

Table 4a: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in air

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	0	0	969	984	7	8	14	0	343	336	8	1	2	1	168	172	2	11	8	1	318	331	14	11	15	1	190	190	14
4	0	0	956	1040	7	10	14	0	316	309	13	2	2	1	796	774	3	12	8	1	72	102	-71	12	15	1	135	154	-14
6	0	0	2384	2244	17	12	14	0	72	16	-52	3	2	1	757	778	3	13	8	1	150	164	-34	1	16	1	524	528	3
8	0	0	1787	1717	22	1	15	0	244	232	4	4	2	1	616	582	2	0	9	1	562	588	2	2	16	1	192	192	5
10	0	0	1772	1648	22	3	15	0	169	174	6	5	2	1	44	23	-4	1	9	1	746	738	2	3	16	1	661	678	3
3	1	0	2445	2480	12	5	15	0	656	620	6	6	2	1	376	383	1	2	9	1	248	262	1	4	16	1	55	9	-15
5	1	0	494	453	3	7	15	0	414	389	8	7	2	1	449	461	3	3	9	1	316	320	2	5	16	1	595	602	4
7	1	0	1390	1343	12	9	15	0	482	474	9	8	2	1	356	346	10	4	9	1	99	97	7	6	16	1	145	129	9
9	1	0	726	673	7	11	15	0	175	179	-23	9	2	1	39	16	-38	5	9	1	78	87	-8	7	16	1	375	386	5
11	1	0	782	720	11	0	16	0	423	417	5	10	2	1	179	188	12	6	9	1	140	144	6	8	16	1	102	78	-15
2	2	0	753	690	5	2	16	0	631	583	5	11	2	1	175	177	12	7	9	1	208	216	6	9	16	1	386	399	7
4	2	0	267	255	2	4	16	0	282	279	10	12	2	1	55	19	-55	8	9	1	97	82	-11	10	16	1	122	87	-18
6	2	0	427	396	2	6	16	0	606	579	6	13	2	1	130	104	-30	9	9	1	214	227	6	11	16	1	235	260	12
8	2	0	338	314	9	8	16	0	461	438	9	14	2	1	42	52	-42	10	9	1	186	181	11	0	17	1	695	700	5
10	2	0	337	315	9	10	16	0	210	233	13	0	3	1	280	293	2	11	9	1	263	248	23	1	17	1	815	798	4
12	2	0	49	13	-48	1	17	0	391	375	8	1	3	1	1078	1077	4	12	9	1	109	143	-30	2	17	1	1492	1497	7
1	3	0	165	185	2	3	17	0	40	72	-39	2	3	1	815	860	3	13	9	1	185	196	-19	3	17	1	87	84	-11
3	3	0	1094	1023	6	5	17	0	75	62	-19	3	3	1	262	279	1	1	10	1	334	342	1	4	17	1	1130	1141	6
5	3	0	574	555	3	7	17	0	407	401	6	4	3	1	338	341	1	2	10	1	529	525	2	5	17	1	69	43	-15
7	3	0	588	556	4	9	17	0	155	151	-24	5	3	1	201	192	1	3	10	1	750	767	3	6	17	1	1081	1107	7
9	3	0	56	4	-56	11	17	0	250	257	16	6	3	1	133	139	3	4	10	1	475	467	3	7	17	1	292	280	6
11	3	0	83	77	-32	0	18	0	202	168	11	7	3	1	206	191	4	5	10	1	145	150	6	8	17	1	758	778	6
0	4	0	818	801	7	2	18	0	260	239	5	8	3	1	351	365	4	6	10	1	286	291	4	9	17	1	113	118	-14
2	4	0	1571	1600	11	4	18	0	325	317	5	9	3	1	213	224	16	7	10	1	494	498	4	10	17	1	489	487	13
4	4	0	408	375	3	6	18	0	68	102	-31	10	3	1	67	9	-28	8	10	1	254	259	4	11	17	1	521	507	11
6	4	0	38	47	-13	8	18	0	367	357	7	11	3	1	292	296	-39	9	10	1	119	127	10	1	18	1	597	608	3
8	4	0	540	502	5	10	18	0	107	112	-36	12	3	1	278	293	16	10	10	1	187	184	7	2	18	1	72	41	-11
10	4	0	149	157	13	1	19	0	175	160	8	13	3	1	271	239	17	11	10	1	260	265	10	3	18	1	466	467	3
12	4	0	364	343	12	3	19	0	108	117	10	14	3	1	96	15	-38	12	10	1	0	40	-1	4	18	1	575	574	4
1	5	0	329	322	2	5	19	0	76	102	-24	1	4	1	188	187	2	13	10	1	154	168	-26	5	18	1	1045	1059	7
3	5	0	587	544	12	7	19	0	105	74	-16	2	4	1	99	95	2	0	11	1	51	37	-6	6	18	1	883	858	6
5	5	0	207	189	2	9	19	0	207	222	10	3	4	1	56	35	3	1	11	1	273	273	1	7	18	1	115	88	-12
7	5	0	36	58	-35	0	20	0	541	519	9	4	4	1	98	79	2	2	11	1	229	236	2	8	18	1	416	412	5
9	5	0	113	105	11	2	20	0	431	406	6	5	4	1	93	90	3	3	11	1	114	120	5	9	18	1	524	535	9
11	5	0	389	357	10	4	20	0	119	117	11	6	4	1	55	46	-7	4	11	1	20	33	-19	10	18	1	98	88	-22
0	6	0	544	506	6	6	20	0	114	101	-17	7	4	1	50	53	-11	5	11	1	95	106	8	0	19	1	474	485	6
2	6	0	594	530	4	8	20	0	94	98	-24	8	4	1	102	98	8	6	11	1	138	151	7	1	19	1	372	351	4
4	6	0	482	466	3	10	20	0	76	64	-76	9	4	1	71	59	-19	7	11	1	98	111	-10	2	19	1	45	37	-22

43	6	6	0	129	147	7	1	21	0	232	225	11	10	4	1	195	179	15	8	11	1	74	48	-13	3	19	1	323	321	4
44	8	6	0	596	564	6	3	21	0	216	214	8	11	4	1	127	135	-14	9	11	1	56	3	-21	4	19	1	367	370	4
45	10	6	0	145	151	-21	5	21	0	403	389	7	12	4	1	124	146	-34	10	11	1	77	42	-16	5	19	1	212	195	7
46	12	6	0	118	111	-24	7	21	0	127	121	-18	13	4	1	93	56	-44	11	11	1	77	25	-76	6	19	1	154	136	11
47	3	7	0	613	590	3	9	21	0	177	131	-34	14	4	1	129	25	-39	12	11	1	0	29	-1	7	19	1	65	28	-24
48	5	7	0	137	140	7	0	22	0	961	891	13	0	5	1	848	886	4	13	11	1	44	4	-43	8	19	1	103	110	-15
49	7	7	0	444	423	5	2	22	0	601	564	5	1	5	1	1452	1417	5	1	12	1	297	305	1	9	19	1	179	186	10
50	9	7	0	560	535	11	4	22	0	523	513	6	2	5	1	2118	2197	8	2	12	1	74	69	5	10	19	1	263	280	10
51	11	7	0	162	159	-22	6	22	0	458	425	18	4	5	1	1595	1637	5	3	12	1	285	294	2	1	20	1	153	164	7
52	13	7	0	95	26	-53	8	22	0	645	613	8	5	5	1	87	83	4	4	12	1	51	44	-15	2	20	1	70	48	-12
53	0	8	0	680	584	6	1	23	0	938	876	8	6	5	1	1440	1480	7	5	12	1	274	287	4	3	20	1	139	150	8
54	2	8	0	468	486	2	3	23	0	1113	1027	11	7	5	1	360	368	4	6	12	1	53	54	-25	4	20	1	84	87	-18
55	4	8	0	869	825	7	5	23	0	50	62	-50	8	5	1	897	905	5	7	12	1	213	224	10	5	20	1	236	246	6
56	6	8	0	596	575	8	7	23	0	1133	1048	10	9	5	1	222	205	8	8	12	1	35	17	-34	6	20	1	153	148	10
57	8	8	0	348	328	6	0	24	0	1363	1237	17	10	5	1	470	475	7	9	12	1	192	181	7	7	20	1	112	94	-18
58	10	8	0	515	476	19	2	24	0	353	349	16	11	5	1	634	621	10	10	12	1	121	117	11	8	20	1	74	25	-23
59	12	8	0	508	481	11	4	24	0	200	184	16	12	5	1	948	946	13	11	12	1	73	23	-23	9	20	1	64	46	-28
60	1	9	0	739	664	3	6	24	0	295	274	10	13	5	1	337	343	16	12	12	1	233	255	12	10	20	1	107	141	-44
61	3	9	0	49	43	-5	1	25	0	477	458	8	1	6	1	1864	1968	6	13	12	1	220	257	19	0	21	1	533	541	8
62	5	9	0	298	279	5	3	25	0	183	195	13	2	6	1	871	789	2	0	13	1	225	245	3	1	21	1	344	338	6
63	7	9	0	1091	1032	9	5	25	0	539	475	8	3	6	1	2070	2112	7	1	13	1	229	241	2	2	21	1	111	106	10
64	9	9	0	233	219	14	0	26	0	114	70	-28	4	6	1	957	981	3	2	13	1	72	75	6	3	21	1	212	219	6
65	11	9	0	57	13	-56	2	26	0	0	3	-1	5	6	1	2631	2736	14	3	13	1	219	235	4	4	21	1	313	323	5
66	13	9	0	404	381	14	4	26	0	76	42	-62	6	6	1	1644	1630	8	4	13	1	147	158	5	5	21	1	35	6	-35
67	0	10	0	858	806	6	1	27	0	405	370	8	7	6	1	726	725	4	5	13	1	109	103	8	6	21	1	294	305	9
68	2	10	0	292	287	2	3	27	0	0	42	-1	8	6	1	609	604	4	6	13	1	36	40	-35	7	21	1	157	150	16
69	4	10	0	313	296	5	0	28	0	170	159	-22	9	6	1	1246	1263	7	7	13	1	36	6	-36	8	21	1	112	115	-21
70	6	10	0	271	248	6	2	28	0	196	242	-22	10	6	1	69	66	-22	8	13	1	60	54	-22	9	21	1	144	156	12
71	8	10	0	368	361	6	1	0	1	498	521	3	11	6	1	815	799	12	9	13	1	79	29	-16	1	22	1	81	93	-22
72	10	10	0	153	158	14	2	0	1	129	116	5	12	6	1	165	190	-22	10	13	1	89	14	-16	2	22	1	255	246	7
73	12	10	0	237	206	24	3	0	1	405	434	3	13	6	1	798	775	12	11	13	1	75	8	-21	3	22	1	326	339	6
74	1	11	0	2444	2319	14	4	0	1	174	152	2	0	7	1	140	144	2	12	13	1	0	18	-1	4	22	1	263	264	6
75	3	11	0	1649	1592	9	5	0	1	404	406	2	1	7	1	908	889	3	1	14	1	88	107	6	5	22	1	0	22	-1
76	5	11	0	234	194	5	6	0	1	105	102	3	2	7	1	816	838	2	2	14	1	357	370	3	6	22	1	130	150	13
77	7	11	0	2201	2127	18	7	0	1	320	336	3	3	7	1	306	296	1	3	14	1	245	268	3	7	22	1	187	210	10
78	9	11	0	841	782	11	8	0	1	30	80	-30	4	7	1	291	309	2	4	14	1	391	402	3	8	22	1	121	105	-15
79	11	11	0	882	825	8	9	0	1	219	239	9	5	7	1	246	241	3	5	14	1	208	222	5	0	23	1	76	99	-56
80	13	11	0	490	437	15	10	0	1	104	128	-28	6	7	1	496	507	6	6	14	1	317	331	5	1	23	1	133	155	-14
81	0	12	0	3273	3160	19	11	0	1	6	22	-5	7	7	1	159	168	6	7	14	1	191	202	7	2	23	1	242	238	9
82	2	12	0	596	571	4	12	0	1	331	323	14	8	7	1	294	305	3	8	14	1	278	268	6	3	23	1	63	42	-22
83	4	12	0	1471	1396	12	13	0	1	304	302	15	9	7	1	251	243	5	9	14	1	119	107	-14	4	23	1	166	152	8
84	6	12	0	721	670	7	0	1	1	356	390	2	10	7	1	61	41	-24	10	14	1	122	126	12	5	23	1	0	29	-1

85	8	12	0	929	881	8	1	1	1	429	447	2	11	7	1	487	482	11	11	14	1	78	35	-24	6	23	1	146	188	13
86	10	12	0	1622	1519	19	2	1	1	101	110	2	12	7	1	414	430	13	12	14	1	0	7	-1	7	23	1	50	68	-49
87	12	12	0	219	218	21	3	1	1	261	276	1	13	7	1	295	291	17	0	15	1	218	245	4	8	23	1	92	110	-33
88	1	13	0	25	20	-24	4	1	1	156	163	2	1	8	1	611	632	2	1	15	1	533	535	3	1	24	1	128	137	-31
89	3	13	0	171	169	6	5	1	1	114	114	2	2	8	1	107	110	2	2	15	1	315	336	3	2	24	1	57	5	-56
90	5	13	0	728	711	10	6	1	1	35	2	-6	3	8	1	534	556	2	3	15	1	194	195	4	3	24	1	135	140	13
91	7	13	0	650	630	7	7	1	1	38	50	-20	4	8	1	153	149	3	4	15	1	68	52	-11	4	24	1	43	18	-42
92	9	13	0	383	386	6	8	1	1	74	85	-20	5	8	1	579	593	4	5	15	1	109	101	8	5	24	1	104	125	-15
93	11	13	0	71	94	-38	9	1	1	39	4	-39	6	8	1	218	220	5	6	15	1	28	24	-28	6	24	1	24	23	-24
94	0	14	0	709	678	7	10	1	1	0	28	-1	7	8	1	360	366	3	7	15	1	174	159	13	7	24	1	84	112	-25
95	2	14	0	448	421	4	11	1	1	51	0	-51	8	8	1	78	89	-11	8	15	1	161	163	11	0	25	1	93	103	-39
96	4	14	0	186	176	9	12	1	1	81	11	-26	9	8	1	240	226	8	9	15	1	176	168	9	1	25	1	101	126	-26
97	6	14	0	409	370	8	13	1	1	80	36	-32	10	8	1	221	230	7	10	15	1	83	62	-21	2	25	1	59	46	-58

Table 4a: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in air

	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
00	3	25	1	124	141	-15	11	5	2	130	105	-20	10	12	2	455	485	5	1	21	2	128	127	-14	11	3	3	77	20	-29
01	4	25	1	80	90	-25	12	5	2	74	94	-54	11	12	2	495	489	8	2	21	2	48	20	-48	12	3	3	177	178	-46
02	5	25	1	65	56	-46	13	5	2	0	5	-1	12	12	2	777	808	8	3	21	2	84	69	-15	13	3	3	0	40	-1
03	6	25	1	0	14	-1	0	6	2	323	348	2	1	13	2	98	108	7	4	21	2	123	114	12	1	4	3	42	25	-7
04	1	26	1	78	16	-48	1	6	2	112	98	2	2	13	2	491	492	3	5	21	2	41	47	-40	2	4	3	140	144	3
05	2	26	1	114	156	-21	2	6	2	338	372	1	3	13	2	381	410	3	6	21	2	314	302	12	3	4	3	189	178	2
06	3	26	1	118	147	-18	3	6	2	31	9	-8	4	13	2	695	690	4	7	21	2	224	250	14	4	4	3	42	14	-10
07	4	26	1	199	200	-33	4	6	2	301	329	2	5	13	2	227	244	8	8	21	2	314	314	14	5	4	3	39	5	-12
08	5	26	1	109	85	-44	5	6	2	306	304	2	6	13	2	448	452	4	0	22	2	443	468	10	6	4	3	76	64	-8
09	0	27	1	326	326	16	6	6	2	462	486	3	7	13	2	143	154	9	1	22	2	218	205	12	7	4	3	15	19	-15
10	1	27	1	198	205	15	7	6	2	345	353	4	8	13	2	110	114	-13	2	22	2	601	635	5	8	4	3	66	15	-17
11	2	27	1	50	89	-49	8	6	2	59	59	-15	9	13	2	0	36	-1	3	22	2	90	58	-15	9	4	3	157	164	7
12	3	27	1	106	109	-25	9	6	2	128	129	10	10	13	2	100	115	-14	4	22	2	573	591	5	10	4	3	73	63	-33
13	4	27	1	202	226	-25	10	6	2	168	151	13	11	13	2	124	108	-32	5	22	2	66	52	-28	11	4	3	183	171	-20
14	0	0	2	1220	1322	10	11	6	2	81	34	-35	12	13	2	180	197	13	6	22	2	536	529	23	12	4	3	93	34	-49
15	1	0	2	1813	1741	11	12	6	2	135	171	-24	0	14	2	289	308	4	7	22	2	113	122	-23	13	4	3	95	91	-48
16	2	0	2	2649	2852	16	13	6	2	0	3	-1	1	14	2	66	59	-14	8	22	2	363	398	8	0	5	3	2962	2853	14
17	3	0	2	183	170	5	1	7	2	52	49	4	2	14	2	335	371	3	1	23	2	673	682	26	1	5	3	63	58	6
18	4	0	2	2081	2187	9	2	7	2	348	327	1	3	14	2	91	88	8	2	23	2	109	113	-17	2	5	3	784	761	3
19	5	0	2	290	277	2	3	7	2	280	288	2	4	14	2	429	454	3	3	23	2	697	720	11	3	5	3	44	46	-7
20	6	0	2	1926	2002	13	4	7	2	238	220	3	5	14	2	65	52	-14	4	23	2	368	349	6	4	5	3	1280	1213	6
21	7	0	2	431	440	4	5	7	2	0	27	-1	6	14	2	296	316	7	5	23	2	971	998	7	5	5	3	42	14	-12
22	8	0	2	1231	1266	15	6	7	2	51	45	-16	7	14	2	27	46	-27	6	23	2	624	582	14	6	5	3	793	748	4
23	9	0	2	496	461	10	7	7	2	62	79	-13	8	14	2	167	198	8	7	23	2	346	375	8	7	5	3	61	5	-14

27	10	0	2	588	593	10	8	7	2	68	78	-15	9	14	2	0	20	-1	0	24	2	82	100	-44	8	5	3	1005	973	7	
28																															
29	11	0	2	1037	1005	14	9	7	2	69	47	-24	10	14	2	147	151	14	1	24	2	557	541	8	9	5	3	47	39	-46	
30	12	0	2	1245	1273	16	10	7	2	259	224	12	11	14	2	166	167	-19	2	24	2	401	414	18	10	5	3	1252	1192	9	
31	13	0	2	430	452	13	11	7	2	194	180	-20	12	14	2	259	267	13	3	24	2	247	243	9	11	5	3	101	25	-35	
32	1	1	2	868	929	3	12	7	2	238	248	17	1	15	2	129	127	6	4	24	2	127	133	-16	12	5	3	107	44	-31	
33	2	1	2	644	553	2	13	7	2	23	66	-22	2	15	2	294	291	4	5	24	2	107	121	-19	13	5	3	0	9	-1	
34	3	1	2	1089	1129	3	0	8	2	523	536	2	3	15	2	397	426	3	6	24	2	239	246	11	1	6	3	2333	2223	8	
35	4	1	2	608	599	2	1	8	2	885	846	2	4	15	2	399	393	3	1	25	2	146	169	15	2	6	3	84	98	4	
36	5	1	2	1385	1464	4	2	8	2	188	206	2	5	15	2	0	36	-1	2	25	2	123	127	-21	3	6	3	1921	1859	7	
37	6	1	2	1182	1140	5	3	8	2	358	355	2	6	15	2	342	340	7	3	25	2	299	317	13	4	6	3	77	59	8	
38	7	1	2	261	270	3	4	8	2	191	195	3	7	15	2	268	287	7	4	25	2	206	191	13	5	6	3	111	88	6	
39	8	1	2	550	545	4	5	8	2	137	140	6	8	15	2	176	186	6	5	25	2	124	117	-30	6	6	3	57	56	-12	
40	9	1	2	692	724	7	6	8	2	191	215	5	9	15	2	44	64	-44	0	26	2	98	51	-33	7	6	3	2411	2320	14	
41	10	1	2	100	122	-30	7	8	2	196	191	5	10	15	2	63	61	-50	1	26	2	75	75	-35	8	6	3	51	46	-33	
42	11	1	2	394	414	8	8	8	2	59	19	-26	11	15	2	113	133	-16	3	26	2	0	14	-1	9	6	3	796	754	6	
43	12	1	2	54	90	-54	9	8	2	75	70	-19	0	16	2	504	528	6	3	26	2	84	37	-57	10	6	3	63	54	-31	
44	13	1	2	392	393	12	10	8	2	71	71	-25	1	16	2	461	460	3	4	26	2	86	46	-85	11	6	3	970	904	13	
45	14	1	2	116	21	-26	11	8	2	82	102	-81	2	16	2	102	108	-11	1	27	2	204	220	17	12	6	3	92	16	-56	
46	0	2	2	350	395	3	12	8	2	17	34	-17	3	16	2	258	262	4	1	0	3	504	475	2	0	7	3	1464	1392	7	
47	1	2	2	44	10	-6	13	8	2	233	262	16	4	16	2	351	379	3	2	0	3	82	79	7	1	7	3	89	89	4	
48	2	2	2	400	445	2	1	9	2	345	379	1	5	16	2	37	2	-36	3	0	3	347	324	2	2	7	3	228	212	2	
49	3	2	2	121	107	2	2	9	2	409	403	2	6	16	2	273	291	5	4	0	3	50	38	-10	3	7	3	39	12	-15	
50	4	2	2	562	593	1	3	9	2	39	54	-11	7	16	2	98	122	-11	5	0	3	205	190	4	4	7	3	567	535	3	
51	5	2	2	103	84	3	4	9	2	555	543	3	8	16	2	111	125	11	6	0	3	59	66	-13	5	7	3	47	1	-12	
52	6	2	2	301	327	2	5	9	2	483	509	4	9	16	2	69	106	-27	7	0	3	246	222	5	6	7	3	111	96	10	
53	7	2	2	66	32	-9	6	9	2	407	406	3	10	16	2	209	209	9	8	0	3	72	17	-16	7	7	3	89	30	-22	
54	8	2	2	201	203	5	7	9	2	57	42	-19	11	16	2	101	71	-20	9	0	3	163	154	-18	8	7	3	235	223	7	
55	9	2	2	75	23	-20	8	9	2	194	182	7	1	17	2	169	182	5	10	0	3	87	33	-30	9	7	3	26	6	-25	
56	10	2	2	145	149	-16	9	9	2	160	160	13	2	17	2	112	115	9	11	0	3	434	411	11	10	7	3	624	611	7	
57	11	2	2	87	116	-32	10	9	2	31	3	-30	3	17	2	71	86	-14	12	0	3	0	9	-1	11	7	3	96	60	-22	
58	12	2	2	213	227	13	11	9	2	99	129	-28	4	17	2	143	147	9	13	0	3	142	193	-28	12	7	3	241	259	15	
59	13	2	2	74	63	-39	12	9	2	0	19	-1	5	17	2	203	223	7	0	1	3	277	269	3	1	8	3	593	575	2	
60	14	2	2	135	129	-31	13	9	2	72	98	-71	6	17	2	67	28	-19	1	1	3	29	14	-10	2	8	3	104	104	4	
61	1	3	2	43	59	-6	0	10	2	305	307	2	7	17	2	99	115	-13	2	1	3	353	345	1	3	8	3	482	461	2	
62	2	3	2	449	403	1	1	10	2	185	172	2	8	17	2	43	9	-43	3	1	3	49	5	-7	4	8	3	45	8	-14	
63	3	3	2	319	337	1	2	10	2	385	406	2	9	17	2	101	112	-14	4	1	3	139	133	2	5	8	3	229	210	3	
64	4	3	2	136	142	2	3	10	2	49	26	-9	10	17	2	127	128	-14	5	1	3	44	2	-11	6	8	3	50	26	-21	
65	5	3	2	380	415	1	4	10	2	259	279	3	11	17	2	32	30	-32	6	1	3	161	158	5	7	8	3	436	414	5	
66	6	3	2	777	752	3	5	10	2	43	26	-22	0	18	2	160	164	8	7	1	3	46	3	-15	8	8	3	58	4	-20	
67	7	3	2	252	262	3	6	10	2	306	323	4	1	18	2	55	0	-25	8	1	3	60	6	-13	9	8	3	452	436	10	
68	8	3	2	640	619	4	7	10	2	140	148	10	2	18	2	216	215	7	9	1	3	60	12	-36	10	8	3	69	25	-38	

69	9	3	2	270	286	5	8	10	2	202	216	10	3	18	2	38	21	-38	10	1	3	78	23	-78	11	8	3	61	29	-52
70	10	3	2	67	94	-38	9	10	2	27	49	-26	4	18	2	144	166	8	11	1	3	84	11	-22	12	8	3	93	40	-63
71	11	3	2	105	136	-21	10	10	2	169	201	14	5	18	2	113	130	11	12	1	3	0	43	-1	0	9	3	722	712	4
72	12	3	2	219	223	11	11	10	2	33	3	-33	6	18	2	242	259	11	13	1	3	0	11	-1	1	9	3	78	93	4
73	13	3	2	74	62	-73	12	10	2	94	145	-52	7	18	2	202	190	18	1	2	3	670	633	2	2	9	3	600	584	3
74	0	4	2	132	158	6	13	10	2	17	13	-17	8	18	2	54	48	-54	2	2	3	74	71	4	3	9	3	51	7	-11
75	2	4	2	349	340	1	1	11	2	1436	1514	5	9	18	2	121	112	-16	3	2	3	360	345	2	4	9	3	60	40	-11
76	3	4	2	693	677	2	2	11	2	110	91	5	10	18	2	144	131	-21	4	2	3	65	70	-9	5	9	3	49	13	-16
77	4	4	2	915	945	3	3	11	2	1201	1246	6	1	19	2	62	43	-22	5	2	3	743	700	3	6	9	3	134	131	7
78	5	4	2	780	751	3	4	11	2	861	853	5	2	19	2	87	76	-12	6	2	3	83	84	6	7	9	3	56	20	-21
79	6	4	2	105	107	5	5	11	2	1738	1833	10	3	19	2	42	16	-41	7	2	3	205	204	6	8	9	3	260	248	6
80	7	4	2	92	94	7	6	11	2	875	854	9	4	19	2	35	43	-34	8	2	3	44	23	-33	9	9	3	50	21	-50
81	8	4	2	119	106	7	7	11	2	753	802	6	5	19	2	54	22	-38	9	2	3	432	414	5	10	9	3	222	219	11
82	9	4	2	433	435	5	8	11	2	146	148	8	6	19	2	160	156	15	10	2	3	111	36	-29	11	9	3	112	38	-32
83	10	4	2	427	450	9	9	11	2	793	836	6	7	19	2	156	155	-21	11	2	3	34	20	-34	12	9	3	269	272	15
84	11	4	2	467	457	7	10	11	2	61	19	-28	8	19	2	291	279	12	12	2	3	59	25	-59	1	10	3	708	688	3
85	12	4	2	68	12	-41	11	11	2	602	639	7	9	19	2	137	129	-19	13	2	3	77	70	-38	2	10	3	44	42	-16
86	13	4	2	227	230	13	12	11	2	304	295	14	10	19	2	138	190	-23	0	3	3	1357	1302	6	3	10	3	161	175	4
87	1	5	2	170	153	2	0	12	2	193	188	14	0	20	2	44	33	-43	1	3	3	47	57	-6	4	10	3	83	54	-15
88	2	5	2	541	503	1	1	12	2	1778	1734	8	1	20	2	133	135	11	2	3	3	316	294	2	5	10	3	736	714	4
89	3	5	2	237	245	1	2	12	2	1681	1744	8	2	20	2	110	108	11	3	3	3	63	53	6	6	10	3	65	67	-13
90	4	5	2	211	201	2	3	12	2	168	155	4	3	20	2	304	302	5	4	3	3	289	279	2	7	10	3	61	20	-16
91	5	5	2	57	72	-6	4	12	2	1280	1343	7	4	20	2	158	179	9	5	3	3	47	3	-14	8	10	3	45	13	-34
92	6	5	2	276	271	3	5	12	2	342	332	10	5	20	2	274	276	7	6	3	3	462	441	2	9	10	3	471	435	6
93	7	5	2	189	206	6	6	12	2	865	911	6	6	20	2	95	86	-22	7	3	3	45	30	-15	10	10	3	69	34	-69
94	8	5	2	424	411	4	7	12	2	62	33	-21	7	20	2	61	23	-36	8	3	3	56	27	-24	11	10	3	84	59	-30
95	9	5	2	180	195	8	8	12	2	700	753	5	8	20	2	81	62	-26	9	3	3	66	27	-15	12	10	3	56	20	-56
96	10	5	2	307	287	7	9	12	2	124	124	-14	9	20	2	199	210	11	10	3	3	407	404	7	0	11	3	426	425	3

Table 4a: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in air

	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
00	1	11	3	52	21	-11	3	19	3	35	11	-34	9	3	4	140	140	12	5	11	4	1488	1466	8	1	21	4	78	25	-24
01	2	11	3	105	107	7	4	19	3	107	102	-15	10	3	4	45	13	-44	6	11	4	766	779	5	2	21	4	128	139	-25
02	3	11	3	60	17	-11	5	19	3	41	1	-40	11	3	4	92	79	-37	7	11	4	485	485	4	3	21	4	247	251	10
03	4	11	3	174	167	4	6	19	3	310	301	7	12	3	4	66	2	-65	8	11	4	288	311	6	4	21	4	166	200	13
04	5	11	3	32	4	-32	7	19	3	54	16	-54	0	4	4	853	880	8	9	11	4	844	834	5	5	21	4	50	47	-49
05	6	11	3	65	19	-15	8	19	3	265	271	9	1	4	4	533	553	3	10	11	4	83	18	-52	6	21	4	163	174	14
06	7	11	3	45	3	-26	9	19	3	69	4	-40	2	4	4	65	17	-8	11	11	4	590	574	16	0	22	4	408	403	13
07	8	11	3	132	114	11	1	20	3	185	188	8	3	4	4	307	313	4	0	12	4	397	380	4	1	22	4	118	125	-15
08	9	11	3	73	11	-34	2	20	3	0	27	-1	4	4	4	290	293	3	1	12	4	821	829	4	2	22	4	547	520	8

11	10	11	3	0	48	-1	3	20	3	194	179	8	5	4	4	54	30	-13	2	12	4	1375	1352	6	3	22	4	27	24	-27
12	11	11	3	31	26	-30	4	20	3	59	1	-34	6	4	4	342	343	4	3	12	4	253	240	6	4	22	4	538	532	33
13	12	11	3	66	49	-65	5	20	3	70	18	-27	7	4	4	201	199	6	4	12	4	763	742	4	5	22	4	72	8	-42
14	1	12	3	309	297	3	6	20	3	68	12	-31	8	4	4	184	163	10	5	12	4	147	145	11	1	23	4	688	663	9
15	2	12	3	0	38	-1	7	20	3	202	188	11	9	4	4	54	64	-33	6	12	4	939	932	5	2	23	4	55	10	-55
16	3	12	3	257	250	3	8	20	3	56	4	-56	10	4	4	205	225	13	7	12	4	218	218	10	3	23	4	524	510	7
17	4	12	3	52	41	-15	0	21	3	92	96	-20	11	4	4	78	56	-77	8	12	4	726	722	5	4	23	4	324	337	12
18	5	12	3	165	162	7	1	21	3	31	53	-30	12	4	4	113	24	-40	9	12	4	276	278	11	0	24	4	273	266	23
19	6	12	3	68	64	-13	2	21	3	571	552	7	1	5	4	89	93	6	10	12	4	226	208	14	1	24	4	589	573	11
20	7	12	3	186	168	8	3	21	3	31	15	-30	2	5	4	194	206	3	1	13	4	64	74	-13	2	24	4	455	448	11
21	8	12	3	38	9	-37	4	21	3	138	121	13	3	5	4	124	139	5	2	13	4	63	57	-12	3	24	4	125	132	-37
22	9	12	3	137	128	13	5	21	3	30	9	-29	4	5	4	183	201	4	3	13	4	122	122	11	1	0	5	177	186	6
23	10	12	3	52	48	-52	6	21	3	137	141	-22	5	5	4	65	58	-10	4	13	4	278	293	6	2	0	5	36	4	-36
24	11	12	3	339	341	10	7	21	3	15	14	-15	6	5	4	63	48	-15	5	13	4	275	297	5	3	0	5	219	239	5
25	12	12	3	0	10	-1	1	22	3	271	273	8	7	5	4	64	24	-13	6	13	4	428	425	4	4	0	5	63	22	-16
26	0	13	3	162	159	6	2	22	3	0	11	-1	8	5	4	57	1	-30	7	13	4	317	332	5	5	0	5	294	318	8
27	1	13	3	53	21	-13	3	22	3	82	101	-22	9	5	4	66	54	-25	8	13	4	345	347	7	6	0	5	69	63	-21
28	2	13	3	303	297	3	4	22	3	0	15	-1	10	5	4	154	169	12	9	13	4	104	113	-16	7	0	5	122	134	11
29	3	13	3	51	30	-14	5	22	3	367	353	7	11	5	4	129	149	-27	10	13	4	146	139	-25	8	0	5	69	13	-30
30	4	13	3	129	128	8	6	22	3	98	32	-22	12	5	4	219	238	18	0	14	4	280	266	8	9	0	5	96	122	-21
31	5	13	3	47	1	-21	7	22	3	83	28	-30	0	6	4	393	383	4	1	14	4	81	105	-10	10	0	5	80	124	-53
32	6	13	3	121	107	11	0	23	3	331	299	13	1	6	4	54	44	-13	2	14	4	326	317	4	0	1	5	156	151	8
33	7	13	3	49	32	-29	1	23	3	40	22	-39	2	6	4	242	239	3	3	14	4	93	97	-10	1	1	5	207	201	4
34	8	13	3	54	21	-26	2	23	3	61	83	-37	3	6	4	28	7	-27	4	14	4	302	306	5	2	1	5	60	64	-11
35	9	13	3	35	30	-34	3	23	3	0	24	-1	4	6	4	154	142	7	5	14	4	120	114	9	3	1	5	137	136	7
36	10	13	3	73	50	-24	4	23	3	232	213	13	5	6	4	131	146	5	6	14	4	207	212	7	4	1	5	113	112	6
37	11	13	3	15	21	-14	5	23	3	95	9	-25	6	6	4	363	365	3	7	14	4	43	50	-43	5	1	5	96	92	-10
38	1	14	3	192	183	4	6	23	3	119	53	-21	7	6	4	274	277	4	8	14	4	242	229	8	6	1	5	49	3	-21
39	2	14	3	11	16	-10	1	24	3	135	144	-19	8	6	4	88	68	-17	9	14	4	61	8	-60	7	1	5	64	65	-16
40	3	14	3	345	344	3	2	24	3	0	10	-1	9	6	4	83	81	-23	10	14	4	133	147	-16	8	1	5	57	15	-21
41	4	14	3	59	35	-15	3	24	3	73	111	-41	10	6	4	176	192	11	1	15	4	204	213	5	9	1	5	58	26	-23
42	5	14	3	398	385	4	4	24	3	46	7	-46	11	6	4	0	25	-1	2	15	4	29	20	-29	10	1	5	59	38	-58
43	6	14	3	70	52	-16	5	24	3	121	97	-21	12	6	4	104	84	-49	3	15	4	213	216	5	11	1	5	0	2	-1
44	7	14	3	355	345	5	0	25	3	150	111	-31	1	7	4	163	173	4	4	15	4	145	153	11	1	2	5	60	56	-11
45	8	14	3	71	28	-19	1	25	3	55	25	-55	2	7	4	154	154	5	5	15	4	56	67	-21	2	2	5	260	255	3
46	9	14	3	227	236	7	2	25	3	168	177	13	3	7	4	61	69	-11	6	15	4	298	308	6	3	2	5	353	365	3
47	10	14	3	34	10	-34	3	25	3	41	16	-40	4	7	4	73	63	-10	7	15	4	392	408	8	4	2	5	369	359	4
48	11	14	3	0	37	-1	4	25	3	73	70	-72	5	7	4	75	16	-9	8	15	4	316	315	9	5	2	5	64	63	-13
49	0	15	3	613	593	6	0	0	4	465	431	7	6	7	4	184	181	5	9	15	4	38	10	-38	6	2	5	380	367	6
50	1	15	3	44	19	-29	1	0	4	1707	1725	10	7	7	4	220	237	6	10	15	4	0	75	-1	7	2	5	221	227	6
51	2	15	3	299	290	4	2	0	4	2330	2321	14	8	7	4	310	329	6	0	16	4	308	308	7	8	2	5	238	230	6
52	3	15	3	72	74	-15	3	0	4	82	44	-11	9	7	4	119	138	-22	1	16	4	50	36	-34	9	2	5	81	17	-22

53	4	15	3	158	149	7	4	0	4	1690	1664	10	10	7	4	206	219	10	2	16	4	133	127	9	10	2	5	95	120	-25	
54	5	15	3	40	13	-40	5	0	4	395	401	4	11	7	4	89	117	-38	3	16	4	297	295	7	11	2	5	113	131	-43	
55	6	15	3	183	175	8	6	0	4	1244	1193	8	12	7	4	87	51	-87	4	16	4	419	421	5	0	3	5	42	28	-41	
56																															
57	7	15	3	69	48	-20	7	0	4	135	128	10	0	8	4	201	187	4	5	16	4	311	328	5	1	3	5	515	501	3	
58	8	15	3	117	128	11	8	0	4	1106	1084	8	1	8	4	71	54	-9	6	16	4	101	74	-21	2	3	5	326	341	3	
59	9	15	3	58	43	-32	9	0	4	88	88	-16	2	8	4	83	82	-8	7	16	4	41	8	-41	3	3	5	249	237	3	
60	10	15	3	247	251	8	10	0	4	686	650	11	3	8	4	408	411	3	8	16	4	128	113	-15	4	3	5	184	196	6	
61	11	15	3	38	12	-37	11	0	4	473	478	12	4	8	4	343	350	3	9	16	4	247	242	9	5	3	5	64	30	-14	
62	1	16	3	683	658	7	12	0	4	1046	1017	14	5	8	4	412	421	3	1	17	4	91	84	-13	6	3	5	125	134	9	
63	2	16	3	69	61	-14	1	1	4	894	896	4	6	8	4	85	100	-12	2	17	4	161	162	15	7	3	5	158	161	8	
64	3	16	3	417	397	4	2	1	4	263	273	3	7	8	4	42	11	-41	3	17	4	206	211	8	8	3	5	175	171	15	
65	4	16	3	56	12	-24	3	1	4	438	414	2	8	8	4	32	12	-32	4	17	4	71	41	-18	9	3	5	189	186	9	
66	5	16	3	362	354	5	4	1	4	695	723	3	9	8	4	251	268	7	5	17	4	117	116	11	10	3	5	56	33	-55	
67	6	16	3	64	17	-19	5	1	4	1238	1227	5	10	8	4	279	295	8	6	17	4	140	157	10	11	3	5	223	233	23	
68	7	16	3	507	506	5	6	1	4	599	609	3	11	8	4	330	331	16	7	17	4	68	9	-25	1	4	5	64	29	-12	
69	8	16	3	80	3	-18	7	1	4	336	327	3	1	9	4	188	192	4	8	17	4	153	169	11	2	4	5	103	100	8	
70	9	16	3	326	306	8	8	1	4	118	121	8	2	9	4	139	142	5	9	17	4	205	221	12	3	4	5	81	78	-10	
71	10	16	3	47	13	-47	9	1	4	481	476	8	3	9	4	174	170	5	0	18	4	243	245	9	4	4	5	44	45	-28	
72	0	17	3	2123	2002	17	10	1	4	35	36	-35	4	9	4	116	127	7	1	18	4	35	2	-34	5	4	5	72	69	-10	
73	1	17	3	24	14	-23	11	1	4	291	285	11	5	9	4	392	393	3	2	18	4	141	142	12	6	4	5	46	40	-22	
74	2	17	3	647	619	4	12	1	4	224	240	13	6	9	4	468	467	4	3	18	4	41	22	-41	7	4	5	66	10	-19	
75	3	17	3	98	43	-23	0	2	4	422	425	3	7	9	4	177	191	12	4	18	4	89	78	-16	8	4	5	63	5	-28	
76	4	17	3	1006	968	6	1	2	4	33	28	-22	8	9	4	361	367	7	5	18	4	128	124	-16	9	4	5	56	74	-34	
77	5	17	3	48	23	-47	2	2	4	317	318	2	9	9	4	308	322	7	6	18	4	244	259	7	10	4	5	86	116	-21	
78	6	17	3	686	654	5	3	2	4	113	117	5	10	9	4	77	53	-23	7	18	4	159	182	11	11	4	5	0	74	-1	
79	7	17	3	54	1	-31	4	2	4	252	247	3	11	9	4	163	161	-23	8	18	4	60	48	-45	0	5	5	522	569	4	
80	8	17	3	935	901	6	5	2	4	120	113	6	0	10	4	107	109	8	1	19	4	47	16	-47	1	5	5	758	726	3	
81	9	17	3	63	28	-33	6	2	4	191	197	4	1	10	4	110	127	5	2	19	4	113	119	-17	2	5	5	1084	1135	4	
82	10	17	3	1093	1050	8	7	2	4	55	44	-15	2	10	4	303	300	3	3	19	4	73	72	-20	3	5	5	187	174	6	
83	1	18	3	720	677	5	8	2	4	267	271	4	3	10	4	48	25	-14	4	19	4	96	81	-15	4	5	5	813	869	4	
84	2	18	3	19	29	-19	9	2	4	77	22	-36	4	10	4	344	346	5	5	19	4	55	23	-39	5	5	5	103	96	8	
85	3	18	3	784	745	5	10	2	4	138	129	-16	5	10	4	47	30	-23	6	19	4	0	33	-1	6	5	5	808	849	4	
86	4	18	3	65	41	-22	11	2	4	119	88	-29	6	10	4	274	274	5	7	19	4	39	79	-38	7	5	5	205	193	7	
87	5	18	3	349	342	5	12	2	4	195	163	-28	7	10	4	11	41	-10	8	19	4	66	112	-65	8	5	5	566	607	5	
88	6	18	3	54	45	-32	1	3	4	253	262	3	8	10	4	117	91	-14	0	20	4	246	256	10	9	5	5	168	148	13	
89	7	18	3	1242	1165	8	2	3	4	297	299	3	9	10	4	69	47	-33	1	20	4	298	307	7	10	5	5	373	396	8	
90	8	18	3	42	37	-41	3	3	4	144	160	4	10	10	4	165	181	-25	2	20	4	176	186	13	11	5	5	484	463	26	
91	9	18	3	165	162	11	4	3	4	417	428	2	11	10	4	76	13	-39	3	20	4	152	168	14	1	6	5	1021	1073	4	
92	10	18	3	0	28	-1	5	3	4	430	440	2	1	11	4	1106	1086	4	4	20	4	60	41	-44	2	6	5	110	90	7	
93	0	19	3	150	118	-15	6	3	4	333	344	3	2	11	4	215	222	5	5	20	4	31	16	-30	3	6	5	1072	1134	5	
94	1	19	3	44	60	-44	7	3	4	105	104	8	3	11	4	1078	1053	6	6	20	4	43	52	-42	4	6	5	684	651	3	

95
96
97
98
99
00
01
02
03
04
05
06
07
08
09
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36

2 19 3 568 546 5 8 3 4 161 151 9 4 11 4 397 416 3 7 20 4 67 83 -42 5 6 5 1445 1506 6

Table 4a: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in air Page 4

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s						
6	6	5	1035	978	5	7	14	5	79	79	-22	2	3	6	52	15	-19	2	12	6	102	112	-11	4	5	7	603	562	4
7	6	5	497	534	5	8	14	5	172	167	11	3	3	6	132	120	9	3	12	6	73	81	-19	5	5	7	62	37	-22
8	6	5	506	480	6	9	14	5	68	66	-67	4	3	6	56	53	-24	4	12	6	542	536	5	6	5	7	662	629	4
9	6	5	775	799	7	0	15	5	119	147	-29	5	3	6	261	247	6	5	12	6	59	8	-24	7	5	7	134	135	-22
10	6	5	38	71	-38	1	15	5	378	369	7	6	3	6	81	79	-14	6	12	6	701	673	6	1	6	7	872	831	4
11	6	5	575	621	8	2	15	5	144	154	9	7	3	6	551	531	4	7	12	6	0	36	-1	2	6	7	74	60	-16
0	7	5	60	52	-22	3	15	5	157	171	10	8	3	6	72	63	-22	1	13	6	170	171	9	3	6	7	666	616	4
1	7	5	575	555	3	4	15	5	88	96	-16	9	3	6	153	158	13	2	13	6	64	12	-27	4	6	7	363	378	5
2	7	5	423	441	3	5	15	5	63	57	-27	10	3	6	0	9	-1	3	13	6	366	363	6	5	6	7	1211	1157	5
3	7	5	259	254	4	6	15	5	57	5	-38	0	4	6	168	163	12	4	13	6	59	82	-37	6	6	7	612	615	4
4	7	5	137	146	7	7	15	5	167	171	10	1	4	6	78	87	-9	5	13	6	426	420	6	7	6	7	392	335	14
5	7	5	164	158	7	8	15	5	76	54	-30	2	4	6	439	431	3	6	13	6	44	74	-43	0	7	7	149	160	11
6	7	5	280	292	7	1	16	5	366	400	8	3	4	6	55	22	-17	7	13	6	141	163	14	1	7	7	332	342	4
7	7	5	128	123	10	2	16	5	165	168	8	4	4	6	200	204	6	0	14	6	295	283	12	2	7	7	387	387	7
8	7	5	200	209	20	3	16	5	386	408	7	5	4	6	71	11	-16	1	14	6	77	32	-27	3	7	7	130	142	10
9	7	5	228	206	14	4	16	5	83	12	-16	6	4	6	414	402	4	2	14	6	232	229	7	4	7	7	166	148	8
10	7	5	40	42	-39	5	16	5	356	385	6	7	4	6	68	38	-20	3	14	6	42	54	-42	5	7	7	77	66	-17
1	8	5	254	268	6	6	16	5	137	135	12	8	4	6	322	293	7	4	14	6	131	142	11	6	7	7	219	225	7
2	8	5	63	43	-13	7	16	5	281	292	10	9	4	6	89	1	-27	5	14	6	41	25	-41	7	7	7	122	35	-45
3	8	5	330	364	3	8	16	5	111	38	-28	1	5	6	110	112	7	6	14	6	174	189	11	1	8	7	284	272	6
4	8	5	95	91	10	0	17	5	470	505	7	2	5	6	53	19	-18	1	15	6	254	233	9	2	8	7	43	60	-42
5	8	5	366	392	4	1	17	5	583	552	5	3	5	6	120	124	8	2	15	6	52	15	-51	3	8	7	173	170	10
6	8	5	65	44	-16	2	17	5	907	960	7	4	5	6	62	35	-18	3	15	6	100	109	-14	4	8	7	67	16	-21
7	8	5	207	214	7	3	17	5	112	101	-24	5	5	6	80	52	-16	4	15	6	29	64	-28	5	8	7	238	214	6
8	8	5	61	23	-34	4	17	5	795	830	6	6	5	6	88	2	-12	5	15	6	379	380	6	6	8	7	83	100	-20
9	8	5	96	101	-25	5	17	5	92	40	-20	7	5	6	250	234	9	6	15	6	0	77	-1	0	9	7	289	299	8
10	8	5	110	133	-17	6	17	5	751	785	9	8	5	6	34	20	-34	0	16	6	171	145	-24	1	9	7	251	250	10
0	9	5	208	202	9	7	17	5	149	154	-23	9	5	6	239	237	23	1	16	6	82	79	-82	2	9	7	147	155	9
1	9	5	475	465	3	1	18	5	366	408	6	0	6	6	165	167	10	2	16	6	441	432	9	3	9	7	98	112	-21
2	9	5	86	106	-9	2	18	5	89	53	-22	1	6	6	85	95	-10	3	16	6	0	15	-1	4	9	7	79	35	-18
3	9	5	211	208	6	3	18	5	352	369	15	2	6	6	189	195	6	4	16	6	70	93	-26	5	9	7	62	19	-25
4	9	5	102	84	-15	4	18	5	476	452	6	3	6	6	38	41	-38	5	16	6	43	26	-42	6	9	7	98	71	-58
5	9	5	68	38	-12	5	18	5	666	677	7	4	6	6	272	268	5	1	17	6	72	52	-39	1	10	7	156	152	7
6	9	5	83	74	-13	6	18	5	637	601	6	5	6	6	63	39	-16	2	17	6	46	41	-46	2	10	7	200	196	7
7	9	5	101	112	-21	0	19	5	245	254	12	6	6	6	68	66	-17	3	17	6	228	219	12	3	10	7	337	315	6
8	9	5	55	51	-34	1	19	5	333	320	6	7	6	6	69	6	-41	4	17	6	45	18	-44	4	10	7	191	202	7

37	9	9	5	163	174	12	2	19	5	57	50	-56	8	6	6	290	286	7	0	18	6	188	153	-22	5	10	7	74	20	-20
38	10	9	5	65	83	-41	3	19	5	168	198	-23	9	6	6	28	2	-28	1	18	6	66	49	-57	6	10	7	39	96	-38
39	1	10	5	160	170	7	4	19	5	275	265	9	1	7	6	143	130	9	2	18	6	125	117	-18	0	11	7	31	7	-30
40	2	10	5	207	205	4	5	19	5	97	79	-22	2	7	6	55	28	-18	3	18	6	68	14	-67	1	11	7	122	130	-13
41	3	10	5	392	425	3	6	19	5	133	135	-48	3	7	6	126	120	8	4	18	6	141	167	-41	2	11	7	120	107	12
42	4	10	5	299	293	4	1	20	5	73	85	-30	4	7	6	62	4	-17	1	19	6	92	10	-91	3	11	7	83	60	-18
43	5	10	5	154	166	6	2	20	5	54	24	-53	5	7	6	136	129	7	1	0	7	170	179	9	4	11	7	71	12	-22
44	6	10	5	306	293	6	3	20	5	144	152	-17	6	7	6	41	9	-41	2	0	7	52	44	-37	5	11	7	0	23	-1
45	7	10	5	263	280	10	4	20	5	113	62	-20	7	7	6	65	5	-28	3	0	7	169	160	9	1	12	7	163	162	10
46	8	10	5	191	193	8	5	20	5	134	173	-23	8	7	6	64	1	-32	4	0	7	93	17	-31	2	12	7	61	10	-27
47	9	10	5	55	64	-55	0	21	5	262	282	11	9	7	6	122	128	-18	5	0	7	90	85	-26	3	12	7	139	122	12
48	10	10	5	144	121	-18	1	21	5	297	292	14	0	8	6	464	453	5	6	0	7	45	68	-45	4	12	7	83	33	-18
49	0	11	5	49	32	-27	2	21	5	106	118	-21	1	8	6	100	113	9	7	0	7	177	170	17	0	13	7	89	112	-27
50	1	11	5	107	107	8	3	21	5	107	134	-42	2	8	6	443	427	3	0	1	7	95	97	-16	1	13	7	62	93	-29
51	2	11	5	129	132	7	1	22	5	71	58	-58	3	8	6	61	12	-17	1	1	7	94	114	-10	2	13	7	69	27	-33
52	3	11	5	112	112	8	2	22	5	200	190	14	4	8	6	72	8	-15	2	1	7	42	40	-42	3	13	7	91	99	-18
53	4	11	5	59	27	-21	0	0	6	2201	2134	18	5	8	6	60	23	-19	3	1	7	100	102	-10	4	13	7	109	52	-49
54	5	11	5	153	134	14	1	0	6	76	69	-16	6	8	6	81	71	-15	4	1	7	86	73	-18	1	14	7	0	11	-1
55	6	11	5	125	121	-21	2	0	6	541	539	4	7	8	6	42	8	-41	5	1	7	96	80	-23	2	14	7	64	93	-64
56	7	11	5	43	59	-43	3	0	6	105	124	-14	8	8	6	123	119	-17	6	1	7	0	25	-1	3	14	7	46	84	-45
57	8	11	5	51	29	-50	4	0	6	1215	1169	10	1	9	6	62	19	-22	7	1	7	0	32	-1	0	0	8	343	392	16
58	9	11	5	59	8	-55	5	0	6	114	54	-15	2	9	6	83	99	-11	1	2	7	99	90	-10	1	0	8	779	744	9
59	1	12	5	147	147	8	6	0	6	681	660	7	3	9	6	455	442	3	2	2	7	174	181	7	2	0	8	889	904	10
60	2	12	5	27	31	-26	7	0	6	57	27	-56	4	9	6	75	52	-14	3	2	7	248	241	5	3	0	8	142	130	-36
61	3	12	5	194	204	9	8	0	6	853	824	8	5	9	6	193	187	6	4	2	7	201	212	7	1	1	8	367	393	8
62	4	12	5	37	2	-37	9	0	6	61	98	-61	6	9	6	42	34	-41	5	2	7	115	113	11	2	1	8	131	123	10
63	5	12	5	225	237	7	1	1	6	677	662	3	7	9	6	314	300	14	6	2	7	139	147	11	3	1	8	257	276	18
64	6	12	5	13	17	-12	2	1	6	31	9	-30	8	9	6	39	40	-38	7	2	7	250	258	8	0	2	8	79	90	-26
65	7	12	5	71	102	-22	3	1	6	615	615	3	0	10	6	325	313	6	0	3	7	135	125	12	1	2	8	31	29	-30
66	8	12	5	51	14	-51	4	1	6	62	62	-17	1	10	6	68	38	-25	1	3	7	279	290	5	2	2	8	95	114	-17
67	9	12	5	156	131	-22	5	1	6	137	127	10	2	10	6	166	161	7	2	3	7	333	335	6	3	2	8	109	9	-33
68	0	13	5	74	107	-46	6	1	6	73	88	-17	3	10	6	80	76	-12	3	3	7	88	100	-13	1	3	8	69	88	-21
69	1	13	5	207	186	7	7	1	6	1023	979	5	4	10	6	206	184	9	4	3	7	69	83	-19	2	3	8	168	153	10
70	2	13	5	69	48	-18	8	1	6	0	42	-1	5	10	6	67	21	-16	5	3	7	73	59	-21	3	3	8	64	8	-63
71	3	13	5	124	129	9	9	1	6	176	186	11	6	10	6	81	92	-21	6	3	7	55	44	-44	0	4	8	207	208	13
72	4	13	5	104	120	-11	0	2	6	216	221	8	7	10	6	67	58	-32	7	3	7	0	67	-1	1	4	8	341	330	5
73	5	13	5	80	46	-16	1	2	6	47	53	-21	8	10	6	227	233	12	1	4	7	113	108	10	2	4	8	78	59	-28
74	6	13	5	0	27	-1	2	2	6	237	232	5	1	11	6	865	848	4	2	4	7	52	15	-28	3	4	8	152	119	-35
75	7	13	5	46	38	-46	3	2	6	93	95	-10	2	11	6	60	56	-17	3	4	7	82	81	-14	1	5	8	36	33	-35
76	8	13	5	34	13	-34	4	2	6	137	130	8	3	11	6	1123	1090	5	4	4	7	46	12	-46	2	5	8	104	99	-17
77	9	13	5	85	25	-26	5	2	6	72	27	-18	4	11	6	76	55	-15	5	4	7	50	37	-39	0	6	8	74	55	-57
78	1	14	5	55	75	-54	6	2	6	239	223	6	5	11	6	165	133	8	6	4	7	78	21	-22	1	6	8	72	33	-39

79	2	14	5	245	236	6	7	2	6	26	62	-25	6	11	6	25	47	-25	7	4	7	48	49	-47	2	6	8	110	153	-50
80	3	14	5	135	153	9	8	2	6	121	131	12	7	11	6	1048	1015	7	0	5	7	308	283	7	1	7	8	0	29	-1
81	4	14	5	327	304	10	9	2	6	91	61	-25	8	11	6	56	16	-56	1	5	7	412	423	4						
82	5	14	5	80	84	-18	10	2	6	151	162	-17	0	12	6	1940	1863	13	2	5	7	885	854	4						
83	6	14	5	276	269	6	1	3	6	158	153	6	1	12	6	101	98	-12	3	5	7	85	96	-13						

84
85
86

Table 4b: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in DAC without fluid (0.0001 GPa) Page 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
87	1	3	0	207	181	4	2	11	1	282	245	7	5	11	2	1512	1690	20	5	16	3	288	287	35	1	12	5	116	127	-62
88	0	4	0	814	856	8	4	11	1	40	79	-40	0	12	2	194	267	51	4	17	3	947	905	13	3	12	5	178	128	30
89	2	4	0	1483	1503	9	3	12	1	308	268	15	1	12	2	1829	1779	24	1	18	3	839	705	41	5	12	5	306	288	33
90	1	5	0	372	313	3	5	12	1	214	243	39	2	12	2	1608	1640	12	3	18	3	801	795	13	0	13	5	50	166	-50
91	3	5	0	727	636	12	0	13	1	147	272	-68	4	12	2	1357	1410	20	5	18	3	325	375	34	1	13	5	168	166	38
92	0	6	0	541	499	9	1	13	1	274	269	16	3	13	2	275	292	16	1	19	3	45	103	-44	3	13	5	138	107	-51
93	2	6	0	559	609	5	1	14	1	99	107	-69	2	14	2	373	332	11	2	19	3	496	487	33	4	13	5	93	102	-92
94	1	7	0	231	228	6	2	15	1	475	454	27	2	17	2	55	175	-55	4	19	3	94	27	-93	1	14	5	48	80	-48
95	3	7	0	522	578	16	6	17	1	1054	1055	24	5	17	2	156	216	28	2	20	3	49	62	-49	2	14	5	279	201	22
96	0	8	0	633	599	8	5	18	1	1129	1125	17	4	18	2	182	149	26	3	20	3	133	162	-60	3	14	5	155	121	38
97	4	8	0	843	836	13	6	18	1	885	849	16	5	18	2	95	144	-95	2	21	3	173	506	-172	4	14	5	313	300	26
98	1	9	0	760	723	76	4	19	1	270	314	17	6	18	2	210	243	51	1	0	4	1448	1533	12	1	15	5	383	349	28
99	2	10	0	256	219	11	5	19	1	106	137	24	2	19	2	74	130	-74	2	0	4	2427	2303	23	2	15	5	144	168	-57
00	1	11	0	2311	2212	24	6	19	1	47	104	-46	6	19	2	237	199	53	1	1	4	963	921	8	3	15	5	175	180	39
01	3	11	0	1625	1631	66	2	20	1	47	57	-47	1	20	2	51	113	-50	2	1	4	211	218	20	4	15	5	50	184	-50
02	0	12	0	3371	3186	54	3	20	1	156	144	43	2	20	2	125	140	-69	0	2	4	406	419	14	1	16	5	321	316	58
03	4	12	0	1384	1366	18	4	20	1	94	94	-93	3	20	2	350	322	20	2	2	4	326	324	13	2	16	5	168	127	-168
04	0	14	0	585	606	19	5	20	1	165	211	30	4	20	2	136	128	-43	1	3	4	329	338	7	3	16	5	291	271	76
05	2	14	0	460	401	14	6	20	1	212	150	-85	5	20	2	217	278	28	2	3	4	127	195	-40	0	0	6	1988	1937	30
06	4	14	0	177	182	24	1	21	1	463	355	58	3	21	2	47	57	-47	0	4	4	947	1004	12	2	0	6	521	489	15
07	3	15	0	206	209	17	2	21	1	86	91	-85	4	21	2	127	117	-55	1	4	4	424	422	9	1	1	6	595	581	11
08	0	16	0	365	431	29	3	21	1	196	174	27	5	21	2	49	142	-49	3	5	4	35	195	-35	3	1	6	613	593	30
09	5	19	0	100	183	-99	4	21	1	275	297	23	1	22	2	223	140	56	2	7	4	98	141	-42	0	2	6	179	163	36
10	2	20	0	384	366	96	2	22	1	236	266	-114	2	22	2	577	519	41	0	8	4	170	174	24	1	2	6	57	40	-57
11	6	20	0	48	218	-48	3	22	1	359	273	23	3	22	2	53	31	-53	4	10	4	253	249	30	2	2	6	220	219	26
12	3	21	0	330	355	32	4	22	1	267	247	36	4	22	2	442	456	42	2	12	4	1308	1351	17	3	2	6	67	103	-67
13	5	21	0	291	256	31	2	23	1	246	230	-76	2	23	2	52	105	-51	5	12	4	49	66	-49	1	3	6	125	142	-39
14	2	22	0	615	468	37	0	0	2	1245	1252	6	1	0	3	458	455	9	4	13	4	313	321	27	0	4	6	162	160	40
15	4	22	0	447	454	23	1	0	2	1857	1686	8	2	0	3	81	74	23	5	13	4	368	383	26	1	4	6	108	80	-51

20	1	0	1	520	504	4	2	0	2	2660	2749	19	2	1	3	340	320	6	3	14	4	62	103	-62	2	4	6	394	390	48
21	0	1	1	377	395	2	1	1	2	930	958	4	1	2	3	688	637	5	4	14	4	249	234	28	4	4	6	218	173	-73
22	1	1	1	408	437	3	2	1	2	614	533	8	2	2	3	58	47	-21	1	15	4	207	198	21	1	5	6	96	104	-80
23	1	2	1	17	155	-16	0	2	2	351	370	3	3	2	3	379	351	9	3	15	4	211	209	30	3	5	6	98	74	-97
24	2	2	1	757	789	7	1	2	2	17	28	-16	0	3	3	1316	1265	8	4	15	4	102	118	-101	0	6	6	152	159	-50
25	1	3	1	1030	1066	15	2	2	2	384	402	5	1	3	3	66	108	19	5	15	4	53	111	-52	1	6	6	66	110	-66
26	2	3	1	814	870	8	1	3	2	32	22	-32	2	3	3	295	268	9	2	16	4	75	79	-74	2	6	6	165	180	34
27	1	4	1	237	237	3	0	4	2	171	198	4	3	3	3	35	133	-34	3	16	4	279	274	21	3	6	6	53	39	-52
28	2	4	1	37	21	-28	1	4	2	255	210	3	2	4	3	153	151	11	4	16	4	367	433	21	4	6	6	202	252	-180
29	0	5	1	757	828	5	3	5	2	31	167	-30	3	4	3	82	165	-82	5	16	4	236	277	49	1	7	6	123	138	-62
30	1	5	1	1376	1304	7	0	6	2	214	290	27	0	5	3	2852	2679	16	1	17	4	51	76	-51	3	7	6	53	107	-53
31	2	5	1	2126	2180	13	1	6	2	67	101	-67	1	5	3	58	129	-57	2	17	4	101	112	-100	0	8	6	415	385	32
32	1	6	1	1951	2022	9	4	6	2	244	332	13	2	5	3	774	753	13	3	17	4	225	237	29	2	8	6	340	377	26
33	2	6	1	879	780	5	2	7	2	422	384	6	4	5	3	1170	1160	11	2	18	4	53	102	-52	3	9	6	364	396	50
34	3	6	1	2000	1963	23	3	7	2	300	280	10	1	6	3	2281	2190	14	3	4	5	44	109	-44	0	10	6	201	241	49
35	0	7	1	182	202	5	0	8	2	372	421	10	4	6	3	36	158	-36	3	5	5	137	178	-136	2	10	6	76	85	-76
36	1	7	1	907	920	5	1	8	2	966	899	11	0	7	3	1548	1427	14	1	7	5	589	584	24	3	10	6	55	78	-55
37	4	7	1	378	413	11	2	8	2	148	121	9	1	7	3	122	145	-121	4	8	5	48	66	-48	1	11	6	758	701	35
38	3	8	1	484	496	8	3	8	2	336	299	11	2	8	3	30	135	-29	3	9	5	290	203	53	0	12	6	1676	1715	22
39	4	8	1	114	106	18	1	9	2	404	393	8	3	8	3	441	430	13	4	9	5	44	4	-43	1	0	7	189	173	-127
40	2	9	1	318	298	21	2	9	2	456	455	7	0	9	3	730	697	14	3	10	5	338	357	20	0	1	7	55	94	-54
41	3	9	1	277	240	9	4	9	2	563	532	18	1	9	3	108	98	21	4	10	5	311	337	38	1	1	7	51	122	-51
42	4	9	1	32	90	-32	0	10	2	246	248	12	2	9	3	562	554	11	5	10	5	220	196	-84	1	2	7	50	81	-49
43	1	10	1	284	271	6	1	10	2	213	147	9	1	10	3	731	638	24	1	11	5	102	121	-75						
44	2	10	1	545	530	4	3	10	2	32	21	-31	4	10	3	45	72	-45	2	11	5	93	146	-92						
45	3	10	1	789	787	7	4	10	2	186	174	30	1	12	3	304	278	15	3	11	5	132	102	-52						
46	1	11	1	231	230	8	3	11	2	1200	1182	13	5	12	3	43	112	-43	4	11	5	48	44	-48						

Table 4c: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in DAC at 1.54 GPa

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
1	3	0	175	171	4	3	10	1	731	755	7	2	9	2	438	409	6	0	9	3	708	682	10	3	11	5	97	101	-97
0	4	0	797	837	5	1	11	1	274	283	7	4	9	2	543	511	23	1	9	3	92	73	-45	4	11	5	54	29	-53
2	4	0	1562	1595	7	2	11	1	284	239	7	0	10	2	321	306	10	2	9	3	614	589	9	1	12	5	53	146	-52
1	5	0	347	308	3	4	11	1	38	64	-38	1	10	2	200	165	9	1	10	3	736	661	12	3	12	5	171	176	36
0	6	0	554	534	7	1	12	1	98	330	-98	4	10	2	265	224	19	1	12	3	301	319	15	1	13	5	186	160	39
2	6	0	585	614	3	3	12	1	325	324	15	2	11	2	134	132	35	5	16	3	343	340	30	3	13	5	69	109	-68
1	7	0	251	214	5	4	12	1	63	103	-62	3	11	2	1167	1193	9	4	17	3	956	923	12	4	13	5	118	166	-118

62	3	7	0	549	613	25	1	13	1	207	256	22	0	12	2	40	104	-39	5	17	3	6	18	-5	2	14	5	226	169	39
63	0	8	0	649	608	7	2	13	1	57	38	-57	1	12	2	1745	1747	20	1	18	3	849	689	27	3	14	5	162	162	-52
64	1	9	0	755	704	11	3	13	1	279	256	19	2	12	2	1646	1728	12	3	18	3	740	745	10	4	14	5	293	273	27
65	3	9	0	30	19	-29	1	14	1	67	70	-66	4	12	2	1258	1363	26	5	18	3	336	380	38	1	15	5	373	346	55
66	2	10	0	307	262	9	4	14	1	399	374	22	2	14	2	379	362	11	2	19	3	563	561	28	2	15	5	169	167	49
67	1	11	0	2428	2345	17	2	15	1	442	376	53	2	17	2	73	145	-72	4	19	3	63	36	-63	3	15	5	120	192	-69
68	3	11	0	1618	1595	9	5	16	1	116	523	-116	5	17	2	188	254	29	2	20	3	50	55	-49	4	15	5	63	121	-63
69	0	12	0	3240	3139	67	5	18	1	965	1051	18	4	18	2	201	185	25	3	20	3	222	196	59	2	16	5	152	172	-70
70	4	12	0	1447	1452	15	4	19	1	351	394	14	5	18	2	92	138	-92	0	0	4	508	462	16	3	16	5	354	343	34
71	0	14	0	703	686	14	5	19	1	186	217	43	2	19	2	74	123	-74	1	0	4	1729	1756	16	0	0	6	2200	2011	25
72	2	14	0	484	460	19	2	20	1	39	50	-39	4	19	2	59	69	-59	2	0	4	2398	2219	28	2	0	6	499	512	20
73	4	14	0	172	182	26	3	20	1	147	158	37	5	19	2	46	56	-46	1	1	4	885	858	8	1	1	6	676	643	8
74	3	15	0	244	253	16	4	20	1	101	118	-100	2	20	2	80	102	-79	2	1	4	306	276	14	0	2	6	217	181	28
75	5	19	0	94	128	-93	5	20	1	207	245	31	3	20	2	307	313	17	0	2	4	446	446	15	1	2	6	50	40	-49
76	4	20	0	57	37	-57	2	21	1	130	129	-130	4	20	2	190	222	31	2	2	4	377	348	20	2	2	6	285	239	29
77	3	21	0	240	285	42	3	21	1	265	228	23	5	20	2	255	300	30	1	3	4	291	274	10	1	3	6	171	168	34
78	5	21	0	387	343	57	4	21	1	311	337	24	5	21	2	73	101	-73	2	3	4	346	286	17	0	4	6	199	211	37
79	2	22	0	677	528	36	3	22	1	355	294	24	3	22	2	63	65	-62	0	4	4	840	882	12	1	4	6	51	67	-51
80	4	22	0	513	492	24	4	22	1	286	222	38	4	22	2	490	537	33	1	4	4	557	556	8	2	4	6	477	408	41
81	1	0	1	520	505	6	0	0	2	1218	1248	6	1	0	3	435	470	12	2	7	4	88	176	-88	1	5	6	134	129	-54
82	0	1	1	350	371	2	1	0	2	1796	1672	9	2	0	3	83	102	20	0	8	4	108	186	-42	3	5	6	141	158	-140
83	1	1	1	427	467	5	2	0	2	2833	2832	44	2	1	3	347	359	6	4	13	4	239	299	-72	0	6	6	98	139	-97
84	1	2	1	57	185	-25	1	1	2	862	916	3	1	2	3	682	628	6	3	14	4	141	127	-87	1	6	6	73	147	-73
85	1	3	1	1104	1112	20	2	1	2	670	576	18	2	2	3	49	98	-49	4	14	4	270	277	30	2	6	6	202	206	34
86	2	3	1	785	849	7	0	2	2	362	378	3	0	3	3	1351	1286	7	1	15	4	93	231	-93	1	7	6	127	144	-63
87	1	4	1	201	206	3	1	2	2	24	31	-23	1	3	3	37	52	-36	3	15	4	230	198	25	3	7	6	57	115	-57
88	2	4	1	66	44	12	2	2	2	379	397	6	2	3	3	338	314	9	4	15	4	94	98	-94	0	8	6	471	455	37
89	0	5	1	811	905	5	2	3	2	421	420	17	3	3	3	60	89	-59	2	16	4	105	149	-104	1	8	6	140	107	-67
90	1	5	1	1461	1383	5	0	4	2	145	155	6	1	4	3	24	13	-24	3	16	4	330	320	21	2	8	6	458	433	33
91	2	5	1	2117	2176	10	1	4	2	273	208	3	2	4	3	158	161	10	4	16	4	357	419	20	2	9	6	67	102	-66
92	1	6	1	1892	1966	4	2	5	2	589	513	17	3	4	3	199	184	20	2	17	4	167	197	35	3	9	6	425	418	52
93	2	6	1	867	803	3	0	6	2	221	298	29	0	5	3	3029	2778	15	3	17	4	242	271	35	0	10	6	296	299	64
94	0	7	1	165	165	5	1	6	2	46	129	-45	1	5	3	34	14	-34	4	17	4	57	55	-56	2	10	6	142	122	-142
95	1	7	1	899	916	3	2	7	2	394	344	14	2	5	3	809	793	6	2	18	4	57	128	-56	1	11	6	848	778	42
96	3	8	1	543	538	23	3	7	2	300	307	7	1	6	3	2358	2252	12	3	5	5	129	143	-129	3	11	6	1030	1066	30
97	2	9	1	353	290	19	0	8	2	504	568	12	2	6	3	46	131	-46	2	7	5	406	438	26	2	12	6	59	93	-59
98	3	9	1	338	314	7	1	8	2	904	881	7	0	7	3	1450	1361	11	3	10	5	398	439	21	1	0	7	150	199	-149
99	4	9	1	98	126	28	2	8	2	241	209	5	1	7	3	92	56	-92	4	10	5	325	297	26	1	1	7	61	141	-61
00	1	10	1	338	347	6	3	8	2	392	323	7	2	8	3	111	142	-42	1	11	5	50	106	-49	1	2	7	132	121	-131
01	2	10	1	550	527	4	1	9	2	377	371	7	3	8	3	516	498	13	2	11	5	170	182	33	0	3	7	91	118	-91

04
05
06
07
08
09
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45

Table 4d: Observed and calculated structure factors for Protoamphibole in DAC at 2.23 GPa

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	3	0	202	201	3	3	12	1	295	287	13	1	12	2	1813	1805	11	1	18	3	883	751	23
0	4	0	808	852	3	5	12	1	124	301	-43	2	12	2	1594	1686	13	2	18	3	96	132	-95
2	4	0	1438	1497	6	0	13	1	204	242	22	4	12	2	1351	1461	18	3	18	3	780	794	13
1	5	0	361	297	5	1	13	1	298	266	7	3	13	2	237	268	22	4	18	3	125	137	-54
3	5	0	688	613	12	2	13	1	48	13	-47	1	14	2	68	82	-67	5	18	3	305	334	31
0	6	0	525	495	4	1	14	1	115	102	-33	2	14	2	346	354	11	1	19	3	48	114	-47
2	6	0	556	592	4	2	15	1	468	439	19	6	16	2	357	282	48	2	19	3	490	477	21
1	7	0	249	250	5	6	17	1	1021	1052	12	2	17	2	172	150	33	1	20	3	71	172	-71
3	7	0	478	560	11	2	18	1	109	70	-108	5	17	2	169	218	30	2	20	3	52	62	-52
0	8	0	635	602	5	5	18	1	1150	1164	14	4	18	2	175	156	26	3	20	3	169	184	36
4	8	0	836	850	15	6	18	1	837	865	17	5	18	2	129	178	-45	4	20	3	31	16	-31
1	9	0	717	723	90	3	19	1	168	208	-77	6	18	2	274	265	41	0	21	3	216	137	-215
3	9	0	161	155	24	4	19	1	251	299	17	1	19	2	68	89	-67	2	21	3	367	522	43
2	10	0	249	210	9	5	19	1	119	98	-47	2	19	2	88	130	-88	1	0	4	1666	1530	60
1	11	0	2323	2193	10	6	19	1	48	99	-47	3	19	2	44	49	-43	2	0	4	2458	2336	28
3	11	0	1651	1613	61	1	20	1	167	177	45	1	20	2	80	110	-80	1	1	4	984	930	6
0	12	0	3371	3227	26	2	20	1	48	39	-48	2	20	2	142	141	-43	2	1	4	223	234	13
4	12	0	1352	1325	14	3	20	1	168	145	31	3	20	2	292	325	20	0	2	4	462	416	12
3	13	0	54	181	-53	4	20	1	113	74	-71	4	20	2	144	131	34	2	2	4	322	323	12
0	14	0	578	601	35	5	20	1	205	233	38	5	20	2	193	273	28	1	3	4	329	334	7
2	14	0	399	392	36	0	21	1	582	514	31	2	21	2	53	43	-52	2	3	4	235	216	17
4	14	0	202	204	20	1	21	1	409	361	63	3	21	2	58	64	-58	0	4	4	980	1005	9
3	15	0	232	221	16	2	21	1	65	115	-65	4	21	2	141	120	-56	1	4	4	445	416	7
0	16	0	411	458	28	3	21	1	189	148	27	0	22	2	533	449	69	3	5	4	68	186	-68
5	19	0	153	189	-63	4	21	1	251	317	26	1	22	2	192	139	-124	3	6	4	41	10	-40
2	20	0	371	363	22	2	22	1	286	273	25	2	22	2	573	537	21	2	7	4	140	136	20
6	20	0	129	242	-129	3	22	1	300	276	29	1	0	3	491	478	10	0	8	4	136	166	33
1	21	0	47	98	-47	4	22	1	250	252	40	2	0	3	63	37	-21	4	10	4	284	237	53
3	21	0	303	352	31	0	23	1	91	172	-90	3	0	3	229	362	-229	2	12	4	1455	1388	28
5	21	0	190	248	-118	1	23	1	162	124	-161	0	1	3	186	261	30	5	12	4	49	2	-49
0	22	0	914	733	51	2	23	1	257	230	53	2	1	3	326	299	6	4	13	4	260	300	23
2	22	0	565	466	31	1	24	1	82	108	-81	1	2	3	703	658	4	5	13	4	439	391	44
4	22	0	463	479	49	0	0	2	1258	1325	5	2	2	3	39	47	-38	3	14	4	100	88	-66
1	23	0	1056	834	59	1	0	2	1896	1733	7	3	2	3	383	369	18	4	14	4	239	251	30
1	0	1	544	510	4	2	0	2	2780	2798	45	0	3	3	1354	1288	5	1	15	4	206	216	24
0	1	1	378	416	1	1	1	2	923	990	3	1	3	3	117	113	7	2	15	4	44	35	-43
1	1	1	411	435	2	2	1	2	618	537	8	2	3	3	273	261	7	3	15	4	202	209	25

46	1	2	1	69	137	-47	0	2	2	368	375	3	3	3	3	77	90	-25	4	15	4	71	119	-71	1	7	6	132	139	-46
47	2	2	1	766	806	5	1	2	2	25	23	-24	2	4	3	135	160	8	5	15	4	83	101	-83	2	7	6	43	53	-42
48	1	3	1	1005	1044	24	2	2	2	381	422	6	3	4	3	49	183	-49	0	16	4	222	261	-71	3	7	6	81	115	-81
49	2	3	1	812	887	7	1	3	2	27	38	-27	0	5	3	2912	2676	9	2	16	4	67	108	-66	4	7	6	51	52	-51
50	1	4	1	240	220	3	2	3	2	447	417	-213	1	5	3	162	144	8	3	16	4	282	272	18	0	8	6	409	372	23
51	2	4	1	26	24	-26	0	4	2	195	206	4	2	5	3	744	737	8	4	16	4	415	451	25	1	8	6	224	256	22
52	0	5	1	749	798	3	1	4	2	264	215	3	4	5	3	1151	1159	11	5	16	4	235	278	54	2	8	6	373	379	23
53	1	5	1	1382	1318	3	2	5	2	544	505	35	1	6	3	2267	2202	7	1	17	4	65	66	-64	1	9	6	47	64	-46
54	2	5	1	2133	2193	11	3	5	2	33	159	-32	2	6	3	56	125	-55	2	17	4	114	121	-64	2	9	6	149	179	-46
55	3	5	1	34	49	-34	0	6	2	279	319	12	4	6	3	162	165	40	3	17	4	200	248	35	3	9	6	423	405	51
56	1	6	1	1954	2043	5	4	6	2	231	318	12	0	7	3	1560	1461	11	0	18	4	223	217	64	0	10	6	256	230	30
57	2	6	1	881	779	4	2	7	2	426	383	7	3	7	3	66	44	-65	2	18	4	65	126	-65	1	10	6	56	56	-56
58	3	6	1	1948	2012	17	3	7	2	289	282	9	2	8	3	125	116	17	3	5	5	121	170	-85	2	10	6	64	82	-64
59	0	7	1	219	212	4	0	8	2	396	419	11	3	8	3	442	427	13	4	8	5	52	74	-52	3	10	6	50	74	-50
60	1	7	1	914	919	3	1	8	2	964	893	7	0	9	3	743	688	10	3	9	5	78	177	-77	1	11	6	761	729	24
61	4	7	1	400	441	16	2	8	2	116	122	10	1	9	3	96	98	21	3	10	5	374	365	13	0	12	6	1729	1779	21
62	3	8	1	489	502	6	3	8	2	327	300	11	2	9	3	577	542	10	4	10	5	323	335	45	1	0	7	57	157	-56
63	4	8	1	67	108	-39	1	9	2	421	406	5	1	10	3	727	663	12	5	10	5	258	222	38	0	1	7	62	101	-62
64	2	9	1	313	278	29	2	9	2	452	448	7	3	11	3	38	16	-37	1	11	5	108	119	-46	1	1	7	93	103	-93
65	3	9	1	270	238	8	4	9	2	567	528	16	1	12	3	320	292	15	2	11	5	86	128	-86	1	2	7	63	83	-63
66	4	9	1	29	32	-29	0	10	2	257	253	11	2	12	3	39	28	-39	3	11	5	120	92	-95	0	3	7	73	173	-72
67	1	10	1	290	276	5	1	10	2	176	151	8	5	12	3	48	119	-48	4	11	5	54	40	-54	1	3	7	142	221	-76
68	2	10	1	527	512	5	4	10	2	179	165	25	2	15	3	142	183	-49	1	12	5	111	153	-65	2	3	7	71	350	-70
69	3	10	1	787	828	10	2	11	2	265	271	23	5	16	3	284	283	32	3	12	5	124	157	-70	1	4	7	72	150	-72
70	1	11	1	222	208	7	3	11	2	1184	1207	11	2	17	3	555	610	31	5	12	5	218	256	47						
71	2	11	1	273	247	8	5	11	2	1400	1676	102	4	17	3	968	927	24	0	13	5	60	148	-60						
72	4	11	1	50	77	-49	0	12	2	310	319	16	6	17	3	838	775	23	1	13	5	156	161	36						

Table 4e: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in DAC at 3.92 GPa

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
1	3	0	219	214	2	2	15	1	541	501	15	5	18	2	112	125	-55	1	0	4	1438	1407	10	3	13	5	108	100	-107
0	4	0	834	870	4	6	17	1	1002	991	23	6	18	2	248	205	51	2	0	4	2497	2345	20	4	13	5	62	85	-62
2	4	0	1444	1475	7	5	18	1	1233	1173	19	1	19	2	46	85	-46	4	0	4	1795	1684	78	1	14	5	59	89	-59
1	5	0	373	315	4	6	18	1	909	838	15	2	19	2	126	120	-55	1	1	4	1009	910	7	2	14	5	284	222	27
3	5	0	758	622	14	3	19	1	117	177	-117	3	19	2	46	52	-46	2	1	4	273	230	23	3	14	5	90	93	-90
0	6	0	557	507	4	4	19	1	200	223	24	6	19	2	303	194	46	4	1	4	578	580	26	4	14	5	293	296	39
2	6	0	546	543	3	5	19	1	51	70	-50	1	20	2	62	105	-62	0	2	4	413	397	11	1	15	5	447	342	21
1	7	0	246	235	6	1	20	1	91	155	-90	2	20	2	71	159	-71	2	2	4	338	329	10	2	15	5	165	184	33

88	3	7	0	97	565	-96	2	20	1	55	24	-55	3	20	2	333	304	21	4	2	4	108	216	-78	3	15	5	129	156	-76
89	0	8	0	617	605	6	3	20	1	101	111	-101	4	20	2	106	74	-79	1	3	4	377	335	7	1	16	5	326	317	44
90	2	8	0	88	455	-87	4	20	1	76	43	-76	5	20	2	172	257	35	2	3	4	95	173	-94	2	16	5	103	76	-102
91	4	8	0	887	827	18	5	20	1	178	199	32	3	21	2	53	115	-53	4	3	4	311	275	47	0	0	6	2019	1909	47
92	1	9	0	547	746	-164	0	21	1	572	546	24	4	21	2	98	115	-98	0	4	4	963	1022	15	2	0	6	508	505	15
93	2	10	0	197	181	10	1	21	1	449	378	32	0	22	2	457	424	32	1	4	4	398	375	10	3	0	6	105	217	-104
94	1	11	0	2334	2074	9	2	21	1	77	91	-77	1	22	2	165	115	-71	3	5	4	158	175	26	4	0	6	947	965	34
95	0	12	0	3516	3226	7	3	21	1	150	144	-59	2	22	2	531	488	27	2	7	4	87	107	-87	1	1	6	575	557	13
96	4	12	0	1299	1320	22	4	21	1	260	308	31	1	23	2	910	745	36	0	8	4	162	161	42	3	1	6	626	601	20
97	0	14	0	556	546	18	5	21	1	56	78	-56	2	23	2	54	47	-54	5	8	4	413	308	53	4	1	6	75	146	-74
98	4	14	0	186	189	52	2	22	1	261	255	39	1	0	3	476	439	8	4	10	4	181	198	45	5	1	6	165	107	-117
99	3	15	0	204	219	20	3	22	1	382	288	25	2	0	3	56	10	-56	3	11	4	921	912	52	0	2	6	213	179	46
00	0	16	0	323	380	24	4	22	1	315	263	44	3	0	3	367	369	15	5	11	4	1534	1449	132	1	2	6	51	33	-50
01	5	19	0	108	188	-107	1	23	1	168	117	-167	0	1	3	315	286	14	2	12	4	1571	1412	10	2	2	6	186	212	22
02	2	20	0	289	288	66	2	23	1	198	222	-99	2	1	3	343	309	6	4	13	4	277	290	23	3	2	6	59	92	-58
03	6	20	0	264	241	-77	0	0	2	1299	1392	9	1	2	3	730	649	5	5	13	4	474	446	42	4	2	6	106	125	-106
04	3	21	0	352	395	30	1	0	2	2003	1773	8	2	2	3	39	12	-39	3	14	4	106	67	-105	1	3	6	127	127	-40
05	2	22	0	539	429	28	2	0	2	2818	2772	31	3	2	3	403	374	7	4	14	4	179	215	31	3	3	6	59	81	-58
06	1	23	0	1012	782	28	3	0	2	232	223	21	0	3	3	1347	1240	6	1	15	4	226	202	22	4	3	6	60	122	-59
07	1	0	1	561	525	5	1	1	2	990	1009	3	1	3	3	166	158	13	2	15	4	52	41	-52	5	3	6	152	205	-106
08	2	0	1	29	96	-29	2	1	2	630	536	7	2	3	3	305	251	7	3	15	4	265	243	21	0	4	6	181	169	31
09	0	1	1	398	402	2	3	1	2	1091	1047	65	3	3	3	71	108	-31	4	15	4	117	112	-117	1	4	6	79	97	-79
10	1	1	1	413	433	3	0	2	2	365	369	3	1	4	3	31	84	-31	5	15	4	131	116	-124	2	4	6	428	391	17
11	2	1	1	29	76	-29	1	2	2	25	6	-25	2	4	3	175	171	8	0	16	4	198	285	-81	3	4	6	52	93	-51
12	1	2	1	22	137	-21	2	2	2	422	432	6	3	4	3	87	125	-87	2	16	4	64	72	-63	4	4	6	153	140	-67
13	2	2	1	793	798	13	1	3	2	33	24	-33	0	5	3	2882	2600	16	3	16	4	266	244	21	1	5	6	93	88	-93
14	1	3	1	993	1034	11	0	4	2	226	231	5	2	5	3	723	697	8	4	16	4	411	438	36	2	5	6	86	107	-86
15	2	3	1	852	933	8	1	4	2	241	198	4	4	5	3	1036	1134	22	1	17	4	53	62	-53	3	5	6	60	47	-60
16	1	4	1	259	259	3	3	5	2	64	138	-64	1	6	3	2242	2143	8	2	17	4	80	72	-80	5	5	6	65	89	-64
17	2	4	1	8	6	-7	0	6	2	283	308	17	4	6	3	50	237	-49	3	17	4	202	242	27	0	6	6	156	196	-50
18	0	5	1	755	764	4	4	6	2	231	321	15	0	7	3	1560	1470	120	0	18	4	210	214	-88	1	6	6	100	116	-100
19	1	5	1	1373	1264	5	2	7	2	406	365	4	3	7	3	39	38	-38	2	18	4	77	99	-77	2	6	6	177	155	29
20	2	5	1	2229	2147	15	3	7	2	278	273	10	2	8	3	106	130	-32	3	4	5	45	177	-44	3	6	6	33	4	-32
21	1	6	1	2050	2017	7	0	8	2	360	362	8	3	8	3	415	387	15	5	5	5	56	34	-55	4	6	6	210	252	35
22	2	6	1	945	739	5	1	8	2	940	867	6	0	9	3	755	697	8	5	6	5	1357	1168	115	5	6	6	59	75	-59
23	3	6	1	2009	2009	22	2	8	2	100	89	24	1	9	3	90	148	-43	0	7	5	127	203	-109	1	7	6	153	136	35
24	0	7	1	237	237	6	3	8	2	325	291	9	2	9	3	585	568	14	1	7	5	607	607	19	2	7	6	62	52	-61
25	1	7	1	936	949	3	1	9	2	472	439	6	4	9	3	47	66	-46	4	7	5	195	233	-130	3	7	6	75	101	-75
26	4	7	1	452	478	20	2	9	2	443	458	6	1	10	3	709	644	21	5	7	5	61	65	-61	0	8	6	264	322	35
27	1	8	1	52	602	-51	4	9	2	599	507	18	1	12	3	315	279	13	4	8	5	58	40	-58	1	8	6	311	280	29
28	3	8	1	481	482	6	0	10	2	239	219	9	5	12	3	52	121	-52	5	8	5	233	291	-134	2	8	6	344	341	24
29	4	8	1	36	44	-36	1	10	2	133	112	13	2	15	3	165	129	-78	3	9	5	199	199	34	2	9	6	145	196	-52

30	2	9	1	279	273	12	4	10	2	122	99-120	5	16	3	226	235	43	4	9	5	59	20	-59	3	9	6	440	383	38	
31	3	9	1	270	246	9	2	11	2	305	307	29	2	17	3	680	579	25	5	9	5	67	100	-66	4	9	6	59	188	-58
32	1	10	1	335	275	3	3	11	2	1232	1163	13	4	17	3	972	954	25	2	10	5	223	260	20	0	10	6	192	177	-57
33	2	10	1	506	506	5	0	12	2	431	416	17	1	18	3	883	737	21	3	10	5	336	341	16	1	10	6	63	46	-63
34	3	10	1	850	817	12	1	12	2	1858	1808	12	2	18	3	109	112-108	4	10	5	320	344	36	2	10	6	60	56	-60	
35	0	11	1	41	31	-40	2	12	2	1637	1668	14	3	18	3	795	809	17	5	10	5	151	216	-96	3	10	6	49	73	-49
36	1	11	1	229	219	7	4	12	2	1434	1415	23	4	18	3	168	168	44	1	11	5	79	140	-79	4	10	6	66	122	-65
37	2	11	1	308	266	7	3	13	2	197	196	17	5	18	3	298	280	33	2	11	5	129	144	-44	1	11	6	793	677	35
38	4	11	1	60	79	-60	0	14	2	43	256	-42	0	19	3	196	327	-80	3	11	5	125	94	-61	2	11	6	62	118	-61
39	3	12	1	265	283	10	1	14	2	47	77	-46	1	19	3	21	125	-21	4	11	5	52	39	-52	3	11	6	921	999	57
40	5	12	1	271	285	52	2	14	2	337	323	12	2	19	3	453	435	13	5	11	5	64	73	-64	0	1	7	109	115-109	
41	0	13	1	241	255	14	5	14	2	48	94	-48	1	20	3	178	140-178	1	12	5	132	167	-55	2	1	7	69	43	-68	
42	1	13	1	284	257	11	1	17	2	61	216	-60	2	20	3	54	64	-54	3	12	5	172	132	34						
43	2	13	1	38	7	-38	2	17	2	202	169	46	3	20	3	120	139	-91	5	12	5	304	240	28						
44	4	13	1	39	186	-38	5	17	2	156	208	41	0	21	3	75	155	-74	0	13	5	58	154	-57						
45	3	14	1	177	217-133		4	18	2	170	142	29	2	21	3	411	526	84	1	13	5	200	162	31						

Table 4f: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in DAC at 6.02 GPa

	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
51	1	3	0	202	189	5	3	18	1	573	543	48	2	21	2	65	8	-65	4	1	4	516	497	28	4	5	5	728	762	53
52	0	4	0	790	821	5	0	19	1	484	391	31	0	22	2	436	390	34	0	2	4	371	363	10	1	6	5	1066	932	23
53	1	5	0	323	341	7	1	19	1	421	406	19	1	22	2	230	159	-42	1	2	4	14	54	-13	3	6	5	1091	1198	18
54	0	6	0	535	523	4	2	19	1	67	62	-67	2	22	2	504	456	47	2	2	4	279	261	16	4	6	5	709	687	52
55	1	7	0	279	308	13	3	19	1	269	216	-60	1	0	3	482	460	13	3	2	4	52	79	-52	0	7	5	290	300	-44
56	0	8	0	553	528	5	1	20	1	63	76	-62	2	0	3	45	82	-45	4	2	4	142	285	-43	1	7	5	550	614	21
57	2	8	0	404	432	36	0	21	1	493	551	25	3	0	3	344	337	24	1	3	4	370	315	9	2	7	5	249	235	-87
58	1	9	0	844	783	13	1	21	1	389	387	22	0	1	3	355	289	19	2	3	4	229	162	18	3	7	5	233	247	-28
59	0	10	0	727	528	25	2	21	1	68	142	-67	1	1	3	40	56	-39	3	3	4	254	345	-43	4	7	5	137	238	-74
60	2	10	0	41	136	-41	1	22	1	81	117	-81	2	1	3	294	268	8	4	3	4	242	321	-29	1	8	5	206	214	-22
61	1	11	0	2285	2091	17	2	22	1	248	286	-88	3	1	3	48	126	-48	0	4	4	854	1020	8	3	8	5	240	263	-28
62	0	12	0	3538	3159	6	0	23	1	128	177-127	1	2	3	696	612	5	1	4	4	326	325	8	4	8	5	61	83	-60	
63	2	12	0	592	526	18	1	23	1	112	113-111	3	2	3	383	417	14	2	4	4	119	64-118	0	9	5	71	152	-71		
64	1	13	0	86	183	-85	2	23	1	77	217	-76	0	3	3	1282	1242	5	3	4	4	60	173	-60	1	9	5	398	476	17
65	0	14	0	532	569	31	0	0	2	1290	1443	4	2	3	3	140	193	-15	4	4	4	215	279	-42	3	9	5	155	179	-49
66	2	14	0	338	309	31	1	0	2	2052	1823	7	3	3	3	66	87	-66	1	5	4	189	191	-55	1	10	5	205	238	-23
67	1	15	0	306	200	-68	2	0	2	2997	2718	39	1	4	3	76	88	-23	3	5	4	179	254	-38	2	10	5	219	278	-29
68	3	15	0	209	205	-63	1	1	2	952	990	4	2	4	3	38	80	-38	4	5	4	79	89	-79	3	10	5	260	286	-32
69	0	16	0	301	412	-62	2	1	2	600	561	12	3	4	3	130	187	-22	0	6	4	338	299	20	4	10	5	160	364	-89

72	2	16	0	565	580	50	0	2	2	359	364	4	0	5	3	2922	2612	11	2	6	4	198	278	-41	1	11	5	135	130	-40		
73	1	17	0	383	340	38	2	2	2	380	427	9	1	5	3	413	295	6	3	6	4	24	67	-24	3	11	5	94	113	-93		
74	0	18	0	61	193	-60	2	3	2	437	430	14	2	5	3	624	677	11	4	6	4	59	95	-58	4	11	5	67	95	-66		
75	2	18	0	217	203	-166	3	3	2	241	238	-121	3	5	3	124	153	-79	1	7	4	56	184	-56	1	12	5	130	120	-68		
76	0	20	0	517	632	-56	0	4	2	224	268	6	1	6	3	2134	2120	13	2	7	4	127	183	-35	3	12	5	132	218	-132		
77	2	20	0	127	228	-126	1	4	2	229	211	6	3	6	3	1896	1761	46	2	8	4	159	181	-40	0	13	5	57	113	-57		
78	0	22	0	718	666	52	2	4	2	527	411	34	0	7	3	1569	1396	10	3	8	4	291	313	-37	1	13	5	208	179	-35		
79	2	22	0	316	389	-95	3	4	2	885	773	31	1	7	3	244	232	15	4	8	4	563	469	46	3	13	5	95	105	-94		
80	1	23	0	930	744	30	1	5	2	117	128	-13	2	7	3	108	136	-83	1	9	4	223	245	-32	1	14	5	61	117	-60		
81	1	0	1	557	536	6	2	5	2	546	463	14	3	7	3	53	113	-53	2	9	4	155	83	-66	2	14	5	280	235	-61		
82	0	1	1	380	408	2	3	5	2	118	184	-44	1	8	3	505	451	14	3	9	4	71	200	-71	3	14	5	65	74	-65		
83	1	1	1	381	411	5	0	6	2	425	374	15	2	8	3	46	57	-45	4	9	4	57	164	-56	4	14	5	442	328	-86		
84																																
85	1	2	1	86	114	-9	1	6	2	48	50	-47	3	8	3	322	404	19	1	10	4	56	50	-55	1	15	5	395	320	23		
86	0	3	1	337	308	5	2	6	2	278	324	26	0	9	3	715	693	10	2	10	4	278	207	-29	2	15	5	158	215	-106		
87	1	3	1	960	982	5	1	7	2	47	87	-47	1	9	3	82	101	-81	1	11	4	1031	944	19	3	15	5	76	158	-75		
88	2	3	1	964	894	67	2	7	2	364	368	8	2	9	3	555	562	19	3	11	4	811	875	34	1	16	5	278	268	-36		
89	1	4	1	248	232	4	3	7	2	143	172	-25	3	9	3	114	124	-113	4	11	4	315	338	-81	2	16	5	60	75	-60		
90	2	4	1	47	80	-46	0	8	2	309	317	8	4	9	3	58	100	-57	0	12	4	105	199	-104	0	0	6	1752	1852	11		
91	0	5	1	683	678	4	1	8	2	814	841	4	1	10	3	729	662	12	1	12	4	736	685	25	2	0	6	426	480	38		
92	1	5	1	1303	1254	5	2	8	2	135	71	-21	3	10	3	123	199	-122	2	12	4	1488	1440	28	4	0	6	650	930	30		
93	2	5	1	2321	2181	43	3	8	2	220	230	19	4	10	3	61	96	-61	3	12	4	106	128	-105	1	1	6	492	548	24		
94	1	6	1	2056	2016	8	1	9	2	473	466	6	0	11	3	480	336	18	4	12	4	822	605	-135	3	1	6	635	559	34		
95	2	6	1	937	788	13	2	9	2	376	490	12	2	11	3	70	48	-69	4	13	4	44	253	-44	0	2	6	169	227	-53		
96	0	7	1	245	284	7	3	9	2	250	237	-42	3	11	3	56	89	-56	1	14	4	79	105	-79	1	2	6	57	54	-57		
97	1	7	1	872	875	4	0	10	2	204	194	12	4	11	3	166	216	-166	2	14	4	194	215	-52	2	2	6	177	193	-40		
98	2	7	1	951	987	18	1	10	2	188	160	11	1	12	3	271	311	17	3	14	4	61	78	-60	4	2	6	68	110	-67		
99	1	8	1	535	515	16	2	10	2	246	234	20	3	12	3	114	205	-113	4	14	4	196	248	-196	1	3	6	150	126	-56		
00	2	8	1	46	92	-46	1	11	2	1405	1455	10	0	13	3	202	182	-37	1	15	4	196	240	-24	3	3	6	57	115	-57		
01	0	9	1	766	789	24	2	11	2	220	261	20	1	13	3	54	99	-53	3	15	4	239	303	-54	4	3	6	116	137	-115		
02	1	9	1	813	722	15	3	11	2	1140	1176	38	2	13	3	200	246	-41	0	16	4	358	284	24	0	4	6	171	183	-39		
03	2	9	1	172	178	11	0	12	2	494	446	25	1	14	3	62	123	-62	2	16	4	57	53	-57	1	4	6	92	110	-92		
04	1	10	1	326	255	6	1	12	2	1783	1792	13	2	14	3	62	122	-61	3	16	4	138	225	-137	2	4	6	340	377	28		
05	2	10	1	436	457	11	2	12	2	1546	1569	19	3	14	3	346	465	-76	2	17	4	155	110	-71	3	4	6	91	169	-90		
06	3	10	1	1121	916	80	3	12	2	47	88	-47	0	15	3	823	695	72	3	17	4	149	180	-148	4	4	6	81	157	-80		
07	0	11	1	40	71	-40	1	13	2	180	114	-48	1	15	3	89	132	-88	0	18	4	128	159	-127	1	5	6	125	112	-124		
08	1	11	1	193	159	11	2	13	2	434	436	37	2	15	3	56	99	-55	2	18	4	93	153	-93	3	5	6	113	80	-112		
09	2	11	1	282	282	15	3	13	2	151	175	-54	3	15	3	55	55	-55	2	19	4	66	35	-65	0	6	6	152	153	-58		
10	3	11	1	51	128	-51	0	14	2	247	180	-28	1	16	3	487	438	21	3	0	5	97	272	-97	2	6	6	132	206	-80		
11	1	12	1	304	278	12	1	14	2	66	99	-66	3	16	3	119	293	-118	0	1	5	29	75	-29	3	6	6	62	94	-61		
12	2	12	1	44	84	-44	2	14	2	293	284	19	0	17	3	1848	1776	53	1	1	5	185	191	-33	4	6	6	153	203	-59		
13	3	12	1	154	260	-30	3	14	2	55	79	-55	1	17	3	208	237	-32	3	1	5	145	138	-117	1	7	6	73	93	-73		

14	0	13	1	216	217	-42	1	15	2	209	257	-24	2	17	3	634	532	35	4	1	5	52	11	-51	2	7	6	121	141-120
15	1	13	1	300	289	10	2	15	2	294	307	-36	1	18	3	816	692	13	1	2	5	63	121	-62	3	7	6	91	57 -90
16	2	13	1	62	50	-61	3	15	2	499	385	-75	2	18	3	58	162	-57	2	2	5	339	319	23	4	7	6	92	111 -91
17	3	13	1	102	87-102		0	16	2	466	418	25	3	18	3	759	748	51	3	2	5	186	249	-40	0	8	6	234	316 -35
18	1	14	1	202	149	-38	1	16	2	479	469	35	0	19	3	188	261	-64	4	2	5	421	438	-44	1	8	6	260	301 -28
19	2	14	1	477	441	38	2	16	2	60	188	-59	1	19	3	125	187-124		0	3	5	42	100	-42	2	8	6	352	286 26
20	3	14	1	66	157	-66	3	16	2	166	214-117		2	19	3	412	431	34	1	3	5	564	512	25	3	8	6	62	56 -62
21	1	15	1	534	486	15	1	17	2	170	185-105		1	20	3	63	123	-63	2	3	5	184	238	-69	1	9	6	88	93 -88
22	2	15	1	524	484	18	2	17	2	185	186	-40	3	20	3	77	106	-77	3	3	5	135	196	-69	2	9	6	193	193 -44
23	1	16	1	455	386	17	3	17	2	63	133	-62	0	21	3	128	116-128		4	3	5	226	242	-58	3	9	6	328	411 -63
24	2	16	1	63	97	-62	0	18	2	46	160	-46	0	0	4	151	113	-43	2	4	5	59	71	-59	0	10	6	177	155 -65
25	3	16	1	478	441	-69	2	18	2	139	149-138		1	0	4	1380	1316	11	3	4	5	56	95	-56	1	10	6	60	73 -60
26	0	17	1	749	668	35	2	19	2	63	113	-62	2	0	4	2425	2353	25	0	5	5	769	815	47	2	10	6	70	64 -69
27	1	17	1	782	729	21	0	20	2	119	113-119		4	0	4	1705	1627	132	1	5	5	802	740	33					
28	2	17	1	1541	1455	29	1	20	2	67	128	-67	1	1	4	989	914	14	2	5	5	864	801	44					
29	1	18	1	720	596	26	2	20	2	206	186	-76	3	1	4	164	229	-33	3	5	5	296	224	29					

Table 4g: Observed and calculated structure factors for protoamphibole in DAC at 6.93 GPa

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
1	3	0	192	153	8	3	14	1	216	134-173		2	14	2	250	282	19	1	18	3	869	702	28	3	2	5	307	272-112	
0	4	0	779	842	4	1	15	1	663	499	25	1	15	2	60	231	-59	2	18	3	71	160	-71	1	3	5	527	502	33
1	5	0	334	321	7	2	15	1	543	510	16	2	15	2	224	267	42	3	18	3	852	831	57	2	3	5	263	260	44
0	6	0	515	571	4	1	16	1	537	407	21	3	15	2	332	379-103		2	19	3	277	427	60	3	3	5	171	208	-75
2	6	0	469	524	17	3	16	1	405	406	42	0	16	2	516	415	49	1	20	3	71	105	-71	2	4	5	68	77	-68
1	7	0	213	204	9	0	17	1	599	699	21	1	16	2	407	466	32	1	21	3	72	103	-72	3	4	5	55	83	-55
0	8	0	501	506	8	1	17	1	836	738	36	2	16	2	67	154	-67	2	21	3	373	529	83	0	5	5	752	730	25
2	8	0	537	537	67	2	17	1	1497	1472	17	1	17	2	147	186-146		0	0	4	155	134	-87	1	5	5	809	706	32
1	9	0	864	891	15	3	17	1	65	173	-64	2	17	2	100	152-100		1	0	4	1630	1332	62	2	5	5	709	845	34
0	10	0	679	557	37	1	18	1	830	650	33	0	18	2	137	143-136		2	0	4	2279	2308	33	3	5	5	276	275	42
1	11	0	2155	2065	17	3	18	1	482	554	43	2	18	2	94	145	-94	1	1	4	947	937	8	1	6	5	1177	945	33
3	11	0	1746	1681	36	0	19	1	528	347	58	1	19	2	59	60	-59	3	1	4	258	255	57	3	6	5	1101	1181	84
0	12	0	3441	3171	7	1	19	1	537	394	56	2	19	2	61	23	-60	0	2	4	450	372	14	1	7	5	571	595	19
2	12	0	608	582	53	3	19	1	206	223-114		1	20	2	197	180-197		2	2	4	295	277	13	2	7	5	282	310	39
0	14	0	506	604	68	1	20	1	152	116-152		2	20	2	72	218	-72	1	3	4	310	293	11	3	7	5	182	273-181	
2	14	0	329	273	33	0	21	1	639	537	29	3	20	2	293	330-121		2	3	4	192	170	24	1	8	5	224	229	21
3	15	0	60	105	-59	1	21	1	414	362	28	1	21	2	93	103	-93	3	3	4	135	295-134		2	8	5	58	21	-58
0	16	0	205	307	56	2	21	1	138	129-138		0	22	2	488	378	35	0	4	4	845	997	8	3	8	5	216	263	-77
2	16	0	641	613	37	3	21	1	158	163-157		1	22	2	258	175	57	1	4	4	279	348	11	0	9	5	141	146	-65

56	1	17	0	291	369	44	1	22	1	77	122	-77	2	22	2	424	471	46	3	4	4	294	225	37	1	9	5	394	450	22
57	2	18	0	234	194	56	2	22	1	124	233	-123	1	0	3	461	422	8	1	5	4	52	166	-52	3	9	5	89	213	-88
58	1	19	0	102	146	-101	3	22	1	346	242	79	2	0	3	37	55	-37	2	5	4	64	116	-64	1	10	5	161	215	-50
59	3	19	0	74	117	-73	0	23	1	259	167	-182	3	0	3	165	388	-103	3	5	4	64	201	-63	2	10	5	202	235	36
60	0	20	0	706	626	57	2	23	1	189	210	-189	0	1	3	336	289	21	0	6	4	353	271	87	3	10	5	206	294	-205
61	2	20	0	167	224	-166	0	0	2	1260	1344	5	2	1	3	243	277	9	2	6	4	168	274	35	1	11	5	126	143	-125
62	3	21	0	202	418	-202	1	0	2	2000	1749	10	1	2	3	700	622	4	1	7	4	136	185	-60	2	11	5	61	81	-61
63	0	22	0	888	625	52	2	0	2	2789	2716	84	3	2	3	370	364	43	2	7	4	114	103	-65	1	12	5	92	134	-92
64	2	22	0	484	391	81	1	1	2	931	967	4	0	3	3	1311	1231	4	2	8	4	62	190	-62	3	12	5	151	173	-151
65	1	0	1	562	508	7	2	1	2	541	535	14	2	3	3	146	160	15	3	8	4	352	365	47	0	13	5	71	102	-71
66	0	1	1	383	416	1	0	2	2	378	366	6	3	3	3	46	132	-46	1	9	4	244	244	27	1	13	5	189	172	47
67	1	1	1	357	376	4	2	2	2	394	412	16	1	4	3	11	112	-11	2	9	4	69	99	-69	3	13	5	59	108	-59
68	1	2	1	112	125	5	2	3	2	381	410	18	3	4	3	79	170	-79	3	9	4	150	225	-150	1	14	5	67	118	-66
69	0	3	1	329	318	4	0	4	2	205	257	7	0	5	3	2710	2634	8	0	10	4	59	31	-58	2	14	5	168	214	-104
70	1	3	1	932	996	5	1	4	2	181	148	6	2	5	3	595	648	9	1	10	4	85	80	-85	3	14	5	69	75	-69
71	1	4	1	235	265	3	2	4	2	316	344	35	1	6	3	1979	2137	12	2	10	4	216	196	36	1	15	5	343	309	31
72	2	4	1	33	57	-33	1	5	2	108	110	18	2	6	3	133	115	-74	1	11	4	1119	1011	32	2	15	5	171	222	-81
73	0	5	1	695	715	2	2	5	2	544	512	13	3	6	3	1941	1856	120	2	11	4	66	85	-66	1	16	5	228	251	61
74	1	5	1	1266	1269	4	0	6	2	446	400	19	0	7	3	1618	1392	13	3	11	4	816	834	41	0	0	6	1663	1872	31
75	2	5	1	2186	2206	70	2	6	2	289	332	46	1	7	3	101	171	-100	0	12	4	320	302	52	2	0	6	489	482	27
76	1	6	1	1986	2034	7	3	6	2	41	25	-40	2	7	3	101	125	-85	1	12	4	767	708	24	1	1	6	430	541	22
77	2	6	1	948	806	17	2	7	2	360	354	11	1	8	3	469	427	21	2	12	4	1418	1451	26	3	1	6	535	601	-178
78	0	7	1	188	229	8	3	7	2	166	226	-58	2	8	3	52	80	-52	0	14	4	172	139	-118	0	2	6	205	208	38
79	1	7	1	895	878	4	0	8	2	350	331	10	3	8	3	423	444	54	1	14	4	98	100	-98	1	2	6	65	37	-65
80	2	7	1	978	967	29	1	8	2	794	829	5	0	9	3	750	672	12	2	14	4	170	247	-62	2	2	6	174	197	-56
81	1	8	1	536	495	26	2	8	2	101	94	-85	1	9	3	70	96	-70	3	14	4	58	51	-58	1	3	6	73	108	-73
82	0	9	1	791	742	13	3	8	2	253	268	52	2	9	3	571	562	20	1	15	4	255	209	25	3	3	6	114	158	-113
83	1	9	1	855	681	19	1	9	2	475	460	6	1	10	3	769	630	15	3	15	4	188	322	-188	0	4	6	192	128	51
84	2	9	1	211	212	17	2	9	2	438	443	19	3	10	3	176	151	-176	0	16	4	318	326	44	1	4	6	93	117	-92
85	3	9	1	192	217	38	0	10	2	166	179	18	0	11	3	515	367	45	2	16	4	66	35	-66	2	4	6	415	424	46
86	1	10	1	356	254	7	1	10	2	156	113	17	2	11	3	59	24	-58	3	16	4	245	242	-198	1	5	6	68	99	-68
87	2	10	1	451	419	18	2	10	2	159	224	24	1	12	3	270	268	21	1	17	4	73	70	-72	3	5	6	70	44	-70
88	3	10	1	758	845	56	1	11	2	1407	1435	15	3	12	3	56	212	-55	2	17	4	115	104	-114	0	6	6	157	145	-99
89	1	11	1	187	183	11	2	11	2	153	225	42	0	13	3	163	117	-163	0	18	4	206	170	-67	2	6	6	154	193	-71
90	2	11	1	268	254	13	3	11	2	1162	1202	62	2	13	3	254	263	31	2	18	4	128	126	-128	1	7	6	111	115	-111
91	3	11	1	94	101	-93	1	12	2	1720	1681	9	1	14	3	102	116	-102	2	19	4	71	66	-71	0	8	6	226	312	40
92	1	12	1	302	295	11	2	12	2	1499	1596	20	3	14	3	348	431	83	3	19	4	66	138	-65	1	8	6	94	260	-94
93	2	12	1	63	49	-62	3	12	2	63	112	-62	0	15	3	800	736	60	1	0	5	161	208	-64	2	8	6	282	313	43
94	3	12	1	243	248	23	1	13	2	58	142	-57	2	15	3	62	67	-61	1	1	5	155	184	38	1	9	6	46	115	-45
95	0	13	1	233	229	19	2	13	2	348	440	32	1	16	3	469	405	18	2	1	5	67	39	-67	2	9	6	64	166	-63
96	1	13	1	306	252	10	3	13	2	106	154	-106	3	16	3	273	310	51	3	1	5	61	125	-60	3	9	6	308	416	-307
97	2	13	1	48	6	-48	0	14	2	267	210	33	0	17	3	1735	1803	25	1	2	5	65	106	-64	0	10	6	169	149	-83

98
99
00
01
02

2 14 1 456 422 21 1 14 2 59 55 -58 2 17 3 606 541 28 2 2 5 168 289 -73 1 10 6 36 44 -36