

AM-91-450

The crystal structure of werdingite $(\text{Mg,Fe})_2\text{Al}_{12}(\text{Al,Fe})_2\text{Si}_4(\text{B,Al})_4\text{O}_{37}$, and its relationship to sillimanite, mullite, and grandidierite

Margaret L. Niven, David J. Waters, John M. Moore

For deposit: Table 2

American Mineralogist, 76, 1-2, 246-256.

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 1

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	0	0	19	-19	-6	2	0	48	48	7	3	0	63	65	3	5	0	82	82	3	7	0	66	66
2	0	0	9	9	-5	2	0	62	62	8	3	0	41	41	4	5	0	19	-19	4	7	0	4	4
3	0	0	17	17	-4	2	0	67	66	9	3	0	18	18	5	5	0	53	54	5	7	0	45	45
4	0	0	85	-83	-3	2	0	48	-46	-9	3	0	28	-29	5	5	0	6	6	6	7	0	46	44
5	0	0	6	4	-2	2	0	164	170	-8	4	0	23	23	7	5	0	21	23	7	7	0	11	-1
6	0	0	125	128	-1	2	0	94	-94	-7	4	0	24	23	8	5	0	30	30	8	8	0	18	-2
7	0	0	41	-41	0	2	0	26	-25	-6	4	0	16	16	8	5	0	7	10	-7	8	0	6	6
8	0	0	88	91	1	2	0	70	71	-5	4	0	18	17	-8	6	0	31	35	-6	8	0	35	-3
9	0	0	15	16	2	2	0	110	112	-4	4	0	22	123	-7	6	0	16	-13	-5	8	0	42	4
0	0	0	24	-23	3	2	0	68	67	-3	4	0	14	-14	-6	6	0	78	-78	-4	8	0	7	-1
1	0	0	20	23	4	2	0	159	168	-2	4	0	78	77	-5	6	0	27	-29	-2	8	0	9	-9
1	0	0	40	41	5	2	0	95	-95	-1	4	0	49	-45	-4	6	0	39	37	-1	8	0	45	-4
1	0	0	52	54	6	2	0	33	32	0	4	0	51	48	-3	6	0	17	17	0	8	0	8	8
1	0	0	38	-38	7	2	0	11	11	1	4	0	23	21	-2	6	0	22	23	1	8	0	15	-1
1	0	0	31	-31	8	2	0	14	-15	2	4	0	79	78	-1	6	0	33	33	2	8	0	29	2
1	0	0	65	-63	9	2	0	16	16	3	4	0	40	-39	0	6	0	101	100	3	8	0	74	-7
1	0	0	9	0	-10	3	0	47	51	4	4	0	53	54	1	6	0	39	-40	4	8	0	44	-4
1	0	0	134	139	-9	3	0	9	9	5	4	0	20	20	2	6	0	50	49	5	8	0	44	-4
1	0	0	82	82	-8	3	0	20	23	6	4	0	48	49	3	6	0	16	-15	6	8	0	14	-1
1	0	0	22	21	-7	3	0	48	48	7	4	0	47	49	4	6	0	29	27	-6	9	0	6	6
1	0	0	107	118	-6	3	0	2	2	8	4	0	47	49	5	6	0	5	-4	-5	9	0	3	-4
1	0	0	115	-121	-5	3	0	2	2	9	4	0	19	-20	6	6	0	39	41	-4	9	0	18	-1
1	0	0	35	40	-4	3	0	56	57	-9	5	0	24	25	7	6	0	13	-11	-3	9	0	32	-3
1	0	0	49	47	-3	3	0	61	59	-8	5	0	67	-67	8	6	0	29	33	-2	9	0	2	-1
1	0	0	27	28	-2	3	0	13	11	-7	5	0	33	34	-8	7	0	51	53	-1	9	0	47	-4
1	0	0	68	68	-1	3	0	123	-118	-6	5	0	56	57	-7	7	0	31	-30	0	9	0	3	3
1	0	0	40	41	0	3	0	51	53	-5	5	0	24	24	-6	7	0	26	-27	1	9	0	8	8
1	0	0	54	-56	1	3	0	75	81	-4	5	0	45	44	-5	7	0	22	21	2	9	0	18	1
1	0	0	32	34	-2	3	0	139	140	-3	5	0	63	63	-4	7	0	51	-50	3	9	0	27	2
1	0	0	35	37	3	3	0	4	-3	-1	5	0	51	-51	-3	7	0	22	122	4	9	0	10	-2
1	0	0	28	37	4	3	0	8	-3	0	5	0	67	-66	-2	7	0	61	61	5	9	0	10	-3
1	0	0	56	58	5	3	0	63	65	1	5	0	15	-14	0	7	0	48	48	-4	10	0	30	10
1	0	0	5	-6	6	3	0	76	-78	2	5	0	54	54	1	7	0	11	11	-3	10	0	11	-1

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	0	1	15	-14	7	2	1	16	17	9	3	1	12	-14	5	5	1	3	-2	5	8	1	10	-1
1	1	1	16	-15	6	2	1	17	-17	8	4	1	6	6	5	5	1	7	-8	5	8	1	3	-
1	1	1	31	-31	5	2	1	4	-4	10	4	1	12	-12	6	7	1	23	-25	6	8	1	6	-
1	1	1	19	-19	4	2	1	2	-2	7	4	1	7	7	5	5	1	11	-12	5	8	1	5	-
1	1	1	19	-20	3	2	1	20	-19	6	4	1	15	15	8	6	1	5	-4	1	8	1	23	-2
1	1	1	31	-31	2	2	1	29	-28	5	4	1	7	-7	7	6	1	22	-22	1	8	1	7	-
1	1	1	34	-34	1	2	1	20	-20	4	4	1	32	32	6	6	1	15	-15	1	8	1	11	-
1	1	1	2	-1	0	2	1	36	-35	3	4	1	15	-15	6	6	1	9	-10	3	8	1	12	-1
1	1	1	20	20	1	2	1	23	24	1	4	1	38	-39	6	6	1	15	-15	4	8	1	8	-
1	1	1	4	5	2	2	1	5	5	1	4	1	8	8	3	6	1	3	3	5	8	1	5	-
1	1	1	8	8	3	2	1	37	-36	0	4	1	11	11	2	6	1	7	-7	6	9	1	4	-
1	1	1	19	-20	4	2	1	4	3	2	4	1	40	-40	1	6	1	7	-7	5	9	1	5	-
1	1	1	24	-25	5	2	1	5	-5	3	4	1	12	-12	0	6	1	2	1	4	9	1	11	1
1	1	1	2	2	6	2	1	18	-18	3	4	1	15	-15	1	6	1	17	-17	3	9	1	4	-
1	1	1	8	8	7	2	1	11	-10	4	4	1	5	-6	3	6	1	3	2	2	9	1	9	-
1	1	1	17	-17	8	2	1	28	-29	5	4	1	21	22	3	6	1	3	4	1	9	1	13	-
1	1	1	35	35	10	2	1	23	24	6	4	1	10	-9	4	6	1	2	2	0	9	1	21	-2
1	1	1	14	-14	9	2	1	7	-6	7	4	1	18	-19	5	6	1	3	-3	1	9	1	7	-
1	1	1	11	-12	8	2	1	5	-4	8	4	1	7	8	6	6	1	5	5	2	9	1	13	-
1	1	1	18	-18	5	2	1	4	3	9	4	1	10	-11	7	6	1	15	17	3	9	1	8	-
1	1	1	35	36	11	2	1	18	-19	5	5	1	9	10	7	7	1	8	-9	3	10	1	8	-
1	1	1	10	10	12	2	1	2	0	8	5	1	19	20	6	7	1	5	4	2	10	1	13	-
1	1	1	43	-43	13	2	1	29	29	7	5	1	12	14	6	7	1	35	-36	1	10	1	7	-
1	1	1	6	6	14	2	1	35	35	6	5	1	2	2	7	7	1	9	-10	0	10	1	7	-
1	1	1	40	40	15	2	1	5	35	5	5	1	17	-17	7	7	1	8	8	1	10	1	19	-2
1	1	1	4	4	16	2	1	19	-21	4	5	1	3	-3	8	7	1	8	8	1	10	1	10	-
1	1	1	14	13	17	2	1	12	-11	3	5	1	27	-28	9	7	1	4	5	1	11	1	27	2
1	1	1	15	-17	3	2	1	38	-38	2	5	1	12	-12	1	7	1	21	-2	0	11	1	6	-
1	1	1	7	-7	4	2	1	14	-15	1	5	1	15	-15	3	7	1	5	-5	4	10	1	15	-
1	1	1	5	8	5	2	1	10	-10	0	5	1	24	25	4	7	1	12	13	1	10	1	21	1
1	1	1	8	8	6	2	1	2	-1	1	5	1	12	11	6	7	1	4	2	1	10	1	6	-
1	1	1	5	6	7	2	1	21	22	2	5	1	13	13	7	7	1	4	5	1	10	1	11	1
1	1	1	37	38	8	2	1	18	19	4	5	1	7	-8	8	8	1	5	-4	1	10	1	28	-

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 5

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	0	2	23	-22	-5	2	2	5	-6	-10	4	2	5	5	7	5	2	28	29	-5	8	2	5	-
4	0	2	4	-22	-14	2	2	60	-60	-9	4	2	37	-38	8	5	9	9	11	-4	8	2	10	-
2	0	2	2	-22	-33	2	2	14	-12	-8	4	2	22	-22	6	6	6	13	-11	-14	8	2	9	-
37	36	36	37	36	-12	2	2	26	25	-7	4	4	22	22	6	6	6	13	-14	-13	8	2	9	-
46	46	46	46	46	-11	2	2	38	37	-6	4	4	88	88	6	6	6	33	-33	-11	8	2	27	-
19	-19	-19	19	-19	0	2	2	21	22	-5	4	4	43	42	6	6	6	31	-31	0	8	2	29	-
13	-13	-13	13	-13	1	2	2	38	37	-4	4	4	9	9	6	6	6	30	29	-3	8	2	9	-
26	-26	-26	26	-26	2	2	2	80	-78	-3	4	4	36	-35	6	6	6	7	6	1	8	2	20	-
16	-16	-16	16	-16	3	2	2	19	-19	-2	4	4	11	-11	6	6	6	7	5	3	8	2	6	-
16	-16	-16	16	-16	4	2	2	13	-12	-1	4	4	16	-16	6	6	6	25	25	4	8	2	14	-
6	-6	-6	6	-6	5	2	2	34	35	0	4	4	10	-9	6	6	6	5	5	5	8	2	16	-
11	-11	-11	11	-11	6	2	2	33	34	1	4	4	49	47	6	6	6	19	20	5	8	2	16	-
26	-26	-26	26	-26	7	2	2	6	6	2	4	4	4	4	6	6	6	15	15	9	8	2	23	-
64	-64	-64	64	-64	8	2	2	6	6	3	4	4	12	11	6	6	6	33	-34	2	8	2	10	-
233	-233	-233	237	-237	9	2	2	6	6	4	4	4	6	7	6	6	6	16	15	-1	8	2	26	-
37	-37	-37	22	-22	10	2	2	16	-15	-1	4	4	43	-44	6	6	6	23	20	0	8	2	13	-
22	-22	-22	39	-39	11	2	2	11	9	7	4	4	3	2	6	6	6	9	-10	9	8	2	4	-
53	-53	-53	8	-8	11	2	2	12	13	8	4	4	26	27	6	6	6	22	22	2	8	2	22	-
8	-8	-8	26	-26	11	2	2	15	-15	8	4	4	3	3	7	7	7	10	-9	3	8	2	16	-
26	-26	-26	45	-45	11	2	2	25	23	7	4	4	10	10	6	6	6	16	17	10	8	2	27	-
45	-45	-45	37	-37	11	2	2	9	9	6	4	4	2	1	6	6	6	3	-3	10	8	2	10	-
14	-14	-14	14	-14	11	2	2	15	15	6	4	4	12	13	6	6	6	1	-2	10	8	2	13	-
8	-8	-8	20	-20	11	2	2	20	-20	5	4	4	1	1	6	6	6	1	-2	10	8	2	11	-
11	-11	-11	14	-14	11	2	2	19	-18	5	4	4	3	3	6	6	6	27	-26	1	8	2	5	-
20	-20	-20	12	-12	11	2	2	32	31	5	4	4	3	0	6	6	6	21	-21	1	8	2	11	-
12	-12	-12	14	-14	11	2	2	24	24	5	4	4	5	3	6	6	6	16	-16	1	8	2	10	-
14	-14	-14	26	-26	11	2	2	3	0	5	4	4	4	5	6	6	6	13	15	1	8	2	8	-
26	-26	-26	20	-20	11	2	2	10	-10	5	4	4	6	4	6	6	6	39	39	1	8	2	11	-
20	-20	-20	13	-13	11	2	2	4	4	5	4	4	24	-25	6	6	6	20	20	1	8	2	22	-
20	-20	-20	13	-13	11	2	2	4	4	5	4	4	4	4	6	6	6	16	-14	1	8	2	8	-
27	-27	-27	27	-27	11	2	2	30	30	5	4	4	23	-22	6	6	6	10	-13	1	8	2	10	-
2	-2	-2	13	-13	11	2	2	30	30	5	4	4	23	-23	6	6	6	20	-23	1	8	2	14	-
2	-2	-2	11	-11	11	2	2	17	-16	5	4	4	27	-30	6	6	6	6	-6	1	8	2	10	-
11	-11	-11	11	-11	9	2	2	8	6	6	5	5	3	4	6	6	6	23	23	3	8	2	13	-

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 6

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
4	-10	3	12	13	2	-7	3	13	-14	3	-5	3	29	-29	2	-3	3	30	28					
-6	-9	3	6	-8	3	-7	3	28	28	4	-5	3	10	9	3	-3	3	4	4					
-5	-9	3	17	-19	4	-7	3	6	6	5	-5	3	7	-7	4	-3	3	7	4					
-4	-9	3	18	20	5	-7	3	10	-11	6	-5	3	6	-6	5	-3	3	3	6					
-3	-9	3	6	-5	6	-7	3	24	24	7	-5	3	22	23	6	-3	3	22	22					
-2	-9	3	20	-20	7	-7	3	11	11	-10	-4	3	3	3	8	-3	3	24	-22					
-1	-9	3	14	14	-8	-6	3	21	23	-9	-4	3	23	-24	7	-3	3	7	-25					
0	-9	3	13	13	-7	-6	3	5	-5	-8	-4	3	28	-29	9	-3	3	4	-3					
2	-9	3	5	6	-6	-6	3	18	-19	-6	-4	3	5	5	-10	-2	3	5	-4					
3	-9	3	6	6	-5	-6	3	4	6	-5	-4	3	2	1	-9	-2	3	6	-3					
4	-9	3	5	6	-4	-6	3	14	-14	-4	-4	3	14	-15	8	-2	3	16	-18					
5	-9	3	13	14	-3	-6	3	27	-27	-3	-4	3	36	-36	-7	-2	3	16	-16					
-7	-8	3	17	-17	-2	-6	3	13	14	-1	-4	3	16	-17	-6	-2	3	6	-5					
-5	-8	3	11	13	-1	-6	3	34	-35	0	-4	3	25	-25	-5	-2	3	30	-51					
-3	-8	3	25	-26	0	-6	3	18	17	1	-4	3	34	-34	-4	-2	3	3	-33					
-1	-8	3	22	24	1	-6	3	15	15	2	-4	3	23	22	-3	-2	3	27	28					
-2	-8	3	12	-14	2	-6	3	26	-26	3	-4	3	13	-12	-2	-2	3	9	-9					
-1	-8	3	12	-12	3	-6	3	3	-4	4	-4	3	13	13	-1	-2	3	8	-36					
0	-8	3	11	11	4	-6	3	31	32	5	-4	3	2	2	0	-2	3	5	33					
1	-8	3	22	-24	5	-6	3	10	-11	6	-4	3	10	10	1	-2	3	6	-5					
2	-8	3	19	20	6	-6	3	3	-2	7	-4	3	20	20	2	-2	3	2	32					
3	-8	3	28	-22	7	-6	3	16	-17	8	-4	3	13	13	-9	-4	3	8	32					
4	-8	3	5	-29	-10	-5	3	11	11	9	-4	3	24	-25	3	-2	3	8	-33					
5	-8	3	5	-5	-9	-5	3	8	-8	-9	-3	3	8	8	5	-2	3	3	-33					
6	-8	3	21	22	-8	-5	3	7	6	-8	-3	3	9	9	6	-2	3	7	27					
7	-8	3	5	-5	-7	-5	3	3	4	-7	-3	3	11	11	7	-2	3	7	-17					
-7	-7	3	17	-19	-6	-5	3	27	-28	-6	-3	3	4	3	8	-2	3	17	-17					
-6	-7	3	29	31	-5	-5	3	14	-13	-5	-3	3	3	-3	9	-2	3	20	22					
-5	-7	3	23	24	-4	-5	3	27	27	-4	-3	3	28	28	-11	-1	3	12	13					
-4	-7	3	25	-27	-2	-5	3	37	37	-3	-3	3	19	-18	-10	-1	3	3	-3					
-3	-7	3	17	17	-1	-5	3	3	3	-2	-3	3	26	-26	-9	-1	3	8	-3					
-2	-7	3	11	-11	0	-5	3	22	-22	-1	-3	3	26	26	-8	-1	3	16	-17					
-1	-7	3	16	16	1	-5	3	45	45	0	-3	3	29	28	-7	-1	3	20	-20					
1	-7	3	5	-5	2	-5	3	14	14	1	-3	3	29	-28	-6	-1	3	45	45					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	1	4	20	19	-6	3	4	57	57	-8	5	4	25	24	-4	7	4	6	6	0	-10	5	2	
1	1	4	153	151	-5	3	4	25	-24	-7	5	4	19	18	-3	7	4	2	2	0	-10	5	2	
1	1	4	16	23	-4	3	4	9	-10	-6	5	4	23	-23	-2	7	4	3	2	-10	5	1		
1	1	4	104	-101	-3	3	4	34	32	-5	5	4	37	36	-1	7	4	6	1	-10	5	3		
1	1	4	53	51	-2	3	4	58	-56	-4	5	4	6	-5	0	7	4	8	7	-7	5	3		
1	1	4	77	-76	-1	3	4	132	134	-3	5	4	66	66	1	7	4	4	2	-5	5	3		
1	1	4	55	54	0	3	4	40	38	-2	5	4	41	41	2	7	4	7	7	-4	5	3		
1	1	4	86	88	1	3	4	41	40	-1	5	4	1	0	3	7	4	4	4	-4	5	3		
1	1	4	24	25	2	3	4	74	73	0	5	4	7	-5	4	7	4	4	4	-3	5	3		
1	1	4	16	-13	3	3	4	8	-9	1	5	4	45	46	5	7	4	4	1	-2	5	3		
1	1	4	49	53	4	3	4	54	-54	2	5	4	28	-28	-6	7	4	4	3	0	5	3		
1	1	4	6	-5	5	3	4	56	57	3	5	4	77	78	-5	7	4	4	15	13	1	8		
1	1	4	52	-52	6	3	4	4	-6	4	5	4	41	41	-4	7	4	4	6	6	3	5		
1	1	4	21	-21	7	3	4	45	45	5	5	4	21	21	-3	7	4	4	7	-6	5	14		
1	1	4	13	11	8	3	4	22	23	6	5	4	16	16	-2	7	4	4	30	27	4	15		
1	1	4	49	49	-10	4	4	14	14	7	5	4	9	1	-1	7	4	4	30	27	4	15		
1	1	4	33	31	-9	4	4	47	46	-8	6	4	59	60	0	7	4	4	6	-5	5	18		
1	1	4	193	198	-8	4	4	78	81	-7	6	4	13	11	1	7	4	4	12	12	-5	12		
1	1	4	31	30	-7	4	4	46	-46	-6	6	4	45	44	2	7	4	4	4	-4	5	18		
1	1	4	28	26	-6	4	4	66	65	-5	6	4	23	24	3	7	4	4	29	-29	-1	12		
1	1	4	8	8	-5	4	4	33	-34	-4	6	4	16	16	-4	7	4	4	14	12	0	12		
1	1	4	12	-11	-4	4	4	38	-38	-3	6	4	37	-37	-3	7	4	4	17	18	1	5		
1	1	4	19	-18	-3	4	4	56	56	-2	6	4	67	67	-2	7	4	4	17	-18	2	9		
1	1	4	152	157	-2	4	4	83	81	-1	6	4	39	-40	-1	7	4	4	46	48	3	27		
1	1	4	32	33	-1	4	4	20	18	0	6	4	24	22	1	7	4	4	20	20	5	27		
1	1	4	43	43	0	4	4	174	185	1	6	4	47	47	-3	7	4	4	16	-17	5	4		
1	1	4	19	19	1	4	4	87	-88	2	6	4	50	50	-2	7	4	4	10	11	-9	4		
1	1	4	8	7	2	4	4	22	-28	3	6	4	4	4	0	7	4	4	10	-12	8	25		
1	1	4	39	40	3	4	4	23	25	4	6	4	43	45	1	7	4	4	4	-5	5	7		
1	1	4	6	-7	5	4	4	15	13	5	6	4	59	-57	-6	7	4	4	16	-16	-7	11		
1	1	4	40	40	6	4	4	27	27	6	6	4	31	32	-5	7	4	4	5	-6	5	11		
1	1	4	33	-32	7	4	4	67	69	-7	7	4	27	27	-4	7	4	4	10	-13	-3	10		
1	1	4	63	66	-9	5	4	48	-49	-6	7	4	6	-6	-2	7	4	4	9	-10	-2	7		

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 10

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	-7	5	6	5	5	-5	5	3	3	2	-3	5	4	4	-1	-1	5	7	-6	-6	1	5	10	
2	-7	5	9	-9	6	-5	5	3	1	3	-5	5	11	-11	0	-1	5	19	-18	-5	1	5	4	
3	-7	5	5	-4	7	-5	5	2	-1	4	-5	5	26	-26	1	-1	5	23	-21	-4	1	5	3	
4	-7	5	6	6	8	-5	5	4	-6	5	-5	5	4	5	2	-1	5	19	-18	-3	1	5	3	
5	-7	5	15	-15	8	-5	5	16	-17	6	-5	5	18	17	3	-1	5	4	-4	-2	1	5	9	
6	-7	5	18	-19	9	-4	5	18	17	7	-4	5	2	2	4	-1	5	21	-20	-1	1	5	7	
7	-7	5	11	-12	10	-4	5	15	15	8	-4	5	2	2	5	-1	5	11	-11	0	1	5	30	
8	-7	5	5	-6	11	-4	5	15	15	9	-4	5	5	3	6	-1	5	22	-23	1	1	5	16	
9	-7	5	2	-2	12	-4	5	20	-20	10	-4	5	12	-12	7	-1	5	5	-4	2	1	5	21	
10	-6	5	6	6	13	-4	5	3	3	11	-4	5	2	2	8	-1	5	5	5	3	1	5	4	
11	-6	5	10	10	14	-4	5	19	-19	12	-4	5	46	47	-11	0	5	19	20	4	1	5	8	
12	-6	5	25	25	15	-4	5	15	-14	13	-4	5	15	16	-10	0	5	6	7	5	1	5	12	
13	-6	5	5	4	16	-4	5	7	-8	14	-4	5	23	-22	-9	0	5	4	-4	-1	1	5	11	
14	-6	5	8	-9	17	-4	5	29	28	15	-4	5	16	15	-8	0	5	12	12	6	1	5	3	
15	-6	5	9	-9	18	-4	5	7	7	16	-4	5	8	8	-7	0	5	2	2	7	1	5	4	
16	-6	5	31	31	19	-4	5	5	-4	17	-4	5	12	-10	-6	0	5	23	-24	-1	2	5	9	
17	-6	5	19	-18	20	-4	5	18	-18	18	-4	5	16	-17	-5	0	5	6	-7	-1	2	5	13	
18	-6	5	22	-22	21	-4	5	15	14	19	-4	5	17	-16	-4	0	5	14	14	-8	2	5	17	
19	-6	5	10	9	22	-4	5	3	3	20	-4	5	16	-15	-3	0	5	7	8	-7	2	5	4	
20	-6	5	7	8	23	-4	5	26	-26	21	-4	5	18	-18	-2	0	5	1	0	-6	2	5	3	
21	-6	5	2	-5	24	-4	5	18	-17	22	-4	5	14	-14	-1	0	5	11	-11	-5	2	5	7	
22	-6	5	6	6	25	-4	5	6	6	23	-4	5	10	-9	0	0	5	4	-5	-4	2	5	6	
23	-6	5	21	-21	26	-4	5	4	4	24	-4	5	6	6	1	0	5	28	-26	-3	2	5	23	
24	-6	5	7	-4	27	-4	5	6	7	25	-4	5	5	5	2	0	5	13	-14	-1	2	5	17	
25	-6	5	12	13	28	-4	5	7	5	26	-4	5	22	-23	3	0	5	46	-46	-2	2	5	4	
26	-6	5	14	14	29	-4	5	16	-16	27	-4	5	10	-9	4	0	5	27	-26	0	2	5	4	
27	-6	5	10	10	30	-4	5	5	-4	28	-4	5	14	15	6	0	5	12	-12	1	2	5	28	
28	-6	5	23	-22	31	-4	5	17	-17	29	-4	5	12	13	7	0	5	11	13	-1	2	5	8	
29	-6	5	24	-23	32	-4	5	24	-24	30	-4	5	8	7	8	0	5	11	13	2	2	5	18	
30	-6	5	3	3	33	-4	5	17	16	31	-4	5	16	-15	8	0	5	3	-2	3	2	5	6	
31	-6	5	17	-17	34	-4	5	28	27	32	-4	5	16	-15	-1	1	5	4	5	5	2	5	6	
32	-6	5	21	-20	35	-4	5	16	-15	33	-4	5	18	-18	-10	1	5	7	-7	6	2	5	27	
33	-6	5	5	-5	36	-4	5	13	-13	34	-4	5	22	-22	-8	1	5	16	-17	7	2	5	23	
34	-6	5	3	3	37	-4	5	8	-8	35	-4	5	24	-23	-7	1	5	20	-20	8	2	5	5	
35	-6	5	6	5	38	-4	5	5	-4	36	-4	5	2	0	-7	1	5	16	-17	9	2	5	6	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 11

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	
14			14	15	5			19	19	3			5	-7	4			0	21	22					
10			10	-10	5			13	-14	4			11	-14	8			0	17	-19					
10			10	-10	5			6	-5	4			7	-10	8			0	10	10					
14			14	-13	5			4	-4	8			5	-9	8			0	8	8					
15			15	14	5			4	5	8			5	-12	8			0	20	-21					
32			32	32	5			11	11	8			11	4	8			0	30	31					
16			16	-16	5			11	-4	8			17	4	8			0	30	31					
12			12	-12	5			19	-21	8			4	3	8			0	11	12					
9			9	9	5			12	12	6			23	-21	6			0	35	-34					
19			19	19	5			19	21	6			15	-14	6			0	5	3					
15			6	-6	5			5	-7	6			13	-12	6			0	3	-3					
21			7	-21	6			13	-14	6			13	-12	6			0	19	19					
7			3	-7	6			5	-5	6			3	15	6			0	33	34					
18			8	-20	6			28	-29	6			23	-22	6			0	22	-22					
13			13	-14	6			9	-9	6			8	-11	6			0	5	-5					
21			15	-21	6			12	13	6			11	12	6			0	12	-13					
15			2	-16	6			11	-11	6			30	30	6			0	15	18					
2			2	2	6			3	-4	6			32	-32	6			0	7	-5					
3			3	-3	6			4	-4	6			34	-33	6			0	26	-27					
2			2	2	6			1	-1	6			25	-25	6			0	4	-2					
11			11	-11	6			8	9	6			9	-9	6			0	14	-13					
6			6	-6	6			20	-21	6			8	8	6			0	33	33					
10			10	-10	6			4	-4	6			24	-24	6			0	5	5					
15			8	-16	6			7	-7	6			16	17	6			0	34	33					
9			9	9	6			3	3	6			25	26	6			0	41	40					
12			12	-12	6			7	-7	6			7	-7	6			0	10	9					
13			13	14	6			9	9	6			33	-33	6			0	14	-14					
5			5	-4	6			1	-1	6			13	-13	6			0	19	-18					
6			6	7	6			2	2	6			5	-5	6			0	6	-5					
7			7	-7	6			10	-10	6			7	-7	6			0	4	2					
2			2	2	6			1	1	6			19	-19	6			0	5	5					
10			10	-10	6			11	-11	6			5	-5	6			0	7	-5					
6			6	7	6			3	3	6			30	32	6			0	16	16					

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
10	-4	6	12	13				50	49	-1	-1	6	71	68										
19	-4	6	17	19		4	-	15	14	0	-1	6	39	37				6	6					
7	-4	6	22	24		5	6	21	-22	1	-1	6	15	13				6	6		6	6		
8	-4	6	21	22		7	-	9	-9	1	-1	6	29	-28				6	6		6	6		
6	-4	6	29	-28		8	-	4	-5	3	-1	6	49	-48				6	6		6	6		
5	-4	6	33	-32		11	3	7	-9	3	-1	6	36	-36				6	6		6	6		
4	-4	6	32	30		-1	-	2	-2	4	-1	6	21	-20				6	6		6	6		
3	-4	6	13	-13		10	-	28	-28	5	-1	6	30	31				6	6		6	6		
2	-4	6	38	38		8	-	20	-19	6	-1	6	30	30				6	6		6	6		
1	-4	6	28	26		7	-	35	36	8	-	6	8	9				6	6		6	6		
0	-4	6	21	-19		6	-	45	45	1	1	6	7	7				6	6		6	6		
3	-4	6	19	-19		5	-	29	28	1	0	6	11	-10				6	6		6	6		
2	-4	6	40	-40		4	-	15	-13	0	0	6	22	22				6	6		6	6		
3	-4	6	4	3		3	-	39	-37	0	0	6	13	-14				6	6		6	6		
5	-4	6	14	13		2	-	71	-67	0	0	6	49	-46				6	6		6	6		
6	-4	6	6	-6		1	-	48	-44	0	0	6	22	-20				6	6		6	6		
7	-4	6	18	18		0	-	12	10	0	0	6	8	-8				6	6		6	6		
8	-4	6	5	5		1	-	51	48	0	0	6	18	17				6	6		6	6		
8	-4	6	20	-20		2	-	29	27	0	0	6	39	39				6	6		6	6		
1	-4	6	14	-13		3	-	27	-27	0	0	6	9	-9				6	6		6	6		
1	-4	6	15	13		4	-	41	-41	0	0	6	35	32				6	6		6	6		
1	-4	6	12	12		6	-	5	4	0	0	6	64	-62				6	6		6	6		
1	-4	6	28	-29		7	-	18	18	0	0	6	38	-37				6	6		6	6		
1	-4	6	17	-16		8	-	10	10	0	0	6	5	4				6	6		6	6		
1	-4	6	3	-2		11	-	7	-7	0	0	6	19	18				6	6		6	6		
1	-4	6	40	39		10	-	19	-19	0	0	6	32	32				6	6		6	6		
1	-4	6	62	62		8	-	3	-1	0	0	6	12	-11				6	6		6	6		
1	-4	6	2	1		7	-	2	2	0	0	6	15	-14				6	6		6	6		
1	-4	6	35	-31		7	-	41	42	0	0	6	15	16				6	6		6	6		
1	-4	6	10	9		6	-	28	-27	0	0	6	22	23				6	6		6	6		
1	-4	6	39	-37		5	-	9	-8	0	0	6	15	-15				6	6		6	6		
1	-4	6	21	-20		4	-	49	-47	0	0	6	7	7				6	6		6	6		
1	-4	6	9	9		3	-	9	-8	0	0	6	15	-15				6	6		6	6		
2	-4	6	24	22		2	-	49	45	0	0	6	11	-11				6	6		6	6		

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-7	-2	7	34	-34	-8	0	7	11	-11	-6	2	7	11	11	-2	4	7	18	18	-2	7	7	3	
-1	-2	7	26	-26	-7	0	7	39	38	-5	2	7	13	-13	-1	4	7	16	-3	-1	7	7	14	
5	-2	7	22	22	-6	0	7	5	6	-4	2	7	16	16	1	4	7	3	16	0	7	7	5	
5	-2	7	15	-14	-5	0	7	16	-15	-3	2	7	33	34	1	4	7	15	16	-1	7	7	8	
1	-2	7	22	-23	-4	0	7	17	-16	-2	2	7	15	-15	2	4	7	3	16	-3	7	7	65	
1	-2	7	44	41	-3	0	7	27	-26	-1	2	7	2	-2	3	4	7	8	8	-2	8	8	7	
1	-2	7	21	-20	-2	0	7	21	-20	0	2	7	44	44	3	4	7	4	8	-1	8	8	41	
1	-2	7	31	30	-1	0	7	26	25	1	2	7	12	-12	4	4	7	24	25	-1	8	8	4	
1	-2	7	17	16	0	0	7	26	-27	2	2	7	12	11	8	4	7	17	-18	0	8	8	4	
1	-2	7	12	-12	1	0	7	28	-27	2	2	7	20	-20	5	4	7	12	-12	-1	8	8	57	
1	-2	7	16	16	1	0	7	9	38	4	2	7	19	-20	5	4	7	12	-13	-5	8	8	18	
1	-2	7	22	-23	3	0	7	9	-10	6	2	7	27	-28	5	4	7	23	-23	-4	8	8	20	
1	-2	7	22	23	4	0	7	31	31	6	2	7	15	-15	5	4	7	8	8	-1	8	8	10	
1	-2	7	13	15	5	0	7	12	12	8	2	7	8	-8	5	4	7	15	-16	-2	8	8	4	
1	-2	7	7	7	6	0	7	3	2	9	2	7	2	2	5	4	7	9	-10	0	8	8	26	
1	-2	7	27	-27	7	0	7	10	11	7	2	7	6	-6	5	4	7	5	4	1	8	8	73	
1	-2	7	11	11	-1	1	7	23	24	-6	2	7	3	3	5	4	7	13	-13	1	8	8	5	
1	-2	7	2	-1	-1	1	7	15	16	-5	2	7	36	36	5	4	7	12	12	-7	8	8	29	
1	-2	7	22	-22	-6	1	7	3	-3	-4	2	7	8	-8	5	4	7	17	19	2	8	8	35	
1	-2	7	13	12	-5	1	7	20	-20	-3	2	7	29	-30	5	4	7	4	-4	-6	8	8	7	
1	-2	7	29	29	-4	1	7	25	-23	-2	2	7	11	10	5	4	7	23	-24	-5	8	8	48	
1	-2	7	15	-14	-2	1	7	23	-23	-1	2	7	21	-21	5	4	7	6	7	-3	8	8	41	
1	-2	7	36	35	-1	1	7	26	-26	0	2	7	28	-29	6	4	7	26	27	-4	8	8	20	
1	-2	7	27	-27	-1	1	7	32	31	0	2	7	4	4	6	4	7	6	6	-2	8	8	37	
1	-2	7	12	-11	0	1	7	17	17	1	2	7	10	-10	6	4	7	9	9	-1	8	8	6	
1	-2	7	38	-12	-1	1	7	36	-36	3	2	7	5	-5	6	4	7	10	-10	1	8	8	40	
1	-2	7	13	-12	2	1	7	26	26	4	2	7	18	19	6	4	7	15	15	0	8	8	90	
1	-2	7	38	-37	5	1	7	9	10	5	2	7	3	-2	6	4	7	12	-13	-1	8	8	40	
1	-2	7	14	13	6	1	7	25	-25	6	2	7	6	-7	6	4	7	13	-14	2	8	8	19	
1	-2	7	4	4	7	1	7	6	-6	7	2	7	9	9	6	4	7	13	13	-1	8	8	20	
1	-2	7	9	9	-1	2	7	14	-13	8	2	7	9	32	6	4	7	3	-1	3	8	8	9	
1	-2	7	12	13	-8	2	7	14	-14	8	2	7	17	18	7	4	7	13	-14	-7	8	8	20	
1	-2	7	8	-8	-8	2	7	14	-14	7	2	7	15	-15	7	4	7	5	5	-8	8	8	9	
1	-2	7	27	-27	-8	2	7	14	-14	5	2	7	21	-21	7	4	7	9	-13	-6	8	8	18	
1	-2	7			-7	2	7	11	-11	4	2	7	14	-13	7	4	7	16	-17	-4	8	8	6	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	
-1	3	8	19	-19	0	-6	8	64	60	3	-4	8	58	56	1	-2	8	23	22	0	0	0	0	73	7
-1	1	8	75	71	2	-6	8	88	83	4	-4	8	42	41	2	-2	8	36	-35	1	2	0	0	41	3
0	0	8	17	16	3	-6	8	6	3	5	-4	8	4	-3	4	-2	8	85	-83	0	0	0	0	102	9
1	1	8	12	11	4	-6	8	7	6	6	-4	8	4	-3	5	-2	8	34	-33	0	0	0	0	70	-6
2	2	8	15	12	5	-6	8	20	20	-11	-3	8	28	29	6	-2	8	65	68	0	0	0	0	26	-2
3	3	8	34	32	6	-6	8	22	22	-10	-3	8	38	38	6	-2	8	18	18	0	0	0	0	14	2
4	4	8	14	-14	-10	-5	8	29	29	-9	-3	8	38	37	6	-2	8	16	18	0	0	0	0	10	-1
5	5	8	58	57	-9	-5	8	48	50	-8	-3	8	41	41	-11	-1	8	26	26	-6	6	0	0	44	4
-1	8	8	12	-9	-8	-5	8	51	-50	-7	-3	8	20	19	-10	-1	8	37	37	-7	7	1	1	45	4
8	8	8	17	18	-7	-5	8	54	53	-6	-3	8	22	21	-9	-1	8	25	-25	-6	6	1	1	34	3
-1	7	8	2	-3	-6	-5	8	6	6	-5	-3	8	46	45	-7	-1	8	36	-35	-5	5	1	1	6	6
-1	7	8	42	42	-5	-5	8	7	-7	-4	-3	8	60	-57	-6	-1	8	37	-35	-4	4	1	1	60	-5
-1	6	8	14	-13	-4	-5	8	62	60	-3	-3	8	75	71	-5	-1	8	32	31	-3	3	1	1	62	6
-1	5	8	75	73	-3	-5	8	79	75	-2	-3	8	4	2	-4	-1	8	65	63	-2	2	1	1	8	-1
-1	4	8	42	41	-2	-5	8	8	-7	-1	-3	8	38	35	-3	-1	8	36	34	-1	1	1	1	74	7
-1	3	8	15	-14	-1	-5	8	63	60	0	-3	8	68	63	-2	-1	8	3	34	-1	1	1	1	63	6
-1	2	8	22	-21	0	-5	8	66	-63	1	-3	8	36	34	-1	-1	8	78	74	0	0	1	1	9	-
-1	1	8	51	47	1	-5	8	2	-1	2	-3	8	40	-37	0	-1	8	62	-60	3	3	1	1	3	3
0	0	8	38	-36	2	-5	8	30	27	3	-3	8	36	35	1	-1	8	46	44	3	4	1	1	55	5
1	1	8	62	59	3	-5	8	44	42	4	-3	8	29	-28	2	-1	8	29	23	4	4	1	1	53	-5
2	2	8	34	32	5	-5	8	45	46	5	-3	8	36	35	3	-1	8	20	19	5	5	1	1	51	5
3	3	8	22	22	-10	-4	8	6	-6	6	-3	8	24	23	4	-1	8	42	41	6	6	2	2	29	2
4	4	8	36	36	-9	-4	8	14	14	7	-3	8	18	20	5	-1	8	37	37	-1	1	2	2	21	2
5	5	8	23	22	-8	-4	8	30	29	-11	-2	8	17	18	6	-1	8	40	-41	-1	1	2	2	20	2
10	10	8	31	33	-7	-4	8	68	-67	-10	-2	8	66	69	7	-1	8	27	28	-1	1	2	2	11	1
-1	9	8	2	1	-6	-4	8	101	100	-9	-2	8	33	-33	-10	0	8	42	44	-7	7	2	2	3	3
-1	8	8	35	36	-5	-4	8	42	42	-8	-2	8	86	86	-9	0	8	5	-2	-5	5	2	2	69	8
-1	7	8	22	22	-4	-4	8	73	71	-6	-2	8	33	-32	-8	0	8	42	42	-5	5	2	2	2	2
-1	6	8	50	49	-3	-4	8	55	52	-5	-2	8	20	20	-7	0	8	55	54	-4	4	2	2	62	6
-1	5	8	31	-30	-2	-4	8	2	1	-4	-2	8	12	13	-6	0	8	42	42	-4	4	2	2	7	7
-1	4	8	52	49	-1	-4	8	60	-55	-3	-2	8	11	-11	-5	0	8	37	-36	-3	3	2	2	27	2
-1	3	8	3	4	0	-4	8	102	97	-2	-2	8	226	254	-4	0	8	101	-98	-2	2	2	2	27	2
-1	2	8	27	26	1	-4	8	37	-35	-1	-2	8	10	-8	-3	0	8	57	-54	-1	1	2	2	51	5
-1	1	8	5	-5	2	-4	8	41	40	0	-2	8	10	10	-1	0	8	53	50	1	2	2	2	33	-3

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 16

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
2	2	8	49	48	-8	5	8	18	-19	0	-10	9	13	-13	4	-7	9	8	-10	-9	-4	9	6	6
3	3	8	23	24	-7	5	8	20	21	-2	-10	9	6	6	-5	-7	9	13	-14	-7	-4	9	20	2
4	2	8	36	36	-6	5	8	39	-38	-2	-10	9	23	-24	-9	-7	9	9	-11	-5	-4	9	26	-2
5	2	8	2	-2	-5	5	8	87	86	-5	-9	9	7	7	-8	-6	9	9	-10	-4	-4	9	14	-1
6	2	8	31	32	-4	5	8	42	41	-4	-9	9	6	5	-7	-6	9	11	-10	-3	-4	9	2	-1
7	2	8	22	22	-3	5	8	3	2	-3	-9	9	3	2	-6	-6	9	5	-5	-2	-4	9	9	-1
8	2	8	39	40	-2	5	8	39	39	-2	-9	9	21	-21	-5	-6	9	10	10	-1	-4	9	7	-1
9	2	8	18	18	-1	5	8	19	18	-1	-9	9	3	-3	-4	-6	9	10	10	0	-4	9	22	-2
0	2	8	35	33	0	5	8	42	-42	0	-9	9	9	9	-3	-6	9	2	2	1	-4	9	5	-2
1	2	8	62	60	1	5	8	47	48	1	-9	9	13	-13	-2	-6	9	9	-9	3	-4	9	20	-1
1	2	8	37	-36	2	5	8	8	-9	2	-9	9	10	-10	-1	-6	9	24	23	4	-4	9	12	-1
1	2	8	48	47	3	5	8	34	35	3	-9	9	7	-7	0	-6	9	3	4	5	-4	9	23	-2
1	2	8	20	-19	-6	6	8	30	32	-8	-8	9	14	15	1	-6	9	4	-3	-6	-4	9	18	-1
1	2	8	15	-15	-5	6	8	9	-9	-7	-8	9	3	8	2	-6	9	9	-2	-9	-4	9	20	-2
1	2	8	44	44	-4	6	8	75	76	-6	-8	9	3	3	3	-6	9	21	-21	-8	-3	9	20	-2
1	2	8	73	73	-3	6	8	28	-29	-5	-8	9	14	14	4	-6	9	9	-10	-7	-3	9	26	-2
1	2	8	13	-13	-2	6	8	4	-5	-4	-8	9	6	-6	5	-6	9	4	4	-6	-3	9	5	-1
1	2	8	41	42	-1	6	8	11	11	-3	-8	9	10	10	-1	-6	9	14	-14	-5	-3	9	12	1
1	2	8	5	-4	0	6	8	20	19	-2	-8	9	6	-6	-9	-6	9	12	-12	-4	-3	9	5	-1
1	2	8	13	-14	1	6	8	17	17	-1	-8	9	11	-10	-7	-5	9	11	11	-3	-3	9	18	-1
1	2	8	15	-13	2	6	8	58	59	0	-8	9	3	-3	-6	-5	9	7	-8	-2	-3	9	19	-1
1	2	8	58	59	-4	7	8	3	2	1	-8	9	10	10	-5	-5	9	11	-11	-1	-3	9	13	1
1	2	8	15	-15	-3	7	8	39	39	2	-8	9	8	8	-4	-8	9	2	2	0	-3	9	6	-1
1	2	8	33	32	-2	7	8	8	-8	4	-8	9	9	-9	-3	-5	9	14	-12	1	-3	9	8	-1
1	2	8	14	13	-1	7	8	64	64	-7	-7	9	9	9	-2	-5	9	14	-13	2	-3	9	3	-1
1	2	8	13	12	0	7	8	11	11	-6	-7	9	7	-7	-1	-5	9	20	-19	3	-3	9	9	-1
1	2	8	13	12	-3	-1	9	4	-4	-5	-7	9	7	7	-4	-5	9	2	2	4	-3	9	5	-1
1	2	8	77	76	-2	-1	9	2	2	-4	-7	9	20	-20	0	-5	9	3	-1	5	-3	9	16	-1
1	2	8	21	-21	-1	-1	9	10	-9	-3	-7	9	20	-19	2	-5	9	16	-16	6	-3	9	13	-1
1	2	8	42	41	-6	-10	9	5	5	-5	-7	9	15	14	3	-5	9	8	-8	-9	-3	9	20	-1
1	2	8	17	-15	-4	-10	9	14	-15	-2	-7	9	20	-20	5	-5	9	3	4	-8	-2	9	5	-2
1	2	8	10	-10	-3	-10	9	4	4	0	-7	9	20	-20	4	-5	9	8	9	-8	-2	9	8	-1
3	4	8	28	28	-1	-10	9	14	14	1	-7	9	3	-3	6	-5	9	10	9	-7	-2	9	3	-2

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 17

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
1	1	1	9	8	3	3	0	6	-6	2	5	2	10	10	1	4	10	4	5	1	6	7	1	
1	1	1	20	-20	3	3	0	13	-12	5	5	2	11	-11	1	7	10	-9	-9	1	5	21	1	
1	1	1	8	-18	3	3	0	10	-10	1	4	10	10	10	1	6	10	-12	-9	1	5	26	1	
1	1	1	3	-3	3	3	0	17	-16	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	15	-15	3	3	0	16	-16	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	24	-22	3	3	0	19	-18	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	16	-16	3	3	0	16	-16	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	21	-22	3	3	0	18	-18	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	11	-10	3	3	0	15	-15	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	20	-19	3	3	0	12	-12	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	3	-3	3	3	0	20	-19	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	22	-3	3	3	0	18	-17	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	19	-19	3	3	0	19	-18	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	5	-5	3	3	0	15	-15	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	20	-19	3	3	0	15	-15	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	6	-6	3	3	0	14	-14	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	12	-12	3	3	0	17	-17	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	14	-14	3	3	0	14	-14	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	3	-3	3	3	0	15	-15	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	5	-5	3	3	0	15	-15	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	24	-2	3	3	0	18	-17	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	13	-13	3	3	0	12	-12	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	14	-13	3	3	0	14	-13	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	8	-8	3	3	0	17	-16	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	16	-17	3	3	0	14	-14	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	3	-3	3	3	0	17	-16	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	12	-11	3	3	0	18	-17	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	5	-5	3	3	0	15	-15	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	7	-7	3	3	0	13	-13	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	
1	1	1	10	-11	3	3	0	11	-12	1	3	9	9	9	1	4	10	-11	-9	1	5	21	1	
1	1	1	4	-4	3	3	0	12	-13	1	4	10	10	10	1	6	10	-11	-9	1	5	26	1	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 18

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
0	-5	10	12	11	2	-3	10	19	19	-10	0	10	25	26	-3	2	10	20	-19	-1	5	10	3	
1	-5	10	37	35	3	-3	10	3	0	-9	0	10	5	5	-2	2	10	2	-1	0	5	10	28	
2	-5	10	14	13	5	-3	10	8	8	-8	0	10	18	-17	-1	2	10	29	28	-5	-1	10	22	
3	-5	10	19	17	-10	-2	10	6	-6	-7	0	10	10	-11	0	2	10	22	20	-4	-1	10	8	
4	-5	10	5	-4	-8	-2	10	4	2	-6	0	10	33	-34	1	2	10	10	8	-3	-1	10	11	
5	-5	10	27	-27	-7	-2	10	17	-18	-5	0	10	10	-9	2	2	10	8	-9	-2	-1	10	19	
6	-4	10	9	-7	-6	-2	10	17	18	-4	0	10	34	32	3	2	10	33	-32	-1	-1	10	21	
7	-4	10	7	7	-5	-2	10	15	14	-3	0	10	25	23	4	2	10	6	-7	0	-1	10	12	
8	-4	10	13	-12	-4	-2	10	32	-32	-2	0	10	16	16	-8	3	10	7	8	-7	-9	10	19	
9	-4	10	10	11	-3	-2	10	14	-12	-1	0	10	26	-25	-7	3	10	15	-16	-6	-9	10	22	
10	-4	10	15	-14	-2	-2	10	18	-18	0	0	10	50	-49	-6	3	10	29	-29	-5	-9	10	4	
11	-4	10	22	-22	-1	-2	10	6	-7	1	0	10	8	-6	-5	3	10	29	-29	-4	-9	10	19	
12	-4	10	20	21	0	-2	10	12	12	2	0	10	6	2	-4	3	10	2	-1	-3	-9	10	12	
13	-4	10	19	-20	1	-2	10	15	-16	3	0	10	23	22	-3	3	10	23	22	-3	-9	10	18	
14	-4	10	24	-23	2	-2	10	22	20	4	0	10	29	30	-2	3	10	55	53	0	-9	10	18	
15	-4	10	15	14	3	-2	10	29	29	5	0	10	3	-2	-1	3	10	20	19	1	-9	10	24	
16	-4	10	25	22	4	-2	10	8	-9	-9	1	10	13	-13	0	3	10	30	-30	2	-9	10	5	
17	-4	10	36	33	5	-2	10	4	-2	-8	1	10	15	-15	1	3	10	16	-16	-8	-8	10	16	
18	-4	10	11	-10	-10	-1	10	4	4	-7	1	10	8	-7	2	3	10	23	-24	-7	-8	10	6	
19	-4	10	49	-47	-9	-1	10	19	20	-6	1	10	31	29	3	3	10	21	-22	-6	-8	10	9	
20	-4	10	16	-16	-8	-1	10	45	45	-5	1	10	58	56	-7	4	10	26	-27	-5	-8	10	21	
21	-4	10	4	-3	-7	-1	10	11	10	-4	1	10	12	12	-6	4	10	16	17	-4	-8	10	24	
22	-3	10	2	-1	-6	-1	10	35	-34	-3	1	10	20	-20	-5	4	10	4	-4	-3	-8	10	20	
23	-3	10	8	9	-5	-1	10	21	-18	-2	1	10	27	-26	-4	4	10	13	12	-2	-8	10	11	
24	-3	10	24	-25	-4	-1	10	13	-14	-1	1	10	19	-17	-3	4	10	23	22	-1	-8	10	16	
25	-3	10	19	-17	-3	-1	10	23	23	1	1	10	4	1	-2	4	10	20	-20	0	-8	10	23	
26	-3	10	16	17	-2	-1	10	20	21	2	1	10	9	6	-1	4	10	14	14	1	-8	10	3	
27	-3	10	10	-10	-1	-1	10	19	-20	3	1	10	26	25	0	4	10	2	2	2	-8	10	31	
28	-3	10	6	6	0	-1	10	23	22	4	1	10	14	15	1	4	10	29	-29	3	-8	10	11	
29	-3	10	19	19	1	-1	10	18	16	-9	2	10	4	-4	-2	4	10	18	17	-8	-7	10	22	
30	-3	10	15	12	2	-1	10	12	-12	-8	2	10	13	13	-5	5	10	3	3	-7	-7	10	7	
31	-3	10	33	31	3	-1	10	11	10	-7	2	10	31	32	-4	5	10	13	-13	-6	-7	10	22	
32	-3	10	14	-12	4	-1	10	5	-6	-5	2	10	17	-18	-3	5	10	9	-9	-5	-7	10	3	
33	-3	10	18	-20	5	-1	10	7	6	-4	2	10	18	-18	-2	5	10	15	-17	-4	-7	10	28	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 20

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-4	-7	12	6	5	-8	-4	12	40	38	1	-2	12	8	-7	-3	1	12	67	64	-7	-7	13	10	
-3	-7	12	71	66	-7	-4	12	4	-3	2	-2	12	38	34	-2	1	12	8	7	-6	-7	13	25	-2
-2	-7	12	24	-22	-6	-4	12	46	44	-1	-2	12	11	-11	-1	1	12	24	23	-5	-7	13	12	-1
-1	-7	12	34	30	-5	-4	12	9	10	-9	-2	12	23	23	0	1	12	37	36	-4	-7	13	6	
0	-7	12	6	-5	-4	-4	12	44	43	-8	-1	12	63	-60	1	1	12	9	9	-3	-7	13	7	
1	-7	12	12	-10	-3	-4	12	3	-2	-7	-1	12	59	56	2	1	12	29	-29	-2	-7	13	3	
2	-7	12	18	17	-2	-4	12	48	44	-6	-1	12	22	21	-2	2	12	37	37	-1	-7	13	13	-1
3	-6	12	23	23	-1	-4	12	15	-13	-5	-1	12	7	6	-7	2	12	14	-13	0	-7	13	11	-1
4	-6	12	26	27	0	-4	12	28	25	-4	-1	12	59	55	-6	2	12	12	-9	1	-7	13	10	-1
5	-6	12	14	-14	1	-4	12	22	20	-3	-1	12	53	50	-5	2	12	33	32	-8	-6	13	22	-2
6	-6	12	78	76	2	-4	12	45	43	-2	-1	12	39	-36	-4	2	12	39	38	-5	-6	13	7	
7	-6	12	17	-16	-9	-3	12	5	6	-1	-1	12	34	32	-3	2	12	6	5	-5	-6	13	12	-1
8	-6	12	3	-3	-8	-3	12	12	10	0	-1	12	48	-46	-2	2	12	95	92	-4	-6	13	3	
9	-6	12	11	10	-7	-3	12	67	65	-1	-1	12	21	20	-1	2	12	42	-41	-3	-6	13	9	
10	-6	12	27	25	-6	-3	12	8	-7	2	-1	12	47	45	0	2	12	11	-11	-2	-6	13	5	
11	-6	12	25	23	-5	-3	12	67	64	3	-1	12	23	22	1	2	12	19	19	0	-6	13	22	-2
12	-6	12	94	88	-4	-3	12	9	-8	-9	0	12	9	9	-6	3	12	6	-3	1	-6	13	9	
13	-6	12	24	-21	-3	-3	12	56	-52	-8	0	12	23	25	-5	3	12	37	37	-2	-6	13	8	
14	-6	12	23	23	-2	-3	12	9	-8	-7	0	12	26	-24	-4	3	12	11	10	-9	-6	13	4	
15	-6	12	10	9	-1	-3	12	70	65	-6	0	12	94	92	-3	3	12	3	2	-8	-5	13	17	-1
16	-6	12	21	21	0	-3	12	8	-7	-5	0	12	24	22	-1	3	12	37	36	-7	-5	13	10	-1
17	-6	12	46	45	1	-3	12	68	64	-4	0	12	24	22	0	3	12	13	-13	-6	-5	13	14	1
18	-6	12	22	21	2	-3	12	11	9	-3	0	12	11	11	-4	4	12	40	-40	-5	-5	13	11	
19	-6	12	46	-43	3	-3	12	5	6	-2	0	12	4	-4	-3	4	12	18	-18	-4	-5	13	7	
20	-6	12	35	33	-9	-2	12	3	4	-1	0	12	21	-19	-2	4	12	21	21	-3	-5	13	7	
21	-6	12	40	-36	-8	-2	12	43	43	0	0	12	79	-77	-5	-9	13	4	-4	-2	-5	13	15	-1
22	-6	12	52	48	-7	-2	12	21	19	-4	-9	13	14	-14	-7	-9	13	15	-15	-1	-5	13	2	
23	-6	12	59	54	-6	-2	12	29	28	-6	0	12	27	27	-7	8	13	3	3	1	-5	13	14	-1
24	-6	12	8	6	-5	-2	12	15	-14	-5	0	12	22	22	-6	8	13	4	-4	2	-5	13	6	
25	-6	12	20	18	-4	-2	12	51	48	-8	1	12	19	19	-5	8	13	20	21	-9	-4	13	4	
26	-6	12	64	59	-3	-2	12	4	-2	-7	1	12	11	-10	-4	8	13	8	-8	-8	-4	13	22	2
27	-6	12	68	-63	-2	-2	12	44	42	-6	1	12	4	-4	-3	8	13	9	-9	-7	-4	13	8	
28	-6	12	23	21	-1	-2	12	11	11	-5	1	12	34	32	-1	8	13	9	8	-6	-4	13	12	-1
29	-6	12	10	-10	0	-2	12	45	42	-4	1	12	24	-23	-8	-7	13	6	7	-4	-4	13	3	

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 21

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-2	-4	13	14	-15	-1	-1	13	15	-15	-6	-7	14	13	-12	-6	-3	14	23	-21	-5	1	14	14	-1
-1	-4	13	11	-11	-1	-1	13	4	-4	-5	-7	14	13	-12	-5	-3	14	12	-11	-3	1	14	14	5
0	-4	13	3	-3	-1	-1	13	10	-11	-4	-7	14	15	-15	-4	-3	14	30	-27	-2	1	14	13	-1
1	-4	13	3	1	-8	0	13	9	-8	-3	-7	14	11	-12	-3	-3	14	27	25	-5	-7	15	3	-2
2	-4	13	10	-10	-7	0	13	13	-15	-2	-7	14	8	9	-2	-3	14	17	17	-4	-7	15	21	-2
7	-4	13	8	-8	-6	0	13	16	-16	-1	-7	14	30	29	-1	-3	14	11	9	-3	-7	15	25	2
6	-4	13	3	1	-5	0	13	13	-13	-7	-6	14	25	-23	0	-3	14	17	-14	-2	-7	15	15	1
5	-4	13	11	-11	-4	0	13	6	-5	-6	-6	14	7	-7	1	-3	14	31	-28	-6	-6	15	4	1
4	-4	13	14	-14	-3	0	13	6	-7	-5	-6	14	6	-7	-8	-2	14	12	-9	-5	-6	15	25	2
4	-4	13	4	4	-2	0	13	2	-2	-4	-6	14	20	20	-7	-2	14	9	-9	-4	-6	15	13	-1
2	-4	13	4	7	-1	0	13	14	-15	-3	-6	14	15	15	-6	-2	14	16	14	-3	-6	15	8	-1
1	-4	13	7	7	0	0	13	13	-15	-2	-6	14	8	-8	-5	-2	14	15	14	-2	-6	15	27	-2
0	-4	13	4	3	1	0	13	9	8	-1	-6	14	14	-12	-4	-2	14	2	-2	-1	-6	15	18	-1
1	-4	13	10	-9	-6	1	13	9	8	0	-6	14	15	-16	-3	-2	14	18	16	-7	-5	15	3	-2
2	-4	13	2	-2	-5	1	13	8	8	-8	-5	14	5	5	-1	-2	14	33	-32	-6	-5	15	24	-1
2	-4	13	4	3	-4	1	13	5	8	-7	-5	14	18	17	0	-2	14	16	-15	-5	-5	15	18	1
8	-4	13	9	-9	-3	1	13	14	-13	-6	-5	14	33	32	1	-2	14	4	-3	-4	-5	15	21	-2
7	-4	13	14	-14	-2	1	13	7	-6	-4	-5	14	17	-14	-7	-1	14	16	17	-3	-5	15	14	-1
6	-4	13	4	4	-1	1	13	18	19	-2	-5	14	13	-12	-6	-1	14	13	11	-2	-5	15	12	-1
5	-4	13	10	-12	0	1	13	2	2	-1	-5	14	19	-17	-5	-1	14	10	10	-1	-5	15	12	-1
4	-4	13	11	-11	1	1	13	3	-4	0	-5	14	11	11	-4	-1	14	14	-14	-7	-4	15	18	1
3	-4	13	4	-4	-6	2	13	6	-3	1	-5	14	14	12	-3	-1	14	21	-22	-6	-4	15	4	-
2	-4	13	3	-1	-5	2	13	4	-7	-6	-4	14	28	27	-2	-1	14	9	10	-5	-4	15	6	-
1	-4	13	10	-9	-4	2	13	4	-3	-7	-4	14	17	16	-1	-1	14	10	8	-4	-4	15	27	-2
0	-4	13	8	8	-3	2	13	10	-9	-6	-4	14	9	-7	0	-1	14	24	22	-3	-4	15	14	-1
2	-4	13	25	-23	-2	2	13	18	-20	-5	-4	14	17	-16	-7	0	14	2	4	-2	-4	15	10	-1
9	-4	13	22	-22	-1	2	13	5	4	-4	-4	14	25	-24	-6	0	14	26	-26	-1	-4	15	12	-1
8	-4	13	4	3	-4	3	13	12	4	-4	-4	14	29	-26	-5	0	14	8	-8	-7	-3	15	15	1
7	-4	13	9	-9	-3	3	13	9	10	-2	-4	14	14	12	-4	0	14	13	14	-6	-3	15	16	-1
6	-4	13	2	2	-5	14	10	3	11	-1	-4	14	25	23	-3	0	14	13	-14	-5	-3	15	11	-1
5	-4	13	12	-12	-8	14	13	3	-2	0	-4	14	17	17	-2	0	14	15	13	-4	-3	15	19	-1
4	-4	13	4	4	-2	14	14	1	13	1	-4	14	11	-11	-1	0	14	17	16	-3	-3	15	16	-1
3	-4	13	9	-9	-1	14	25	25	-25	-8	-3	14	13	-14	0	0	14	12	9	-2	-3	15	8	-
2	-4	13	4	-3	-7	14	15	-11	-11	-7	-3	14	15	-15	-6	1	14	24	25	-1	-3	15	31	3

OBSERVED AND CALCULATED STRUCTURE FACTORS FOR WERDINGITE NIVEN ET AL

PAGE 22

H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC	H	K	L	FO	FC
-7	-2	15	9	-9	-4	-2	15	10	10	-1	-2	15	8	8	-4	-1	15	14	-13	-4	0	15	11	-1
-6	-2	15	12	11	-3	-2	15	20	19	-6	-1	15	17	16	-3	-1	15	31	29	-4	-4	16	100	5
-5	-2	15	23	-21	-2	-2	15	14	-13	-5	-1	15	12	-12	-2	-1	15	9	9					

Table 7. Bond-valence analysis for werdingite

Site	Al(6)1	Al(6)2	Al(6)3	Al(6)4	Al(6)5	Al(6)6	Al(5)1	Al(5)2	-----Mg(5)1-----			Si(4)1	Si(4)2	Al(4)2	B(3)2	B(3)1	-----Fe/Al(4)1-----				S	
Cation	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Al	Mg	Fe ²⁺	Al	Si	Si	Al	B	B	Fe ²⁺	Al	Al	Al		
Occupancy	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	0.76	0.16	0.08	1.0	1.0	0.23	0.77	1.0	0.23	0.27	0.27	0.23		
01	-	-	-	-	-	-	0.7727	0.6774	0.4044	0.1047	0.0407	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.
02	-	0.4423	-	-	-	-	0.6227	-	-	-	-	-	-	0.3307	0.6530	-	-	-	-	-	-	2.
03	-	-	0.4553	-	-	-	0.6276	-	-	-	-	-	-	-	-	0.9372	-	-	-	-	-	2.
04	-	-	-	-	0.4736	-	-	-	-	-	-	0.9460	-	-	-	-	0.1902	0.1672	0.1672	0.1425	-	1.
05	-	-	-	0.4174	-	-	-	-	-	-	-	-	0.9672	-	-	-	0.1908	0.1677	0.1677	0.1428	-	1.
06	-	-	-	-	-	0.4662	-	0.6546	-	-	-	0.9862	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.
07	-	-	-	0.5970	0.6146	-	0.7566	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.
08	-	-	-	0.4966	0.4529	-	-	-	-	-	-	-	-	0.2961	0.7216	-	-	-	-	-	-	1.
09	-	-	-	-	0.4141	-	-	0.6721	-	-	-	-	1.0056	-	-	-	-	-	-	-	-	2.
010	-	-	-	-	0.5815	0.6097	-	0.3837	0.3399	0.0864	0.0336	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.
011	0.5332	-	-	-	-	-	-	-	0.3590	0.0918	0.0357	-	-	0.3607	0.7177	-	-	-	-	-	-	2.
012	-	0.5769	0.5546	-	-	-	0.1504	0.6260	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.
013	-	0.5374	-	-	-	-	-	-	0.3642	0.0933	0.0362	-	-	-	-	1.0081	-	-	-	-	-	2.
014	0.4446	0.4901	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.9972	-	-	-	-	-	-	-	-	1.
015	-	0.4687	0.5098	-	-	-	-	-	-	-	-	0.9862	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.
016	0.5072	0.5032	-	-	-	-	-	-	0.2214	0.0538	0.0209	-	-	-	-	-	0.1891	0.1664	0.1664	0.1417	-	1.
017	-	-	-	-	0.4914	0.4435	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.0163	-	-	-	-	-	1.
018	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1.0310	1.0368	-	-	-	-	-	-	-	-	2.
019A	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.2368	-	-	0.0977	-	-	-	0.1839	0.
019B	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.1664	0.2672	-	-	0.
Sum	2.97	3.02	3.04	3.02	3.03	3.04	2.93	3.01	1.69	0.43	0.17	3.95	4.01	1.22	2.09	2.96	0.67	0.67	0.77	0.61		
Site totals									-----								-----					
									2.29						3.32			2.71				