AM-95-583

Nchwaningite, $Mn_2^{2+}SiO_3(OH)_2 \cdot H_2O$, a new pyroxene-related chain silicate from the N'chwaning mine, Kalahari manganese field, South Africa

Daniel Nyfeler, Thomas Armbruster, Roger Dixon, Vladimir Bermanec

For deposit: Table 2

American Mineralogist, 80, 3-4, 377-386.

Table 2 (for deposit) 4 pages,

observed and calculated structure factors
for nchwaningite

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR nchwan in Pca2(1)

H	K	L	10FO	10FC	10S
2	0	-7	159	168	3
4	0	-7	505	518	4
6	0	-7	113	129	3
1	1	-7	207	203	3
2	1	-7	54	55	6
3	1	-7	192	182	3
4	1	-7	293	298	4
5	1	-7	232	222	3
6	1	-7	84	81	4
1	2	-7	232	232	3
2	2	-7	121	118	3
3	2	-7	298	295	4
4	2	-7	263	267	3
5	2	-7	148	153	3
1	3	-7	62	63	7
2	3	-7	96	108	4
3	3	-7	108	98	4
0	0	-6	783	772	3
2	0	-6	318	321	3
4	0	-6	126	136	3
6	0	-6	371	376	3
8	0	-6	619	624	3
10	0	-6	242	246	3
0	1	-6	377	372	4
1	1	-6	382	381	3
2	1	-6	130	132	3
3	1	-6	147	144	2
4	1	-6	56	65	5
5	1	-6	277	275	4
6	1	-6	65	72	5
7	1	-6	380	395	4
8	1	-6	235	234	3
9	1	-6	35	41	-16
10	1	-6	106	109	4
0	2	-6	255	244	4
1	2	-6	156	167	3
2	2	-6	194	194	3
3	2	-6	92	100	4
4	2	-6	69	64	4
5	2	-6	124	129	3
6	2	-6	277	275	4
7	2	-6	327	337	4
8	2	-6	255	247	3
9	2	-6	75	69	5
10	2	-6	146	144	3
0	3	-6	460	474	4
1	3	-6	89	112	6
2	3	-6	251	256	3
3	3	-6	9	31	-35
4	3	-6	159	162	3
5	3	-6	79	78	4
6	3	-6	153	155	3
7	3	-6	101	105	4
8	3	-6	241	248	3
9	3	-6	72	73	5
0	4	-6	200	208	3
1	4	-6	145	163	4
2	4	-6	50	67	-13
3	4	-6	71	76	5
4	4	-6	109	104	4
5	4	-6	96	94	4
6	4	-6	62	59	6
7	4	-6	328	346	4
8	4	-6	114	119	4
0	5	-6	492	490	4
1	5	-6	218	236	4
2	5	-6	203	203	3
3	5	-6	171	171	3
4	5	-6	88	83	4
5	5	-6	180	185	3
6	5	-6	117	115	4
0	6	-6	505	504	4
1	6	-6	36	120	-31
2	0	-5	128	121	2
4	0	-5	332	339	3
6	0	-5	317	315	3
8	0	-5	354	355	3
10	0	-5	168	177	3
12	0	-5	53	41	6
1	1	-5	262	263	3
2	1	-5	96	95	3
3	1	-5	688	696	3
4	1	-5	155	148	2
5	1	-5	357	359	3
6	1	-5	147	147	2
7	1	-5	149	149	2
8	1	-5	182	181	3
9	1	-5	158	166	2
10	1	-5	122	120	3
11	1	-5	573	578	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
12	1	-5	104	95	4
13	1	-5	165	180	3
1	2	-5	203	203	3
2	2	-5	85	84	3
3	2	-5	550	545	3
4	2	-5	331	331	3
5	2	-5	326	322	3
6	2	-5	149	150	2
7	2	-5	42	37	6
8	2	-5	125	129	3
9	2	-5	105	109	3
10	2	-5	71	83	5
11	2	-5	407	400	4
12	2	-5	55	60	6
1	3	-5	93	96	3
2	3	-5	202	198	3
3	3	-5	216	213	3
4	3	-5	527	531	3
5	3	-5	161	161	3
6	3	-5	239	239	3
7	3	-5	55	59	5
8	3	-5	205	211	3
9	3	-5	111	116	3
10	3	-5	235	237	3
11	3	-5	198	198	3
12	3	-5	218	215	3
1	4	-5	103	103	3
2	4	-5	86	98	4
3	4	-5	617	610	3
4	4	-5	406	412	3
5	4	-5	384	386	3
6	4	-5	70	79	5
7	4	-5	109	110	3
8	4	-5	49	51	6
9	4	-5	49	51	7
10	4	-5	175	174	3
11	4	-5	449	453	4
1	5	-5	198	206	3
2	5	-5	150	150	3
3	5	-5	267	273	3
4	5	-5	84	65	4
5	5	-5	76	72	4
6	5	-5	180	179	3
7	5	-5	96	95	4
8	5	-5	151	155	3
9	5	-5	125	126	3
1	6	-5	62	51	6
2	6	-5	85	87	5
3	6	-5	251	243	4
4	6	-5	373	377	4
5	6	-5	240	241	4
6	6	-5	165	168	3
7	6	-5	71	70	5
8	6	-5	209	214	3
1	7	-5	200	202	3
2	7	-5	11	62	-44
3	7	-5	331	332	4
4	7	-5	215	204	3
5	7	-5	148	151	3
0	0	-4	1024	1037	2
2	0	-4	179	170	2
4	0	-4	193	197	2
6	0	-4	218	219	3
8	0	-4	569	587	3
10	0	-4	30	12	-14
12	0	-4	256	254	4
14	0	-4	317	321	4
0	1	-4	591	600	3
1	1	-4	575	556	3
2	1	-4	84	87	3
3	1	-4	230	240	3
4	1	-4	124	122	2
5	1	-4	241	240	3
6	1	-4	161	165	2
7	1	-4	489	472	3
8	1	-4	342	349	3
9	1	-4	304	301	3
10	1	-4	55	53	4
11	1	-4	222	225	3
12	1	-4	153	152	3
13	1	-4	101	96	3
14	1	-4	208	204	3
0	2	-4	538	538	3
1	2	-4	493	490	3
2	2	-4	130	128	2
3	2	-4	298	296	3
4	2	-4	147	153	2
5	2	-4	364	368	3
6	2	-4	141	139	2
7	2	-4	609	610	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
8	2	-4	350	359	3
9	2	-4	217	219	3
10	2	-4	37	35	-11
11	2	-4	90	85	3
12	2	-4	126	132	3
13	2	-4	70	71	5
14	2	-4	178	186	3
0	3	-4	947	955	3
1	3	-4	259	267	4
2	3	-4	147	153	2
3	3	-4	183	182	3
4	3	-4	218	223	3
5	3	-4	74	67	3
6	3	-4	336	348	3
7	3	-4	136	134	2
8	3	-4	542	552	3
9	3	-4	123	121	3
10	3	-4	114	113	3
11	3	-4	45	51	7
12	3	-4	303	304	4
13	3	-4	75	75	5
14	3	-4	418	417	4
0	4	-4	417	417	4
1	4	-4	461	469	3
2	4	-4	192	207	3
3	4	-4	298	294	3
4	4	-4	86	91	3
5	4	-4	366	371	3
6	4	-4	71	68	4
7	4	-4	583	586	3
8	4	-4	247	234	4
9	4	-4	260	261	4
10	4	-4	106	112	3
11	4	-4	120	116	3
12	4	-4	132	134	3
13	4	-4	94	91	4
0	5	-4	562	574	4
1	5	-4	221	235	3
2	5	-4	130	138	3
3	5	-4	72	68	4
4	5	-4	132	133	3
5	5	-4	146	148	2
6	5	-4	302	310	4
7	5	-4	366	370	4
8	5	-4	386	406	4
9	5	-4	33	39	-17
10	5	-4	66	69	5
11	5	-4	143	146	3
12	5	-4	141	139	3
0	6	-4	494	494	4
1	6	-4	116	127	4
2	6	-4	167	169	2
3	6	-4	57	48	5
4	6	-4	140	146	3
5	6	-4	83	82	4
6	6	-4	115	117	3
7	6	-4	181	182	3
8	6	-4	279	285	3
9	6	-4	181	179	3
10	6	-4	78	82	5
0	7	-4	87	106	5
1	7	-4	229	224	4
2	7	-4	204	208	3
3	7	-4	21	25	-28
4	7	-4	68	67	5
5	7	-4	112	111	4
6	7	-4	170	174	3
7	7	-4	337	341	4
8	7	-4	93	90	4
0	8	-4	335	336	5
1	8	-4	223	240	3
2	8	-4	69	70	6
3	8	-4	83	82	5
4	8	-4	65	76	6
5	8	-4	145	146	3
2	0	-3	558	550	2
4	0	-3	1772	1773	9
6	0	-3	409	426	2
8	0	-3	289	285	3
10	0	-3	618	617	3
12	0	-3	654	656	3
14	0	-3	133	132	3
16	0	-3	161	168	3
1	1	-3	483	465	2
2	1	-3	69	67	3
3	1	-3	759	755	2
4	1	-3	658	650	2
5	1	-3	203	203	3
6	1	-3	96	94	2
7	1	-3	185	184	2

H	K	L	10FO	10FC	10S
8	1	-3	144	143	2
9	1	-3	241	242	3
10	1	-3	186	186	3
11	1	-3	484	483	3
12	1	-3	234	239	3
13	1	-3	183	179	3
14	1	-3	106	109	3
15	1	-3	171	172	3
16	1	-3	54	58	6
1	2	-3	323	324	3
2	2	-3	417	422	2
3	2	-3	460	466	2
4	2	-3	610	607	2
5	2	-3	67	71	3
6	2	-3	263	270	3
7	2	-3	162	167	2
8	2	-3	237	236	3
9	2	-3	136	132	2
10	2	-3	410	410	3
11	2	-3	357	363	3
12	2	-3	256	261	4
13	2	-3	90	88	4
14	2	-3	73	74	4
15	2	-3	234	235	3
1	3	-3	128	134	2
2	3	-3	176	179	3
3	3	-3	143	145	2
4	3	-3	622	620	3
5	3	-3	105	109	2
6	3	-3	143	147	2
7	3	-3	127	133	2
8	3	-3	399	403	3
9	3	-3	42	47	5
10	3	-3	389	396	3
11	3	-3	82	82	3
12	3	-3	237	233	3
13	3	-3	33	43	-16
14	3	-3	155	156	3
15	3	-3	35	11	-16
1	4	-3	342	347	3
2	4	-3	162	161	2
3	4	-3	374	386	3
4	4	-3	162	170	3
5	4	-3	69	74	3
6	4	-3	243	248	3
7	4	-3	130	132	2
8	4	-3	210	215	3
9	4	-3	177	172	3
10	4	-3	35	47	-7
11	4	-3	299	317	4
12	4	-3	39	62	-14
13	4	-3	104	100	4
14	4	-3	115	115	4
1	5	-3	296	301	3
2	5	-3	178	185	3
3	5	-3	584	587	3
4	5	-3	706	709	3
5	5	-3	302	302	3
6	5	-3	122	129	2
7	5	-3	65	63	4
8	5	-3	163	172	2
9	5	-3	144	143	2
10	5	-3	272	264	4
11	5	-3	444	446	4
12	5	-3	364	363	4
13	5	-3	98	101	4
1	6	-3	25	43	-21
2	6	-3	107	110	3
3	6	-3	103	108	3
4	6	-3	746	759	3
5	6	-3	127	133	3
6	6	-3	166	171	3
7	6	-3	77	73	4
8	6	-3	217	219	3
9	6	-3	69	70	5
10	6	-3	279	276	4
11	6	-3	105	107	4
12	6	-3	297	297	4
1	7	-3	137	135	3
2	7	-3	106	114	4
3	7	-3	522	530	4
4	7	-3	103	103	3
5	7	-3	255	254	3
6	7	-3	128	136	3
7	7	-3	60	45	5
8	7	-3	53	51	6
9	7	-3	60	62	6
10	7	-3	80	76	5
1	8	-3	98	106	4
2	8	-3	163	170	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
3	8	-3	357	354	4
4	8	-3	326	320	4
5	8	-3	184	181	3
6	8	-3	90	97	4
7	8	-3	93	100	4
8	8	-3	122	121	4
1	9	-3	52	48	7
2	9	-3	77	68	5
3	9	-3	71	84	6
4	9	-3	150	165	3
0	0	-2	602	593	2
2	0	-2	176	190	2
4	0	-2	624	619	2
6	0	-2	323	324	2
8	0	-2	269	242	3
10	0	-2	357	363	3
12	0	-2	477	480	3
14	0	-2	358	358	3
16	0	-2	163	155	3
0	1	-2	764	741	2
1	1	-2	932	947	2
2	1	-2	273	264	2
3	1	-2	481	465	2
4	1	-2	192	188	2
5	1	-2	249	241	2
6	1	-2	103	99	2
7	1	-2	1110	1141	2
8	1	-2	359	354	2
9	1	-2	379	396	3
10	1	-2	134	133	2
11	1	-2	217	215	3
12	1	-2	236	237	3
13	1	-2	75	68	3
14	1	-2	159	155	2
15	1	-2	458	463	3
16	1	-2	105	106	4
17	1	-2	128	133	3
0	2	-2	799	800	2
1	2	-2	787	792	2
2	2	-2	39	46	4
3	2	-2	120	116	2
4	2	-2	251	251	2
5	2	-2	285	285	2
6	2	-2	195	181	3
7	2	-2	863	869	2
8	2	-2	196	199	3
9	2	-2	108	108	2
10	2	-2	171	171	3
11	2	-2	225	227	3
12	2	-2	177	176	3
13	2	-2	36	34	-7
14	2	-2	173	167	2
15	2	-2	419	415	4
16	2	-2	40	40	-8
0	3	-2	1415	1411	2
1	3	-2	249	249	3
2	3	-2	447	449	2
3	3	-2	15	15	-20
4	3	-2	187	179	3
5	3	-2	213	215	3
6	3	-2	204	197	3
7	3	-2	344	361	3
8	3	-2	757	763	3
9	3	-2	245	259	3
10	3	-2	149	147	2
11	3	-2	78	81	3
12	3	-2	264	262	3
13	3	-2	89	89	3
14	3	-2	293	287	4
15	3	-2	157	157	3
16	3	-2	142	141	3
0	4	-2	708	719	3
1	4	-2	775	784	3
2	4	-2	87	91	3
3	4	-2	184	189	3
4	4	-2	75	71	3
5	4	-2	123	120	2
6	4	-2	200	206	3
7	4	-2	870	884	3
8	4	-2	487	504	3
9	4	-2	141	139	2
10	4	-2	39	37	-11
11	4	-2	283	284	3
12	4	-2	82	78	3
13	4	-2	100	102	3
14	4	-2	189	191	3
15	4	-2	477	475	4
0	5	-2	589	570	3
1	5	-2	313	310	3
2	5	-2	359	368	3

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR nchwan in Pca2(1)

H	K	L	10FO	10FC	10S
3	5	-2	140	140	2
4	5	-2	78	78	3
5	5	-2	284	293	3
6	5	-2	129	122	2
7	5	-2	402	413	3
8	5	-2	322	317	3
9	5	-2	117	119	3
10	5	-2	140	135	2
11	5	-2	120	122	3
12	5	-2	197	201	3
13	5	-2	57	43	5
14	5	-2	142	126	3
0	6	-2	571	570	3
1	6	-2	347	355	3
2	6	-2	110	116	3
3	6	-2	183	182	3
4	6	-2	202	203	3
5	6	-2	118	117	3
6	6	-2	263	270	4
7	6	-2	232	239	3
8	6	-2	323	331	4
9	6	-2	158	159	2
10	6	-2	97	100	4
11	6	-2	97	98	4
12	6	-2	303	303	4
13	6	-2	106	101	4
0	7	-2	272	278	4
1	7	-2	371	376	4
2	7	-2	169	165	2
3	7	-2	195	195	3
4	7	-2	123	129	3
5	7	-2	241	241	3
6	7	-2	121	123	3
7	7	-2	441	450	4
8	7	-2	119	123	3
9	7	-2	107	105	3
10	7	-2	58	55	6
11	7	-2	106	103	4
0	8	-2	381	382	4
1	8	-2	195	188	3
2	8	-2	35	42	-18
3	8	-2	264	266	3
4	8	-2	95	97	4
5	8	-2	240	243	3
6	8	-2	156	161	3
7	8	-2	226	218	4
8	8	-2	219	231	3
9	8	-2	121	118	4
0	9	-2	664	659	4
1	9	-2	153	189	5
2	9	-2	75	69	5
3	9	-2	50	51	-13
4	9	-2	126	128	3
5	9	-2	91	95	4
6	9	-2	171	170	3
2	0	-1	384	378	1
4	0	-1	708	713	2
6	0	-1	447	443	2
8	0	-1	446	448	2
10	0	-1	541	552	3
12	0	-1	290	305	3
14	0	-1	195	197	3
16	0	-1	318	317	4
1	1	-1	428	432	2
2	1	-1	93	91	2
3	1	-1	1171	1159	7
4	1	-1	958	976	2
5	1	-1	561	577	2
6	1	-1	158	157	2
7	1	-1	252	256	2
8	1	-1	308	308	2
9	1	-1	308	318	3
10	1	-1	217	223	3
11	1	-1	670	664	3
12	1	-1	238	243	3
13	1	-1	178	180	3
14	1	-1	48	39	5
15	1	-1	263	260	4
16	1	-1	166	154	3
17	1	-1	165	162	3
1	2	-1	519	518	2
2	2	-1	288	296	2
3	2	-1	1112	1135	2
4	2	-1	696	676	2
5	2	-1	428	439	2
6	2	-1	218	216	2
7	2	-1	60	55	3
8	2	-1	168	173	2
9	2	-1	147	143	2
10	2	-1	333	349	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
11	2	-1	693	707	3
12	2	-1	211	211	3
13	2	-1	139	142	2
14	2	-1	119	118	3
15	2	-1	243	238	3
16	2	-1	174	178	3
17	2	-1	90	88	4
1	3	-1	301	306	2
2	3	-1	93	93	2
3	3	-1	334	338	2
4	3	-1	1391	1422	2
5	3	-1	232	236	2
6	3	-1	196	199	3
7	3	-1	188	189	2
8	3	-1	422	436	3
9	3	-1	182	188	3
10	3	-1	394	405	3
11	3	-1	229	229	3
12	3	-1	343	360	3
13	3	-1	121	118	3
14	3	-1	58	41	5
15	3	-1	78	74	4
16	3	-1	172	175	3
1	4	-1	314	316	3
2	4	-1	137	137	2
3	4	-1	990	998	2
4	4	-1	641	648	2
5	4	-1	459	463	2
6	4	-1	83	94	3
7	4	-1	86	80	3
8	4	-1	180	189	3
9	4	-1	69	70	3
10	4	-1	167	169	3
11	4	-1	712	720	3
12	4	-1	261	262	4
13	4	-1	177	183	2
14	4	-1	86	83	4
15	4	-1	268	263	4
16	4	-1	66	64	5
1	5	-1	227	226	3
2	5	-1	165	167	2
3	5	-1	446	447	3
4	5	-1	777	808	3
5	5	-1	100	106	3
6	5	-1	126	127	2
7	5	-1	34	26	-11
8	5	-1	259	262	3
9	5	-1	105	96	3
10	5	-1	204	211	3
11	5	-1	378	385	3
12	5	-1	285	297	4
13	5	-1	86	86	4
14	5	-1	74	72	5
15	5	-1	218	218	3
1	6	-1	82	80	3
2	6	-1	58	58	4
3	6	-1	285	287	3
4	6	-1	565	567	3
5	6	-1	284	286	3
6	6	-1	92	95	3
7	6	-1	37	32	-6
8	6	-1	314	317	3
9	6	-1	115	118	3
10	6	-1	278	279	4
11	6	-1	203	206	3
12	6	-1	166	165	3
13	6	-1	204	200	3
14	6	-1	22	35	-28
1	7	-1	199	198	3
2	7	-1	166	173	2
3	7	-1	445	446	3
4	7	-1	199	187	3
5	7	-1	180	175	3
6	7	-1	214	223	3
7	7	-1	37	41	-7
8	7	-1	75	80	4
9	7	-1	110	104	3
10	7	-1	138	140	3
11	7	-1	354	359	4
12	7	-1	108	111	4
1	8	-1	250	243	3
2	8	-1	47	47	7
3	8	-1	359	369	4
4	8	-1	384	379	4
5	8	-1	178	180	3
6	8	-1	23	22	-24
7	8	-1	59	59	6
8	8	-1	145	149	3
9	8	-1	190	187	3
10	8	-1	164	166	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	9	-1	163	155	3
2	9	-1	151	144	3
3	9	-1	182	176	3
4	9	-1	520	511	4
5	9	-1	117	114	4
6	9	-1	182	186	3
7	9	-1	127	127	4
1	10	-1	105	103	4
2	0	0	214	217	1
4	0	0	437	437	2
6	0	0	413	436	2
8	0	0	1638	1674	9
12	0	0	206	200	3
14	0	0	592	593	3
16	0	0	419	416	4
0	1	0	1049	1061	5
1	1	0	404	405	1
2	1	0	48	50	3
3	1	0	477	492	1
4	1	0	31	35	-9
5	1	0	245	263	2
6	1	0	275	274	2
7	1	0	1042	1059	2
8	1	0	524	530	2
9	1	0	126	127	2
10	1	0	83	82	2
11	1	0	224	228	3
12	1	0	124	124	2
13	1	0	63	67	4
14	1	0	240	243	4
15	1	0	361	348	3
16	1	0	113	111	3
17	1	0	172	170	3
0	2	0	1460	1447	7
1	2	0	486	473	2
2	2	0	322	330	2
3	2	0	149	141	2
4	2	0	398	403	2
5	2	0	483	485	2
6	2	0	306	328	2
7	2	0	493	505	2
8	2	0	573	590	2
9	2	0	66	63	3
10	2	0	16	21	-21
11	2	0	175	172	3
12	2	0	191	190	3
13	2	0	49	42	5
14	2	0	367	368	3
15	2	0	197	200	3
16	2	0	189	187	3
17	2	0	42	50	-14
0	3	0	446	484	2
1	3	0	321	321	2
2	3	0	34	31	-9
3	3	0	157	159	2
4	3	0	318	315	2
5	3	0	83	81	2
6	3	0	610	620	2
7	3	0	49	57	4
8	3	0	441	446	2
9	3	0	86	88	3
10	3	0	70	68	3
11	3	0	19	30	-21
12	3	0	467	473	3
13	3	0	29	33	-15
14	3	0	507	505	3
15	3	0	79	71	4
16	3	0	69	66	5
17	3	0	49	52	7
0	4	0	79	69	3
1	4	0	445	443	2
2	4	0	447	440	2
3	4	0	293	303	3
4	4	0	117	119	2
5	4	0	581	598	2
6	4	0	35	11	-10
7	4	0	343	336	3
8	4	0	34	21	-10
9	4	0	74	68	3
10	4	0	217	221	3
11	4	0	87	88	3
12	4	0	250	254	3
13	4	0	100	95	3
14	4	0	74	75	4
15	4	0	118	121	3
16	4	0	105	101	4
0	5	0	768	765	3
1	5	0	665	660	3
2	5	0	132	137	2
3	5	0	191	195	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
4	5	0	55	44	4
5	5	0	349	351	3
6	5	0	464	479	3
7	5	0	687	698	3
8	5	0	601	613	3
9	5	0	87	83	3
10	5	0	191	193	3
11	5	0	107	101	3
12	5	0	158	162	2
14	5	0	351	351	4
15	5	0	358	352	4
0	6	0	1149	1149	3
2	6	0	215	205	3
3	6	0	27	11	-15
4	6	0	144	146	2
5	6	0	187	200	3
6	6	0	194	186	3
7	6	0	110	110	3
8	6	0	682	689	3
9	6	0	115	122	3
10	6	0	107	109	3
11	6	0	29	28	-18
12	6	0	196	194	3
13	6	0	44	62	-14
14	6	0	301	300	4
0	7	0	166	167	2
1	7	0	480	474	3
2	7	0	139	137	3
3	7	0	38	6	-11
4	7	0	93	96	3
5	7	0	89	87	3
6	7	0	192	188	3
7	7	0	644	645	3
8	7	0	37	28	-8
9	7	0	24	46	-22
10	7	0	152	152	3
11	7	0	200	194	3
12	7	0	36	25	-16
0	8	0	523	513	3
1	8	0	278	277	4
2	8	0	38	49	-14
3	8	0	18	8	-27
4	8	0	83	87	4
5	8	0	53	53	6
6	8	0	167	170	3
7	8	0	473	482	4
8	8	0	326	317	4
9	8	0	114	113	4
0	9	0	185	186	3
1	9	0	45	40	-13
2	9	0	129	119	3
3	9	0	33	23	-17
4	9	0	187	187	3
5	9	0	44	49	-8
6	9	0	41	27	-14
7	9	0	72	82	5
8	9	0	37	22	-18
0	10	0	130	145	4
1	10	0	250	249	4
2	10	0	204	203	3
3	10	0	111	115	4
2	0	1	386	373	1
4	0	1	710	702	2
6	0	1	450	458	2
8	0	1	447	458	2
10	0	1	535	530	2
12	0	1	293	282	3
14	0	1	199	192	3
16	0	1	323	319	4
1	1	1	444	415	2
2	1	1	98	92	2
3	1	1	1186	1189	7
4	1	1	962	942	2
5	1	1	573	587	2
6	1	1	158	159	2
7	1	1	257	255	2
8	1	1	313	315	2
9	1	1	311	309	3
10	1	1	220	223	3
11	1	1	678	701	3
12	1	1	228	227	3
13	1	1	179	178	3
14	1	1	23	39	-21
15	1	1	267	270	4
16	1	1	165	163	3
17	1	1	166	167	3
1	2	1	537	521	2
2	2	1	296	291	2
3	2	1	1136	1129	2
4	2	1	714	706	2

H	K	L	10FO	10FC	10S
5	2	1	443	445	2
6	2	1	217	221	2
7	2	1	60	58	3
8	2	1	167	161	2
9	2	1	144	142	2
10	2	1	338	331	3
11	2	1	693	701	3
12	2	1	212	212	3
13	2	1	140	135	2
14	2	1	119	114	3
15	2	1	241	237	3
16	2	1	174	167	3
17	2	1	92	93	4
1	3	1	310	307	2
2	3	1	97	91	2
3	3	1	338	343	2
4	3	1	1410	1406	2
5	3	1	233	238	3
6	3	1	200	198	3
7	3	1	189	191	3
8	3	1	433	433	3
9	3	1	184	191	3
10	3	1	397	399	3
11	3	1	228	237	3
12	3	1	351	348	3
13	3	1	119	123	3
14	3	1	59	46	5
15	3	1	80	78	4
16	3	1	176	176	3
1	4	1	315	311	3
2	4	1	139	133	2
3	4	1	1003	1005	2
4	4	1	655	669	2
5	4	1	459	472	2
6	4	1	87	82	2
7	4	1	83	85	3
8	4	1	184	182	3
9	4	1	65	60	3
10	4	1	177	179	3
11	4	1	714	722	3
12	4	1	257	272	4
13	4	1	184	179	3
14	4	1	83	80	4
15	4	1	270	263	4
16	4	1	66	54	5
1	5	1	229	227	3
2	5	1	166	161	2
3	5	1	446	450	3
4	5	1	785	768	3
5	5	1	96	98	3
6	5	1	129	131	2
7	5	1	26	25	-16
8	5	1	264	270	3
9	5	1	99	103	3
10	5	1	202	202	3
11	5	1	377	388	3
12	5	1	281	273	4
13	5	1	91	95	4
14	5	1	70	64	5
15	5	1	216	216	3
1	6	1	84	77	3
2	6	1	61	54	4
3	6	1	292	296	3
4	6	1	575	576	3
5	6	1	288	294	3
6	6	1	92	100	3
7	6	1	25	26	-9
8	6	1	311	319	3
9	6	1	117	115	3
10	6	1	282	282	4
11	6	1	214	208	3
12	6	1	176	173	3
13	6	1	205	203	3
14	6	1	50	31	7
1	7	1	199	198	3
2	7	1	171	168	3
3	7	1	457	453	3
4	7	1	198	195	3
5	7	1	181	178	3
6	7	1	220	215	3
7	7	1	30	40	-9
8	7	1	76	82	4
9	7	1	101	104	4
10	7	1	139	143	3
11	7	1	359	366	4
12	7	1	113	111	4
1	8	1	252	249	3
2	8	1	23	42	-25
3	8	1	361	347	4
4	8	1	396	400	4

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR nchwan in Pca2(1)

H	K	L	10FO	10FC	10S
5	8	1	177	172	3
7	8	1	62	61	6
8	8	1	143	141	3
9	8	1	187	190	3
10	8	1	161	161	3
1	9	1	168	158	3
2	9	1	146	145	3
3	9	1	189	185	3
4	9	1	531	525	4
5	9	1	122	119	4
6	9	1	183	177	3
7	9	1	136	133	3
1	10	1	104	105	4
0	0	2	609	577	2
2	0	2	174	183	2
4	0	2	627	611	2
6	0	2	329	334	2
8	0	2	279	292	3
10	0	2	357	359	3
12	0	2	484	476	3
14	0	2	355	360	3
16	0	2	168	171	3
0	1	2	792	779	2
1	1	2	951	933	2
2	1	2	279	265	2
3	1	2	486	460	2
4	1	2	187	187	2
5	1	2	250	252	2
6	1	2	108	103	2
7	1	2	1116	1114	2
8	1	2	365	377	3
9	1	2	384	386	3
10	1	2	136	135	2
11	1	2	221	216	3
12	1	2	229	232	3
13	1	2	74	66	3
14	1	2	161	161	3
15	1	2	454	446	3
16	1	2	113	112	3
17	1	2	133	127	3
0	2	2	822	772	2
1	2	2	815	795	2
2	2	2	37	46	4
3	2	2	127	131	2
4	2	2	260	248	2
5	2	2	291	286	2
6	2	2	195	195	3
7	2	2	880	881	2
8	2	2	203	193	3
9	2	2	106	106	2
10	2	2	170	171	2
11	2	2	232	222	3
12	2	2	183	184	3
13	2	2	21	33	-22
14	2	2	175	173	3
15	2	2	416	420	4
16	2	2	48	49	7
0	3	2	1469	1426	2
1	3	2	255	248	3
2	3	2	466	451	2
4	3	2	192	191	3
5	3	2	217	213	3
6	3	2	210	212	3
7	3	2	353	356	3
8	3	2	762	767	3
9	3	2	251	256	3
10	3	2	156	153	3
11	3	2	81	78	3
12	3	2	259	267	3
13	3	2	95	87	3
14	3	2	295	303	4
15	3	2	157	154	3
16	3	2	150	143	3
0	4	2	725	705	3
1	4	2	797	780	3
2	4	2	94	84	2
3	4	2	194	195	2
4	4	2	78	80	3
5	4	2	123	120	2
6	4	2	207	203	3
7	4	2	886	890	3
8	4	2	491	492	3
9	4	2	140	138	2
10	4	2	27	38	-16
11	4	2	276	278	3
12	4	2	79	84	4
13	4	2	102	100	3
14	4	2	194	187	3
15	4	2	480	474	4
0	5	2	613	613	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
1	5	2	314	302	3
2	5	2	365	372	3
3	5	2	142	137	2
4	5	2	81	81	3
5	5	2	291	286	3
6	5	2	133	140	2
7	5	2	410	408	3
8	5	2	335	344	3
9	5	2	118	121	3
10	5	2	139	139	2
11	5	2	123	126	3
12	5	2	199	192	3
13	5	2	37	41	-15
14	5	2	141	148	3
0	6	2	586	566	3
1	6	2	361	349	3
2	6	2	116	109	3
3	6	2	183	181	3
4	6	2	202	203	3
5	6	2	117	119	3
6	6	2	269	264	3
7	6	2	234	239	3
8	6	2	329	325	3
9	6	2	159	157	2
10	6	2	97	94	4
11	6	2	100	99	4
12	6	2	301	300	4
13	6	2	105	101	4
0	7	2	283	276	4
1	7	2	378	366	3
2	7	2	173	175	3
3	7	2	196	193	3
4	7	2	129	126	3
5	7	2	242	239	3
6	7	2	128	122	3
7	7	2	445	441	4
8	7	2	126	128	3
9	7	2	98	98	4
10	7	2	54	64	6
11	7	2	100	113	4
0	8	2	385	366	4
1	8	2	205	209	3
2	8	2	40	36	-9
3	8	2	270	265	4
4	8	2	95	99	4
5	8	2	245	246	3
6	8	2	162	157	3
7	8	2	232	238	4
8	8	2	225	219	4
9	8	2	127	119	3
0	9	2	672	650	4
1	9	2	157	183	4
2	9	2	70	75	6
3	9	2	19	46	-34
4	9	2	122	125	4
5	9	2	95	92	4
6	9	2	172	169	3
2	0	3	566	549	2
4	0	3	1783	1785	9
6	0	3	415	413	2
8	0	3	288	293	3
10	0	3	627	626	3
12	0	3	650	654	3
14	0	3	133	126	3
16	0	3	167	158	3
1	1	3	491	480	2
2	1	3	73	62	2
3	1	3	767	749	2
4	1	3	665	657	2
5	1	3	205	197	3
6	1	3	93	84	2
7	1	3	183	183	2
8	1	3	136	133	2
9	1	3	247	246	3
10	1	3	187	186	3
11	1	3	476	480	3
12	1	3	243	243	4
13	1	3	189	183	3
14	1	3	111	106	3
15	1	3	174	167	3
16	1	3	58	48	6
1	2	3	319	312	3
2	2	3	435	422	2
3	2	3	469	452	2
4	2	3	621	612	2
5	2	3	66	54	3
6	2	3	261	263	3
7	2	3	171	166	3
8	2	3	240	246	3
9	2	3	135	134	2

H	K	L	10FO	10FC	10S
10	2	3	417	414	3
11	2	3	357	350	3
12	2	3	265	257	4
13	2	3	101	100	3
14	2	3	74	70	4
15	2	3	235	237	3
1	3	3	134	134	2
2	3	3	180	171	3
3	3	3	145	139	2
4	3	3	635	623	3
5	3	3	109	105	2
6	3	3	144	137	2
7	3	3	128	130	2
8	3	3	398	399	3
9	3	3	46	46	5
10	3	3	397	397	3
11	3	3	82	79	3
12	3	3	244	246	3
13	3	3	47	44	6
14	3	3	162	155	3
15	3	3	46	10	-12
1	4	3	362	345	3
2	4	3	167	166	3
3	4	3	384	363	3
4	4	3	158	145	2
5	4	3	72	50	3
6	4	3	256	256	3
7	4	3	134	136	2
8	4	3	214	214	3
9	4	3	178	179	3
10	4	3	56	41	4
11	4	3	304	291	4
12	4	3	61	60	5
13	4	3	110	112	3
14	4	3	118	118	4
1	5	3	306	306	3
2	5	3	182	180	3
3	5	3	600	594	3
4	5	3	730	720	3
5	5	3	306	304	3
6	5	3	125	120	2
7	5	3	68	67	4
8	5	3	168	160	3
9	5	3	145	147	2
10	5	3	268	268	4
11	5	3	447	448	4
12	5	3	371	371	4
13	5	3	102	94	4
1	6	3	36	44	-14
2	6	3	114	111	3
3	6	3	111	95	3
4	6	3	767	759	3
5	6	3	129	127	3
6	6	3	170	173	2
7	6	3	77	77	4
8	6	3	214	217	3
9	6	3	76	69	4
10	6	3	286	282	4
11	6	3	96	96	4
12	6	3	302	297	4
1	7	3	141	137	3
2	7	3	114	115	3
3	7	3	541	535	4
4	7	3	103	91	3
5	7	3	254	257	3
6	7	3	138	136	3
7	7	3	27	40	-21
8	7	3	54	60	6
9	7	3	60	60	6
10	7	3	74	70	5
1	8	3	98	86	4
2	8	3	174	172	3
3	8	3	361	359	4
4	8	3	325	316	4
5	8	3	179	180	3
6	8	3	95	94	4
7	8	3	97	95	4
8	8	3	120	125	4
1	9	3	41	46	-16
2	9	3	72	75	6
3	9	3	82	81	5
4	9	3	148	137	3
0	0	4	1036	997	2
2	0	4	174	190	2
4	0	4	196	192	2
6	0	4	218	213	3
8	0	4	574	565	3
10	0	4	17	19	-25
12	0	4	261	269	4
14	0	4	314	310	4

H	K	L	10FO	10FC	10S
0	1	4	602	578	3
1	1	4	588	589	3
2	1	4	84	82	3
3	1	4	231	225	3
4	1	4	126	128	2
5	1	4	247	242	3
6	1	4	165	161	2
7	1	4	493	499	3
8	1	4	339	330	3
9	1	4	309	312	3
10	1	4	57	58	4
11	1	4	223	223	3
12	1	4	158	160	3
13	1	4	98	96	4
14	1	4	205	201	3
0	2	4	548	535	3
1	2	4	505	487	3
2	2	4	132	134	2
3	2	4	305	299	3
4	2	4	148	143	2
5	2	4	370	363	3
6	2	4	139	133	2
7	2	4	621	613	3
8	2	4	357	363	3
9	2	4	219	216	3
10	2	4	31	27	-8
11	2	4	96	96	3
12	2	4	132	127	3
13	2	4	76	72	4
14	2	4	185	175	3
0	3	4	976	959	3
1	3	4	263	274	4
2	3	4	147	141	2
3	3	4	184	183	3
4	3	4	221	225	3
5	3	4	67	69	4
6	3	4	344	335	3
7	3	4	137	142	2
8	3	4	546	545	3
9	3	4	125	127	3
10	3	4	113	114	3
11	3	4	39	53	-14
12	3	4	301	296	4
13	3	4	79	77	5
14	3	4	419	408	4
0	4	4	444	443	3
1	4	4	481	471	3
2	4	4	199	200	3
3	4	4	305	296	3
4	4	4	92	93	3
5	4	4	374	363	3
6	4	4	74	72	4
7	4	4	600	600	3
8	4	4	243	252	3
9	4	4	267	259	4
10	4	4	111	108	3
11	4	4	123	133	3
12	4	4	133	127	3
13	4	4	93	92	4
0	5	4	572	550	3
1	5	4	228	227	3
2	5	4	136	129	3
3	5	4	74	72	4
4	5	4	140	141	3
5	5	4	148	143	2
6	5	4	308	297	4
7	5	4	368	373	4
8	5	4	392	380	4
9	5	4	29	39	-19
10	5	4	70	64	5
11	5	4	148	145	3
12	5	4	147	146	3
0	6	4	508	493	4
1	6	4	125	134	3
2	6	4	171	169	2
3	6	4	61	49	5
4	6	4	151	151	3
5	6	4	79	83	4
6	6	4	126	123	3
7	6	4	187	192	3
8	6	4	283	282	4
9	6	4	191	184	3
10	6	4	85	82	4
0	7	4	94	99	5
1	7	4	239	231	4
2	7	4	211	208	3
3	7	4	41	30	-14
4	7	4	50	62	7
5	7	4	111	115	4
6	7	4	177	175	3

H	K	L	10FO	10FC	10S
7	7	4	346	344	4
8	7	4	92	94	4
0	8	4	345	344	5
1	8	4	227	232	3
2	8	4	62	76	7
3	8	4	84	83	5
4	8	4	71	72	6
5	8	4	158	160	3
2	0	5	130	135	2
4	0	5	344	347	3
6	0	5	323	319	3
8	0	5	357	356	3
10	0	5	164	150	3
12	0	5	41	73	-15
1	1	5	262	249	3
2	1	5	95	98	3
3	1	5	700	684	3
4	1	5	162	173	2
5	1	5	356	344	3
6	1	5	148	151	2
7	1	5	149	149	2
8	1	5	184	181	3
9	1	5	156	151	2
10	1	5	121	125	3
11	1	5	578	575	3
12	1	5	104	109	4
13	1	5	172	164	3
1	2	5	215	211	3
2	2	5	86	94	4
3	2	5	561	555	3
4	2	5	331	323	3
5	2	5	327	324	3
6	2	5	151	153	2
8	2	5	128	134	3
9	2	5	114	115	3
10	2	5	78	62	4
11	2	5	406	407	4
12	2	5	33	46	-18
1	3	5	95	95	3
2	3	5	211	205	3
3	3	5	220	210	3
4	3	5	536	531	3
5	3	5	161	157	3
6	3	5	246	247	4
7	3	5	58	58	5
8	3	5	205	214	3
9	3	5	121	116	3
10	3	5	246	252	3
11	3	5	206	198	3
12	3	5	219	218	3
1	4	5	104	108	3
2	4	5	94	92	4
3	4	5	626	619	3
4	4	5	417	404	4
5	4	5	394	387	4
6	4	5	71	70	5
7	4	5	105	101	3
8	4	5	44	43	-13
9	4	5	22	57	-88
10	4	5	179	176	3
11	4	5	461	456	4
1	5	5	207	200	3
2	5	5	159	160	3
3	5	5	278	265	4
4	5	5	88	100	4
5	5	5	77	73	5
6	5	5	188	187	3
7	5	5	90	92	4
8	5	5	156	153	3
9	5	5	129	126	3
1	6	5	50	51	7
2	6	5	80	82	5
3	6	5	257	245	4
4	6	5	384	375	4
5	6	5	248	241	3
6	6	5	162	166	3
7	6	5	73	70	5
8	6	5	212	210	3
1	7	5	210	197	3
3	7	5	335	324	4
4	7	5	212	213	3
5	7	5	143	141	4
0	0	6	792	802	3
2	0	6	316	317	3
4	0	6	135	126	2
6	0	6	370	379	3
8	0	6	629	643	3
10	0	6	238	239	3
0	1	6	377	380	4
1	1	6	378	371	4

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR nchwan in Pca2(1)

H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S	H	K	L	10FO	10FC	10S
2	1	6	133	127	3	4	2	6	63	61	5	7	3	6	106	98	4	1	5	6	228	243	3	3	1	7	198	209	3
3	1	6	150	149	2	5	2	6	124	122	3	8	3	6	249	243	3	2	5	6	203	200	3	4	1	7	298	287	4
4	1	6	61	63	4	6	2	6	278	277	4	9	3	6	75	70	5	3	5	6	173	177	3	5	1	7	234	240	3
5	1	6	282	286	4	7	2	6	320	324	4	0	4	6	202	193	3	4	5	6	87	84	5	6	1	7	79	82	5
6	1	6	75	76	4	8	2	6	256	259	3	1	4	6	149	135	3	5	5	6	185	186	3	1	2	7	231	230	3
7	1	6	390	383	4	9	2	6	72	76	5	2	4	6	49	76	-15	6	5	6	122	127	4	2	2	7	114	110	4
8	1	6	228	238	3	10	2	6	146	141	3	3	4	6	91	85	4	0	6	6	516	514	4	3	2	7	299	296	4
9	1	6	26	35	-23	0	3	6	473	467	4	4	4	6	104	107	4	2	0	7	162	156	3	4	2	7	266	266	3
10	1	6	104	103	4	1	3	6	93	107	5	5	4	6	104	98	4	4	0	7	498	494	4	5	2	7	149	154	3
0	2	6	258	263	4	2	3	6	253	248	3	6	4	6	60	56	6	6	0	7	111	107	4	1	3	7	69	65	6
1	2	6	153	151	3	4	3	6	166	166	3	7	4	6	331	325	4	1	1	7	206	210	3	2	3	7	105	99	4
2	2	6	197	193	3	5	3	6	84	78	4	8	4	6	114	103	4	2	1	7	57	51	6	3	3	7	99	104	5
3	2	6	102	95	3	6	3	6	163	165	3	0	5	6	506	500	4												