115	md	1,730	073	mf	1,598
712	mf	1,725	720	md	1,597
271	f	1,719	651	dif	1,595
642	mf	1,716	612	mmf	1,592
641	i	1,715	716	mmf	1,590
621	dif	1,714	560	mmf	1,585
435	dif	1,711	116	dif	1,583
371	dif	1,698	406	mmi	1,582
324	mi	1,692	733	mmf	1,577
433	mi		280	mi	1,574
553	f	1,689	281	mmf	
713	dif	1,688	225	mi	1,571
722	mf	1,678	470	dif	1,569
244	mmf	1,676	414	mmf	1,565
362	f	1,671	625	mmi	1,564
721	dif	1,666	646	mmf	1,563
146	mi	1,662	641	i	1,559
640	i	1,658	726	mf	1,556
463	mmi	1,656	660	dif	1,549
306	md		173	mmf	
			126	i	

9/18

Tabela 2 - continuação

hkl	I	d(calc)	hkl	I	d(calc)
082	mi	1,542	606	mmi	1,445
730	dif	1,541	807	mi	
006	md		663	md	1,444
145	mmf		1,537	190	dif
545	i	1,532	800	mi	1,441
287	i	1,531	481	mi	1,440
016	mmf	1,530	642	md	
711	dif	1,529	536	mmf	1,437
701	i	1,521	031	mmf	
236	mmf	1,520	817	dif	1,436
807	mi	1,519	751	mf	
235	dif	1,517	191	mmf	1,434
533	mf	1,516	810	dif	1,432
336	dif				
516	mmf	1,512	446	i	1,424
817	f	1,509	427	md	
561	f	1,508	383	mf	1,423
743	mi	1,503	420	mf	
453	dif				
721	dif	1,499	444	i	1,420
136	dif	1,498	831	mmf	1,417
813	dif	1,490	335	dif	1,412
811	dif	1,488	290	dif	1,410
526	i	1,483	291	mmf	
315	mmf	1,480	712	dif	1,408
273	dif	1,479	582	dif	
713	dif	1,475	183	dif	1,405
577	dif	1,472	623	i	
661	dif	1,468	733	dif	1,404
823	i	1,462	463	mmf	
183	f	1,461	373	dif	1,397
246	md	1,453	741	mmf	1,393
731	dif	1,452	571	dif	
282	mf				
643	mi	1,450	524	mf	1,390
767	mmf	1,446	722	md	1,384
			208	mf	1,383
			217	dif	

(continua)

10/18

Tabela 2 - continuação

hkt	I	d(calc)	hkt	I	d(calc)
842	md	1,378	1.10.0	f	1,300
553	dif	1,376	851	dif	
672	mmf	1,370	137	dif	
841	mmf	1,362	492	dif	1,299
801	mmf	1,360	831	dif	1,298
762	dif	1,358	027	mf	1,294
815	dif	1,357	1.10.1	mmf	
345	mf		383	i	1,291
227	mi	1,356	604	md	
117	mmf	1,354	932	dif	1,289
534	dif	1,353	571	dif	1,287
761	f	1,350	713	dif	1,266
392	dif	1,346	537	dif	1,284
425	mf	1,342	910	mmf	1,275
673	dif		246	f	1,274
825	md	1,336	627	mf	1,271
913	dif		682	mf	1,270
517	mmf		802	mf	1,267
821	dif	1,332	392	dif	
726	mi	1,331	816	dif	1,266
751	dif	1,327	1.10.2	mf	1,264
337	dif	1,325	761	dif	1,258
646	f	1,322	147	mmf	1,257
844	mmf		841	i	1,256
237	dif	1,321	773	mmf	1,254
292	dif	1,320	680	i	1,246
236	dif	1,319	3.10.1	mmf	1,245
760	dif	1,314	592	dif	1,242
857	dif		336	dif	
017	mmf		634	dif	1,238
473	i	1,310	863	mf	1,236
836	dif	1,302	590	dif	1,230
853	dif	1,301	941	i	
921	mmf		3.10.2	mf	1,228

(continua)

11/18

Tabela 2 - continuação

hkt	I	d(calc)	hkt	I	d(calc)
832	dif	1,217	128	mmf	1,168
408	dif	1,213	3.10.2	dif	1,167
10.0.2	mf	1,212	813	mmf	1,166
911	dif		608	i	
3.10.1	dif		2.11.0	dif	1,165
535	dif	1,211	2.11.1	mmf	
2.10.3	i	1,209	4.10.3	mmf	1,164
406	mf		237	dif	1,163
208	dif		690	mmf	1,160
10.1.3	dif	1,208	724	dif	1,158
851	dif	1,207	615	dif	1,157
492	dif	1,206	008	md	1,155
0.10.3	dif	1,205	10.0.0	i	1,153
416	mf	1,204	823	md	
681	md	1,202	5.10.1	mmf	1,152
644	f	1,201	950	mmf	1,151
663	mmf		2.10.3	dif	
328	f	1,197	583	mmf	1,150
10.0.4	i	1,193	10.3.1	dif	1,149
10.2.3	f		10.1.0	mmf	1,148
10.1.4	mf	1,188	2.11.2	dif	1,147
762	dif		962	mf	
227	mmf	1,187	2.11.1	dif	1,144
10.1.1	dif	1,186	625	mf	
951	mmf	1,184	941	f	1,141
842	f	1,181	912	dif	
0.11.1	mmf	1,179	3.11.1	dif	1,138
691	dif		5.10.0	mmf	
692	dif	1,177	448	mmf	1,137
545	dif		10.4.2	md	
528	i	1,176	734	dif	1,136
931	dif	1,173	446	dif	1,134
714	dif	1,172	833	dif	1,131
873	mmf	1,170	772	dif	1,129
1.11.1	mmf	1,169	922	f	1,128
10.3.3	dif		638	dif	1,127
438	dif		691	dif	1,124

(continua)

12/18

Tabela 2. - continuação.

hkl	I	d(calc)	hkl	I	d(calc)
516	dif	1,123	5.10.2	dif	1,067
10.4.4	mf	1,121	429	md	
10.4.1	f	1,119	11.2.1	dif	1,066
1.11.3	dif	1,117	11.3.2	dif	
2.11.3	mmf	1,114	218	mmf	1,064
118	f	1,111	913	dif	
526	dif		1,110	4.10.3	dif
C.11.3	dif	1,109		11.1.5	dif
791	mf		1,107	427	dif
5.10.1	dif	1,105		773	dif
932	dif		1,104	0.12.2	dif
881	dif	1,099		11.3.4	dif
951	dif		1,098	2.12.2	dif
128	md	1,091		2.12.1	md
648	mmf		1,090	947	mmf
3.12.0	mi	1,089		606	md
973	dif		1,087	616	dif
790	dif	1,084		11.4.3	f
11.1.4	dif		1,084	881	f
048	mmf	1,083		7.10.2	dif
10.4.0	mmf		1,082	10.4.1	dif
10.5.1	mmf	1,080		10.0.2	f
808	md		1,079	7.10.1	dif
C.12.1	f	1,076		629	f
6.10.3	dif		1,072	10.1.2	dif
971	dif	1,070		238	dif
918	dif		1,069	333	mmf
138	dif	1,068		11.3.5	dif
304	f		1,068	11.2.0	mf
347	dif	1,068		10.2.7	md
314	mmf		1,068	1.12.3	md
2.12.1	mmf	1,068		2.12.2	f
11.3.3	dif		1,068	848	mmf
208	mi	1,068		4.12.1	md
519	mmf		1,068	11.4.1	mmf
2.11.3	dif	1,068		7.10.0	dif

(continua)

13/18

Tabela 2 - continuação

hk#	I	d(calc)	hk#	I	d(calc)
6.11.1̄	dif	1,024	2.13.0	dif	0,9918
928	f	1,023	12.0.1̄	dif	0,9882
4.12.2̄	md	1,020	6.11.1̄	dif	0,9880
3.12.3̄	dif		829	mmf	0,9872
4.12.0	mf	1,019	10.0.8̄	mmf	0,9867
745	dif		12.3.3̄	dif	0,9864
11.2.6̄	f		8.10.3̄	dif	0,9861
549	dif	1,018	12.1.1̄	dif	0,9854
318	dif		11.1.7̄	dif	0,9838
248	mmf	1,017	0.13.2	dif	0,9837
943	mf	1,016	924	mf	
11.4.5̄	dif	1,015	749	mmf	0,9822
1.12.3	dif		11.6.2̄	dif	0,9821
029	md		10.1.3	dif	0,9799
962	dif	1,014	716	mmf	0,9783
328	mmf	1,009	7.11.1̄	dif	0,9781
12.0.4̄	i	1,007	12.2.1̄	mf	0,9772
12.0.2̄	md	1,006	3.13.1̄	dif	0,9767
10.7.1̄	mmf	1,005	1.13.2	dif	0,9746
11.1.1	dif	1,003	4.0.10	mf	0,9742
12.1.2̄	mmf		10.8.2̄	md	0,9740
1.13.0	dif	1,002	3.13.0	mf	0,9739
149	mmf		4.12.2	dif	0,9735
4.12.1	mmf		7.11.3̄	dif	0,9732
382	mf	1,001	10.2.3	mf	0,9718
12.2.3̄	mf		547	mmf	0,9701
0.13.1	dif	1,000	418	dif	0,9690
646	mmf	1,000	3.1.10	mmf	0,9685
11.15.1̄	dif	0,9986	6.10.3	mmf	0,9682
7.10.1	dif	0,9972	11.6.1̄	md	0,9681
11.2.1	f	0,9947	3.12.3	md	
12.2.2̄	dif	0,9944	793	md	0,9661
333	dif	0,9942	12.4.4̄	mf	0,9625
119	mmf	0,9927	11.3.7̄	dif	0,9623
873	mmf	0,9925	11.4.1	dif	0,9620
914	mmf	0,9921	12.4.2̄	dif	0,9617

(continua)

Tabela 2 - continuação

hkl	I	d(calc)	hkl	I	d(calc)
2.0.10	mi	0,9614	8.11.1	dif	0,9316
7.10.2	mmf	0,9612	448	dif	0,9314
990	mmf		13.1.4	dif	0,9300
919	dif	0,9609	1.14.1	dif	0,9295
12.0.0	f	0,9607	6.12.1	md	0,9290
3.2.10	f	0,9606	11.2.8	mf	0,9281
6.0.10	i	0,9598	5.13.2	dif	0,9276
6.12.2	mmf	0,9591	12.1.7	dif	0,9266
2.13.2	dif	0,9590	13.1.2	mmf	0,9245
6.12.1	dif	0,9589	12.5.1	dif	
2.1.10	dif	0,9588	0.0.10	f	0,9243
10.3.3	dif	0,9587	12.4.6	dif	0,9240
12.1.0	dif	0,9582	12.1.1	mmf	0,9237
4.13.1	dif	0,9557	13.2.4	mmf	0,9230
617	dif	0,9538	5.13.0	mmf	0,9227
149	mf	0,9524	915	mmf	
3.13.3	dif	0,9507	2.4.10	dif	0,9224
4.13.0	mf	0,9505	12.4.0	mmf	0,9218
229	dif	0,9499	10.0.4	dif	
6.12.0	f	0,9485	6.4.10	mmf	0,9210
438	dif	0,9484	518	mmf	0,9205
5.3.10	dif	0,9472	370	mmf	0,9199
627	f	0,9463	12.2.7	mmf	0,9197
12.4.1	dif	0,9460	10.1.4	dif	0,9195
10.4.8	dif	0,9447	1.14.2	dif	0,9180
11.4.7	dif	0,9446	806	mmf	0,9177
1.1.10	mmf	0,9430	8.11.0	dif	0,9175
7.11.1	dif	0,9415	12.2.1	md	0,9169
11.5.1	dif	0,9394	7.12.3	dif	0,9166
3.13.2	dif	0,9379	10.2.9	f	
1.2.10	mmf	0,9357	9.10.0	mf	0,9155
11.7.1	mmf	0,9354	11.8.3	dif	0,9153
11.1.8	dif	0,9351	816	f	0,9145
7.2.10	mf	0,9335	11.7.0	dif	0,9142
9.10.1	dif	0,9319	10.8.1	f	0,9140
1.14.0	dif	0,9318	11.6.1	dif	0,9139

(continua)

15/18

Tabela 2 - continuação

h&k	I	d(calc)	h&k	I	d(calc)
15.3.3	dif	0,9136	12.1.2	mmf	0,8845
13.3.4	dif	0,9117	4.1.11	dif	0,8833
3.14.1	dif	0,9107	5.1.11	f	0,8825
1.14.2	dif	0,9089	737	dif	0,8821
13.1.1	dif	0,9084	419	mmf	0,8812
5.13.1	dif	0,9068	1.3.10	dif	0,8805
11.1.3	dif	0,9064	13.5.3	dif	0,8799
12.3.1	dif	0,9058	3.14.2	dif	0,8790
0.3.10	dif	0,9042	3.1.11	f	
10.9.0	mmf	0,9034	13.2.0	dif	0,8788
538	dif	0,9028	10.9.1	dif	0,8783
339	dif	0,9022	4.2.11	md	0,8774
13.2.1	f	0,9019	13.4.1	mf	0,8772
6.12.2	dif				
13.3.5	dif	0,9012	6.1.11	f	0,8765
6.13.2	dif	0,9005	11.4.3	dif	0,8755
13.1.6	dif	0,8994	608	f	
717	f	0,8985	429	mf	0,8753
13.4.3	mf	0,8984	13.1.7	mmf	0,8733
2.14.3	dif	0,8966	12.5.1	dif	0,8730
0.14.3	dif	0,8946	5.14.1	mf	0,8723
13.2.6	mmf	9,8931	2.14.3	mmf	0,8720
13.3.1	mmf	0,8914	9.11.0	mmf	0,8718
12.4.1	dif	0,8910	6.2.11	mmf	0,8707
1.2.10	dif	0,8906	8.12.0	f	0,8697
9.11.3	dif	0,8905	11.3.9	dif	0,8691
945	dif	0,8901	0.15.1	mmf	0,8687
12.0.8	md	0,8897	7.13.1	dif	0,8686
0.4.10	mmf	0,8895	1.15.1	mmf	0,8681
12.1.8	mmf	0,8877	14.0.4	mmf	0,8672
9.2.10	f	0,8875	5.14.0	dif	0,8664
8.4.10	mmf	0,8870	429	dif	0,8657
11.7.1	dif	0,8862	14.1.4	mmf	0,8653
9.11.1	dif	0,8859	14.1.3	f	0,8649
8.12.2	dif				
13.1.0	f	0,8848	1.15.1	dif	0,8643
			2.15.1	mmf	0,8628
			9 10.2	dif	0,8617

(continua)

16/18

Tabela 2 -- continuação

hkl	I	d(calc)	hkl	I	d(calc)
10.1.5	mmf	0,8615	14.2.1	mmf	0,8372
14.2.3	mmf	0,8593	8.13.1	dif	0,8356
14.0.2	mf	0,8589	5.14.2	dif	0,8338
12.4.8	dif	0,8585	837	dif	0,8334
14.1.5	dif	0,8581	0.2.11	dif	
13.3.7	dif		11.10.1	dif	0,8332
14.1.2	mmf	0,8571	4.14.3	dif	0,8330
12.8.2	dif	0,8570	1.15.3	dif	0,8321
11.1.4	mmf	0,8561	11.2.10	mmf	0,8299
13.4.0	dif	0,8560	12.7.1	dif	0,8298
10.2.5	mf		539	dif	0,8289
11.4.9	mf		14.3.1	dif	0,8288
10.7.0	dif	0,8545	12.8.0	f	0,8285
5.4.11	mmf	0,8538	10.11.0	mmf	0,8280
14.2.5	dif	0,8526	11.9.1	dif	0,8276
9.11.1	dif	0,8510	728	f	0,8239
8.12.1	mf	0,8509	14.0.0	mf	0,8235
11.2.4	dif	0,8507	14.5.3	dif	0,8229
3.4.11	mmf		14.1.0	dif	0,8219
14.3.3	dif	0,8502	13.6.0	dif	0,8215
13.2.1	dif	0,8501	2.15.3	dif	0,8207
9.12.3	dif	0,8466	14.2.7	mmf	0,8191
12.8.1	mmf	0,8459	11.10.0	f	0,8181
14.0.6	i	0,8458	13.2.2	f	0,8176
7.13.1	dif	0,8426	549	dif	0,8175
1.15.3	dif		5.15.0	dif	0,8161
11.10.2	dif	0,8420	13.5.1	dif	0,8148
827	md		0.16.1	mmf	
10.11.1	dif	0,8416	7.14.0	dif	0,8130
2.4.10	dif	0,8414	2.16.1	mmf	0,8099
13.6.1	mmf	0,8403	13.3.2	dif	0,8096
13.5.0	dif	0,8399	14.3.0	dif	0,8092
0.15.3	dif	0,8395	4.0.10	mmf	0,8090
8.13.2	dif	0,8392	10.0.6	mmf	0,8086
7.4.11	dif	0,8387	9.4.11	dif	0,8079
14.4.4	dif	0,8382	12.8.1	dif	0,8059
10.4.10	dif		3.15.3	dif	0,8058

(contínua)

17/18

Tabela 2 - continuação

hkl	I	d(calc)	hkl	I	d(calc)
2.16.1	md	0,8037	13.6.2	dif	0,7709
6.15.1	dif	0,8005	8.14.1	mmf	0,7704
13.6.1	mf	0,7990	14.0.2	dif	0,7698
11.10.1	dif	0,7978	9.4.12	dif	0,7690
7.2.12	mf	0,7957	13.2.10	mmf	0,7682
11.3.5	dif	0,7952	14.2.9	mf	0,7672
1.4.11	dif	0,7949	11.4.11	dif	0,7664
8.14.3	mmf	0,7934	848	dif	0,7662
1.16.3	dif	0,7932	9.3.12	dif	0,7654
14.2.1	mf	0,7924	15.4.1	dif	0,7650
2.16.2	dif	0,7918	12.2.11	f	0,7580
4.16.1	dif	0,7899	6.16.1	md	0,7578
808	dif	0,7881	12.9.2	dif	0,7569
4.16.2	dif	0,7871	11.2.6	mf	0,7567
3.16.3	mf		15.2.8	mf	0,7551
4.4.12	dif	0,7870	12.2.5	mf	0,7548
4.4.10	dif	0,7853	10.12.2	dif	0,7541
10.4.6	dif	0,7850	8.15.1	dif	0,7539
15.4.3	dif	0,7845	10.2.7	mf	0,7529
15.4.5	mmf	0,7823	16.2.5	mf	0,7521
13.9.2	dif	0,7816	16.2.3	mmf	0,7516
12.4.10	dif	0,7819	3.4.11	dif	0,7510
15.2.1	mmf	0,7811	11.3.6	dif	0,7505
12.8.2	dif	0,7794	749	dif	0,7488
12.4.4	dif	0,7788	16.3.4	dif	0,7482
947	dif	0,7785	13.10.1	dif	0,7475
4.16.1	mmf	0,7784	16.3.5	dif	0,7460
7.15.1	dif	0,7779	6.2.13	mf	0,7433
14.4.8	dif	0,7778	6.16.1	mmf	0,7428
11.12.3	dif	0,7760	4.2.13	f	0,7426
9.13.1	dif	0,7759	9.14.1	dif	0,7415
14.4.1	dif	0,7755	10.4.12	dif	0,7413
838	dif		4.2.11	mf	0,7411
10.12.1	dif	0,7752	10.14.3	dif	0,7404
10.13.3	dif	0,7747	14.9.2	dif	0,7396
2.4.12	mmf	0,7746	16.3.6	dif	0,7391
9.2.12	mf	0,7720	11.2.12	mmf	0,7379

16/18

Tabela 2 - continuação

hkt	I	d(calc)	hkt	I	d(calc)
8.15.1	f	0,7344	14.11.1	dif	0,6885
14.7.1	dif	0,7342	15.3.3	dif	0,6872
12.12.1	dif	0,7323	12.14.3	dif	0,6869
16.2.1	mf	0,7320	6.3.11	dif	0,6850
12.11.1	dif	0,7308	1.4.13	dif	0,6810
14.9.1	dif	0,7301	10.16.2	dif	0,6781
5.16.3	mmf	0,7299	15.3.11	dif	0,6768
829	dif	0,7294	13.13.1	mmf	0,6753
15.4.1	dif	0,7280	14.12.2	dif	0,6748
16.3.7	dif	0,7276	10.16.1	mi	} 0,6743
7.4.13	dif	0,7254	15.10.1	mmf	
10.13.2	dif	0,7246	12.3.7	dif	0,6730
3.4.13	mmf	0,7240	2.3.13	dif	0,6719
13.4.11	dif	0,7192	15.4.11	dif	0,6705
1.18.2	dif	0,7161	14.3.5	dif	0,6699
16.4.1	mmf	0,7187	16.4.10	dif	0,6680
14.8.1	mmf	0,7174	14.12.1	dif	0,6676
13.10.1	mf	0,7172	7.3.11	dif	0,6602
1.18.2	dif	0,7147	3.3.13	mmf	0,6552
9.4.13	mmf	0,7094	7.4.11	mmf	0,6544
9.15.1	mmf	0,7092	13.4.13	dif	0,6536
16.5.1	dif	0,7091	9.3.10	dif	0,6501
11.3.7	dif	0,7084	10.17.2	dif	0,6499
11.14.1	mmf	0,7069	3.4.13	mmf	0,6495
1.4.13	mmf	0,7068	9.17.2	mmf	0,6389
6.1.1	dif	0,7062	6.4.12	dif	0,6354
16.4.8	dif	0,7054	15.10.2	mf	0,6323
16.4.0	dif	0,7037	14.12.2	dif	0,6289
5.4.11	dif	0,7029	11.4.9	dif	0,6276
12.4.6	dif	0,7027	16.4.12	dif	0,6242
14.6.3	mmf	0,7003	15.4.13	mmf	0,6192
3.18.2	dif	0,6999	10.4.10	dif	0,6191
14.3.4	dif	0,6990	13.16.3	mmf	0,6155
17.4.5	dif	0,6974	14.15.3	mmf	} 0,6149
17.4.7	dif	0,6949	5.4.13	dif	
16.3.9	dif	0,6946	9.4.11	dif	0,6079
14.4.4	dif	0,6922			