

Acta Crystallographica Section C

**Crystal Structure  
Communications**

ISSN 0108-2701

Editor: **George Ferguson**

**Structure of the fourth form of 1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetraazacyclooctane ( $\gamma$ -HMX),  $2C_4H_8N_8O_8 \cdot 0.5H_2O$**

**P. Main, R. E. Cobbleddick and R. W. H. Small**

This electronic document was scanned from an archival copy of material deposited to accompany a paper published in an IUCr journal. In many cases the only accessible copy was a microfilm of a poor-quality original.

For deposition Table of  $U_{ij}$  ( $\times 10^4$ ) C, N, O atoms

	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
C(1A)	401(58)	507(43)	283(48)	-1(41)	-44(41)	23(42)
C(2A)	<del>445(48)</del> 433(50)	309(49)	-21(41)	-21(41)	11(41)	0(41)
C(3A)	317(50)	657(52)	264(45)	-52(41)	94(37)	6(43)
C(4A)	327(49)	560(49)	388(52)	-21(45)	187(41)	26(42)
N(1A)	340(40)	634(44)	276(38)	-60(37)	91(32)	-83(34)
N(2A)	416(43)	548(40)	292(40)	-116(35)	143(34)	58(34)
N(3A)	293(39)	583(40)	272(40)	47(34)	-45(31)	8(32)
N(4A)	394(48)	403(38)	553(49)	47(36)	99(38)	78(32)
N(5A)	517(53)	764(58)	530(56)	75(49)	214(47)	22(42)
N(6A)	662(66)	692(51)	404(51)	-20(46)	171(49)	12(49)
N(7A)	360(52)	1019(67)	334(51)	53(55)	54(39)	7(49)
N(8A)	468(53)	595(47)	370(46)	92(38)	145(40)	71(41)
O(1A)	1062(71)	706(49)	851(62)	31(48)	444(51)	-79(45)
O(2A)	1074(68)	1006(57)	827(60)	-101(52)	730(56)	41(50)
O(3A)	680(54)	783(48)	680(57)	-29(40)	351(45)	78(42)
O(4A)	736(51)	690(39)	488(45)	-183(36)	147(41)	-54(38)
O(5A)	604(49)	1230(59)	303(38)	-76(47)	62(36)	91(45)
O(6A)	1022(76)	1040(62)	596(57)	250(50)	68(49)	482(58)
O(7A)	428(44)	706(41)	729(51)	75(41)	46(40)	165(35)
O(8A)	593(47)	529(36)	<del>538</del> <sup>539</sup> (53)	43(37)	22(39)	-37(37)
C(1B)	414(59)	637(57)	353(54)	73(48)	30(45)	-99(45)
C(2B)	406(55)	605(52)	377(55)	-20(44)	142(45)	112(42)
C(3B)	443(56)	658(56)	404(55)	-43(44)	259(45)	-127(44)
C(4B)	561(69)	717(56)	469(63)	2(54)	252(51)	-7(54)
N(1B)	363(45)	623(45)	343(42)	58(38)	153(35)	-2(33)
N(2B)	340(43)	565(42)	337(43)	-27(37)	68(35)	7(32)

42260

Table of  $U_{ij}$  ( $\times 10^4$ ) C, N, O atoms continued.

	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{23}$	$U_{13}$	$U_{12}$
N(3B)	440(46)	727(52)	340(48)	-24(40)	173(37)	28(39)
N(4B)	475(52)	531(43)	553(54)	-66(39)	229(42)	-60(38)
N(5B)	297(43)	763(57)	473(56)	141(49)	76(41)	31(40)
N(6B)	855(79)	634(50)	438(56)	-184(47)	330(58)	-137(52)
N(7B)	503(55)	892(67)	455(60)	117(55)	132(47)	13(47)
N(8B)	754(69)	680(55)	534(58)	-27(47)	306(50)	78(58)
O(1B)	681(55)	799(48)	785(59)	49(44)	322(45)	-245(40)
O(2B)	571(47)	1017(52)	321(36)	-14(42)	170(32)	47(40)
O(3B)	877(58)	729(44)	601(52)	-182(39)	306(45)	29(40)
O(4B)	679(52)	996(55)	428(42)	-261(41)	-77(40)	-214(41)
O(5B)	759(59)	1129(60)	387(46)	107(46)	94(42)	251(48)
O(6B)	852(63)	849(52)	865(67)	313(50)	172(52)	63(47)
O(7B)	1081(74)	593(42)	1382(92)	42(49)	743(69)	39(48)
O(8B)	621(56)	769(49)	969(71)	-4(47)	176(49)	-194(44)

Table of calculated H atom coordinates ( $\times 10^{-3}$ ) and  $U_{\text{iso}}$  ( $\times 10^{-3}$ )

	x	y	z	$U_{\text{iso}}$
H(1A)	626	552	735	73(30)
H(2A)	677	735	683	55(27)
H(3A)	753	307	571	110(48)
H(4A)	672	300	664	73(33)
H(5A)	485	241	576	90(37)
H(6A)	436	193	412	20(17)
H(7A)	360	626	528	36(21)
H(8A)	440	486	642	54(26)
H(1B)	193	121	748	40(22)
H(2B)	270	268	694	23(18)
H(3B)	213	-168	523	43(24)
H(4B)	157	-129	648	97(42)
H(5B)	-34	-68	591	56(29)
H(6B)	-107	-68	429	56(26)
H(7B)	-9	189	688	45(24)
H(8B)	-48	372	594	96(40)

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

GAMMA HMX

MONO

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC
3	1	0	626	547	-12	2	3	128	120	3	5	0	213	200	5	7	0	60	55	-1	1	1	592	614
3	1	-1	634	543	-11	3	0	163	161	4	5	0	54	57	6	7	0	87	80	7	7	0	87	80
3	3	-1	464	474	-10	4	0	448	425	5	5	0	42	36	8	7	0	63	64	8	7	0	63	64
2	0	0	73	96	-9	3	0	145	149	6	5	0	68	63	5	5	0	48	48	6	8	0	48	48
2	0	0	109	111	-8	3	0	93	101	7	5	0	67	72	7	5	0	67	72	7	8	0	67	72
2	0	0	257	259	-7	3	0	178	168	8	5	0	120	122	8	5	0	120	122	8	8	0	120	122
2	0	0	450	437	-6	3	0	101	98	9	5	0	66	55	9	5	0	66	55	9	8	0	66	55
2	0	0	1224	1142	-5	3	0	113	113	9	5	0	89	85	9	5	0	89	85	9	8	0	89	85
2	0	0	982	839	-4	3	0	73	71	10	5	0	103	109	10	5	0	103	109	10	8	0	103	109
2	0	0	981	839	-3	3	0	63	52	10	5	0	85	84	10	5	0	85	84	10	8	0	85	84
2	0	0	1228	1142	-2	3	0	43	40	11	5	0	59	52	11	5	0	59	52	11	8	0	59	52
2	0	0	453	437	-1	3	0	67	70	11	5	0	40	45	11	5	0	40	45	11	8	0	40	45
2	0	0	255	255	0	3	0	85	91	11	5	0	85	91	11	5	0	85	91	11	8	0	85	91
2	0	0	104	96	0	3	0	102	107	11	5	0	102	107	11	5	0	102	107	11	8	0	102	107
2	0	0	81	76	0	3	0	171	174	11	5	0	171	174	11	5	0	171	174	11	8	0	171	174
2	0	0	77	75	0	3	0	123	122	11	5	0	123	122	11	5	0	123	122	11	8	0	123	122
2	0	0	131	128	0	3	0	77	82	11	5	0	77	82	11	5	0	77	82	11	8	0	77	82
2	0	0	212	210	0	3	0	91	91	11	5	0	91	91	11	5	0	91	91	11	8	0	91	91
2	0	0	88	85	0	3	0	82	81	11	5	0	82	81	11	5	0	82	81	11	8	0	82	81
2	0	0	228	234	0	3	0	121	122	11	5	0	121	122	11	5	0	121	122	11	8	0	121	122
2	0	0	325	316	0	3	0	173	174	11	5	0	173	174	11	5	0	173	174	11	8	0	173	174
2	0	0	296	292	0	3	0	108	107	11	5	0	108	107	11	5	0	108	107	11	8	0	108	107
2	0	0	839	793	0	3	0	87	91	11	5	0	87	91	11	5	0	87	91	11	8	0	87	91
2	0	0	232	272	0	3	0	74	70	11	5	0	74	70	11	5	0	74	70	11	8	0	74	70
2	0	0	189	183	0	3	0	59	55	11	5	0	59	55	11	5	0	59	55	11	8	0	59	55
2	0	0	191	183	0	3	0	55	50	11	5	0	55	50	11	5	0	55	50	11	8	0	55	50
2	0	0	281	274	0	3	0	121	122	11	5	0	121	122	11	5	0	121	122	11	8	0	121	122
2	0	0	841	798	0	3	0	71	72	11	5	0	71	72	11	5	0	71	72	11	8	0	71	72
2	0	0	297	292	0	3	0	52	62	11	5	0	52	62	11	5	0	52	62	11	8	0	52	62
2	0	0	326	316	0	3	0	57	57	11	5	0	57	57	11	5	0	57	57	11	8	0	57	57
2	0	0	232	234	0	3	0	215	200	11	5	0	215	200	11	5	0	215	200	11	8	0	215	200
2	0	0	78	78	0	3	0	210	206	11	5	0	210	206	11	5	0	210	206	11	8	0	210	206
2	0	0	211	210	0	3	0	263	258	11	5	0	263	258	11	5	0	263	258	11	8	0	263	258
2	0	0	138	128	0	3	0	264	264	11	5	0	264	264	11	5	0	264	264	11	8	0	264	264
2	0	0	54	75	0	3	0	120	136	11	5	0	120	136	11	5	0	120	136	11	8	0	120	136
2	0	0	70	76	0	3	0	214	206	11	5	0	214	206	11	5	0	214	206	11	8	0	214	206

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

GAMMA HMX

MEMO

H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC
0	1	1	318	341	11	2	1	64	61	4	4	1	237	234	2	6	1	84	83
1	1	1	161	172	12	2	1	107	102	6	4	1	119	120	3	6	1	94	94
1	1	1	268	260	13	2	1	69	71	7	4	1	100	98	3	6	1	42	51
2	1	1	734	730	-12	3	1	71	65	8	4	1	59	45	5	6	1	76	78
3	1	1	320	294	-10	3	1	79	69	9	4	1	125	130	6	6	1	81	81
4	1	1	515	517	-9	3	1	94	90	11	4	1	88	84	7	6	1	101	104
5	1	1	396	393	-8	3	1	92	95	11	4	1	58	70	8	6	1	49	65
6	1	1	147	141	-7	3	1	141	144	-11	5	1	75	32	8	6	1	76	73
7	1	1	262	248	-6	3	1	68	62	-10	5	1	100	102	8	6	1	46	44
8	1	1	188	189	-5	3	1	112	109	-8	5	1	75	75	-5	7	1	59	59
9	1	1	96	87	-4	3	1	189	195	-7	5	1	63	69	-4	7	1	39	51
10	1	1	84	88	-3	3	1	348	358	-6	5	1	81	74	-2	7	1	45	51
11	1	1	63	60	-2	3	1	471	474	-5	5	1	97	97	1	7	1	64	65
12	1	1	117	132	-1	3	1	430	442	-4	5	1	189	185	2	7	1	55	50
13	1	1	145	144	0	3	1	712	740	-3	5	1	159	155	2	7	1	91	83
14	1	1	263	265	1	3	1	294	290	-2	5	1	102	109	4	7	1	45	44
15	1	1	137	142	1	3	1	51	56	-1	5	1	247	243	5	7	1	64	64
16	1	1	74	75	1	3	1	141	148	0	5	1	182	184	3	8	1	56	60
17	1	1	163	160	1	3	1	217	218	1	5	1	177	174	1	8	1	32	36
18	1	1	275	280	1	3	1	215	219	3	5	1	107	105	3	8	1	65	78
19	1	1	226	224	1	3	1	34	36	-12	5	1	46	46	-10	0	2	157	148
20	1	1	343	358	1	3	1	71	66	-10	5	1	120	115	-8	0	2	172	178
21	1	1	562	591	1	3	1	133	131	-6	5	1	124	116	-4	0	2	216	205
22	1	1	249	264	-10	4	1	80	70	-4	5	1	52	45	-2	0	2	481	464
23	1	1	196	208	-9	4	1	132	120	-8	5	1	115	120	0	0	2	923	930
24	1	1	456	471	-7	4	1	77	76	-7	5	1	115	120	0	0	2	759	780
25	1	1	432	427	-6	4	1	175	180	-7	5	1	166	165	0	0	2	1054	1072
26	1	1	279	270	-5	4	1	64	63	-6	5	1	110	107	0	0	2	788	771
27	1	1	155	148	-4	4	1	152	166	-5	5	1	100	101	0	0	2	681	660
28	1	1	241	232	-3	4	1	111	121	-4	5	1	91	93	0	0	2	313	318
29	1	1	194	199	-2	4	1	296	296	-3	5	1	40	40	0	0	2	252	252
30	1	1	66	75	-1	4	1	93	101	-2	5	1	51	57	8	6	2	92	85
31	1	1	194	185	0	4	1	106	108	-14	6	1	30	31	12	0	2	63	38
32	1	1	142	139	1	4	1	106	108	-12	6	1	30	31	14	0	2	92	85
33	1	1	120	121	2	4	1	224	215	-11	6	1	60	61	11	1	2	83	95

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

GAMMA HMX

MCNC

Observed	Calculated	Structure Factors	Gamma HMX	MCNC
2	2	129	209	824
2	2	160	83	119
3	2	374	251	210
4	2	194	47	344
5	2	231	170	82
6	2	172	35	161
7	2	107	155	99
8	2	145	124	45
9	2	129	261	147
10	2	84	111	189
11	2	58	209	29
12	2	149	86	49
13	2	64	84	74
14	2	142	63	100
15	2	123	83	64
16	2	188	67	51
17	2	169	64	83
18	2	159	50	41
19	2	154	91	54
20	2	127	94	73
21	2	62	97	100
22	2	62	106	73
23	2	71	36	158
24	2	94	153	78
25	2	91	147	153
26	2	74	188	48
27	2	124	156	63
28	2	128	36	12
29	2	63	120	81
30	2	56	72	188
31	2	52	43	175
32	2	56	72	193
33	2	45	112	467
34	2	116	68	489
35	2	112	32	489
36	2	109	62	228
37	2	122	217	47
38	2	169	85	63
39	2	264	259	66
40	2	191	45	51
41	2	234	169	54
42	2	167	35	59
43	2	101	151	68
44	2	151	130	61
45	2	120	261	83
46	2	85	111	41
47	2	71	109	54
48	2	149	71	73
49	2	59	70	100
50	2	150	63	64
51	2	123	83	57
52	2	195	67	51
53	2	179	64	63
54	2	87	50	69
55	2	96	131	118
56	2	197	50	85
57	2	154	131	136
58	2	127	91	56
59	2	128	94	85
60	2	64	96	93
61	2	70	110	158
62	2	67	59	73
63	2	92	42	162
64	2	91	147	71
65	2	70	153	54
66	2	128	147	65
67	2	70	188	44
68	2	124	156	39
69	2	69	36	12
70	2	56	120	88
71	2	52	72	186
72	2	56	43	189
73	2	45	112	194
74	2	116	68	483
75	2	112	32	525
76	2	109	62	221
77	2	122	217	47
78	2	169	85	63
79	2	264	259	66
80	2	191	45	51
81	2	234	169	54
82	2	167	35	59
83	2	101	151	68
84	2	151	130	61
85	2	120	261	83
86	2	85	111	41
87	2	71	109	54
88	2	149	71	73
89	2	59	70	100
90	2	150	63	64
91	2	123	83	57
92	2	195	67	51
93	2	179	64	63
94	2	87	50	69
95	2	96	131	118
96	2	197	50	85
97	2	154	131	136
98	2	127	91	56
99	2	128	94	85
100	2	64	96	93
101	2	70	110	158
102	2	67	59	73
103	2	92	42	162
104	2	91	147	71
105	2	70	153	54
106	2	128	147	65
107	2	70	188	44
108	2	124	156	39
109	2	69	36	12
110	2	56	120	88
111	2	52	72	186
112	2	56	43	189
113	2	45	112	194
114	2	116	68	483
115	2	112	32	525
116	2	109	62	221
117	2	122	217	47
118	2	169	85	63
119	2	264	259	66
120	2	191	45	51
121	2	234	169	54
122	2	167	35	59
123	2	101	151	68
124	2	151	130	61
125	2	120	261	83
126	2	85	111	41
127	2	71	109	54
128	2	149	71	73
129	2	59	70	100
130	2	150	63	64
131	2	123	83	57
132	2	195	67	51
133	2	179	64	63
134	2	87	50	69
135	2	96	131	118
136	2	197	50	85
137	2	154	131	136
138	2	127	91	56
139	2	128	94	85
140	2	64	96	93
141	2	70	110	158
142	2	67	59	73
143	2	92	42	162
144	2	91	147	71
145	2	70	153	54
146	2	128	147	65
147	2	70	188	44
148	2	124	156	39
149	2	69	36	12
150	2	56	120	88
151	2	52	72	186
152	2	56	43	189
153	2	45	112	194
154	2	116	68	483
155	2	112	32	525
156	2	109	62	221
157	2	122	217	47
158	2	169	85	63
159	2	264	259	66
160	2	191	45	51
161	2	234	169	54
162	2	167	35	59
163	2	101	151	68
164	2	151	130	61
165	2	120	261	83
166	2	85	111	41
167	2	71	109	54
168	2	149	71	73
169	2	59	70	100
170	2	150	63	64
171	2	123	83	57
172	2	195	67	51
173	2	179	64	63
174	2	87	50	69
175	2	96	131	118
176	2	197	50	85
177	2	154	131	136
178	2	127	91	56
179	2	128	94	85
180	2	64	96	93
181	2	70	110	158
182	2	67	59	73
183	2	92	42	162
184	2	91	147	71
185	2	70	153	54
186	2	128	147	65
187	2	70	188	44
188	2	124	156	39
189	2	69	36	12
190	2	56	120	88
191	2	52	72	186
192	2	56	43	189
193	2	45	112	194
194	2	116	68	483
195	2	112	32	525
196	2	109	62	221
197	2	122	217	47
198	2	169	85	63
199	2	264	259	66
200	2	191	45	51
201	2	234	169	54
202	2	167	35	59
203	2	101	151	68
204	2	151	130	61
205	2	120	261	83
206	2	85	111	41
207	2	71	109	54
208	2	149	71	73
209	2	59	70	100
210	2	150	63	64
211	2	123	83	57
212	2	195	67	51
213	2	179	64	63
214	2	87	50	69
215	2	96	131	118
216	2	197	50	85
217	2	154	131	136
218	2	127	91	56
219	2	128	94	85
220	2	64	96	93
221	2	70	110	158
222	2	67	59	73
223	2	92	42	162
224	2	91	147	71
225	2	70	153	54
226	2	128	147	65
227	2	70	188	44
228	2	124	156	39
229	2	69	36	12
230	2	56	120	88
231	2	52	72	186
232	2	56	43	189
233	2	45	112	194
234	2	116	68	483
235	2	112	32	525
236	2	109	62	221
237	2	122	217	47
238	2	169	85	63
239	2	264	259	66
240	2	191	45	51
241	2	234	169	54
242	2	167	35	59
243	2	101	151	68
244	2	151	130	61
245	2	120	261	83
246	2	85	111	41
247	2	71	109	54
248	2	149	71	73
249	2	59	70	100
250	2	150	63	64
251	2	123	83	57
252	2	195	67	51
253	2	179	64	63

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR GAMMA HMX MONO

H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC	H	K	L	IOFD	IOFC
-9	4	3	82	85	-7	5	3	117	120	2	4	4	266	244	-2	2	4	465	468	-6	4	4	4	104	103	-6	4	4	4	4	104	103	-5	4	4	4	168	167	
-5	4	3	58	62	-6	5	3	47	46	4	4	4	411	400	-1	2	4	500	500	-5	4	4	4	168	167	-5	4	4	4	4	168	167	-4	4	4	4	104	94	
-4	4	3	224	225	-5	5	3	94	95	6	0	4	278	273	0	2	4	167	174	-4	4	4	4	104	167	-4	4	4	4	4	104	167	-2	4	4	4	66	71	
-3	4	3	229	222	-4	5	3	182	187	8	0	4	220	230	1	2	4	206	201	-2	4	4	4	103	205	-1	4	4	4	4	213	205	-1	4	4	4	213	205	
-2	4	3	108	112	-3	5	3	95	109	10	0	4	64	68	1	2	4	230	225	0	4	4	4	103	164	0	4	4	4	4	175	164	0	4	4	4	175	164	
-1	4	3	428	409	-2	6	3	59	64	-14	1	4	98	92	3	2	4	171	172	3	2	4	4	171	239	1	4	4	4	4	241	239	1	4	4	4	241	239	
0	4	3	140	137	0	6	3	65	71	-13	1	4	39	34	4	2	4	84	76	2	4	4	4	141	147	2	4	4	4	4	141	147	2	4	4	4	141	147	
1	4	3	168	159	1	6	3	121	116	-11	1	4	56	49	5	2	4	223	234	3	4	4	4	61	65	3	4	4	4	4	61	65	3	4	4	4	61	65	
2	4	3	160	150	2	6	3	92	50	-10	1	4	64	51	6	2	4	103	89	5	4	4	4	53	47	5	4	4	4	4	53	47	5	4	4	4	53	47	
3	4	3	117	121	3	6	3	52	95	-9	1	4	53	23	7	2	4	62	52	6	4	4	4	62	150	6	4	4	4	4	62	150	6	4	4	4	62	150	
4	4	3	76	102	4	6	3	119	116	-7	1	4	57	64	9	2	4	133	123	7	4	4	4	65	83	7	4	4	4	4	65	83	7	4	4	4	65	83	
5	4	3	113	106	5	6	3	129	137	-6	1	4	99	96	10	2	4	65	73	8	4	4	4	64	90	8	4	4	4	4	64	90	8	4	4	4	64	90	
6	4	3	61	63	6	6	3	63	51	-5	1	4	258	246	9	2	4	64	64	9	4	4	4	64	73	9	4	4	4	4	64	73	9	4	4	4	64	73	
7	4	3	133	137	7	6	3	80	75	-4	1	4	306	320	11	2	4	64	33	11	4	4	4	64	98	11	4	4	4	4	64	98	11	4	4	4	64	98	
8	4	3	114	113	8	6	3	66	61	-3	1	4	324	380	12	2	4	125	130	12	4	4	4	64	98	12	4	4	4	4	64	98	12	4	4	4	64	98	
9	4	3	70	70	9	6	3	112	106	-2	1	4	372	388	-11	2	4	157	154	-11	4	4	4	64	98	-11	4	4	4	4	64	98	-10	4	4	4	64	98	
10	4	3	72	62	-4	6	3	112	106	-1	1	4	548	524	-7	2	4	150	147	-6	4	4	4	64	98	-7	4	4	4	4	64	98	-9	4	4	4	64	98	
11	4	3	90	82	-3	6	3	61	54	-4	1	4	296	261	-5	2	4	69	75	-5	4	4	4	64	98	-5	4	4	4	4	64	98	-8	4	4	4	64	98	
12	4	3	116	116	-1	6	3	61	71	-3	1	4	376	362	-4	2	4	165	168	-4	4	4	4	64	98	-4	4	4	4	4	64	98	-7	4	4	4	64	98	
13	4	3	115	123	-1	6	3	44	41	-3	1	4	252	251	-3	2	4	188	184	-3	4	4	4	64	98	-3	4	4	4	4	64	98	-6	4	4	4	64	98	
14	4	3	150	159	0	6	3	42	50	0	1	4	52	57	-2	2	4	240	236	-2	4	4	4	64	98	-2	4	4	4	4	64	98	-5	4	4	4	64	98	
15	4	3	130	178	1	6	3	63	32	1	1	4	59	60	-1	2	4	79	76	-1	4	4	4	64	98	-1	4	4	4	4	64	98	-3	4	4	4	64	98	
16	4	3	101	101	2	6	3	45	52	2	1	4	213	222	0	2	4	70	65	0	4	4	4	64	98	0	4	4	4	4	64	98	-2	4	4	4	64	98	
17	4	3	130	137	3	6	3	75	79	3	1	4	144	142	1	2	4	279	281	3	4	4	4	64	98	1	4	4	4	4	64	98	-2	4	4	4	64	98	
18	4	3	148	137	4	6	3	49	55	4	1	4	89	88	2	2	4	262	261	4	4	4	4	64	98	2	4	4	4	4	64	98	-1	4	4	4	64	98	
19	4	3	141	134	5	6	3	64	68	5	3	4	66	52	3	2	4	83	78	5	4	4	4	64	98	3	4	4	4	4	64	98	0	4	4	4	64	98	
20	4	3	155	143	4	6	3	79	71	6	3	4	99	82	5	2	4	82	82	6	4	4	4	64	98	4	4	4	4	4	64	98	1	4	4	4	64	98	
21	4	3	143	143	0	6	3	67	67	-12	2	4	67	76	6	2	4	107	102	6	4	4	4	64	98	6	4	4	4	4	64	98	1	4	4	4	64	98	
22	4	3	135	124	0	6	3	79	65	-10	2	4	67	76	7	2	4	108	103	7	4	4	4	64	98	7	4	4	4	4	64	98	5	4	4	4	64	98	
23	4	3	150	157	2	6	3	201	201	-9	2	4	140	132	8	2	4	97	89	8	4	4	4	64	98	8	4	4	4	4	64	98	5	4	4	4	64	98	
24	4	3	109	110	-12	6	3	221	214	-10	2	4	181	181	9	2	4	79	38	9	4	4	4	64	98	9	4	4	4	4	64	98	7	4	4	4	64	98	
25	4	3	136	132	-3	6	3	265	270	-8	2	4	120	117	-9	2	4	103	105	7	4	4	4	64	98	7	4	4	4	4	64	98	6	4	4	4	64	98	
26	4	3	107	97	-6	6	3	278	290	-7	2	4	306	322	-12	2	4	116	121	-7	4	4	4	64	98	-7	4	4	4	4	64	98	6	4	4	4	64	98	
27	4	3	57	36	-4	6	3	68	59	-5	2	4	244	244	-9	2	4	77	89	-5	4	4	4	64	98	-5	4	4	4	4	64	98	6	4	4	4	64	98	
28	4	3	81	74	-2	6	3	1323	1322	-4	2	4	237	241	-8	2	4	118	121	-4	4	4	4	64	98	-8	4	4	4	4	64	98	6	4	4	4	64	98	
29	4	3	112	116	0	6	3	456	459	-3	2	4	132	135	-7	2	4	123	122	-5	4	4	4	64	98	-7	4	4	4	4	64	98	6	4	4	4	64	98	



OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR										GAMMA HMX		MGNE		PAGE 5					
H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC
-4	6	4	86	85	-2	1	5	241	252	-8	3	5	153	161	-7	5	5	60	52
-3	6	4	114	120	-1	1	5	536	538	-7	3	5	151	159	-6	5	5	131	130
-2	6	4	108	120	0	1	5	340	333	-4	5	5	104	109	-4	5	5	89	90
-1	6	4	103	111	1	1	5	167	172	-5	3	5	152	159	-2	5	5	163	171
0	6	4	84	79	2	1	5	121	122	-4	3	5	250	241	-1	5	5	117	121
1	6	4	106	110	2	1	5	201	205	-3	3	5	256	259	0	5	5	50	51
2	6	4	71	73	2	1	5	237	249	-2	3	5	461	474	1	5	5	53	53
3	6	4	57	49	2	1	5	60	75	-1	3	5	264	280	4	5	5	171	185
4	6	4	50	44	2	1	5	72	59	0	3	5	171	182	5	5	5	135	137
5	6	4	44	46	2	1	5	118	116	1	3	5	225	226	5	5	5	139	141
6	6	4	30	33	1	1	5	77	79	2	3	5	151	159	6	5	5	57	47
7	6	4	24	27	1	1	5	76	79	3	3	5	109	107	6	5	5	58	56
8	6	4	17	18	1	1	5	75	78	3	3	5	173	175	6	5	5	59	55
9	6	4	10	12	1	1	5	75	78	4	3	5	117	119	6	5	5	135	139
10	6	4	5	5	1	1	5	98	98	4	3	5	117	119	6	5	5	152	155
11	6	4	3	3	1	1	5	95	95	5	3	5	119	117	6	5	5	155	155
12	6	4	2	2	1	1	5	93	91	5	3	5	58	58	6	5	5	151	151
13	6	4	1	1	1	1	5	93	91	6	3	5	124	125	6	5	5	143	143
14	6	4	0	0	1	1	5	144	144	6	3	5	140	150	6	5	5	151	150
15	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
16	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
17	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
18	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
19	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
20	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
21	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
22	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
23	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
24	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
25	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
26	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
27	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
28	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
29	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
30	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
31	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
32	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
33	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
34	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
35	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
36	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
37	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
38	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
39	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155
40	6	4	0	0	1	1	5	143	142	7	3	5	117	117	6	5	5	155	155

DESERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR

GAMMA HMX

MONO

H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC	H	K	L	10FD	10FC					
1	2	6	78	77	5	4	6	109	112	-3	0	7	129	126	5	2	7	59	54	-2	5	7	76	74
2	2	6	224	220	4	4	6	68	71	-1	0	7	159	168	6	2	7	119	122	-1	5	7	79	55
3	2	6	65	74	-11	3	6	100	98	1	0	7	307	290	8	2	7	96	84	0	5	7	61	65
4	2	6	135	138	-9	5	6	50	40	3	0	7	92	78	-11	3	7	88	87	1	5	7	73	94
5	2	6	70	86	-8	5	6	78	89	5	0	7	118	125	-10	3	7	119	118	1	5	7	83	75
6	2	6	55	45	-7	5	6	150	155	7	0	7	82	64	-4	3	7	96	98	3	5	7	54	58
8	2	6	76	80	-6	5	6	117	120	9	0	7	77	62	-7	3	7	120	125	4	5	7	48	28
10	2	6	84	80	-5	5	6	47	53	-14	1	7	64	46	-5	3	7	102	93	5	5	7	48	28
11	3	6	59	55	-4	5	6	191	188	-13	1	7	76	79	-4	3	7	127	128	-3	5	7	64	66
19	3	6	133	139	-2	5	6	120	120	-10	1	7	141	131	0	3	7	162	155	-1	5	7	85	79
29	3	6	69	70	-1	5	6	54	58	-11	1	7	88	69	1	3	7	85	85	-4	5	7	83	83
39	3	6	133	139	-2	5	6	120	120	-10	1	7	76	73	1	3	7	85	85	-4	5	7	74	75
49	3	6	69	70	-1	5	6	181	178	-9	1	7	141	131	2	3	7	76	82	-3	5	7	48	54
59	3	6	133	139	-2	5	6	70	69	-7	1	7	91	89	3	3	7	91	97	-2	5	7	62	71
69	3	6	106	101	1	5	6	167	175	-6	1	7	256	256	4	3	7	112	121	-1	5	7	97	101
79	3	6	133	133	2	5	6	159	162	-5	1	7	152	159	5	3	7	112	109	0	5	7	108	99
89	3	6	110	103	3	5	6	127	134	-4	1	7	72	61	9	3	7	70	83	1	5	7	123	126
99	3	6	73	80	4	5	6	67	74	-3	1	7	250	291	-11	4	7	59	40	2	5	7	56	55
109	3	6	186	184	5	5	6	76	73	-2	1	7	159	146	-10	4	7	69	82	4	5	7	50	55
119	3	6	120	120	6	5	6	71	71	-1	1	7	99	100	-9	4	7	57	48	4	5	7	53	55
129	3	6	54	55	-7	5	6	62	61	0	1	7	79	77	-7	4	7	113	118	5	5	7	137	136
139	3	6	76	88	-8	5	6	46	51	1	1	7	99	100	-6	4	7	113	100	-12	5	7	137	136
149	3	6	81	88	-9	5	6	46	40	0	1	7	79	77	-4	4	7	113	100	-10	5	7	148	146
159	3	6	81	88	-10	5	6	46	40	1	1	7	79	77	-3	4	7	113	100	-8	5	7	241	223
169	3	6	109	112	-11	5	6	81	79	2	1	7	186	178	-11	4	7	63	64	-5	5	7	208	206
179	3	6	102	117	-12	5	6	91	79	8	1	7	172	183	-10	4	7	127	134	-8	5	7	241	223
189	3	6	66	70	-13	5	6	110	110	-4	1	7	132	130	-7	4	7	75	63	-6	5	7	208	206
199	3	6	94	99	-14	5	6	106	115	6	1	7	93	95	-5	4	7	54	47	-4	5	7	173	176
209	3	6	113	116	-15	5	6	108	110	8	1	7	102	95	-4	4	7	54	47	-2	5	7	166	165
219	3	6	113	116	-16	5	6	47	46	-11	2	7	78	64	0	4	7	167	166	0	5	7	173	176
229	3	6	101	94	-17	5	6	63	64	-8	2	7	95	85	2	4	7	78	78	2	5	7	163	159
239	3	6	97	98	-18	5	6	53	49	-7	2	7	134	123	4	4	7	92	93	4	5	7	115	124
249	3	6	71	71	-19	5	6	58	64	-5	2	7	106	102	5	4	7	73	76	8	5	7	75	82
259	3	6	73	66	-20	5	6	59	65	-4	2	7	68	60	-7	5	7	102	99	-12	5	7	60	49
269	3	6	55	55	-21	5	6	49	52	-3	2	7	161	161	-8	5	7	97	98	-11	5	7	76	66
279	3	6	120	125	-22	5	6	98	98	-2	2	7	178	181	-6	5	7	49	29	-10	5	7	117	122
289	3	6	97	99	-23	5	6	187	185	2	2	7	174	181	-4	5	7	92	96	-9	5	7	73	80
299	3	6	130	130	-24	5	6	167	177	2	2	7	132	125	-3	5	7	51	44	-7	5	7	86	80
309	3	6	87	87	-25	5	6	173	177	3	2	7	132	125	-3	5	7	51	44	-7	5	7	86	80

DESERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR GAMMA HMX NONE PAGE 7

DESERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR				GAMMA HMX				NONE							
H	K	L	IOFD	H	K	L	IOFD	H	K	L	IOFD	H	K	L	IOFD
-6	1	8	84	4	3	8	73	5	0	9	106	-1	4	9	57
-5	1	8	71	-10	4	8	76	-11	1	9	98	0	4	9	65
-4	1	8	87	-9	4	8	60	-10	1	9	66	1	4	9	72
-3	1	8	184	-7	4	8	108	-9	1	9	69	5	5	9	62
-2	1	8	181	-6	4	8	93	-8	1	9	152	-7	5	9	48
-1	1	8	77	-5	4	8	83	-7	1	9	166	-1	5	9	68
1	1	8	85	-4	4	8	82	-6	1	9	205	0	5	9	58
2	1	8	102	-3	4	8	91	-5	1	9	107	2	5	9	56
3	1	8	71	-2	4	8	90	-4	1	9	77	5	5	9	67
4	1	8	127	-1	4	8	117	-3	1	9	145	0	6	9	64
5	1	8	156	0	4	8	90	-2	1	9	192	0	0	10	205
7	1	8	73	1	4	8	80	-1	1	9	181	-4	0	10	323
8	1	8	81	2	4	8	95	0	1	9	115	-2	0	10	78
-12	1	8	108	3	4	8	85	1	1	9	159	2	0	10	159
-11	1	8	118	4	4	8	102	2	1	9	66	4	0	10	73
-9	1	8	167	-10	4	8	75	-9	1	9	94	-11	1	10	61
-8	1	8	153	-9	4	8	67	-10	1	9	25	-10	1	10	63
-7	1	8	56	-7	4	8	44	-8	1	9	89	-6	1	10	53
-5	1	8	84	-5	4	8	55	-5	1	9	62	-5	1	10	171
-4	1	8	94	-4	4	8	64	-4	1	9	74	-4	1	10	104
-3	1	8	74	-3	4	8	67	-3	1	9	63	-3	1	10	86
-1	1	8	63	-1	4	8	54	-1	1	9	77	-2	1	10	74
0	1	8	111	0	4	8	100	0	1	9	74	0	1	10	151
1	1	8	114	1	4	8	71	1	1	9	69	1	1	10	130
2	1	8	92	2	4	8	51	2	1	9	69	2	1	10	101
3	1	8	56	3	4	8	80	3	1	9	122	3	1	10	109
4	1	8	63	4	4	8	54	4	1	9	91	4	1	10	77
5	1	8	148	5	4	8	90	5	1	9	80	5	1	10	61
7	1	8	77	7	4	8	187	7	1	9	76	7	1	10	96
9	1	8	121	9	4	8	135	9	1	9	89	9	1	10	69
-6	3	8	80	-11	6	8	187	-11	3	9	94	-6	2	10	81
-5	3	8	58	-7	6	8	185	-7	3	9	97	-8	2	10	82
-4	3	8	77	-5	6	8	272	-5	3	9	64	-3	2	10	67
0	3	8	124	-1	6	8	222	-1	3	9	73	0	2	10	86
1	3	8	113	1	6	8	251	1	3	9	58	2	2	10	74
3	3	8	130	3	6	8	154	3	3	9	72	3	2	10	81

