

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 2277 2321 29	4 6 0 719 709 6	0-12 1 335 316 18	7-5 1 855 890 13	5 1 1 325 325 4
6 0 0 3708 3601 30	6 6 0 162 159 9	2-12 1 227 220 -26	9-5 1 351 349 17	7 1 1 890 906 8
8 0 0 2440 2488 20	8 6 0 625 629 7	4-12 1 654 637 14	11-5 1 314 326 12	9 1 1 86 17 -33
10 0 0 2733 2659 26	10 6 0 341 348 16	6-12 1 0 20 -1	13-5 1 316 339 23	11 1 1 79 76 -54
12 0 0 201 208 19	12 6 0 94 26 -93	-5-11 1 170 53 -27	15-5 1 83 42 -83	13 1 1 146 133 -25
14 0 0 1961 1828 28	-13 7 0 25 56 -24	-3-11 1 309 313 13	-14-4 1 95 59 -95	-16 2 1 676 702 17
-13 1 0 280 301 22	-11 7 0 297 298 19	-1-11 1 327 327 17	-12-4 1 294 281 15	-14 2 1 132 96 -38
-11 1 0 865 862 10	-9 7 0 74 13 -73	1-11 1 218 198 22	-10-4 1 92 40 -21	-12 2 1 767 733 13
-9 1 0 823 803 7	-7 7 0 475 461 10	3-11 1 120 145 -41	-8-4 1 362 368 5	-10 2 1 986 989 15
-7 1 0 2302 2328 18	-5 7 0 120 111 -20	5-11 1 107 85 -47	-6-4 1 192 188 9	-8 2 1 2046 2024 16
-5 1 0 452 427 4	-3 7 0 644 635 6	7-11 1 368 370 18	-4-4 1 372 375 4	-6 2 1 802 829 6
-3 1 0 4562 4726 58	-1 7 0 378 380 6	9-11 1 129 51 -62	-2-4 1 91 115 -12	-4 2 1 1246 1257 12
3 1 0 2949 2971 38	1 7 0 297 311 6	11-11 1 112 16 -100	0-4 1 454 459 5	-2 2 1 2436 2488 31
5 1 0 1897 1876 14	3 7 0 177 176 6	-10-10 1 111 145 -49	2-4 1 77 16 -14	0 2 1 809 825 10
7 1 0 1757 1769 13	5 7 0 81 23 -18	-6-10 1 722 717 11	4-4 1 92 70 -11	2 2 1 2685 2626 34
9 1 0 399 400 5	7 7 0 826 847 8	-4-10 1 0 14 -1	6-4 1 917 931 8	4 2 1 1060 1050 8
11 1 0 768 740 9	9 7 0 620 616 12	-2-10 1 104 22 -20	8-4 1 924 898 14	6 2 1 799 816 6
13 1 0 181 163 -27	11 7 0 331 315 17	0-10 1 184 184 13	10-4 1 511 490 30	8 2 1 1133 1106 11
-14 2 0 422 421 19	-12 8 0 119 133 -56	2-10 1 262 255 17	12-4 1 615 609 10	10 2 1 161 148 -42
-12 2 0 49 23 -48	-10 8 0 358 372 17	4-10 1 387 348 13	14-4 1 307 288 21	12 2 1 493 469 10
-10 2 0 615 611 11	-8 8 0 314 327 17	6-10 1 538 524 10	-13-3 1 272 269 17	14 2 1 305 304 16
-8 2 0 297 302 6	-6 8 0 434 408 9	8-10 1 419 414 15	-11-3 1 309 315 11	-15 3 1 110 94 -110
-6 2 0 655 641 5	-4 8 0 472 466 6	10-10 1 228 160 -29	-9-3 1 561 556 6	-13 3 1 330 317 15
-4 2 0 111 22 -47	-2 8 0 405 404 6	12-10 1 95 65 -95	-7-3 1 1037 1037 8	-11 3 1 204 225 -24
-2 2 0 1834 1859 23	0 8 0 1139 1143 15	-11-9 1 269 293 22	-5-3 1 829 849 7	-9 3 1 426 424 7
0 2 0 207 182 4	2 8 0 412 420 6	-9-9 1 1287 1287 18	-3-3 1 1308 1332 12	-7 3 1 440 453 6
2 2 0 1980 1997 25	4 8 0 524 510 6	-7-9 1 1455 1452 20	-1-3 1 553 543 7	-5 3 1 555 581 5
4 2 0 91 71 9	6 8 0 1241 1245 12	-5-9 1 1089 1115 15	1-3 1 1062 1087 14	-3 3 1 1916 1885 18
6 2 0 292 276 7	8 8 0 642 641 11	-3-9 1 1311 1303 13	3-3 1 144 78 10	-1 3 1 724 713 9
8 2 0 747 757 6	10 8 0 870 860 14	-1-9 1 437 456 7	5-3 1 274 263 6	1 3 1 85 56 -14
10 2 0 202 236 13	12 8 0 180 158 -38	1-9 1 2257 2255 21	7-3 1 175 169 8	3 3 1 597 549 6
12 2 0 159 200 -27	-13 9 0 575 581 17	3-9 1 788 766 13	9-3 1 115 115 -37	5 3 1 266 261 4
14 2 0 163 161 -30	-11 9 0 1928 1888 28	5-9 1 1170 1110 12	11-3 1 473 470 9	7 3 1 96 54 -13
-15 3 0 0 45 -1	-9 9 0 963 946 15	7-9 1 883 861 10	13-3 1 0 23 -1	9 3 1 582 583 7
-13 3 0 64 55 -63	-7 9 0 1150 1105 12	9-9 1 144 132 -35	15-3 1 209 186 -43	11 3 1 657 638 9
-11 3 0 134 170 -38	-5 9 0 1072 988 16	11-9 1 1013 1011 16	-14-2 1 231 220 21	13 3 1 125 25 -35
-9 3 0 89 131 -49	-3 9 0 2096 2073 24	13-9 1 276 277 25	-12-2 1 0 68 -1	-14 4 1 243 280 -31
-7 3 0 45 31 -44	-1 9 0 3105 3084 29	-12-8 1 349 348 23	-10-2 1 607 596 6	-12 4 1 651 660 9
-5 3 0 588 581 9	1 9 0 790 773 11	-10-8 1 466 468 14	-8-2 1 89 67 -17	-10 4 1 548 548 12
-3 3 0 594 605 6	3 9 0 2527 2488 24	-8-8 1 280 290 14	-6-2 1 766 766 6	-8 4 1 655 670 9
-1 3 0 234 240 5	5 9 0 1312 1356 17	-6-8 1 715 735 7	-4-2 1 585 588 5	-6 4 1 898 908 7
1 3 0 147 144 6	7 9 0 1575 1559 22	-4-8 1 364 378 5	-2-2 1 1090 1096 14	-4 4 1 1172 1169 9
3 3 0 1307 1293 12	9 9 0 757 739 13	-2-8 1 1049 1055 10	0-2 1 0 23 -1	-2 4 1 524 558 6
5 3 0 841 848 7	11 9 0 56 54 -55	0-8 1 430 429 7	2-2 1 1184 1184 15	0 4 1 128 197 7
7 3 0 125 95 -14	-12 10 0 509 515 19	2-8 1 228 202 8	4-2 1 84 81 -18	2 4 1 689 700 7
9 3 0 569 578 6	-10 10 0 726 712 14	4-8 1 1393 1368 17	6-2 1 757 753 6	4 4 1 129 91 -24
11 3 0 139 106 -25	-8 10 0 1049 1044 16	6-8 1 642 630 8	8-2 1 436 435 8	6 4 1 753 758 6
13 3 0 199 173 19	-6 10 0 774 731 13	8-8 1 529 464 11	10-2 1 200 198 21	8 4 1 759 769 10

-14 4 0 0 21 -1 -4 10 0 2439 2338 35 10 -8 1 194 201 -27 12 -2 1 61 21 -61 10 4 1 401 394 15  
-12 4 0 639 618 27 -2 10 0 920 891 15 12 -8 1 145 149 -47 14 -2 1 240 269 -31 12 4 1 463 450 10  
-10 4 0 225 252 20 0 10 0 1160 1156 15 -11 -7 1 106 100 -60 -13 -1 1 508 509 17 -15 5 1 35 50 -34  
-8 4 0 585 604 10 2 10 0 383 383 8 -9 -7 1 476 477 7 -11 -1 1 343 330 10 -13 5 1 109 145 -44  
-6 4 0 774 774 6 4 10 0 91 103 -25 -7 -7 1 477 498 7 -9 -1 1 85 62 -18 -11 5 1 186 161 -20  
-4 4 0 93 74 -12 6 10 0 1760 1748 23 -5 -7 1 314 319 6 -7 -1 1 576 593 5 -9 5 1 115 149 -27  
-2 4 0 63 25 -41 10 10 0 588 602 13 -3 -7 1 182 200 6 -5 -1 1 743 754 6 -7 5 1 1751 1763 14  
0 4 0 342 349 8 -11 11 0 382 352 19 -1 -7 1 365 378 6 -3 -1 1 329 331 5 -5 5 1 147 139 12  
2 4 0 210 192 7 -7 11 0 503 507 15 1 -7 1 101 91 -15 1 -1 1 255 248 4 -3 5 1 1441 1465 11  
4 4 0 526 517 4 -5 11 0 336 352 18 3 -7 1 561 567 5 3 -1 1 1785 1821 23 -1 5 1 1837 1837 17  
6 4 0 156 154 11 -3 11 0 1101 1083 17 5 -7 1 672 659 10 5 -1 1 177 181 6 1 5 1 1345 1338 18  
8 4 0 370 384 5 -1 11 0 128 123 -40 7 -7 1 311 310 10 7 -1 1 566 566 7 3 5 1 640 671 4  
10 4 0 247 239 12 1 11 0 1805 1787 26 9 -7 1 68 15 -68 9 -1 1 353 350 9 5 5 1 252 239 5  
12 4 0 360 367 24 3 11 0 59 69 -59 11 -7 1 137 151 -44 11 -1 1 88 17 -44 7 5 1 2288 2297 17  
14 4 0 161 135 -42 5 11 0 1375 1355 18 13 -7 1 0 66 -1 13 -1 1 60 36 -60 9 5 1 930 934 10  
-15 5 0 138 135 -65 -6 12 0 390 409 17 -12 -6 1 154 157 -40 -14 0 1 478 491 16 11 5 1 1200 1169  
12  
-13 5 0 158 185 -28 -4 12 0 167 155 -33 -10 -6 1 179 180 16 -12 0 1 603 582 9 13 5 1 737 699 11  
-11 5 0 61 47 -60 -2 12 0 839 826 14 -8 -6 1 1157 1165 11 -10 0 1 845 833 7 -14 6 1 8 107 -7  
-9 5 0 67 30 -66 0 12 0 90 60 -71 -6 -6 1 787 790 8 -8 0 1 1302 1303 10 -12 6 1 55 16 -54  
-7 5 0 948 966 9 2 12 0 131 81 -40 -4 -6 1 1226 1214 10 -6 0 1 1115 1102 9 -10 6 1 120 116 -50  
-5 5 0 314 309 5 -5 13 0 203 206 -38 -2 -6 1 614 603 6 -4 0 1 849 866 14 -8 6 1 86 104 -38  
-3 5 0 1088 1087 8 -3 13 0 220 179 -27 0 -6 1 1037 1046 10 -2 0 1 116 113 5 -6 6 1 71 81 -23  
-1 5 0 716 716 7 -1 13 0 170 152 -35 2 -6 1 1047 1069 10 2 0 1 243 241 4 -4 6 1 64 32 -25  
1 5 0 362 355 5 1 13 0 411 430 16 4 -6 1 902 895 9 4 0 1 441 437 4 -2 6 1 407 398 6  
3 5 0 137 92 -18 3 13 0 405 397 15 6 -6 1 1493 1471 18 6 0 1 328 338 11 0 6 1 360 343 7  
5 5 0 261 279 5 -2 14 0 461 440 19 8 -6 1 575 581 8 8 0 1 281 287 6 2 6 1 513 514 4  
7 5 0 637 639 6 0 14 0 241 223 -29 10 -6 1 1536 1494 16 10 0 1 19 42 -19 4 6 1 585 584 5  
9 5 0 471 482 6 2 14 0 164 172 -38 12 -6 1 750 756 17 12 0 1 134 145 -22 6 6 1 113 95 -32  
11 5 0 387 348 13 -2 -14 1 122 90 -60 14 -6 1 233 241 -34 14 0 1 283 99 24 8 6 1 752 761 8  
13 5 0 98 16 -54 0 -14 1 298 291 24 -13 -5 1 143 113 -32 -15 1 1 371 354 21 10 6 1 493 493 13  
-14 6 0 45 82 -44 2 -14 1 353 308 25 -11 -5 1 335 329 12 -13 1 1 0 57 -1 12 6 1 96 76 -96  
-12 6 0 0 46 -1 4 -14 1 363 358 22 -9 -5 1 125 131 -16 -11 1 1 634 611 15 -13 7 1 85 105 -84  
-10 6 0 327 329 -39 -3 -13 1 883 888 14 -7 -5 1 137 138 10 -9 1 1 269 275 18 -11 7 1 93 95 -92  
-8 6 0 95 88 -40 -1 -13 1 211 223 -27 -5 -5 1 284 286 15 -7 1 1 770 778 9 -9 7 1 89 73 -65  
-6 6 0 204 230 8 1 -13 1 472 452 16 -3 -5 1 345 347 4 -5 1 1 1308 1297 12 -7 7 1 521 524 8  
-4 6 0 69 64 -24 3 -13 1 483 459 16 -1 -5 1 102 97 -10 -3 1 1 816 820 11 -5 7 1 97 84 -22  
-2 6 0 267 266 6 5 -13 1 160 131 -42 1 -5 1 442 421 5 -1 1 1 239 209 4 -3 7 1 1017 997 8  
0 6 0 73 77 -19 -4 -12 1 514 532 11 3 -5 1 1117 1128 11 1 1 1 360 344 5 -1 7 1 682 694 7  
2 6 0 147 146 6 -2 -12 1 198 214 -23 5 -5 1 194 179 7 3 1 1 1915 1924 24 1 7 1 262 270 6

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite 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
3 7 1 632 645 5	1 -11 2 151 135 -30	-12 -4 2 1201 1166 13	-8 2 2 426 440 5	0 8 2 406 395 6
5 7 1 438 456 8	3 -11 2 378 393 14	-10 -4 2 1527 1501 12	-6 2 2 71 36 -16	2 8 2 451 448 14
7 7 1 811 808 13	5 -11 2 344 336 17	-8 -4 2 209 209 11	-4 2 2 102 96 9	4 8 2 481 475 6
9 7 1 461 467 12	7 -11 2 0 16 -1	-6 -4 2 5800 5757 45	-2 2 2 202 205 6	6 8 2 64 34 -41
11 7 1 536 532 14	9 -11 2 234 205 -29	-4 -4 2 2402 2382 32	0 2 2 582 579 8	8 8 2 55 55 -54
-12 8 1 61 16 -61	11 -11 2 120 137 -80	-2 -4 2 1679 1828 21	2 2 2 946 930 12	10 8 2 62 71 -61
-10 8 1 418 436 15	-10 -10 2 94 157 -79	0 -4 2 4474 4477 57	4 2 2 626 630 7	-11 9 2 183 192 -35
-8 8 1 198 183 -22	-8 -10 2 92 118 -38	2 -4 2 5722 5809 78	6 2 2 896 908 8	-9 9 2 231 258 -27

-6 8 1 406 386 21 -6-10 2 672 687 10 4-4 2 5617 5716 45 8 2 2 614 604 12 -7 9 2 292 272 15  
 -4 8 1 201 192 11 -4-10 2 130 137 -15 6-4 2 757 785 6 10 2 2 120 95 -33 -5 9 2 313 311 10  
 -2 8 1 192 193 11 -2-10 2 94 34 -22 8-4 2 2608 2563 26 12 2 2 609 585 9 -3 9 2 238 231 19  
 0 8 1 851 855 9 0-10 2 160 161 -24 10-4 2 1831 1806 18 -15 3 2 45 70 -45 -1 9 2 673 660 8  
 2 8 1 596 601 11 2-10 2 565 562 12 12-4 2 1353 1314 14 -13 3 2 175 203 -36 1 9 2 349 348 7  
 4 8 1 791 770 6 4-10 2 360 337 15 14-4 2 1135 1096 18 -11 3 2 252 261 17 3 9 2 245 237 10  
 6 8 1 882 885 9 6-10 2 230 195 18 -13 -3 2 1280 1222 19 -9 3 2 164 161 14 5 9 2 730 726 11  
 8 8 1 346 358 12 8-10 2 320 295 21 -11 -3 2 347 342 11 -7 3 2 324 334 5 7 9 2 104 55 -37  
 10 8 1 372 377 17 10-10 2 169 159 -38 -9 -3 2 1591 1558 12 -5 3 2 644 640 5 9 9 2 225 233 23  
 -13 9 1 44 7 -44 12-10 2 59 7 -59 -7 -3 2 2531 2522 19 -3 3 2 656 662 5 11 9 2 149 79 -47  
 -11 9 1 263 292 25 -11 -9 2 204 185 -27 -5 -3 2 1946 1952 15 -1 3 2 57 74 -14 -12 10 2 198 183 -37  
 -9 9 1 0 49 -1 -9 -9 2 489 494 8 -1 -3 2 1042 1042 13 1 3 2 919 897 12 -10 10 2 125 158 -52  
 -7 9 1 229 207 16 -7 -9 2 246 235 12 1 -3 2 3857 4035 49 3 3 2 717 705 6 -8 10 2 133 99 -41  
 -5 9 1 180 144 -24 -5 -9 2 485 480 9 3 -3 2 1745 1745 22 5 3 2 388 396 6 -6 10 2 170 101 -34  
 -3 9 1 581 563 7 -3 -9 2 424 428 6 5 -3 2 1323 1381 16 7 3 2 1039 1046 8 -4 10 2 718 676 13  
 -1 9 1 737 725 8 -1 -9 2 540 555 7 7 -3 2 1002 1004 15 9 3 2 326 310 10 -2 10 2 355 345 10  
 1 9 1 780 786 15 1 -9 2 911 944 14 9 -3 2 588 570 26 11 3 2 697 678 9 0 10 2 153 137 -18  
 3 9 1 716 707 8 3 -9 2 974 946 15 11 -3 2 1925 1852 19 13 3 2 243 214 19 2 10 2 371 369 8  
 5 9 1 348 356 10 5 -9 2 640 610 8 13 -3 2 194 191 -25 -14 4 2 107 56 -71 4 10 2 301 321 11  
 7 9 1 691 684 12 7 -9 2 621 573 12 15 -3 2 564 517 17 -12 4 2 187 235 -32 6 10 2 118 128 -35  
 9 9 1 250 290 19 9 -9 2 161 169 -39 -14 -2 2 296 304 17 -10 4 2 600 611 12 10 10 2 131 61 -51  
 11 9 1 114 154 -86 11 -9 2 432 402 20 -12 -2 2 0 99 -1 -8 4 2 256 281 8 -7 11 2 1031 986 16  
 -12 10 1 237 212 -36 13 -9 2 201 162 -32 -10 -2 2 993 963 8 -6 4 2 150 144 12 -5 11 2 123 42 -48  
 -10 10 1 103 38-103 -12 -8 2 383 360 21 -8 -2 2 339 333 5 -4 4 2 431 419 4 -3 11 2 432 400 13  
 -8 10 1 46 5 -45 -10 -8 2 318 323 10 -6 -2 2 948 948 7 -2 4 2 563 572 6 -1 11 2 647 630 13  
 -6 10 1 108 30 -45 -8 -8 2 85 44 -24 -4 -2 2 293 288 5 0 4 2 136 92 -54 1 11 2 136 147 -23  
 -4 10 1 267 251 19 -6 -8 2 200 200 9 0 -2 2 338 322 5 2 4 2 239 201 9 3 11 2 57 22 -57  
 -2 10 1 506 480 10 -4 -8 2 307 313 5 2 -2 2 1499 1491 19 4 4 2 1963 1965 15 -6 12 2 97 47 -96  
 0 10 1 255 256 11 -2 -8 2 481 485 6 4 -2 2 419 420 10 6 4 2 239 235 5 -4 12 2 119 73 -54  
 2 10 1 74 4 -37 0 -8 2 372 372 6 6 -2 2 263 237 14 8 4 2 737 740 8 -2 12 2 650 616 14  
 4 10 1 130 135 -24 2 -8 2 45 30 -45 8 -2 2 49 40 -49 10 4 2 1268 1252 13 0 12 2 219 199 -26  
 6 10 1 114 115 -37 4 -8 2 168 152 15 10 -2 2 398 401 9 12 4 2 122 28 -58 2 12 2 177 190 -31  
 10 10 1 82 61 -81 6 -8 2 88 18 -32 12 -2 2 417 417 14 -15 5 2 488 524 16 -5 13 2 157 174 -49  
 -11 11 1 463 452 17 8 -8 2 368 370 13 14 -2 2 145 136 -59 -13 5 2 1004 999 20 -3 13 2 154 168 -43  
 -7 11 1 1110 1059 17 10 -8 2 367 364 16 -13 -1 2 457 445 10 -11 5 2 1094 1095 17 -1 13 2 207 206 -  
 28  
 -5 11 1 680 656 14 12 -8 2 93 12 -93 -11 -1 2 133 118 -22 -9 5 2 1086 1115 16 1 13 2 157 133 -37  
 -3 11 1 789 768 14 -13 -7 2 189 154 -44 -9 -1 2 21 11 -20 -7 5 2 3368 3405 42 0 14 2 995 956 17  
 -1 11 1 460 437 13 -11 -7 2 399 425 16 -7 -1 2 288 304 7 -5 5 2 258 283 6 2 14 2 272 319 26  
 1 11 1 543 529 8 -9 -7 2 273 262 14 -5 -1 2 548 567 12 -3 5 2 2295 2341 18 -6 -16 3 515 434 18  
 3 11 1 138 159 -24 -7 -7 2 93 94 -34 -3 -1 2 234 229 5 -1 5 2 3487 3531 33 -5 -15 3 277 298 22  
 5 11 1 198 188 20 -5 -7 2 975 984 9 -1 -1 2 46 30 -8 1 5 2 4154 4122 51 -1 -15 3 0 43 -1  
 -6 12 1 327 366 19 -3 -7 2 1151 1122 9 3 -1 2 1064 1077 14 3 5 2 3105 3122 21 1 -15 3 49 45 -49  
 -4 12 1 231 262 -26 -1 -7 2 77 64 -21 5 -1 2 414 412 5 5 5 2 373 341 4 -10 -14 3 488 489 21  
 -2 12 1 298 316 18 1 -7 2 72 94 -18 7 -1 2 433 450 4 7 5 2 3070 3065 24 -8 -14 3 130 116 -62  
 0 12 1 271 284 21 3 -7 2 113 101 -13 9 -1 2 124 121 -18 9 5 2 642 642 8 -4 -14 3 217 229 -25  
 2 12 1 182 169 -26 5 -7 2 787 757 9 11 -1 2 285 263 11 11 5 2 951 942 10 -2 -14 3 534 517 14  
 -5 13 1 224 222 -34 7 -7 2 393 364 13 13 -1 2 204 223 20 13 5 2 594 588 11 0 -14 3 871 876 15  
 -3 13 1 82 66 -81 9 -7 2 35 110 -34 -14 0 2 53 44 -52 -14 6 2 1116 1179 18 2 -14 3 110 58 -71  
 -1 13 1 279 259 23 11 -7 2 18 45 -17 -12 0 2 281 278 19 -12 6 2 571 552 12 4 -14 3 93 12 -93  
 1 13 1 112 36 -66 13 -7 2 159 179 -53 -10 0 2 660 651 6 -10 6 2 2406 2399 34 -11 -13 3 788 739 18  
 -2 14 1 634 625 16 -12 -6 2 341 363 17 -8 0 2 1070 1063 8 -8 6 2 1198 1236 17 -3 -13 3 647 695 13  
 0 14 1 734 732 15 -10 -6 2 308 307 9 -6 0 2 590 586 6 -6 6 2 1632 1652 13 -1 -13 3 398 422 14  
 2 14 1 738 768 15 -8 -6 2 557 568 7 -4 0 2 715 738 7 -4 6 2 2053 2021 16 1 -13 3 827 797 14

-6-16 2 653 612 15 -6-6 2 458 455 6 -2 0 2 68 22 -13 -2 6 2 1157 1157 11 3-13 3 213 168 -27  
 -7-15 2 852 842 17 -4-6 2 1196 1195 11 2 0 2 126 126 6 0 6 2 5868 5979 85 5-13 3 1918 1830 28  
 -5-15 2 165 59 -44 -2-6 2 269 261 6 4 0 2 628 624 5 2 6 2 329 335 4 -12-12 3 1056 1015 17  
 -3-15 2 841 829 15 0-6 2 66 72 -17 6 0 2 586 592 6 4 6 2 1389 1362 14 -4-12 3 147 158 -31  
 -1-15 2 912 920 16 2-6 2 2005 2050 19 8 0 2 137 169 -16 6 6 2 1024 1020 15 -2-12 3 1326 1368  
 20  
 -2-14 2 813 797 14 4-6 2 296 284 5 10 0 2 95 55 -28 8 6 2 984 994 15 0-12 3 396 411 13  
 0-14 2 475 484 16 6-6 2 264 274 7 12 0 2 71 37 -70 10 6 2 1757 1707 25 2-12 3 1109 1079 17  
 2-14 2 411 401 19 8-6 2 423 420 8 -15 1 2 161 169 -38 12 6 2 572 564 14 4-12 3 531 499 14  
 4-14 2 467 436 18 10-6 2 181 171 18 -13 1 2 0 17 -1 -13 7 2 329 338 19 6-12 3 472 429 17  
 -11-13 2 297 169 24 12-6 2 120 62 -38 -11 1 2 133 125 -34 -11 7 2 104 75 -65 10-12 3 314 317 26  
 -3-13 2 1556 1596 23 14-6 2 199 207 -38 -9 1 2 103 119 -18 -7 7 2 1209 1218 12 -13-11 3 165 12 -  
 53  
 -1-13 2 825 846 14 -13-5 2 1086 1007 12 -7 1 2 0 13 -1 -5 7 2 1101 1098 11 -3-11 3 642 646 11  
 1-13 2 1174 1127 18 -11-5 2 966 944 9 -5 1 2 939 947 9 -3 7 2 881 873 16 -1-11 3 67 25 -67  
 3-13 2 880 870 15 -9-5 2 684 688 9 -3 1 2 559 561 9 -1 7 2 1386 1371 13 1-11 3 122 103 -33  
 5-13 2 1584 1500 23 -7-5 2 106 55 -39 -1 1 2 141 144 6 1 7 2 1172 1188 11 3-11 3 332 312 17  
 -12-12 2 253 307 -30 -5-5 2 1240 1262 12 1 1 2 288 267 6 3 7 2 98 74 -11 5-11 3 241 254 21  
 -4-12 2 403 413 12 -3-5 2 1197 1186 9 3 1 2 752 755 7 5 7 2 1714 1715 16 7-11 3 305 301 21  
 -2-12 2 466 479 12 -1-5 2 2392 2380 38 5 1 2 153 161 6 7 7 2 557 568 7 9-11 3 91 132 -91  
 0-12 2 357 360 16 1-5 2 2306 2343 22 7 1 2 301 311 5 9 7 2 915 909 14 11-11 3 217 244 -27  
 2-12 2 324 316 18 3-5 2 339 364 4 9 1 2 365 370 16 11 7 2 84 65 -84 -10-10 3 389 393 16  
 4-12 2 405 411 17 5-5 2 685 677 5 11 1 2 461 450 9 -12 8 2 77 121 -77 -8-10 3 214 234 16  
 6-12 2 317 317 21 7-5 2 1227 1202 21 13 1 2 136 53 -32 -10 8 2 336 330 16 -4-10 3 657 656 11  
 10-12 2 303 297 23 9-5 2 566 561 14 -16 2 2 288 316 26 -8 8 2 372 382 11 -2-10 3 354 376 10  
 -13-11 2 448 461 21 11-5 2 1362 1328 31 -14 2 2 176 200 -26 -6 8 2 71 11 -53 0-10 3 694 721 12  
 -3-11 2 63 33 -63 13-5 2 296 272 18 -12 2 2 130 167 -43 -4 8 2 173 161 13 2-10 3 86 49 -57  
 -1-11 2 126 58 -30 -14-4 2 1084 1020 23 -10 2 2 146 151 -16 -2 8 2 969 949 10 4-10 3 1030 987  
 16

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 3

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  
 6-10 3 777 736 9 -11-3 3 202 198 13 -7 3 3 304 312 5 7 9 3 168 157 -26 -12-8 4 1564 1527 22  
 8-10 3 687 647 13 -9-3 3 1340 1317 11 -5 3 3 429 442 4 9 9 3 172 126 -30 -10-8 4 768 786 8  
 10-10 3 633 643 15 -7-3 3 860 901 7 -3 3 3 1275 1264 10 -12 10 3 322 310 28 -8-8 4 453 478 7  
 12-10 3 632 614 16 -5-3 3 997 1001 11 -1 3 3 176 203 6 -10 10 3 546 563 16 -6-8 4 920 911 13  
 -11-9 3 126 95 -41 -1-3 3 1895 1807 24 1 3 3 335 345 4 -8 10 3 255 229 -27 -4-8 4 1739 1745 22  
 -9-9 3 484 492 7 1-3 3 3550 3652 45 3 3 3 873 858 7 -6 10 3 148 139 -43 -2-8 4 4310 4313 41  
 -7-9 3 89 41 -24 3-3 3 1438 1452 35 5 3 3 280 285 6 -4 10 3 1100 1074 11 0-8 4 252 256 10  
 -5-9 3 75 67 -46 5-3 3 844 894 6 7 3 3 804 814 9 -2 10 3 418 402 9 2-8 4 2479 2472 34  
 -3-9 3 319 328 7 7-3 3 761 757 8 9 3 3 188 188 15 0 10 3 1315 1317 13 4-8 4 2841 2845 28  
 -1-9 3 248 262 25 9-3 3 258 249 25 11 3 3 760 745 9 2 10 3 158 165 -19 6-8 4 1501 1470 16  
 1-9 3 664 662 11 11-3 3 1006 981 11 13 3 3 204 199 -22 4 10 3 395 425 10 8-8 4 1077 1057 17  
 3-9 3 1236 1225 13 13-3 3 472 455 14 -14 4 3 188 134 -38 -7 11 3 1036 1035 16 10-8 4 119 74 -  
 57  
 5-9 3 823 794 9 15-3 3 290 264 -30 -12 4 3 294 315 18 -5 11 3 120 54 -45 12-8 4 1779 1777 26  
 7-9 3 654 601 12 -14-2 3 507 512 12 -10 4 3 438 444 11 -3 11 3 663 645 13 -13-7 4 1195 1171 18  
 9-9 3 526 494 14 -12-2 3 267 289 20 -8 4 3 103 118 -19 -1 11 3 560 547 10 -11-7 4 422 438 14  
 11-9 3 630 618 15 -10-2 3 382 369 7 -6 4 3 533 537 5 1 11 3 628 628 8 -9-7 4 907 917 9  
 -12-8 3 216 227 -30 -8-2 3 1858 1865 14 -4 4 3 171 186 7 3 11 3 687 707 11 -7-7 4 1024 1022 10  
 -10-8 3 99 100 -27 -6-2 3 556 553 14 -2 4 3 707 697 6 -6 12 3 175 165 -41 -5-7 4 3056 3077 31

-8-8 3 99 110-18 -4-2 3 2085 2095 27 0 4 3 25 32-25 -4 12 3 480 449 15 -3-7 4 2593 2550 20  
 -6-8 3 114 152-28 -2-2 3 619 610 8 2 4 3 156 117 12 -2 12 3 254 263 24 -1-7 4 2017 1982 47  
 -4-8 3 236 239 7 2-2 3 1774 1773 22 4 4 3 421 419 4 0 12 3 111 116-57 1-7 4 2213 2185 21  
 -2-8 3 531 526 11 4-2 3 292 288 17 6 4 3 320 323 6 2 12 3 75 60-74 3-7 4 1061 1071 11  
 0-8 3 352 343 6 6-2 3 1776 1830 20 8 4 3 746 737 8 -3 13 3 337 371 22 5-7 4 2331 2351 63  
 2-8 3 134 131 14 8-2 3 87 43-32 10 4 3 236 221 15 -1 13 3 36 34-36 7-7 4 1173 1125 18  
 4-8 3 76 34-38 10-2 3 614 595 8 12 4 3 69 30-69 1 13 3 117 35-63 9-7 4 892 875 15  
 6-8 3 101 60-33 12-2 3 76 50-75 -15 5 3 14 64-13 -6-16 4 371 299 23 11-7 4 992 964 16  
 8-8 3 369 350 17 -13-1 3 303 294 14 -13 5 3 0 17 -1 -9-15 4 333 114 29 13-7 4 1097 1088 17  
 10-8 3 629 595 13 -11-1 3 298 298 9 -11 5 3 104 115-50 -7-15 4 448 422 21 -12-6 4 363 357 19  
 12-8 3 180 90-40 -9-1 3 53 10-53 -9 5 3 124 144-42 -1-15 4 260 302-28 -10-6 4 683 679 8  
 -13-7 3 664 656 15 -7-1 3 149 153 10 -7 5 3 172 180 10 1-15 4 390 387 22 -8-6 4 469 467 6  
 -11-7 3 0 72 -1 -5-1 3 516 531 5 -5 5 3 756 768 6 -10-14 4 270 257-31 -6-6 4 1018 1036 24  
 -9-7 3 133 109-45 -3-1 3 344 347 6 -3 5 3 168 172 8 -8-14 4 158 170-55 -4-6 4 493 481 12  
 -7-7 3 610 614 7 -1-1 3 145 98 7 -1 5 3 949 957 9 -6-14 4 329 354 22 -2-6 4 83 53-22  
 -5-7 3 1348 1372 13 3-1 3 513 544 12 1 5 3 962 968 10 -4-14 4 311 298 21 0-6 4 462 451 5  
 -3-7 3 1572 1546 12 5-1 3 103 78 9 3 5 3 1427 1422 9 -2-14 4 344 353 20 2-6 4 107 119-11  
 -1-7 3 418 412 5 7-1 3 79 17-21 5 5 3 267 261 5 0-14 4 495 501 15 4-6 4 142 137-15  
 1-7 3 533 535 7 9-1 3 364 371 7 7 5 3 142 145-16 2-14 4 171 175-37 6-6 4 266 274 8  
 3-7 3 330 340 8 11-1 3 500 475 8 9 5 3 550 547 15 4-14 4 82 49-81 8-6 4 322 313 9  
 5-7 3 189 213-21 13-1 3 253 236 23 11 5 3 145 181-26 -9-13 4 318 314 25 10-6 4 288 289 15  
 7-7 3 0 22 -1 -14 0 3 8 8-7 13 5 3 109 49-95 -5-13 4 410 393 16 12-6 4 470 440 25  
 9-7 3 47 91-47 -12 0 3 263 248 15 -14 6 3 301 360 22 -3-13 4 295 301 12 14-6 4 266 235 25  
 11-7 3 308 308 19 -10 0 3 145 171 13 -12 6 3 214 197 18 -1-13 4 96 112-73 -13-5 4 571 548 32  
 13-7 3 183 115-39 -8 0 3 1140 1175 12 -10 6 3 650 649 11 1-13 4 247 281 23 -11-5 4 327 329 9  
 -12-6 3 67 98-67 -6 0 3 439 439 4 -8 6 3 566 571 6 3-13 4 449 428 17 -9-5 4 322 335 6  
 -10-6 3 849 848 9 -4 0 3 1122 1132 10 -6 6 3 123 101-13 5-13 4 894 840 16 -7-5 4 171 170 10  
 -8-6 3 110 79-23 -2 0 3 136 128 5 -4 6 3 160 145 8 -12-12 4 239 87-34 -5-5 4 48 30-30  
 -6-6 3 933 941 15 0 0 3 660 692 8 -2 6 3 71 79-24 -10-12 4 103 67-102 -3-5 4 386 386 4  
 -4-6 3 440 431 7 2 0 3 1738 1729 22 0 6 3 543 539 6 -2-12 4 97 82-31 -1-5 4 310 286 4  
 -2-6 3 166 154 7 4 0 3 978 983 7 2 6 3 147 138 8 0-12 4 651 655 12 1-5 4 515 513 9  
 0-6 3 221 214 6 6 0 3 1738 1760 16 4 6 3 811 816 8 2-12 4 186 176-29 3-5 4 361 368 9  
 2-6 3 399 413 5 8 0 3 428 403 7 6 6 3 80 94-41 4-12 4 226 209-27 5-5 4 266 255 6  
 4-6 3 366 370 6 10 0 3 995 974 11 8 6 3 164 197-23 6-12 4 203 154-33 7-5 4 287 311 9  
 6-6 3 164 181 10 12 0 3 393 383 11 10 6 3 170 217-31 8-12 4 76 66-75 9-5 4 82 91-41  
 8-6 3 625 637 21 -15 1 3 141 99-53 12 6 3 175 241-38 10-12 4 43 61-42 11-5 4 164 195-26  
 10-6 3 448 450 9 -13 1 3 198 208-33 -13 7 3 308 346 22 -13-11 4 319 278 27 13-5 4 116 44-91  
 12-6 3 135 165-32 -11 1 3 111 127-20 -11 7 3 319 320 20 -11-11 4 140 160-57 -14-4 4 262 262  
 19  
 14-6 3 216 155-43 -9 1 3 389 394 5 -7 7 3 360 362 9 -3-11 4 887 886 14 -12-4 4 39 46-38  
 -13-5 3 807 768 10 -7 1 3 815 831 8 -5 7 3 1576 1562 25 -1-11 4 319 331 9 -10-4 4 619 609 6  
 -11-5 3 203 201 13 -5 1 3 1165 1172 9 -3 7 3 861 857 9 1-11 4 212 214-22 -8-4 4 657 654 6  
 -9-5 3 498 494 5 -3 1 3 1114 1141 14 -1 7 3 255 263 7 3-11 4 213 196-24 -6-4 4 1335 1348 10  
 -7-5 3 493 498 5 -1 1 3 673 677 9 1 7 3 105 85-16 5-11 4 303 293 19 -4-4 4 268 275 6  
 -5-5 3 622 647 6 1 1 3 1317 1278 17 3 7 3 262 271 10 7-11 4 175 190-31 -2-4 4 72 69-13  
 -3-5 3 279 269 4 3 1 3 270 248 4 5 7 3 812 805 8 9-11 4 239 224-32 0-4 4 279 302 5  
 -1-5 3 447 418 5 5 1 3 988 1013 8 7 7 3 354 369 12 11-11 4 102 98-101 2-4 4 311 301 4  
 1-5 3 429 433 5 7 1 3 370 350 10 9 7 3 538 564 11 -12-10 4 260 251 20 4-4 4 879 880 6  
 3-5 3 96 105-11 9 1 3 898 892 16 11 7 3 195 236-28 -10-10 4 215 233-26 6-4 4 281 294 8  
 5-5 3 489 494 5 11 1 3 1423 1375 14 -12 8 3 664 690 14 -8-10 4 84 131-40 8-4 4 549 562 8  
 7-5 3 453 462 7 13 1 3 299 281 16 -10 8 3 447 444 14 -2-10 4 322 327 12 10-4 4 79 16-53  
 9-5 3 293 324 10 -16 2 3 363 379 20 -8 8 3 1293 1290 13 0-10 4 971 983 15 12-4 4 88 126-87  
 11-5 3 108 120-39 -14 2 3 133 154-58 -6 8 3 733 738 8 2-10 4 215 196 20 14-4 4 167 65-52  
 13-5 3 92 8-74 -12 2 3 166 153-32 -4 8 3 53 68-53 4-10 4 221 222 15 -13-3 4 433 428 13

-14-4 3 634 646 18	-10 2 3 75 14 -34	-2 8 3 934 919 9	6-10 4 558 542 18	-11-3 4 42 23 -41
-12-4 3 296 303 9	-8 2 3 278 284 8	0 8 3 387 385 7	8-10 4 522 518 14	-9-3 4 132 131 -16
-10-4 3 762 755 7	-6 2 3 579 581 6	2 8 3 1103 1089 12	10-10 4 272 308 25	-7-3 4 32 26 -31
-8-4 3 902 915 7	-4 2 3 84 84 -10	4 8 3 251 261 11	12-10 4 274 279 -29	-5-3 4 64 86 -19
-6-4 3 2120 2149 16	-2 2 3 674 685 9	6 8 3 934 941 12	-11-9 4 540 556 14	-3-3 4 78 58 -12
-4-4 3 171 135 14	0 2 3 541 551 7	8 8 3 907 895 14	-9-9 4 518 533 7	-1-3 4 559 539 7
-2-4 3 623 611 8	2 2 3 721 723 7	10 8 3 162 179 -31	-7-9 4 1562 1567 26	1-3 4 1225 1241 16
0-4 3 700 690 7	4 2 3 282 262 17	-11 9 3 63 114 -63	-5-9 4 369 372 8	3-3 4 579 591 6
2-4 3 772 764 7	6 2 3 1142 1161 12	-9 9 3 399 390 16	-3-9 4 1473 1480 21	5-3 4 485 513 5
4-4 3 878 896 7	8 2 3 644 634 10	-7 9 3 218 236 20	-1-9 4 1076 1079 11	7-3 4 402 411 7
6-4 3 92 96 -24	10 2 3 248 255 15	-5 9 3 333 360 10	1-9 4 723 751 12	9-3 4 324 330 11
8-4 3 572 577 10	12 2 3 600 581 13	-3 9 3 357 357 8	3-9 4 1175 1207 12	11-3 4 273 261 15
10-4 3 70 51 -70	-15 3 3 58 17 -58	-1 9 3 242 228 12	5-9 4 1251 1228 13	13-3 4 405 379 14
12-4 3 45 31 -45	-13 3 3 229 247 -30	1 9 3 83 105 -27	7-9 4 655 602 13	-14-2 4 69 42 -69
14-4 3 160 107 -40	-11 3 3 306 313 17	3 9 3 26 25 -25	9-9 4 310 249 20	-12-2 4 475 473 11
-13-3 3 1585 1511 38	-9 3 3 571 585 7	5 9 3 76 32 -50	11-9 4 191 69 -31	-10-2 4 108 104 -29

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite 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																																																																																																																																											
-8-2 4 314 322 5	2 4 4 509 528 4	1 13 4 820 800 15	-1-7 5 1087 1089 10	13-1 5 191 175 -37	-6-2 4 352 343 4	4 4 4 585 594 5	-5-17 5 627 538 17	1-7 5 2130 2090 30	-14 0 5 0 20 -1	-4-2 4 210 179 5	6 4 4 249 236 9	-6-16 5 388 301 21	3-7 5 212 204 10	-12 0 5 220 222 13	-2-2 4 787 788 10	8 4 4 137 146 -18	-4-16 5 576 583 14	5-7 5 2772 2779 27	-10 0 5 754 742 7	2-2 4 55 27 -15	10 4 4 499 525 11	-9-15 5 406 340 24	7-7 5 153 96 -27	-8 0 5 84 86 -22	4-2 4 522 529 4	12 4 4 346 354 20	-5-15 5 379 353 21	9-7 5 568 564 13	-6 0 5 274 289 4	6-2 4 1222 1262 22	-15 5 4 0 39 -1	-1-15 5 374 379 22	11-7 5 299 178 22	-4 0 5 481 478 4	8-2 4 391 398 7	-13 5 4 114 55 -58	1-15 5 338 355 23	13-7 5 157 99 -52	-2 0 5 648 649 9	10-2 4 444 427 9	-11 5 4 171 182 -27	-10-14 5 463 468 21	-12-6 5 244 281 22	0 0 5 262 268 5	12-2 4 176 155 -24	-9 5 4 375 368 8	-6-14 5 420 423 20	-10-6 5 478 475 7	2 0 5 195 206 5	-13-1 4 73 111 -73	-7 5 4 157 153 11	-4-14 5 466 458 16	-8-6 5 146 112 -24	4 0 5 358 365 5	-11-1 4 99 74 -23	-5 5 4 875 894 13	-2-14 5 609 621 13	-6-6 5 731 742 7	6 0 5 198 202 8	-9-1 4 404 409 5	-3 5 4 202 201 6	0-14 5 64 21 -64	-4-6 5 1096 1091 10	8 0 5 397 398 10	-7-1 4 353 363 6	-1 5 4 808 804 7	2-14 5 246 273 -26	-2-6 5 1743 1742 22	10 0 5 336 342 10	-5-1 4 1037 1041 8	1 5 4 44 25 -31	4-14 5 226 257 -29	0-6 5 936 918 9	12 0 5 84 49 -83	-3-1 4 691 689 9	3 5 4 999 1000 7	-11-13 5 180 120 -38	2-6 5 512 513 9	-13 1 5 353 346 18	-1-1 4 48 13 -9	5 5 4 291 293 5	-9-13 5 316 320 25	4-6 5 242 257 6	-11 1 5 91 76 -28	3-1 4 275 299 4	7 5 4 95 35 -25	-7-13 5 307 318 24	6-6 5 492 497 7	-9 1 5 128 137 -16	5-1 4 187 178 5	9 5 4 357 356 21	-5-13 5 80 13 -80	8-6 5 72 41 -47	-7 1 5 92 86 -12	7-1 4 172 171 10	11 5 4 34 33 -33	-3-13 5 141 128 -32	10-6 5 667 648 9	-5 1 5 474 484 4	9-1 4 425 432 8	-14 6 4 125 79 -64	-1-13 5 527 542 13	12-6 5 572 560 10	-3 1 5 261 238 8	11-1 4 660 644 7	-12 6 4 252 252 20	1-13 5 164 174 -39	14-6 5 109 114 -108	-1 1 5 282 285 5	13-1 4 103 18 -84	-10 6 4 244 225 20	3-13 5 541 531 14	-13-5 5 112 122 -48	1 1 5 846 842 8	-14 0 4 543 508 17	-8 6 4 352 377 7	5-13 5 1174 1145 18	-11-5 5 240 237 10	3 1 5 1362 1343 11	-12 0 4 282 312 9	-6 6 4 62 5 -48	-12-12 5 227 87 -34	-9-5 5 282 295 9	5 1 5 547 553 6	-10 0 4 471 481 8	-4 6 4 76 66 -18	-10-12 5 140 74 -65	-7-5 5 54 16 -27	7 1 5 235 250 9	-8 0 4 681 701 7	-2 6 4 196 201 9	-8-12 5 256 277 -28	-5-5 5 363 375 9	9 1 5 261 286 14	-6 0 4 406 419 4	0 6 4 453 452 4	-6-12 5 0 55 -1	-3-5 5 175 157 8	11 1 5 232 246 16	-4 0 4 1464 1462 14	2 6 4 58 49 -22	-4-12 5 52 30 -51	-1-5 5 229 195 6	13 1 5 316 334 -36	-2 0 4 69 39 -14	4 6 4 512 515 7	-2-12 5 102 88 -28	1-5 5 40 21 -40	-16 2 5 599 575 18	0 0 4 267 257 4	6 6 4 145 152 13	0-12 5 405 421 12	3-5 5 865 862 11	-14 2 5 756 728 15	2 0 4 1082 1091 14	8 6 4 66 123 -65	2-12 5 536 538 12	5-5 5 334 344 7	-12 2 5 561 554 13

4 0 4 1686 1690 13 10 6 4 0 44 -1 4-12 5 124 83 -52 7-5 5 181 186 14 -10 2 5 971 972 10  
6 0 4 295 300 7 12 6 4 83 127 -83 6-12 5 159 53 -49 9-5 5 53 13 -53 -8 2 5 741 761 11  
8 0 4 989 1010 8 -13 7 4 142 184 -59 8-12 5 166 169 -39 11-5 5 216 217 16 -6 2 5 1560 1582 12  
10 0 4 242 239 -32 -7 7 4 538 536 8 10-12 5 67 137 -67 13-5 5 401 364 22 -4 2 5 565 558 5  
12 0 4 533 515 10 -5 7 4 996 1001 10 -13-11 5 250 210 -37 -14-4 5 54 62 -53 -2 2 5 564 572 4  
-13 1 4 2146 2053 30 -3 7 4 324 315 7 -11-11 5 122 104 -67 -12-4 5 134 112 -21 0 2 5 667 633 6  
-11 1 4 374 371 11 -1 7 4 54 68 -45 -9-11 5 739 747 14 -10-4 5 781 766 7 2 2 5 425 413 4  
-9 1 4 1606 1577 15 1 7 4 625 638 7 -3-11 5 1267 1276 13 -8-4 5 496 500 4 4 2 5 988 982 8  
-7 1 4 1836 1883 14 3 7 4 115 117 11 -1-11 5 953 963 12 -6-4 5 1126 1135 17 6 2 5 217 182 -30  
-5 1 4 1672 1665 13 5 7 4 443 446 9 1-11 5 350 363 13 -4-4 5 1521 1491 19 8 2 5 477 482 9  
-3 1 4 3250 3361 30 7 7 4 232 227 19 3-11 5 233 193 -25 -2-4 5 623 613 8 10 2 5 258 257 16  
-1 1 4 1103 1060 14 9 7 4 448 463 13 5-11 5 506 486 10 0-4 5 412 465 6 12 2 5 146 165 -27  
1 1 4 6062 6191 79 11 7 4 406 418 19 7-11 5 136 158 -45 2-4 5 725 719 7 -13 3 5 562 562 15  
3 1 4 3576 3484 27 -12 8 4 139 142 -48 9-11 5 82 25 -81 4-4 5 2511 2521 66 -11 3 5 752 742 12  
5 1 4 2244 2296 17 -10 8 4 119 132 -46 11-11 5 283 311 27 6-4 5 1124 1150 11 -9 3 5 53 19 -52  
7 1 4 1606 1575 16 -8 8 4 235 259 22 -12-10 5 606 591 11 8-4 5 886 884 10 -7 3 5 784 779 11  
9 1 4 125 139 -21 -6 8 4 417 419 11 -10-10 5 309 338 12 10-4 5 1175 1131 12 -5 3 5 868 873 7  
11 1 4 2142 2089 21 -4 8 4 152 164 -16 -8-10 5 290 297 12 12-4 5 381 352 15 -3 3 5 236 234 4  
13 1 4 82 83 -82 -2 8 4 62 76 -39 -2-10 5 546 555 7 14-4 5 608 591 18 -1 3 5 2273 2279 22  
-16 2 4 1485 1495 22 0 8 4 854 849 9 0-10 5 286 304 10 -13-3 5 55 34 -54 1 3 5 1911 1880 14  
-14 2 4 1182 1135 18 2 8 4 254 262 12 2-10 5 143 129 -27 -11-3 5 214 221 10 3 3 5 186 190 6  
-12 2 4 1166 1171 18 4 8 4 491 506 6 4-10 5 277 270 11 -9-3 5 61 67 -35 5 3 5 285 300 6  
-10 2 4 1530 1534 15 6 8 4 245 250 10 6-10 5 105 20-104 -7-3 5 482 482 6 7 3 5 152 167 -34  
-8 2 4 326 315 13 8 8 4 113 61 -45 8-10 5 624 579 13 -5-3 5 843 849 8 9 3 5 468 474 21  
-6 2 4 6372 6404 50 10 8 4 284 258 25 10-10 5 119 157 -93 -3-3 5 624 617 8 11 3 5 562 574 12  
-4 2 4 2572 2554 20 -11 9 4 207 224 -31 12-10 5 157 188 -58 3-3 5 49 38 -17 -12 4 5 704 722 13  
0 2 4 4323 4418 55 -9 9 4 403 415 13 -11-9 5 576 574 9 5-3 5 87 62 -25 -10 4 5 551 554 8  
2 2 4 5335 5215 63 -7 9 4 228 257 19 -9-9 5 409 427 8 7-3 5 117 122 -16 -8 4 5 1705 1743 13  
4 2 4 4745 4736 36 -5 9 4 51 58 -50 -7-9 5 422 436 7 9-3 5 544 542 8 -6 4 5 625 636 6  
6 2 4 1073 1099 11 -3 9 4 763 752 8 -1-9 5 79 80 -29 11-3 5 211 169 20 -4 4 5 1822 1814 14  
8 2 4 2629 2603 25 -1 9 4 385 389 11 1-9 5 161 142 -21 13-3 5 574 507 16 -2 4 5 149 143 -17  
10 2 4 1511 1493 15 1 9 4 394 378 8 3-9 5 485 503 7 -14-2 5 98 22 -61 0 4 5 898 913 7  
12 2 4 1071 1040 12 3 9 4 491 514 9 5-9 5 108 85 -28 -12-2 5 626 608 8 2 4 5 1906 1926 14  
-15 3 4 164 126 -45 5 9 4 171 183 -20 7-9 5 72 76 -72 -10-2 5 169 158 13 4 4 5 321 314 4  
-13 3 4 798 814 15 7 9 4 674 664 12 9-9 5 184 185 -31 -8-2 5 163 176 15 6 4 5 1471 1472 14  
-11 3 4 624 634 8 9 9 4 474 477 15 11-9 5 65 48 -64 -6-2 5 200 212 5 8 4 5 150 157 -18  
-9 3 4 1074 1080 11 -12 10 4 260 283 26 -12-8 5 1013 1037 16 -4-2 5 458 437 5 10 4 5 687 701 9  
-7 3 4 741 768 8 -8 10 4 316 296 18 -10-8 5 0 72 -1 -2-2 5 1423 1420 18 12 4 5 0 40 -1  
-5 3 4 129 102 10 -6 10 4 1045 1026 16 -8-8 5 543 557 7 4-2 5 444 452 5 -13 5 5 191 174 -39  
-3 3 4 1628 1615 12 -4 10 4 218 226 -46 -6-8 5 1105 1104 16 6-2 5 865 891 7 -11 5 5 202 182 -24  
-1 3 4 698 733 15 -2 10 4 107 47 -26 -4-8 5 124 131 -17 8-2 5 528 540 8 -9 5 5 515 518 7  
1 3 4 70 24 -26 0 10 4 1311 1299 13 -2-8 5 1593 1589 15 10-2 5 711 694 9 -7 5 5 358 377 6  
3 3 4 1467 1449 11 2 10 4 560 570 7 0-8 5 1320 1312 13 12-2 5 173 123 -24 -5 5 5 626 638 6  
5 3 4 397 386 4 4 10 4 1283 1297 17 2-8 5 544 541 7 -13-1 5 343 349 15 -3 5 5 398 393 6  
7 3 4 63 4 -42 -7 11 4 1791 1769 26 4-8 5 430 435 7 -11-1 5 55 14 -55 -1 5 5 353 363 10  
9 3 4 514 516 8 -5 11 4 106 103 -79 6-8 5 169 117 -29 -9-1 5 535 534 7 1 5 5 133 145 -14  
11 3 4 768 760 9 -3 11 4 1800 1725 26 8-8 5 758 720 14 -7-1 5 549 555 5 3 5 5 77 62 -14  
13 3 4 530 524 11 -1 11 4 1452 1428 16 10-8 5 325 333 21 -5-1 5 1430 1428 11 5 5 5 747 759 6  
-12 4 4 195 230 -27 1 11 4 1656 1617 16 12-8 5 569 578 16 -3-1 5 931 942 12 7 5 5 181 185 13  
-10 4 4 484 486 8 -6 12 4 329 334 20 -13-7 5 1246 1218 19 -1-1 5 404 409 5 9 5 5 302 309 12  
-8 4 4 332 344 6 -4 12 4 405 377 17 -11-7 5 1128 1142 17 3-1 5 247 247 3 11 5 5 399 383 12  
-6 4 4 72 64 -18 -2 12 4 442 442 16 -9-7 5 1952 1948 18 5-1 5 142 152 12 -14 6 5 238 271 -27  
-4 4 4 202 211 6 0 12 4 1358 1318 20 -7-7 5 346 373 15 7-1 5 142 139 12 -12 6 5 279 274 22  
-2 4 4 1130 1120 9 -3 13 4 51 78 -50 -5-7 5 2720 2795 37 9-1 5 709 716 7 -10 6 5 123 149 -38

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite 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
-6 6 5 532 548 5	-2-12 6 1205 1199 12	-9 -5 6 840 839 8	9 1 6 222 211 20	4 8 6 1376 1369 13
-4 6 5 154 184 9	0-12 6 1143 1170 17	-7 -5 6 478 476 7	11 1 6 89 133 -47	6 8 6 1297 1290 18
-2 6 5 1071 1088 10	2-12 6 977 1008 16	-5 -5 6 390 408 4	13 1 6 277 276 -31	8 8 6 1040 1018 16
0 6 5 609 617 5	4-12 6 135 126 -39	-1 -5 6 430 423 6	-14 2 6 329 338 20	10 8 6 493 477 16
2 6 5 416 422 5	6-12 6 1423 1380 21	1 -5 6 993 941 9	-12 2 6 236 235 22	-11 9 6 318 363 27
4 6 5 671 689 7	8-12 6 550 583 15	3 -5 6 88 80 -12	-10 2 6 554 571 7	-9 9 6 206 207 -30
6 6 5 496 503 9	10-12 6 206 244 -39	5 -5 6 304 320 14	-8 2 6 421 421 7	-7 9 6 566 556 13
8 6 5 215 222 17	-11-11 6 767 765 14	7 -5 6 548 553 7	-6 2 6 709 726 6	-5 9 6 422 423 9
10 6 5 365 373 16	-9-11 6 950 992 15	9 -5 6 81 56 -40	-4 2 6 51 7 -30	-3 9 6 0 76 -1
-13 7 5 180 157 -37	-7-11 6 415 422 8	11 -5 6 504 469 10	-2 2 6 63 52 -13	-1 9 6 1448 1411 14
-9 7 5 294 319 17	-5-11 6 1475 1500 20	13 -5 6 134 32 -62	0 2 6 302 292 5	1 9 6 385 371 8
-7 7 5 645 643 7	-3-11 6 1740 1713 23	-14 -4 6 809 781 11	2 2 6 63 25 -10	3 9 6 1486 1465 20
-5 7 5 1169 1169 12	-1-11 6 1959 1982 19	-12 -4 6 443 450 11	4 2 6 683 680 7	7 9 6 30 87 -30
-3 7 5 583 581 7	1-11 6 1258 1277 19	-10 -4 6 805 807 7	6 2 6 421 423 6	9 9 6 676 665 15
-1 7 5 80 97 -27	3-11 6 828 858 14	-8 -4 6 264 282 8	8 2 6 349 349 9	-8 10 6 28 37 -28
1 7 5 1384 1374 13	5-11 6 1089 1067 12	-6 -4 6 1067 1047 10	10 2 6 133 145 -91	-6 10 6 371 391 17
3 7 5 683 691 7	7-11 6 1251 1248 19	-4 -4 6 1982 2057 25	12 2 6 73 79 -72	-4 10 6 348 347 17
5 7 5 885 881 9	9-11 6 1174 1156 18	2 -4 6 642 623 8	-13 3 6 257 265 22	-2 10 6 133 134 -24
7 7 5 875 893 13	11-11 6 608 603 16	4 -4 6 601 616 6	-11 3 6 206 207 14	0 10 6 151 136 -29
9 7 5 845 852 13	-12-10 6 412 398 23	6 -4 6 207 197 16	-9 3 6 191 204 12	-7 11 6 140 32 -55
11 7 5 1085 1077 17	-10-10 6 255 261 17	8 -4 6 1364 1407 22	-7 3 6 435 438 5	-5 11 6 132 145 -56
-12 8 5 0 136 -1	-8-10 6 658 681 19	10 -4 6 599 592 12	-5 3 6 921 931 7	-3 11 6 80 52 -80
-8 8 5 280 294 19	-6-10 6 515 528 11	12 -4 6 519 513 12	-3 3 6 416 401 3	-1 11 6 673 635 14
-6 8 5 578 576 9	-4-10 6 424 436 11	14 -4 6 311 313 28	-1 3 6 382 383 4	1 11 6 109 136 -66
-4 8 5 156 152 -25	-2-10 6 437 449 7	-13 -3 6 583 574 14	1 3 6 591 586 5	-4 12 6 459 439 17
-2 8 5 396 402 7	0-10 6 157 92 -26	-11 -3 6 190 169 -22	3 3 6 266 266 4	-2 12 6 176 206 -35
0 8 5 544 543 11	2-10 6 109 84 -36	-9 -3 6 2095 2090 16	5 3 6 424 427 6	0 12 6 255 296 26
2 8 5 246 233 17	4-10 6 360 366 23	-7 -3 6 1815 1831 14	7 3 6 248 262 9	-1 13 6 122 182 -108
4 8 5 204 207 11	6-10 6 229 247 17	-5 -3 6 1974 2014 18	9 3 6 590 592 8	-5 -17 7 656 103 15
6 8 5 316 321 9	8-10 6 110 151 -61	-3 -3 6 2262 2183 29	11 3 6 59 75 -58	-8 -16 7 309 230 -32
8 8 5 331 323 17	10-10 6 278 304 25	3 -3 6 1032 1018 14	-12 4 6 310 320 22	-6 -16 7 193 216 -42
10 8 5 165 169 -32	12-10 6 100 92 -99	5 -3 6 4305 4267 34	-10 4 6 98 3 -26	-4 -16 7 0 10 -1
-11 9 5 216 222 -33	-11 -9 6 919 898 19	7 -3 6 329 347 11	-8 4 6 223 209 9	-9 -15 7 335 326 26
-9 9 5 461 480 15	-9 -9 6 28 66 -28	9 -3 6 873 896 18	-6 4 6 241 245 6	-7 -15 7 604 312 18
-7 9 5 26 16 -26	-7 -9 6 287 301 6	11 -3 6 834 836 10	-4 4 6 351 331 5	-5 -15 7 484 511 13
-5 9 5 66 84 -66	-5 -9 6 0 98 -1	13 -3 6 139 142 -68	-2 4 6 380 389 4	-3 -15 7 102 164 -79
-3 9 5 531 513 7	-3 -9 6 75 18 -74	-14 -2 6 372 382 14	0 4 6 315 316 4	1 -15 7 515 508 17
-1 9 5 541 528 7	-1 -9 6 20 5 -20	-12 -2 6 2991 2881 37	2 4 6 313 296 4	-10 -14 7 284 301 28
1 9 5 345 337 17	1 -9 6 129 127 -16	-10 -2 6 963 981 8	4 4 6 257 240 6	-8 -14 7 750 667 16
3 9 5 246 251 13	3 -9 6 804 825 9	-8 -2 6 1168 1138 11	6 4 6 1219 1216 12	-6 -14 7 360 353 19
5 9 5 507 506 10	5 -9 6 120 122 -25	-6 -2 6 3291 3271 25	8 4 6 81 65 -38	-4 -14 7 316 324 19
7 9 5 511 506 12	7 -9 6 169 155 -32	-4 -2 6 5064 5016 44	10 4 6 70 34 -70	0 -14 7 241 194 -27
9 9 5 177 247 -32	9 -9 6 127 128 -48	-2 -2 6 7447 7589 96	12 4 6 107 100 -79	2 -14 7 211 230 -30
-8 10 5 222 200 -31	11 -9 6 154 178 -45	2 -2 6 4442 4404 62	-13 5 6 87 32 -86	4 -14 7 13 35 -12
-6 10 5 388 373 18	-12 -8 6 622 617 14	4 -2 6 4027 3920 39	-11 5 6 247 254 20	-11 -13 7 306 313 -



-4 10 5 338 324 12 -10 -8 6 41 69 -40 6 -2 6 2765 2788 26 -9 5 6 436 445 7 -9 -13 7 648 578 17  
 -2 10 5 138 118 -22 -8 -8 6 212 214 11 8 -2 6 1824 1836 15 -7 5 6 210 233 9 -7 -13 7 373 364 18  
 0 10 5 332 327 10 -6 -8 6 946 971 13 10 -2 6 105 97 -34 -5 5 6 614 616 5 -5 -13 7 246 242 25  
 2 10 5 678 686 8 -4 -8 6 164 193 -20 12 -2 6 2517 2391 36 -3 5 6 200 190 15 -3 -13 7 507 502 11  
 -7 11 5 249 237 -27 -2 -8 6 504 500 9 -13 -1 6 721 722 15 -1 5 6 61 12 -17 -1 -13 7 467 480 12  
 -5 11 5 108 56 -55 0 -8 6 638 644 7 -11 -1 6 359 366 7 1 5 6 318 321 4 1 -13 7 212 204 22  
 -3 11 5 107 36 -71 2 -8 6 369 362 6 -9 -1 6 1050 1046 10 3 5 6 167 180 7 3 -13 7 274 311 23  
 -1 11 5 724 717 13 4 -8 6 255 250 13 -7 -1 6 608 590 5 5 5 6 1142 1138 9 5 -13 7 33 141 -32  
 1 11 5 747 726 13 6 -8 6 124 128 -37 -5 -1 6 2457 2453 24 7 5 6 337 340 8 9 -13 7 395 402 18  
 -4 12 5 589 583 14 8 -8 6 866 827 15 -3 -1 6 1701 1698 13 9 5 6 402 406 10 -12 -12 7 279 258 -33  
 -2 12 5 307 340 21 10 -8 6 192 205 -30 -1 -1 6 900 921 11 11 5 6 958 944 11 -10 -12 7 185 101 -33  
 0 12 5 35 49 -34 12 -8 6 173 187 -47 3 -1 6 38 16 -25 -14 6 6 151 13 -55 -8 -12 7 1213 1215 18  
 -1 13 5 385 374 21 -13 -7 6 69 57 -69 5 -1 6 979 1016 17 -12 6 6 335 369 19 -6 -12 7 775 769 13  
 1 13 5 394 395 18 -11 -7 6 411 392 15 7 -1 6 86 26 -19 -10 6 6 619 646 12 -4 -12 7 674 679 12  
 -5 -17 6 448 20 17 -9 -7 6 475 482 6 9 -1 6 751 755 10 -8 6 6 143 142 -17 -2 -12 7 448 459 12  
 -8 -16 6 743 286 16 -7 -7 6 208 231 8 11 -1 6 377 396 10 -6 6 6 1104 1118 9 0 -12 7 503 498 12  
 -6 -16 6 72 69 -72 -5 -7 6 25 61 -25 13 -1 6 230 164 -40 -4 6 6 51 24 -51 2 -12 7 731 754 13  
 -4 -16 6 134 135 -53 -3 -7 6 379 377 8 -14 0 6 156 167 -44 -2 6 6 748 764 15 4 -12 7 877 879 15  
 -7 -15 6 297 240 25 -1 -7 6 646 651 14 -12 0 6 140 158 -19 0 6 6 207 185 7 6 -12 7 1065 1051 16  
 -3 -15 6 172 200 -35 1 -7 6 473 469 6 -10 0 6 658 642 7 2 6 6 877 865 6 8 -12 7 122 113 -57  
 1 -15 6 341 365 25 3 -7 6 558 557 7 -8 0 6 337 336 5 4 6 6 2043 2037 19 10 -12 7 132 113 -75  
 -8 -14 6 488 519 17 5 -7 6 1239 1264 13 -6 0 6 29 27 -28 6 6 6 397 395 7 -11 -11 7 1779 1731 24  
 -6 -14 6 105 87 -104 7 -7 6 109 72 -50 -4 0 6 837 830 7 8 6 6 1072 1078 16 -9 -11 7 1305 1330 19  
 -4 -14 6 446 427 15 9 -7 6 193 133 -33 -2 0 6 1049 1042 7 10 6 6 188 183 -36 -7 -11 7 829 874 9  
 0 -14 6 746 769 14 11 -7 6 224 202 -29 0 0 6 198 221 8 -13 7 6 1905 1975 27 -5 -11 7 1327 1339 19  
 2 -14 6 339 350 20 13 -7 6 126 112 -67 2 0 6 777 781 6 -9 7 6 1405 1442 21 -3 -11 7 76 60 -75  
 4 -14 6 526 539 16 -12 -6 6 60 91 -59 4 0 6 578 574 6 -7 7 6 1719 1728 17 -1 -11 7 2750 2774 26  
 -11 -13 6 152 38 -64 -10 -6 6 56 60 -56 6 0 6 303 318 5 -5 7 6 1861 1857 18 1 -11 7 360 382 14  
 -9 -13 6 468 361 23 -8 -6 6 93 104 -20 8 0 6 88 91 -29 -3 7 6 2565 2548 24 3 -11 7 1095 1119 12  
 -7 -13 6 669 653 16 -6 -6 6 233 242 6 10 0 6 42 28 -41 -1 7 6 337 334 31 5 -11 7 1248 1249 13  
 -5 -13 6 215 234 -27 -4 -6 6 188 183 12 12 0 6 757 746 10 1 7 6 4052 3992 38 7 -11 7 385 398 16  
 -3 -13 6 1502 1502 20 -2 -6 6 103 87 -12 -13 1 6 216 231 -26 3 7 6 1763 1742 16 9 -11 7 1257 1190  
 19  
 -1 -13 6 56 62 -55 0 -6 6 848 842 12 -11 1 6 69 15 -47 5 7 6 1362 1385 13 11 -11 7 532 526 17  
 1 -13 6 1135 1151 18 2 -6 6 248 255 6 -9 1 6 305 312 8 7 7 6 989 988 15 -12 -10 7 561 575 33  
 3 -13 6 0 70 -1 4 -6 6 752 758 10 -7 1 6 267 271 7 9 7 6 284 287 22 -10 -10 7 170 181 -32  
 5 -13 6 114 123 -72 6 -6 6 447 449 9 -5 1 6 679 669 6 -12 8 6 382 376 20 -8 -10 7 756 792 8  
 9 -13 6 208 177 -42 8 -6 6 366 374 9 -3 1 6 476 468 3 -8 8 6 152 183 -30 -6 -10 7 92 98 -76  
 -12 -12 6 347 377 22 10 -6 6 484 462 9 -1 1 6 200 191 3 -6 8 6 2519 2507 24 -4 -10 7 410 429 13  
 -10 -12 6 149 58 -49 12 -6 6 57 74 -56 1 1 6 846 817 8 -4 8 6 117 62 -32 -2 -10 7 572 557 10  
 -8 -12 6 1021 1016 16 14 -6 6 0 13 -1 3 1 6 780 787 5 -2 8 6 1198 1192 12 0 -10 7 561 579 7  
 -6 -12 6 278 272 22 -13 -5 6 139 145 -33 5 1 6 68 18 -26 0 8 6 892 866 9 2 -10 7 1168 1190 13  
 -4 -12 6 308 295 18 -11 -5 6 109 139 -23 7 1 6 326 360 7 2 8 6 265 266 25 4 -10 7 452 465 14

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 6

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  
 6 -10 7 520 515 13 7 -3 7 630 629 11 2 4 7 310 289 11 -3 -13 8 414 419 14 4 -6 8 656 648 7  
 8 -10 7 0 51 -1 9 -3 7 481 495 9 4 4 7 422 398 6 1 -13 8 292 337 19 6 -6 8 2942 2975 29  
 10 -10 7 80 11 -79 11 -3 7 118 95 -34 6 4 7 619 640 7 3 -13 8 245 239 -26 8 -6 8 1605 1628 31  
 -11 -9 7 247 273 17 -14 -2 7 125 108 -55 8 4 7 90 44 -32 5 -13 8 86 30 -85 10 -6 8 1055 1046 11  
 -9 -9 7 191 190 12 -12 -2 7 2191 2104 21 10 4 7 182 185 -19 7 -13 8 429 431 18 12 -6 8 663 688 15

-7-9 7 272 288 7 -10-2 7 448 460 13 12 4 7 293 307 28 9-13 8 537 484 18 -13-5 8 233 269 22  
 -5-9 7 353 374 13 -8-2 7 821 807 7 -11 5 7 0 9 -1 -12-12 8 159 202 -42 -11-5 8 938 942 8  
 -3-9 7 70 6-70 -6-2 7 2450 2430 19 -9 5 7 524 542 6 -10-12 8 36 24 -36 -9-5 8 1262 1272 12  
 -1-9 7 159 183 14 -4-2 7 319 302 3 -7 5 7 38 39 -38 -8-12 8 493 504 16 -7-5 8 990 957 8  
 1-9 7 162 155 12 -2-2 7 704 782 19 -5 5 7 687 698 6 -6-12 8 91 20 -91 -5-5 8 1808 1807 14  
 3-9 7 659 678 8 2-2 7 2042 1988 19 -3 5 7 220 241 6 -4-12 8 217 248 20 -3-5 8 2204 2186 28  
 5-9 7 125 140 -23 4-2 7 144 123 10 -1 5 7 32 28 -31 -2-12 8 29 73 -29 3-5 8 653 659 13  
 7-9 7 256 244 22 6-2 7 498 507 5 1 5 7 158 153 8 0-12 8 232 243 20 5-5 8 844 866 10  
 9-9 7 127 147 -60 8-2 7 1105 1121 12 3 5 7 239 251 6 2-12 8 294 288 19 7-5 8 1106 1134 11  
 11-9 7 110 159-109 10-2 7 827 815 9 5 5 7 514 521 5 4-12 8 397 434 15 9-5 8 748 788 26  
 -12-8 7 461 463 16 12-2 7 508 519 15 7 5 7 231 214 13 6-12 8 568 565 12 11-5 8 611 589 23  
 -10-8 7 432 431 7 -13-1 7 233 255 18 9 5 7 795 785 14 8-12 8 341 303 20 13-5 8 587 574 18  
 -8-8 7 790 808 11 -11-1 7 68 53 -43 11 5 7 390 359 14 10-12 8 97 15 -97 -14-4 8 250 243 19  
 -6-8 7 749 760 6 -9-1 7 1850 1852 22 -12 6 7 188 213 -38 -11-11 8 223 195 -31 -12-4 8 439 450  
 10  
 -4-8 7 511 499 9 -7-1 7 1969 1960 15 -10 6 7 163 196 -26 -9-11 8 468 494 15 -10-4 8 344 361 8  
 -2-8 7 1392 1401 19 -5-1 7 811 846 9 -8 6 7 196 199 12 -7-11 8 245 253 11 -8-4 8 523 516 4  
 0-8 7 313 314 5 -3-1 7 1125 1038 9 -6 6 7 130 99 -14 -5-11 8 231 216 22 -6-4 8 631 619 5  
 2-8 7 462 455 8 -1-1 7 543 550 6 -4 6 7 154 175 -21 -3-11 8 271 275 16 -4-4 8 493 491 5  
 4-8 7 1093 1132 11 3-1 7 263 230 5 -2 6 7 185 187 11 -1-11 8 521 531 10 -2-4 8 711 702 9  
 6-8 7 1141 1156 17 5-1 7 2889 2881 32 0 6 7 72 28 -25 1-11 8 549 579 11 2-4 8 434 434 5  
 8-8 7 1356 1335 20 7-1 7 1553 1564 16 2 6 7 401 398 4 3-11 8 654 685 10 4-4 8 519 493 17  
 10-8 7 303 309 23 9-1 7 253 261 13 4 6 7 748 746 6 5-11 8 613 609 9 6-4 8 584 627 9  
 12-8 7 643 659 18 11-1 7 290 307 14 6 6 7 565 577 11 7-11 8 334 331 20 8-4 8 252 279 12  
 -13-7 7 137 141 -59 -14 0 7 897 887 15 8 6 7 53 40 -53 9-11 8 416 416 19 10-4 8 87 21 -86  
 -11-7 7 122 133 -46 -12 0 7 179 195 -21 10 6 7 188 182 -36 11-11 8 67 73 -67 12-4 8 359 362 15  
 -9-7 7 37 54 -37 -10 0 7 1873 1851 18 -9 7 7 494 500 14 -12-10 8 83 16 -83 -13-3 8 0 46 -1  
 -7-7 7 272 287 7 -8 0 7 768 772 6 -7 7 7 71 10 -54 -10-10 8 57 30 -57 -11-3 8 413 422 9  
 -5-7 7 201 141 17 -6 0 7 608 620 5 -5 7 7 211 224 13 -8-10 8 361 397 8 -9-3 8 147 154 13  
 -3-7 7 360 385 9 -4 0 7 2432 2436 25 -3 7 7 251 260 10 -6-10 8 395 404 15 -7-3 8 175 167 6  
 -1-7 7 404 385 8 -2 0 7 620 562 5 -1 7 7 169 171 14 -4-10 8 187 213 -20 -5-3 8 311 315 4  
 1-7 7 403 410 6 2 0 7 201 192 3 1 7 7 621 619 6 -2-10 8 136 161 -23 -3-3 8 282 263 4  
 3-7 7 538 533 6 4 0 7 2540 2526 24 3 7 7 1190 1172 11 0-10 8 606 594 7 -1-3 8 355 339 3  
 5-7 7 820 842 13 6 0 7 653 648 7 5 7 7 105 78 -19 2-10 8 91 120 -30 1-3 8 820 788 6  
 7-7 7 121 121 -33 8 0 7 189 207 -22 7 7 7 152 168 -32 4-10 8 139 135 -20 3-3 8 833 842 8  
 9-7 7 130 138 -50 10 0 7 1283 1273 13 9 7 7 66 69 -66 6-10 8 419 434 15 5-3 8 157 156 10  
 11-7 7 140 147 -55 12 0 7 451 451 11 -12 8 7 181 92 -43 8-10 8 63 113 -63 7-3 8 243 245 14  
 13-7 7 93 66 -93 -13 1 7 291 321 21 -8 8 7 141 185 -42 10-10 8 322 319 25 9-3 8 328 329 10  
 -12-6 7 133 137 -42 -11 1 7 62 12 -62 -6 8 7 351 341 24 -11-9 8 128 161 -31 11-3 8 24 67 -23  
 -10-6 7 89 44 -48 -9 1 7 242 232 10 -4 8 7 752 749 10 -9-9 8 616 627 6 -14-2 8 0 53 -1  
 -8-6 7 237 243 7 -7 1 7 296 304 5 -2 8 7 280 284 9 -7-9 8 491 530 5 -12-2 8 812 793 10  
 -6-6 7 297 308 7 -5 1 7 659 667 5 0 8 7 133 156 -17 -5-9 8 813 829 13 -10-2 8 494 484 11  
 -4-6 7 287 312 10 -3 1 7 1020 971 7 2 8 7 226 244 14 -3-9 8 446 463 10 -8-2 8 537 525 5  
 2-6 7 325 320 7 -1 1 7 77 101 -9 4 8 7 430 440 12 -1-9 8 504 514 10 -6-2 8 911 904 7  
 4-6 7 784 799 7 1 1 7 775 744 9 6 8 7 238 255 18 1-9 8 57 38 -43 -4-2 8 181 181 5  
 6-6 7 300 309 8 3 1 7 481 464 5 8 8 7 266 251 22 3-9 8 615 633 10 -2-2 8 628 625 6  
 8-6 7 326 332 12 5 1 7 503 511 6 -9 9 7 540 567 16 5-9 8 54 73 -53 0-2 8 217 224 7  
 10-6 7 441 423 15 7 1 7 201 215 11 -7 9 7 974 1017 16 7-9 8 171 183 -28 2-2 8 892 883 9  
 12-6 7 327 293 21 9 1 7 639 643 9 -5 9 7 1062 1036 17 9-9 8 52 74 -51 4-2 8 498 511 7  
 -13-5 7 264 281 19 11 1 7 432 422 11 -3 9 7 250 266 14 11-9 8 0 18 -1 6-2 8 326 339 6  
 -11-5 7 410 430 7 -12 2 7 25 59 -25 -1 9 7 1225 1211 26 -12-8 8 303 277 23 8-2 8 813 800 7  
 -9-5 7 766 755 10 -10 2 7 387 386 7 1 9 7 340 330 9 -10-8 8 643 636 14 10-2 8 298 321 12  
 -7-5 7 403 402 5 -8 2 7 121 127 -14 3 9 7 600 624 10 -8-8 8 459 458 8 12-2 8 71 88 -71  
 -5-5 7 1269 1271 10 -6 2 7 271 282 5 7 9 7 397 414 15 -6-8 8 779 817 6 -13-1 8 0 9 -1

-1 -5 7 903 870 11	-4 2 7 167 174 8	-8 10 7 611 622 15	-4 -8 8 272 296 12	-11 -1 8 271 287 10
3 -5 7 56 55 -23	-2 2 7 539 547 4	-6 10 7 92 82 -92	-2 -8 8 689 706 10	-9 -1 8 43 21 -43
5 -5 7 371 378 16	0 2 7 725 715 6	-4 10 7 592 574 14	0 -8 8 1850 1860 20	-7 -1 8 654 661 6
7 -5 7 190 194 13	2 2 7 68 22 -11	-2 10 7 381 383 15	2 -8 8 635 649 7	-5 -1 8 84 71 -12
9 -5 7 272 269 13	4 2 7 845 845 9	0 10 7 531 499 13	4 -8 8 685 712 22	-3 -1 8 617 600 4
11 -5 7 530 500 13	6 2 7 662 669 7	-5 11 7 346 354 19	6 -8 8 447 452 13	-1 -1 8 145 143 4
13 -5 7 220 206 -36	8 2 7 281 293 10	-3 11 7 168 161 -35	8 -8 8 83 102 -82	1 -1 8 761 766 10
-14 -4 7 41 30 -41	10 2 7 247 248 16	-1 11 7 186 175 -34	10 -8 8 0 48 -1	3 -1 8 52 38 -22
-12 -4 7 342 335 13	12 2 7 300 297 28	1 11 7 122 122 -58	12 -8 8 144 185 -64	5 -1 8 486 495 5
-10 -4 7 355 366 8	-13 3 7 71 2 -70	-2 12 7 530 541 17	-13 -7 8 609 619 17	7 -1 8 577 578 6
-8 -4 7 583 586 5	-11 3 7 209 209 16	0 12 7 670 687 15	-11 -7 8 586 589 13	9 -1 8 308 286 11
-6 -4 7 535 539 5	-9 3 7 230 222 11	-5 -17 8 684 667 13	-9 -7 8 0 14 -1	11 -1 8 85 34 -58
-4 -4 7 597 601 6	-7 3 7 816 813 7	-8 -16 8 0 12 -1	-7 -7 8 242 240 8	-14 0 8 423 386 21
2 -4 7 85 100 -18	-5 3 7 1011 1026 8	-6 -16 8 57 90 -56	-5 -7 8 103 118 -14	-12 0 8 165 167 -23
4 -4 7 717 708 12	-3 3 7 694 693 6	-4 -16 8 76 113 -76	-3 -7 8 1648 1641 22	-10 0 8 140 113 -16
6 -4 7 154 125 -16	-1 3 7 732 743 9	-9 -15 8 378 380 27	-1 -7 8 2479 2455 32	-8 0 8 567 582 5
8 -4 7 300 307 10	1 3 7 126 125 8	-7 -15 8 729 751 15	1 -7 8 350 372 8	-6 0 8 619 613 7
10 -4 7 170 188 -20	3 3 7 743 730 6	-5 -15 8 658 668 14	3 -7 8 576 554 7	-4 0 8 566 564 5
12 -4 7 109 27 -43	5 3 7 1160 1190 11	-3 -15 8 680 714 12	5 -7 8 1045 1101 16	-2 0 8 1092 1061 8
14 -4 7 82 104 -81	7 3 7 949 945 10	-10 -14 8 423 439 22	7 -7 8 140 161 -42	0 0 8 627 603 5
-13 -3 7 245 260 18	9 3 7 987 971 16	-8 -14 8 273 286 28	9 -7 8 988 986 16	2 0 8 367 364 4
-11 -3 7 462 455 15	11 3 7 452 455 11	-6 -14 8 371 378 18	11 -7 8 427 423 17	4 0 8 307 308 7
-9 -3 7 351 366 7	-12 4 7 467 468 16	-4 -14 8 308 327 18	13 -7 8 564 593 19	6 0 8 546 539 15
-7 -3 7 76 63 -14	-10 4 7 200 186 15	2 -14 8 114 100 -62	-12 -6 8 1111 1119 17	8 0 8 668 678 10
-5 -3 7 136 141 8	-8 4 7 263 272 8	4 -14 8 351 348 21	-10 -6 8 1375 1375 13	10 0 8 330 310 18
-3 -3 7 623 602 8	-6 4 7 496 499 5	-11 -13 8 256 276 -29	-8 -6 8 2689 2635 26	12 0 8 227 247 19
-1 -3 7 379 377 5	-4 4 7 188 182 6	-9 -13 8 442 447 18	-6 -6 8 385 359 5	-13 1 8 51 111 -51
3 -3 7 575 584 6	-2 4 7 1073 1088 8	-7 -13 8 398 406 17	-4 -6 8 2769 2805 25	-11 1 8 219 241 14
5 -3 7 164 100 -31	0 4 7 103 103 -11	-5 -13 8 397 417 16	2 -6 8 2740 2744 38	-9 1 8 86 69 -19

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 7

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

-7 1 8 469 471 5	0 8 8 120 113 -24	9 -9 9 135 122 -42	-6 -2 9 524 525 5	-11 5 9 889 905 14
-5 1 8 1427 1417 11	2 8 8 122 60 -22	11 -9 9 319 332 24	-4 -2 9 106 80 8	-9 5 9 161 170 16
-3 1 8 257 245 4	4 8 8 95 94 -29	-12 -8 9 237 266 -30	-2 -2 9 1263 1248 10	-7 5 9 1976 1991 16
-1 1 8 53 21 -13	6 8 8 210 217 -22	-10 -8 9 468 473 10	0 -2 9 345 343 7	-5 5 9 137 130 -18
1 1 8 201 185 5	8 8 8 74 115 -74	-8 -8 9 626 646 6	2 -2 9 731 716 7	-3 5 9 1231 1230 10
3 1 8 365 361 4	-9 9 8 248 298 25	-6 -8 9 119 111 -32	4 -2 9 1500 1494 10	-1 5 9 349 351 5
5 1 8 679 689 7	-7 9 8 378 386 17	-4 -8 9 277 304 11	6 -2 9 764 777 9	1 5 9 65 26 -21
7 1 8 595 598 7	-5 9 8 419 434 15	-2 -8 9 216 208 8	8 -2 9 1095 1115 9	3 5 9 1193 1184 9
9 1 8 508 505 10	-3 9 8 163 165 -21	0 -8 9 928 913 9	10 -2 9 178 175 -33	5 5 9 869 871 7
11 1 8 259 244 16	-1 9 8 424 418 10	2 -8 9 89 69 -32	12 -2 9 338 356 17	7 5 9 1219 1205 12
-12 2 8 402 405 17	1 9 8 253 244 12	4 -8 9 544 544 11	-13 -1 9 305 317 14	9 5 9 117 132 -36
-10 2 8 56 26 -55	7 9 8 356 341 17	6 -8 9 85 70 -84	-11 -1 9 87 63 -33	-10 6 9 1116 1153 12
-8 2 8 492 496 10	-6 10 8 404 421 18	8 -8 9 363 354 17	-9 -1 9 266 270 7	-8 6 9 197 164 -21
-6 2 8 165 89 -38	-4 10 8 186 214 -38	10 -8 9 0 35 -1	-7 -1 9 753 758 6	-6 6 9 591 592 8
-4 2 8 726 730 5	-2 10 8 466 467 15	12 -8 9 0 7 -1	-5 -1 9 482 486 4	-4 6 9 960 958 10
-2 2 8 1850 1854 14	0 10 8 132 120 -37	-13 -7 9 747 732 15	-3 -1 9 1186 1180 12	-2 6 9 243 246 24
0 2 8 1060 1037 8	-5 11 8 604 587 16	-11 -7 9 0 27 -1	-1 -1 9 92 78 6	0 6 9 1116 1093 9
2 2 8 1075 1048 8	-3 11 8 226 210 -34	-9 -7 9 146 160 -20	1 -1 9 208 196 5	2 6 9 163 164 9
4 2 8 1248 1246 22	-1 11 8 151 72 -41	-7 -7 9 179 175 9	3 -1 9 419 417 4	4 6 9 1372 1366 11

6 2 8 894 902 9 -2 12 8 837 819 17 -5 -7 9 568 575 9 5 -1 9 286 288 5 6 6 9 526 530 8  
8 2 8 1231 1254 12 0 12 8 313 327 27 -3 -7 9 361 362 6 7 -1 9 912 911 13 8 6 9 270 262 21  
10 2 8 67 35 -67 -5 -17 9 303 328 22 -1 -7 9 810 808 8 9 -1 9 686 693 12 -9 7 9 118 100 -49  
12 2 8 615 612 10 -8 -16 9 369 349 27 1 -7 9 727 717 9 11 -1 9 444 428 14 -7 7 9 492 470 15  
-13 3 8 1617 1565 23 -6 -16 9 109 136 -109 3 -7 9 88 39 -33 -14 0 9 272 260 27 -5 7 9 437 435 21  
-11 3 8 1160 1203 17 -4 -16 9 511 526 17 5 -7 9 143 136 -32 -12 0 9 241 266 -25 -3 7 9 86 41 -41  
-9 3 8 1911 1968 19 -9 -15 9 539 503 21 7 -7 9 307 357 15 -10 0 9 96 48 -32 -1 7 9 323 309 9  
-7 3 8 400 416 5 -7 -15 9 1696 1674 24 9 -7 9 768 781 15 -8 0 9 705 705 6 1 7 9 166 161 11  
-5 3 8 3909 3933 30 -5 -15 9 372 405 16 11 -7 9 0 161 -1 -6 0 9 89 70 -13 3 7 9 22 66 -22  
-3 3 8 2605 2606 20 -3 -15 9 375 386 16 13 -7 9 200 233 -44 -4 0 9 976 989 6 5 7 9 299 291 16  
-1 3 8 2578 2613 20 -10 -14 9 374 392 24 -12 -6 9 1168 1167 18 -2 0 9 950 936 7 7 7 9 296 303 18  
1 3 8 3160 3175 24 -8 -14 9 662 681 14 -10 -6 9 560 573 9 0 0 9 268 266 3 9 7 9 329 328 24  
3 3 8 1124 1097 9 -6 -14 9 323 336 18 -8 -6 9 2569 2546 30 2 0 9 189 190 4 -10 8 9 134 157 -52  
5 3 8 3966 3920 38 -4 -14 9 1065 1077 16 -6 -6 9 562 592 6 4 0 9 686 680 7 -8 8 9 195 223 -30  
7 3 8 552 552 17 -2 -14 9 293 301 17 -4 -6 9 1694 1716 15 6 0 9 232 220 17 -6 8 9 724 725 14  
9 3 8 822 830 18 8 -14 9 57 93 -57 -2 -6 9 983 975 13 8 0 9 469 488 9 -4 8 9 343 354 10  
11 3 8 797 793 10 -11 -13 9 0 75 -1 0 -6 9 300 283 9 10 0 9 161 170 -26 -2 8 9 835 834 9  
-12 4 8 1995 2008 28 -9 -13 9 155 173 -43 2 -6 9 1766 1765 25 12 0 9 0 6 -1 0 8 9 194 203 14  
-10 4 8 542 581 8 -7 -13 9 97 155 -96 4 -6 9 807 822 8 -13 1 9 63 63 -62 2 8 9 333 336 12  
-8 4 8 937 976 8 -5 -13 9 385 406 13 6 -6 9 1830 1871 18 -11 1 9 213 223 17 4 8 9 137 133 -27  
-6 4 8 1646 1659 19 -3 -13 9 0 33 -1 8 -6 9 0 35 -1 -9 1 9 374 382 6 6 8 9 491 506 13  
-4 4 8 2416 2417 19 3 -13 9 138 154 -42 10 -6 9 94 40 -78 -7 1 9 576 584 5 8 8 9 546 547 15  
-2 4 8 4042 4147 31 5 -13 9 0 17 -1 12 -6 9 335 365 27 -5 1 9 823 813 13 -7 9 9 112 116 -58  
0 4 8 628 650 5 7 -13 9 421 425 20 -13 -5 9 89 72 -88 -3 1 9 329 334 4 -5 9 9 379 381 18  
2 4 8 2311 2279 23 9 -13 9 236 256 -30 -11 -5 9 1676 1650 16 -1 1 9 72 57 -11 -3 9 9 525 546 13  
4 4 8 1638 1676 17 -12 -12 9 88 136 -88 -9 -5 9 846 855 9 1 1 9 387 385 3 -1 9 9 107 148 -61  
6 4 8 634 641 8 -10 -12 9 345 382 23 -7 -5 9 936 936 7 3 1 9 346 341 4 7 9 9 552 530 16  
8 4 8 833 830 9 -8 -12 9 805 857 14 -5 -5 9 1161 1160 8 5 1 9 336 345 6 -6 10 9 203 238 -29  
10 4 8 141 132 -25 -6 -12 9 485 508 15 -3 -5 9 944 913 13 7 1 9 375 380 8 -4 10 9 272 313 23  
-11 5 8 138 112 -43 -4 -12 9 427 449 13 -1 -5 9 4442 4204 60 9 1 9 416 420 9 -2 10 9 603 588 15  
-9 5 8 314 332 7 -2 -12 9 265 271 17 1 -5 9 82 81 -26 11 1 9 483 484 11 0 10 9 410 404 17  
-7 5 8 61 59 -31 4 -12 9 79 78 -56 3 -5 9 1075 1072 12 -12 2 9 355 342 17 -3 11 9 372 375 20  
-5 5 8 163 167 10 6 -12 9 793 781 14 5 -5 9 1256 1278 13 -10 2 9 221 228 13 -1 11 9 233 224 -31  
-3 5 8 1157 1175 9 8 -12 9 963 971 16 7 -5 9 67 49 -49 -8 2 9 75 84 -24 -5 -17 10 107 68 -107  
-1 5 8 419 412 5 10 -12 9 458 446 18 9 -5 9 1167 1129 17 -6 2 9 345 358 5 -8 -16 10 145 216 -75  
1 5 8 490 465 5 -11 -11 9 111 142 -82 11 -5 9 922 922 15 -4 2 9 486 493 4 -6 -16 10 34 61 -34  
3 5 8 1460 1446 11 -9 -11 9 99 88 -98 13 -5 9 568 580 18 -2 2 9 685 689 5 -4 -16 10 125 121 -63  
5 5 8 409 409 7 -7 -11 9 150 169 -18 -14 -4 9 184 214 -28 0 2 9 62 34 -13 -9 -15 10 292 344 29  
7 5 8 317 327 11 -5 -11 9 203 221 -22 -12 -4 9 276 313 13 2 2 9 66 16 -18 -5 -15 10 294 347 22  
9 5 8 68 15 -67 -3 -11 9 0 62 -1 -10 -4 9 1225 1232 12 4 2 9 631 630 7 -3 -15 10 160 121 -35  
11 5 8 421 409 19 -1 -11 9 348 351 11 -8 -4 9 331 315 4 6 2 9 210 216 10 -10 -14 10 210 216 -42  
-12 6 8 122 162 -60 3 -11 9 604 615 18 -6 -4 9 1364 1338 10 8 2 9 365 363 10 -8 -14 10 0 75 -1  
-10 6 8 335 339 12 5 -11 9 564 546 13 -4 -4 9 162 163 5 10 2 9 29 11 -29 -6 -14 10 0 53 -1  
-8 6 8 118 91 -19 7 -11 9 599 579 13 -2 -4 9 1161 1134 15 -13 3 9 91 152 -90 -4 -14 10 84 113 -83  
-6 6 8 459 470 7 9 -11 9 351 311 22 0 -4 9 931 898 13 -11 3 9 46 80 -46 -2 -14 10 653 650 13  
-4 6 8 365 381 16 -12 -10 9 0 22 -1 2 -4 9 538 532 5 -9 3 9 275 268 15 8 -14 10 83 116 -82  
-2 6 8 776 755 8 -10 -10 9 71 50 -71 4 -4 9 1781 1790 15 -7 3 9 432 445 5 -11 -13 10 382 403 26  
0 6 8 99 94 -15 -8 -10 9 0 7 -1 6 -4 9 263 263 13 -5 3 9 824 817 7 -9 -13 10 0 62 -1  
2 6 8 141 131 10 -6 -10 9 39 76 -39 8 -4 9 528 537 21 -3 3 9 1121 1119 9 -7 -13 10 417 459 17  
4 6 8 315 322 6 -4 -10 9 170 229 -24 10 -4 9 13 72 -13 -1 3 9 244 245 5 -5 -13 10 806 839 13  
6 6 8 60 54 -60 -2 -10 9 328 338 11 12 -4 9 84 24 -84 1 3 9 109 101 9 -3 -13 10 203 209 21  
8 6 8 173 210 -27 0 -10 9 263 245 8 -13 -3 9 172 209 -29 3 3 9 734 726 6 5 -13 10 191 197 -30  
10 6 8 229 256 -30 2 -10 9 445 473 10 -11 -3 9 202 208 17 5 3 9 278 284 9 7 -13 10 201 155 -35  
-9 7 8 527 511 13 4 -10 9 198 205 17 -9 -3 9 188 180 11 7 3 9 403 405 8 9 -13 10 137 116 -67

-7 7 8 87 52 -41 6-10 9 654 643 13 -7 -3 9 137 129 8 9 3 9 532 522 9 -12-12 10 393 434 25  
-5 7 8 454 454 7 8-10 9 189 182 -32 -5 -3 9 439 436 4 11 3 9 365 369 24 -10-12 10 294 304 27  
-3 7 8 75 12 -30 10-10 9 126 39 -74 -3 -3 9 431 404 6 -12 4 9 1054 1069 16 -8-12 10 316 364 22  
-1 7 8 291 282 9 -13 -9 9 0 28 -1 -1 -3 9 199 178 6 -10 4 9 194 196 19 -6-12 10 623 654 13  
1 7 8 520 519 5 -11 -9 9 272 284 16 1 -3 9 300 285 12 -8 4 9 509 528 6 -4-12 10 326 327 15  
3 7 8 384 389 6 -9 -9 9 647 653 10 3 -3 9 595 602 5 -6 4 9 320 326 6 -2-12 10 549 535 11  
5 7 8 165 161 14 -7 -9 9 862 893 7 5 -3 9 354 348 5 -4 4 9 300 261 18 4-12 10 74 59 -74  
7 7 8 481 492 13 -5 -9 9 1098 1114 16 7 -3 9 356 387 8 -2 4 9 933 925 11 6-12 10 322 346 19  
9 7 8 237 255 -25 -3 -9 9 258 266 13 9 -3 9 374 384 10 0 4 9 1330 1310 10 8-12 10 380 380 20  
-10 8 8 0 7 -1 -1 -9 9 1273 1262 12 11 -3 9 430 435 12 2 4 9 1081 1072 10 10-12 10 345 320 25  
-8 8 8 110 80 -57 1 -9 9 788 818 12 -14 -2 9 9 25 -9 4 4 9 429 434 5 -11-11 10 144 193 -46  
-6 8 8 126 121 -39 3 -9 9 384 391 11 -12 -2 9 423 420 16 6 4 9 302 275 22 -9-11 10 1050 1054 16  
-4 8 8 615 608 8 5 -9 9 373 380 13 -10 -2 9 363 372 7 8 4 9 237 249 15 -7-11 10 182 201 16  
-2 8 8 260 282 10 7 -9 9 372 393 16 -8 -2 9 543 531 5 10 4 9 552 567 13 -5-11 10 746 760 12

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 8

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  
-3-11 10 796 797 12 -10 -4 10 219 227 11 -13 3 10 55 108 -54 8-14 11 42 79 -42 2-6 11 1369 1340 13  
-1-11 10 338 346 11 -8 -4 10 153 155 8 -11 3 10 145 149 -33 -11-13 11 205 248 -42 4-6 11 728 729 10  
1-11 10 140 103 -27 -6 -4 10 461 457 4 -9 3 10 424 423 7 -9-13 11 0 38 -1 6-6 11 1106 1111 11  
3-11 10 553 590 12 -4 -4 10 327 320 3 -7 3 10 578 581 6 -7-13 11 796 817 14 8-6 11 1015 1046 21  
5-11 10 740 748 13 -2 -4 10 307 309 7 -5 3 10 269 276 7 -5-13 11 962 959 15 10-6 11 464 472 18  
7-11 10 635 618 14 0 -4 10 302 286 10 -3 3 10 213 216 5 -3-13 11 445 444 13 12-6 11 546 516 16  
9-11 10 204 139 -35 2 -4 10 419 414 4 -1 3 10 272 295 5 5-13 11 129 145 -55 -13 -5 11 86 3 -85  
-12-10 10 208 190 21 4 -4 10 396 403 4 1 3 10 681 671 6 7-13 11 165 166 -36 -11 -5 11 117 56 -34  
-10-10 10 522 532 10 6 -4 10 692 685 11 3 3 10 369 383 4 9-13 11 260 266 -34 -9 -5 11 493 495 5  
-8-10 10 1280 1338 12 8 -4 10 238 250 12 5 3 10 105 81 -22 -12-12 11 197 201 -44 -7 -5 11 64 42 -17  
-6-10 10 1068 1098 10 10 -4 10 343 351 11 7 3 10 181 188 13 -10-12 11 220 262 -29 -5 -5 11 568 570 4  
-4-10 10 1265 1281 18 -13 -3 10 49 59 -48 9 3 10 178 186 -19 -8-12 11 481 541 16 -3 -5 11 499 482 5  
-2-10 10 1193 1167 16 -11 -3 10 320 319 10 11 3 10 242 249 21 -6-12 11 532 558 12 -1 -5 11 76 45 -8  
0-10 10 2500 2425 24 -9 -3 10 546 534 5 -12 4 10 519 537 15 -4-12 11 25 28 -24 1-5 11 362 353 4  
2-10 10 1863 1879 26 -7 -3 10 427 417 4 -10 4 10 249 252 16 -2-12 11 265 241 20 3-5 11 451 453 12  
4-10 10 1261 1315 18 -5 -3 10 869 866 7 -8 4 10 74 27 -42 2-12 11 113 53 -53 5-5 11 102 85 -22  
6-10 10 397 399 14 -3 -3 10 492 483 7 -6 4 10 295 293 7 4-12 11 234 257 23 7-5 11 178 175 15  
8-10 10 840 827 15 -1 -3 10 545 516 8 -4 4 10 189 184 8 6-12 11 203 209 -33 9-5 11 312 320 12  
10-10 10 1636 1575 24 1 -3 10 419 401 5 -2 4 10 247 243 6 8-12 11 467 470 19 11-5 11 284 287 17  
-13 -9 10 141 159 -63 3 -3 10 614 617 4 0 4 10 164 149 9 -11-11 11 0 76 -1 -14 -4 11 348 353 17  
-11 -9 10 414 440 10 5 -3 10 381 389 5 2 4 10 715 714 6 -9-11 11 949 979 15 -12 -4 11 140 91 -43  
-9 -9 10 1002 990 8 7 -3 10 413 432 8 4 4 10 200 206 8 -7-11 11 651 657 8 -10 -4 11 151 132 -18  
-7 -9 10 1441 1463 11 9 -3 10 373 365 10 6 4 10 68 83 -45 -5-11 11 158 185 -25 -8 -4 11 343 341 4  
-5 -9 10 1450 1456 20 11 -3 10 131 160 -44 8 4 10 339 342 18 -3-11 11 81 21 -65 -6 -4 11 687 681 5

-3 -9 10 1140 1136 16 -14 -2 10 198 203 -25 10 4 10 418 415 25 -1 -11 11 325 329 11 -4 -4 11 684 662  
 5  
 -1 -9 10 1616 1582 15 -12 -2 10 318 308 20 -11 5 10 216 217 -25 1 -11 11 786 781 12 -2 -4 11 464 468  
 4  
 1 -9 10 1750 1758 18 -10 -2 10 803 810 9 -9 5 10 145 53 -38 3 -11 11 808 814 13 0 -4 11 790 769 7  
 3 -9 10 703 724 12 -8 -2 10 827 836 7 -7 5 10 609 605 7 5 -11 11 675 704 13 2 -4 11 72 8 -13  
 5 -9 10 673 698 12 -6 -2 10 1092 1088 9 -5 5 10 379 378 7 7 -11 11 211 198 -25 4 -4 11 144 139 8  
 7 -9 10 1085 1106 17 -4 -2 10 66 44 -13 -3 5 10 215 221 8 9 -11 11 320 314 22 6 -4 11 597 619 7  
 9 -9 10 874 862 15 -2 -2 10 421 415 4 -1 5 10 45 44 -45 -12 -10 11 576 557 11 8 -4 11 296 287 11  
 11 -9 10 830 859 15 0 -2 10 870 862 8 1 5 10 222 225 11 -10 -10 11 833 838 9 10 -4 11 78 68 -78  
 -12 -8 10 267 325 24 2 -2 10 1600 1581 11 3 5 10 316 324 6 -8 -10 11 1486 1524 14 -13 -3 11 81 48 -  
 80  
 -10 -8 10 561 562 8 4 -2 10 333 344 4 5 5 10 201 211 9 -6 -10 11 49 87 -49 -11 -3 11 338 350 9  
 -8 -8 10 282 301 7 6 -2 10 1103 1124 10 7 5 10 918 902 10 -4 -10 11 1489 1482 20 -9 -3 11 831 816  
 7  
 -6 -8 10 464 474 6 8 -2 10 605 611 7 9 5 10 454 464 11 -2 -10 11 1147 1128 11 -7 -3 11 568 561 4  
 -4 -8 10 57 13 -34 10 -2 10 488 454 14 -10 6 10 161 149 -25 0 -10 11 1706 1648 23 -5 -3 11 993 976  
 6  
 -2 -8 10 130 99 12 -13 -1 10 329 249 34 -8 6 10 262 283 13 2 -10 11 75 98 -75 -3 -3 11 775 768 5  
 0 -8 10 461 461 6 -11 -1 10 1853 1843 18 -6 6 10 157 175 -18 4 -10 11 170 194 -27 -1 -3 11 369 372  
 4  
 2 -8 10 473 476 10 -9 -1 10 1442 1436 11 -4 6 10 611 622 7 6 -10 11 1158 1190 18 1 -3 11 95 110 -  
 11  
 4 -8 10 424 433 10 -7 -1 10 928 933 7 -2 6 10 373 392 7 8 -10 11 415 402 18 3 -3 11 380 377 4  
 6 -8 10 92 47 -48 -5 -1 10 1457 1474 11 0 6 10 197 206 8 10 -10 11 1068 1030 18 5 -3 11 593 602 6  
 8 -8 10 81 34 -81 -3 -1 10 588 603 5 2 6 10 116 129 -14 -11 -9 11 1710 1677 17 7 -3 11 621 636 8  
 10 -8 10 277 280 26 -1 -1 10 5798 5899 68 4 6 10 406 414 6 -9 -9 11 26 83 -25 9 -3 11 175 144 -20  
 12 -8 10 144 116 -71 1 -1 10 1712 1728 13 6 6 10 166 158 -19 -7 -9 11 2525 2539 23 11 -3 11 457 446  
 16  
 -13 -7 10 293 325 26 3 -1 10 1690 1672 13 8 6 10 237 228 24 -5 -9 11 827 840 8 -14 -2 11 166 164 -  
 46  
 -11 -7 10 0 69 -1 5 -1 10 2045 2035 16 -9 7 10 294 274 26 -3 -9 11 677 663 7 -12 -2 11 494 455 15  
 -9 -7 10 415 427 7 7 -1 10 1084 1110 11 -7 7 10 93 29 -93 -1 -9 11 1640 1592 16 -10 -2 11 173 182  
 13  
 -7 -7 10 53 6 -52 9 -1 10 1659 1666 57 -5 7 10 575 567 14 1 -9 11 1234 1221 12 -8 -2 11 79 78 -19  
 -5 -7 10 691 685 8 11 -1 10 130 100 -41 -3 7 10 81 88 -60 3 -9 11 2531 2484 36 -6 -2 11 35 40 -35  
 -3 -7 10 807 796 17 -14 0 10 499 512 18 -1 7 10 513 508 16 5 -9 11 481 504 12 -4 -2 11 485 484 4  
 -1 -7 10 501 504 6 -12 0 10 1182 1187 18 1 7 10 67 62 -33 7 -9 11 1078 1141 17 -2 -2 11 57 47 -11  
 1 -7 10 355 345 6 -10 0 10 1661 1650 16 3 7 10 202 204 11 9 -9 11 618 619 14 0 -2 11 1031 1027  
 10  
 3 -7 10 566 555 10 -8 0 10 2891 2865 22 5 7 10 1069 1057 16 11 -9 11 124 37 -86 2 -2 11 63 82 -15  
 5 -7 10 93 27 -38 -6 0 10 617 593 8 7 7 10 532 535 14 -12 -8 11 297 346 21 4 -2 11 720 712 5  
 7 -7 10 198 192 -28 -4 0 10 3374 3379 23 -8 8 10 738 720 14 -10 -8 11 133 137 -19 6 -2 11 154 143  
 12  
 9 -7 10 502 515 15 -2 0 10 4332 4450 33 -6 8 10 413 416 17 -8 -8 11 69 36 -69 8 -2 11 408 415 9  
 11 -7 10 39 54 -39 0 0 10 3493 3486 27 -4 8 10 251 248 24 -6 -8 11 820 837 8 10 -2 11 174 182 -28  
 -12 -6 10 231 285 22 2 0 10 2280 2291 15 -2 8 10 1622 1591 16 -4 -8 11 815 800 6 -13 -1 11 336 312  
 23  
 -10 -6 10 646 648 10 6 0 10 2628 2617 26 0 8 10 317 282 -44 -2 -8 11 70 11 -69 -11 -1 11 574 578 8  
 -8 -6 10 1149 1136 11 8 0 10 1224 1236 14 4 8 10 786 812 12 0 -8 11 68 14 -30 -9 -1 11 72 45 -22  
 -6 -6 10 257 271 7 10 0 10 873 876 16 6 8 10 926 931 14 2 -8 11 141 157 -21 -7 -1 11 414 412 5  
 -4 -6 10 693 689 6 -13 1 10 121 149 -52 -7 9 10 128 176 -49 4 -8 11 42 41 -41 -5 -1 11 1035 1038 8  
 -2 -6 10 525 519 6 -11 1 10 223 243 -24 -5 9 10 2282 2264 33 6 -8 11 196 196 -23 -3 -1 11 419 420  
 3

0-6 10 427 418 5 -9 1 10 422 435 5 -3 9 10 1364 1345 21 8-8 11 624 631 13 -1-1 11 321 325 5  
2-6 10 1118 1104 11 -7 1 10 590 597 5 -1 9 10 1159 1142 18 10-8 11 374 417 19 1-1 11 1388 1375  
9  
4-6 10 161 146 -20 -5 1 10 455 448 5 7 9 10 149 132 -43 12-8 11 151 62 -62 3-1 11 476 472 4  
6-6 10 625 639 8 -3 1 10 24 19 -24 -6 10 10 352 348 25 -13-7 11 71 167 -71 5-1 11 91 46 -16  
8-6 10 379 398 26 -1 1 10 528 512 4 -4 10 10 0 55 -1 -11-7 11 17 59 -16 7-1 11 406 391 11  
10-6 10 90 54 -68 1 1 10 660 665 5 -2 10 10 887 829 15 -9-7 11 340 337 8 9-1 11 548 581 10  
12-6 10 149 125 -62 3 1 10 166 160 13 0 10 10 1015 972 16 -7-7 11 222 234 8 11-1 11 284 299  
25  
-13-5 10 210 215 -24 5 1 10 269 262 8 -3 11 10 849 810 16 -5-7 11 640 649 8 -12 0 11 1190 1175  
18  
-11-5 10 93 81 -26 7 1 10 117 96 -23 -1 11 10 636 576 16 -3-7 11 618 631 7 -10 0 11 472 471 6  
-9-5 10 62 65 -38 9 1 10 154 140 -20 -5-17 11 271 137 -30 -1-7 11 261 228 19 -8 0 11 2313 2283  
18  
-7-5 10 382 373 5 11 1 10 184 180 -22 -8-16 11 220 254 -44 1-7 11 150 144 11 -6 0 11 879 895 7  
-5-5 10 318 314 3 -12 2 10 154 151 -39 -6-16 11 598 588 16 3-7 11 642 649 11 -4 0 11 1469 1493  
11  
-3-5 10 426 424 4 -10 2 10 147 139 -15 -4-16 11 546 536 16 5-7 11 81 26 -59 -2 0 11 613 606 5  
-1-5 10 908 872 7 -8 2 10 206 206 9 -9-15 11 44 157 -43 7-7 11 79 22 -79 0 0 11 171 177 11  
1-5 10 770 750 5 -6 2 10 330 341 5 -7-15 11 73 78 -73 9-7 11 458 508 16 2 0 11 1642 1644 11  
3-5 10 383 388 4 -4 2 10 985 992 8 -5-15 11 81 71 -80 11-7 11 169 146 -41 4 0 11 790 794 8  
5-5 10 523 537 7 -2 2 10 956 961 6 -3-15 11 128 81 -46 -12-6 11 10 130 -9 6 0 11 1796 1775 18  
7-5 10 59 27 -59 0 2 10 446 437 4 -10-14 11 0 95 -1 -10-6 11 559 549 10 8 0 11 183 186 -22  
9-5 10 102 94 -37 2 2 10 389 392 5 -8-14 11 0 120 -1 -8-6 11 1096 1084 9 10 0 11 117 95 -34  
11-5 10 170 194 -26 4 2 10 545 536 7 -6-14 11 231 280 24 -6-6 11 232 222 6 -13 1 11 819 806 14  
13-5 10 105 58-104 6 2 10 592 594 7 -4-14 11 151 187 -36 -4-6 11 409 403 4 -11 1 11 411 434 13  
-14-4 10 388 403 23 8 2 10 64 70 -64 -2-14 11 307 330 15 -2-6 11 721 703 7 -9 1 11 810 821 7  
-12-4 10 93 76 -44 10 2 10 211 233 -26 6-14 11 0 97 -1 0-6 11 729 716 8 -7 1 11 434 424 6

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 9

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  
-5 1 11 175 167 7 -1 11 11 256 192 -38 -3-7 12 252 268 5 -10 0 12 514 520 6 -8 8 12 459 454 21  
-3 1 11 2001 2005 13 -7-17 12 286 237 -38 -1-7 12 761 788 14 -8 0 12 810 811 7 -6 8 12 195 110 -  
38  
-1 1 11 2479 2517 16 -5-17 12 302 319 28 1-7 12 444 453 9 -6 0 12 302 313 5 -4 8 12 555 555 15  
1 1 11 1203 1210 8 -8-16 12 128 69-109 3-7 12 345 344 10 -4 0 12 433 437 4 -2 8 12 53 58 -52  
3 1 11 51 45 -50 -6-16 12 445 431 20 5-7 12 0 72 -1 -2 0 12 345 350 3 4 8 12 655 669 13  
5 1 11 230 230 9 -4-16 12 320 306 23 7-7 12 90 95 -90 0 0 12 400 393 3 6 8 12 142 169 -35  
7 1 11 598 609 10 -9-15 12 179 221 -49 9-7 12 269 340 27 2 0 12 1094 1089 7 -5 9 12 85 53 -84  
9 1 11 558 578 9 -7-15 12 717 702 16 11-7 12 242 222 -34 4 0 12 352 355 7 -3 9 12 391 418 18  
11 1 11 929 911 11 -5-15 12 754 747 14 -12-6 12 381 397 20 6 0 12 397 424 8 -1 9 12 69 32 -68  
-12 2 11 671 676 14 -3-15 12 183 235 -30 -10-6 12 73 103 -72 8 0 12 195 213 15 -2 10 12 196 224 -  
36  
-10 2 11 1218 1221 10 -10-14 12 81 41 -80 -8-6 12 149 187 -26 10 0 12 129 118 -33 -7-17 13 237 182  
-42  
-8 2 11 645 646 6 -8-14 12 71 117 -70 -6-6 12 924 913 7 -13 1 12 91 161 -90 -5-17 13 455 443 18  
-6 2 11 1369 1372 11 -6-14 12 601 610 16 -4-6 12 330 335 4 -11 1 12 117 115 -39 -8-16 13 409 386  
23  
-4 2 11 376 393 11 -4-14 12 526 512 14 -2-6 12 1792 1774 13 -9 1 12 470 472 6 -6-16 13 500 472  
20  
-2 2 11 1480 1496 11 -2-14 12 694 692 13 0-6 12 198 205 11 -7 1 12 86 35 -18 -4-16 13 211 230 -

30  
0 2 11 1217 1216 8 6-14 12 291 308 24 2-6 12 94 87 -20 -5 1 12 340 344 6 -9-15 13 473 490 18  
2 2 11 241 265 6 -11-13 12 363 343 27 4-6 12 72 30 -29 -3 1 12 568 575 6 -7-15 13 319 321 30  
4 2 11 1803 1791 17 -9-13 12 377 432 18 6-6 12 660 695 10 -1 1 12 608 602 4 -5-15 13 601 601  
16  
6 2 11 537 535 7 -7-13 12 685 706 14 8-6 12 84 28 -51 1 1 12 89 73 -10 -3-15 13 729 710 13  
8 2 11 387 394 10 -5-13 12 1387 1392 19 10-6 12 561 556 17 3 1 12 447 458 4 -10-14 13 734 757  
16  
10 2 11 84 120 -83 -3-13 12 1141 1116 16 12-6 12 161 81 -66 5 1 12 81 18 -44 -8-14 13 602 610  
17  
-11 3 11 72 37 -71 3-13 12 980 973 15 -13 -5 12 291 301 19 7 1 12 291 289 11 -6-14 13 1162 1147  
17  
-9 3 11 341 334 8 5-13 12 698 681 14 -11 -5 12 614 612 14 9 1 12 365 378 11 -4-14 13 499 514 13  
-7 3 11 717 727 6 7-13 12 587 574 16 -9 -5 12 182 157 -20 -12 2 12 36 32 -35 -2-14 13 421 418 14  
-5 3 11 168 150 -19 -12-12 12 153 148 -60 -7 -5 12 1910 1902 13 -10 2 12 355 363 11 6-14 13 121 107  
-75  
-3 3 11 359 362 7 -10-12 12 159 182 -52 -5 -5 12 84 30 -34 -8 2 12 90 75 -20 -11-13 13 1017 1013  
17  
-1 3 11 490 502 5 -8-12 12 339 395 20 -3 -5 12 640 633 5 -6 2 12 225 237 8 -9-13 13 725 745 16  
1 3 11 64 33 -19 -6-12 12 570 574 13 -1 -5 12 1532 1491 12 -4 2 12 652 665 6 -7-13 13 1261 1284  
18  
3 3 11 68 22 -21 -4-12 12 475 461 12 1 -5 12 1680 1628 11 -2 2 12 413 424 4 -5-13 13 717 717 13  
5 3 11 713 705 8 -2-12 12 343 329 14 3 -5 12 2708 2694 21 0 2 12 128 132 8 -3-13 13 1957 1911  
26  
7 3 11 452 449 8 2-12 12 263 263 19 5 -5 12 137 96 -44 2 2 12 422 428 4 -1-13 13 250 284 18  
9 3 11 190 209 19 4-12 12 234 239 -25 7 -5 12 1042 1048 17 4 2 12 395 392 15 3-13 13 1518 1519  
22  
-12 4 11 119 94 -56 6-12 12 147 167 -39 9 -5 12 561 590 9 6 2 12 237 247 10 5-13 13 761 763 15  
-10 4 11 88 120 -42 8-12 12 351 330 23 11 -5 12 727 743 10 8 2 12 104 87 -30 7-13 13 669 691 15  
-8 4 11 231 216 10 -11-11 12 58 55 -57 -14 -4 12 1308 1301 14 10 2 12 128 142 -43 -12-12 13 191 141  
-37  
-6 4 11 82 43 -30 -9-11 12 590 585 15 -12 -4 12 479 499 16 -11 3 12 277 294 23 -10-12 13 395 395  
20  
-4 4 11 514 519 5 -7-11 12 249 261 12 -10 -4 12 1129 1132 11 -9 3 12 319 322 9 -8-12 13 126 84 -  
54  
-2 4 11 305 304 6 -5-11 12 110 114 -41 -8 -4 12 2551 2507 20 -7 3 12 246 259 8 -6-12 13 253 250  
24  
0 4 11 274 275 6 -3-11 12 133 103 -35 -6 -4 12 3018 2980 20 -5 3 12 351 354 5 -4-12 13 586 586  
11  
2 4 11 267 259 7 -1-11 12 263 273 9 -4 -4 12 2350 2305 18 -3 3 12 68 31 -18 -2-12 13 463 452 11  
4 4 11 396 401 5 1-11 12 832 807 13 -2 -4 12 2158 2087 14 -1 3 12 441 437 8 0-12 13 863 870 14  
6 4 11 398 401 8 3-11 12 224 229 16 0 -4 12 4635 4482 53 1 3 12 131 129 11 2-12 13 105 40 -45  
8 4 11 181 160 -21 5-11 12 202 239 -26 2 -4 12 2903 2891 19 3 3 12 216 216 7 4-12 13 196 204 -  
26  
10 4 11 483 498 14 7-11 12 0 33 -1 4 -4 12 1638 1614 11 5 3 12 484 480 8 6-12 13 171 204 -42  
-11 5 11 111 7 -54 9-11 12 233 238 -34 6 -4 12 902 887 23 7 3 12 859 857 10 8-12 13 0 78 -1  
-9 5 11 255 263 -33 -12-10 12 100 34 -63 8 -4 12 1482 1508 15 9 3 12 736 749 10 -11-11 13 255 253  
-29  
-7 5 11 514 516 26 -10-10 12 325 318 32 10 -4 12 1763 1769 18 -12 4 12 592 562 15 -9-11 13 209 203  
-31  
-5 5 11 128 132 -20 -8-10 12 579 583 7 -13 -3 12 132 113 -52 -10 4 12 175 162 -21 -7-11 13 138 141 -  
20  
-3 5 11 540 535 5 -6-10 12 339 355 8 -11 -3 12 293 327 23 -8 4 12 1484 1492 12 -5-11 13 156 160  
14



-1 5 11 170 180 9 -4-10 12 404 383 13 -9 -3 12 957 953 8 -6 4 12 224 226 12 -3-11 13 163 151 -27  
 1 5 11 334 335 7 -2-10 12 386 387 7 -7 -3 12 740 723 11 -4 4 12 246 238 20 -1-11 13 131 119 -20  
 3 5 11 534 536 5 0-10 12 174 164 13 -5 -3 12 1107 1101 9 -2 4 12 766 776 6 1-11 13 512 528 11  
 5 5 11 345 352 7 2-10 12 502 507 11 -3 -3 12 736 726 4 0 4 12 925 904 7 3-11 13 112 23 -42  
 7 5 11 1062 1068 11 4-10 12 154 195 -24 -1 -3 12 124 123 7 2 4 12 1724 1689 13 5-11 13 277 281  
 22  
 9 5 11 851 836 10 6-10 12 450 495 15 1 -3 12 356 362 4 4 4 12 279 298 7 7-11 13 112 120 -78  
 -10 6 11 141 134 -31 8-10 12 155 187 -48 3 -3 12 316 304 4 6 4 12 1277 1283 13 9-11 13 238 287 -  
 32  
 -8 6 11 676 694 14 10-10 12 283 288 25 5 -3 12 556 559 5 8 4 12 591 579 12 -12-10 13 173 206 -  
 43  
 -6 6 11 42 50 -42 -11 -9 12 126 151 -36 7 -3 12 450 465 8 -11 5 12 1986 2045 20 -10-10 13 306 331  
 14  
 -4 6 11 769 763 8 -9 -9 12 345 342 10 9 -3 12 64 52 -63 -9 5 12 1519 1534 16 -8-10 13 614 618 8  
 -2 6 11 474 481 9 -7 -9 12 114 76 -20 11 -3 12 361 369 22 -7 5 12 786 802 18 -6-10 13 874 869 9  
 0 6 11 59 68 -36 -5 -9 12 244 249 8 -14 -2 12 127 122 -42 -5 5 12 1936 1903 18 -4-10 13 303 327 9  
 2 6 11 117 104 -15 -3 -9 12 157 45 -25 -12 -2 12 479 478 16 -3 5 12 1207 1204 10 -2-10 13 121 92 -  
 51  
 4 6 11 219 215 10 -1 -9 12 416 410 7 -10 -2 12 179 191 11 -1 5 12 3594 3591 28 0-10 13 513 494 7  
 6 6 11 344 325 16 1 -9 12 853 834 9 -8 -2 12 90 85 -17 1 5 12 1277 1288 12 2-10 13 928 935 14  
 8 6 11 111 14 -74 3 -9 12 404 394 12 -6 -2 12 63 43 -17 3 5 12 1377 1371 12 4-10 13 844 862 14  
 -9 7 11 117 116 -67 5 -9 12 793 826 13 -4 -2 12 612 599 4 5 5 12 1215 1207 12 6-10 13 652 684 13  
 -7 7 11 271 257 22 7 -9 12 124 17 -43 -2 -2 12 220 220 3 7 5 12 866 876 10 8-10 13 638 663 15  
 -5 7 11 357 364 14 9 -9 12 161 81 -48 0 -2 12 1240 1233 8 9 5 12 1233 1211 19 10-10 13 627 639  
 18  
 -3 7 11 247 261 12 11 -9 12 212 117 -50 2 -2 12 454 470 4 -10 6 12 296 332 23 -11 -9 13 0 8 -1  
 -1 7 11 161 165 16 -12 -8 12 545 558 15 4 -2 12 308 309 5 -8 6 12 1437 1435 22 -9 -9 13 92 122 -30  
 1 7 11 101 74 -23 -10 -8 12 202 188 19 6 -2 12 276 278 12 -6 6 12 44 71 -43 -7 -9 13 488 496 7  
 3 7 11 333 316 14 -8 -8 12 292 277 8 8 -2 12 109 123 -32 -4 6 12 1012 1012 22 -5 -9 13 54 16 -38  
 5 7 11 141 97 -34 -6 -8 12 401 399 6 10 -2 12 678 664 14 -2 6 12 1135 1124 11 -3 -9 13 59 57 -58  
 7 7 11 627 615 13 -4 -8 12 231 244 7 -13 -1 12 47 99 -47 0 6 12 445 442 7 -1 -9 13 145 157 14  
 -8 8 11 133 71 -47 -2 -8 12 703 685 7 -11 -1 12 240 263 23 2 6 12 121 120 -17 1 -9 13 674 678 7  
 -6 8 11 191 159 -31 0 -8 12 358 366 6 -9 -1 12 121 126 -13 4 6 12 292 299 14 3 -9 13 347 358 13  
 -4 8 11 91 21 -90 2 -8 12 471 466 9 -7 -1 12 577 576 5 6 6 12 967 952 15 5 -9 13 478 515 13  
 -2 8 11 332 346 18 4 -8 12 499 529 11 -5 -1 12 672 665 5 8 6 12 112 80 -93 7 -9 13 37 38 -36  
 0 8 11 332 361 15 6 -8 12 621 655 13 -3 -1 12 529 534 3 -9 7 12 246 274 24 9 -9 13 39 41 -39  
 4 8 11 875 875 13 8 -8 12 204 204 -30 -1 -1 12 179 177 4 -7 7 12 162 112 -38 11 -9 13 68 129 -67  
 6 8 11 325 353 17 10 -8 12 518 490 18 1 -1 12 406 403 3 -5 7 12 196 213 -33 -12 -8 13 50 147 -50  
 -7 9 11 0 63 -1 12 -8 12 123 63 -77 3 -1 12 244 245 5 -3 7 12 714 717 13 -10 -8 13 105 108 -45  
 -5 9 11 100 131 -100 -13 -7 12 15 166 -14 5 -1 12 51 3 -50 -1 7 12 1268 1257 27 -8 -8 13 234 225 -  
 25  
 -3 9 11 806 810 15 -11 -7 12 368 348 17 7 -1 12 77 7 -40 1 7 12 597 580 11 -6 -8 13 289 295 6  
 -1 9 11 98 115 -92 -9 -7 12 565 551 6 9 -1 12 263 256 15 3 7 12 313 311 14 -4 -8 13 523 519 5  
 -4 10 11 348 379 20 -7 -7 12 861 870 8 11 -1 12 163 135 -44 5 7 12 669 667 12 -2 -8 13 980 957 10  
 -2 10 11 85 46 -84 -5 -7 12 531 507 5 -12 0 12 292 320 20 7 7 12 205 217 -30 0 -8 13 111 35 -38

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 10

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 -8 13 103 74 -21	3 -1 13 98 91 -12	-4 8 13 241 233 -30	10 -8 14 831 894 17	-6 0 14 470 479 6
4 -8 13 89 74 -51	5 -1 13 699 699 15	-2 8 13 630 601 14	-13 -7 14 294 291 28	-4 0 14 830 832 7
6 -8 13 276 308 19	7 -1 13 308 299 22	4 8 13 736 717 13	-9 -7 14 657 651 13	-2 0 14 627 612 4

8-8 13 141 159 -51 9-1 13 542 541 10 -5 9 13 37 21 -36 -7-7 14 889 875 9 0 0 14 850 827 5  
 10-8 13 327 335 28 -12 0 13 0 47 -1 -3 9 13 0 15 -1 -5 -7 14 1598 1579 15 2 0 14 843 850 6  
 -13-7 13 54 134 -54 -10 0 13 106 112 -21 -1 9 13 93 171 -93 -3-7 14 766 743 8 4 0 14 1250 1248  
 18  
 -9-7 13 302 312 7 -8 0 13 543 549 6 -5-17 14 741 720 16 -1-7 14 573 562 7 6 0 14 888 902 10  
 -7-7 13 875 859 8 -6 0 13 174 182 17 -8-16 14 377 367 30 1-7 14 678 668 7 8 0 14 150 109 -25  
 -5-7 13 1506 1478 11 -4 0 13 130 138 8 -6-16 14 233 198 -38 3-7 14 428 424 11 10 0 14 955 988  
 16  
 -3-7 13 329 332 6 -2 0 13 246 252 5 -4-16 14 46 81 -46 5-7 14 614 612 12 -11 1 14 1025 1042 11  
 -1-7 13 395 390 9 0 0 13 64 18 -11 -9-15 14 169 145 -69 7-7 14 465 493 14 -9 1 14 596 587 7  
 1-7 13 578 574 7 2 0 13 927 923 6 -7-15 14 220 205 -39 9-7 14 711 797 16 -7 1 14 3030 2989 29  
 3-7 13 104 50 -35 4 0 13 426 419 7 -5-15 14 332 368 23 11-7 14 256 278 -34 -5 1 14 1342 1342  
 15  
 5-7 13 128 158 -32 6 0 13 509 514 8 -3-15 14 297 303 20 -10-6 14 297 296 10 -3 1 14 1457 1466  
 10  
 7-7 13 358 361 16 8 0 13 392 389 10 -10-14 14 78 80 -77 -8-6 14 274 267 7 -1 1 14 2444 2446 16  
 9-7 13 628 661 15 10 0 13 258 251 18 -8-14 14 193 180 -43 -6-6 14 80 31 -15 1 1 14 2633 2619  
 21  
 11-7 13 123 113-101 -13 1 13 0 14 -1 -6-14 14 204 190 -35 -4-6 14 788 787 6 3 1 14 2690 2684  
 26  
 -10-6 13 186 202 18 -11 1 13 84 26 -50 -4-14 14 263 274 24 -2-6 14 84 94 -21 5 1 14 98 93 -25  
 -8-6 13 731 741 6 -9 1 13 595 586 6 -2-14 14 66 159 -66 0-6 14 445 442 11 7 1 14 1427 1430 23  
 -6-6 13 213 222 6 -7 1 13 135 121 13 4-14 14 195 158 -37 2-6 14 417 439 5 9 1 14 956 971 11  
 -4-6 13 977 983 8 -5 1 13 404 407 5 6-14 14 384 415 19 4-6 14 204 209 11 -12 2 14 260 259 -27  
 -2-6 13 699 709 7 -3 1 13 310 310 4 -11-13 14 408 373 25 6-6 14 0 35 -1 -10 2 14 855 861 29  
 0-6 13 524 532 19 -1 1 13 96 68 -10 -9-13 14 75 79 -75 8-6 14 70 21 -70 -8 2 14 1485 1497 14  
 2-6 13 402 410 5 1 1 13 317 316 5 -7-13 14 203 221 -31 10-6 14 442 491 17 -6 2 14 1677 1678 16  
 4-6 13 226 230 11 3 1 13 288 286 7 -5-13 14 521 510 14 -13-5 14 288 320 29 -4 2 14 1376 1378  
 11  
 6-6 13 305 317 10 5 1 13 636 633 12 -3-13 14 229 225 21 -11-5 14 353 363 19 -2 2 14 1121 1116  
 7  
 8-6 13 137 156 -29 7 1 13 630 629 8 -1-13 14 844 812 13 -9-5 14 383 379 6 0 2 14 1978 1974 13  
 10-6 13 249 243 21 9 1 13 657 667 10 1-13 14 147 152 -34 -7-5 14 531 542 4 2 2 14 707 713 6  
 12-6 13 164 155 -64 -12 2 13 120 110 -65 3-13 14 594 600 13 -5-5 14 443 438 4 4 2 14 690 672  
 13  
 -13-5 13 389 417 14 -10 2 13 298 291 16 5-13 14 712 708 15 -3-5 14 103 115 -23 6 2 14 403 392  
 9  
 -11-5 13 228 263 -27 -8 2 13 350 348 7 7-13 14 0 46 -1 -1-5 14 133 139 10 8 2 14 718 732 13  
 -9-5 13 408 402 6 -6 2 13 658 665 7 -12-12 14 201 125 -31 1-5 14 723 718 5 -11 3 14 87 40 -87  
 -7-5 13 1646 1644 11 -4 2 13 702 697 6 -10-12 14 271 272 -32 3-5 14 345 339 8 -9 3 14 188 194 -  
 28  
 -5-5 13 708 730 6 -2 2 13 436 445 4 -8-12 14 366 358 20 5-5 14 178 167 15 -7 3 14 468 456 8  
 -3-5 13 602 593 5 0 2 13 682 696 5 -6-12 14 526 512 13 7-5 14 74 110 -71 -5 3 14 63 59 -30  
 -1-5 13 961 954 8 2 2 13 462 468 8 -4-12 14 420 417 13 9-5 14 340 313 14 -3 3 14 372 366 5  
 1-5 13 1765 1728 12 4 2 13 115 125 -20 -2-12 14 476 462 11 -12-4 14 59 30 -59 -1 3 14 1101 1088  
 9  
 3-5 13 899 909 7 6 2 13 68 23 -68 0-12 14 97 25 -53 -10-4 14 334 332 7 1 3 14 614 615 7  
 5-5 13 246 260 10 8 2 13 128 104 -28 2-12 14 447 460 13 -8-4 14 1098 1067 9 3 3 14 997 985 8  
 7-5 13 441 449 8 -11 3 13 269 258 16 4-12 14 593 606 14 -6-4 14 182 191 7 5 3 14 111 84 -25  
 9-5 13 92 43 -41 -9 3 13 466 454 11 6-12 14 38 68 -37 -4-4 14 145 127 7 7 3 14 174 158 -28  
 11-5 13 200 197 -43 -7 3 13 80 106 -31 8-12 14 247 254 -30 -2-4 14 282 289 5 -10 4 14 107 88 -59  
 -14-4 13 1724 1717 25 -5 3 13 232 240 7 -11-11 14 439 442 16 0-4 14 496 482 5 -8 4 14 314 280  
 20  
 -12-4 13 152 135 -38 -3 3 13 469 469 5 -9-11 14 304 291 19 2-4 14 461 451 4 -6 4 14 283 299 11

-10 -4 13 1583 1546 12 -1 3 13 595 596 5 -7 -11 14 746 728 9 4 -4 14 563 560 5 -4 4 14 633 623 11  
 -8 -4 13 1492 1477 12 1 3 13 75 53 -21 -5 -11 14 604 626 7 6 -4 14 817 793 13 -2 4 14 210 214 14  
 -6 -4 13 638 627 5 3 3 13 65 54 -27 -3 -11 14 320 333 9 8 -4 14 81 84 -49 0 4 14 678 680 7  
 -4 -4 13 2387 2355 16 5 3 13 402 404 9 -1 -11 14 175 144 16 10 -4 14 225 182 -32 2 4 14 212 211 9  
 -2 -4 13 1983 1928 15 7 3 13 496 479 13 1 -11 14 92 14 -50 -13 -3 14 329 354 24 4 4 14 272 288 8  
 0 -4 13 2774 2726 21 9 3 13 246 242 19 3 -11 14 114 118 -36 -11 -3 14 157 191 -30 6 4 14 291 299  
 16  
 2 -4 13 824 820 6 -10 4 13 59 12 -59 5 -11 14 209 238 -29 -9 -3 14 301 297 7 8 4 14 116 94 -42  
 4 -4 13 85 80 -16 -8 4 13 114 18 -38 7 -11 14 0 37 -1 -7 -3 14 695 699 5 -9 5 14 224 244 -28  
 6 -4 13 1281 1267 14 -6 4 13 141 147 -18 9 -11 14 36 57 -35 -5 -3 14 701 713 5 -7 5 14 326 335 19  
 8 -4 13 173 158 -20 -4 4 13 957 957 8 -12 -10 14 324 372 24 -3 -3 14 146 129 9 -5 5 14 225 228 14  
 10 -4 13 907 885 15 -2 4 13 342 341 10 -10 -10 14 322 330 27 -1 -3 14 279 279 5 -3 5 14 101 99 -26  
 -13 -3 13 236 254 -34 0 4 13 170 180 10 -8 -10 14 379 393 9 1 -3 14 1077 1085 7 -1 5 14 258 270 8  
 -11 -3 13 842 835 14 2 4 13 142 131 12 -6 -10 14 86 52 -24 3 -3 14 66 34 -19 1 5 14 330 329 7  
 -9 -3 13 859 853 7 4 4 13 493 497 8 -4 -10 14 784 792 6 5 -3 14 306 309 6 3 5 14 145 135 -15  
 -7 -3 13 1664 1664 11 6 4 13 106 77 -69 -2 -10 14 567 567 7 7 -3 14 175 160 17 5 5 14 129 117 -24  
 -5 -3 13 886 889 6 8 4 13 495 494 11 0 -10 14 177 177 14 9 -3 14 36 68 -36 7 5 14 56 43 -56  
 -3 -3 13 458 455 3 -11 5 13 622 630 11 2 -10 14 612 623 11 -12 -2 14 171 224 -37 -8 6 14 114 134 -  
 78  
 -1 -3 13 1206 1186 10 -9 5 13 124 154 -57 4 -10 14 520 530 12 -10 -2 14 0 17 -1 -6 6 14 356 374 18  
 1 -3 13 141 121 -18 -7 5 13 359 375 16 6 -10 14 226 300 -26 -8 -2 14 640 644 6 -4 6 14 208 272 -26  
 3 -3 13 2050 2051 14 -5 5 13 432 430 8 8 -10 14 236 280 -29 -6 -2 14 289 289 5 -2 6 14 97 115 -65  
 5 -3 13 1097 1088 10 -3 5 13 606 602 6 10 -10 14 109 67 -108 -4 -2 14 197 217 5 0 6 14 86 99 -69  
 7 -3 13 351 369 9 -1 5 13 91 85 -20 -11 -9 14 79 23 -78 -2 -2 14 1429 1450 10 2 6 14 244 237 14  
 9 -3 13 95 146 -94 1 5 13 1077 1097 27 -9 -9 14 111 111 -23 0 -2 14 335 358 4 4 6 14 88 35 -56  
 -12 -2 13 872 869 15 3 5 13 352 359 6 -7 -9 14 233 234 10 2 -2 14 446 445 4 6 6 14 161 158 -38  
 -10 -2 13 686 679 6 5 5 13 158 162 -19 -5 -9 14 63 67 -62 4 -2 14 200 196 8 -7 7 14 210 219 -34  
 -8 -2 13 1076 1079 9 7 5 13 187 147 -20 -3 -9 14 714 708 6 6 -2 14 601 615 8 -5 7 14 0 82 -1  
 -6 -2 13 1179 1164 8 -10 6 13 256 238 -27 -1 -9 14 532 515 10 8 -2 14 129 108 -48 -3 7 14 149 184 -  
 34  
 -4 -2 13 102 82 -16 -8 6 13 760 777 16 1 -9 14 979 947 10 10 -2 14 58 17 -58 -1 7 14 200 208 -32  
 -2 -2 13 1170 1186 7 -6 6 13 1306 1290 20 3 -9 14 548 553 11 -13 -1 14 0 10 -1 1 7 14 82 124 -81  
 0 -2 13 611 608 5 -4 6 13 273 274 12 5 -9 14 687 679 13 -11 -1 14 456 475 10 3 7 14 397 378 16  
 2 -2 13 1041 1027 7 -2 6 13 0 28 -1 7 -9 14 370 380 18 -9 -1 14 65 45 -38 5 7 14 227 245 -24  
 4 -2 13 788 785 6 0 6 13 138 151 -18 9 -9 14 283 298 24 -7 -1 14 650 632 6 -6 8 14 146 140 -50  
 6 -2 13 583 575 8 2 6 13 545 542 6 -12 -8 14 1110 1099 17 -5 -1 14 800 812 6 -4 8 14 460 455 19  
 8 -2 13 652 657 10 4 6 13 696 681 9 -10 -8 14 601 587 13 -3 -1 14 502 512 4 -2 8 14 193 214 -33  
 10 -2 13 201 167 -29 6 6 13 894 897 14 -8 -8 14 909 903 9 -1 -1 14 57 3 -13 4 8 14 124 80 -53  
 -13 -1 13 101 161 -101 -7 7 13 889 904 15 -6 -8 14 2283 2265 17 1 -1 14 572 584 10 -3 9 14 0 57 -1  
 -11 -1 13 178 211 -27 -5 7 13 292 309 24 -4 -8 14 2454 2420 19 3 -1 14 169 148 10 -5 -17 15 549 520  
 17  
 -9 -1 13 299 301 7 -3 7 13 1419 1436 21 -2 -8 14 2160 2130 21 5 -1 14 38 30 -37 -8 -16 15 255 251 -  
 42  
 -7 -1 13 397 403 5 -1 7 13 608 582 13 0 -8 14 1491 1436 14 7 -1 14 650 671 12 -6 -16 15 657 635  
 16  
 -5 -1 13 724 709 6 1 7 13 998 989 15 2 -8 14 2052 2018 20 9 -1 14 702 705 10 -4 -16 15 566 559 14  
 -3 -1 13 182 167 5 3 7 13 239 254 21 4 -8 14 2150 2133 30 -12 0 14 312 355 21 -9 -15 15 214 259 -  
 41  
 -1 -1 13 295 292 4 5 7 13 555 540 12 6 -8 14 795 816 14 -10 0 14 301 279 11 -7 -15 15 186 171 -53  
 1 -1 13 268 261 3 -6 8 13 434 427 21 8 -8 14 754 818 14 -8 0 14 490 504 6 -5 -15 15 52 112 -52

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite 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

-3-15 15 142 161 -47 11 -7 15 714 766 17 3 1 15 614 597 7 -6-12 16 577 595 12 -6 -4 16 148 127 -  
17  
5-15 15 103 95-102 -10 -6 15 289 272 9 5 1 15 694 680 8 -4-12 16 1360 1335 19 -4 -4 16 442 451  
6  
-10-14 15 305 325 26 -8 -6 15 683 667 6 7 1 15 783 783 9 -2-12 16 1648 1623 16 -2 -4 16 243 234  
6  
-8-14 15 435 470 23 -6 -6 15 594 586 5 9 1 15 148 133 -31 0-12 16 1033 1027 16 0 -4 16 348 336  
5  
-6-14 15 273 301 -29 -4 -6 15 325 323 8 -12 2 15 455 472 17 2-12 16 773 773 13 2 -4 16 220 227 7  
-4-14 15 474 468 13 -2 -6 15 170 180 8 -10 2 15 966 961 11 4-12 16 691 704 14 4 -4 16 1287 1284  
9  
-2-14 15 471 467 14 0 -6 15 205 216 10 -8 2 15 833 839 20 6-12 16 1076 1092 17 6 -4 16 328 323  
10  
4-14 15 658 654 15 2 -6 15 927 912 8 -6 2 15 519 509 7 8-12 16 670 650 18 8 -4 16 468 472 16  
6-14 15 641 662 18 4 -6 15 465 449 25 -4 2 15 977 982 10 -11-11 16 460 457 16 -13 -3 16 1489 1468  
22  
-11-13 15 143 137 -76 6 -6 15 343 355 14 -2 2 15 1258 1239 8 -9-11 16 684 649 14 -11 -3 16 656 665  
9  
-9-13 15 128 68 -63 8 -6 15 337 344 13 0 2 15 1674 1677 13 -7-11 16 495 520 11 -9 -3 16 513 509  
6  
-7-13 15 301 302 27 10 -6 15 45 112 -45 2 2 15 94 47 -17 -5-11 16 965 975 15 -7 -3 16 966 981 8  
-5-13 15 128 149 -52 -11 -5 15 245 239 -26 4 2 15 175 192 16 -3-11 16 1078 1068 11 -5 -3 16 1702  
1688 11  
-3-13 15 244 253 23 -9 -5 15 85 44 -22 6 2 15 531 532 8 -1-11 16 818 808 13 -3 -3 16 2611 2552  
25  
-1-13 15 433 421 13 -7 -5 15 383 388 5 8 2 15 595 595 17 1-11 16 201 226 20 -1 -3 16 730 722 5  
1-13 15 350 392 14 -5 -5 15 552 547 5 -11 3 15 140 132 -80 3-11 16 645 640 12 1 -3 16 2112 2057  
14  
3-13 15 290 290 22 -3 -5 15 97 83 -13 -9 3 15 1807 1767 26 5-11 16 764 768 14 3 -3 16 1715 1708  
17  
5-13 15 580 581 15 -1 -5 15 126 119 11 -7 3 15 293 297 14 7-11 16 434 472 21 5 -3 16 1525 1524  
10  
7-13 15 215 198 -34 1 -5 15 341 326 9 -5 3 15 1260 1265 10 9-11 16 723 731 19 7 -3 16 777 761  
13  
-12-12 15 110 102-110 3 -5 15 398 393 5 -3 3 15 484 489 5 -10-10 16 171 169 -30 9 -3 16 105 123-  
104  
-10-12 15 103 54-102 5 -5 15 152 132 -17 -1 3 15 175 166 13 -8-10 16 341 368 16 -12 -2 16 1174 1180  
18  
-8-12 15 119 109 -61 7 -5 15 182 208 -20 1 3 15 610 617 7 -6-10 16 216 225 12 -10 -2 16 670 700  
23  
-6-12 15 162 173 -38 9 -5 15 664 654 25 3 3 15 615 613 6 -4-10 16 424 422 8 -8 -2 16 1120 1125  
11  
-4-12 15 300 310 16 -12 -4 15 106 120 -64 5 3 15 1534 1519 16 -2-10 16 372 369 8 -6 -2 16 2439 2401  
18  
-2-12 15 639 631 12 -10 -4 15 187 169 13 7 3 15 39 67 -39 0-10 16 224 228 13 -4 -2 16 2437 2415  
14  
0-12 15 243 259 19 -8 -4 15 438 441 11 -10 4 15 212 233 -31 2-10 16 348 357 12 -2 -2 16 1939 1911  
13  
2-12 15 0 43 -1 -6 -4 15 488 487 5 -8 4 15 617 620 14 4-10 16 416 423 15 0 -2 16 1145 1135 8  
4-12 15 193 172 -33 -4 -4 15 152 139 7 -6 4 15 654 639 14 6-10 16 112 11 -65 2 -2 16 1848 1848  
12  
6-12 15 89 13 -89 -2 -4 15 125 132 10 -4 4 15 183 171 11 8-10 16 135 141 -67 4 -2 16 1422 1420

11

8-12 15 117 93-117 0-4 15 617 608 5 -2 4 15 543 542 8 -11-9 16 39 98-38 6-2 16 511 525 8  
-11-11 15 534 529 16 2-4 15 918 907 6 0 4 15 623 612 7 -9-9 16 299 300 10 8-2 16 1015 1000 16  
-9-11 15 271 291 24 4-4 15 847 842 6 2 4 15 918 927 8 -7-9 16 368 365 6 -11-1 16 330 297 13  
-7-11 15 597 583 12 6-4 15 842 840 9 4 4 15 96 69-32 -5-9 16 93 91-28 -9-1 16 377 393 7  
-5-11 15 964 974 27 8-4 15 332 344 11 6 4 15 256 267 14 -3-9 16 262 240 10 -7-1 16 39 18-38  
-3-11 15 790 778 9 -13-3 15 166 213-51 -9 5 15 252 280-31 -1-9 16 277 271 12 -5-1 16 251 262

5

-1-11 15 365 368 11 -11-3 15 80 121-68 -7 5 15 290 315 24 1-9 16 346 347 8 -3-1 16 601 606 4  
1-11 15 214 235 19 -9-3 15 283 282 8 -5 5 15 516 528 16 3-9 16 88 104-52 -1-1 16 60 58-23  
3-11 15 264 273 19 -7-3 15 651 652 6 -3 5 15 156 171 15 5-9 16 174 149-36 1-1 16 558 555 7  
5-11 15 221 234-28 -5-3 15 169 160 7 -1 5 15 66 12-40 7-9 16 541 560 15 3-1 16 654 656 6  
7-11 15 267 274-29 -3-3 15 224 215 6 1 5 15 454 451 12 9-9 16 0 22 -1 5-1 16 94 86-31  
9-11 15 390 402 27 -1-3 15 296 302 4 3 5 15 107 91-27 -10-8 16 253 242 14 7-1 16 174 159-31  
-12-10 15 617 574 16 1-3 15 280 267 5 5 5 15 503 518 10 -8-8 16 445 435 6 9-1 16 246 256-26  
-10-10 15 154 114-29 3-3 15 267 263 6 7 5 15 373 398 20 -6-8 16 240 213 7 -12 0 16 259 254 24  
-8-10 15 740 727 13 5-3 15 257 259 7 -8 6 15 0 58 -1 -4-8 16 474 478 7 -10 0 16 63 11-62  
-6-10 15 153 138 15 7-3 15 448 444 13 -6 6 15 591 604 15 -2-8 16 143 142-19 -8 0 16 179 176 15  
-4-10 15 258 255 11 9-3 15 421 427 17 -4 6 15 291 332 22 0-8 16 121 81-18 -6 0 16 581 607 7  
-2-10 15 125 102-31 -12-2 15 394 416 17 -2 6 15 70 103-70 2-8 16 564 567 7 -4 0 16 768 766 5  
0-10 15 297 296 15 -10-2 15 237 238 13 0 6 15 579 597 11 4-8 16 512 515 12 -2 0 16 76 59-13  
2-10 15 584 574 11 -8-2 15 311 314 7 2 6 15 32 38-32 6-8 16 523 549 15 0 0 16 269 275 6  
4-10 15 270 262 21 -6-2 15 876 865 7 4 6 15 116 54-35 8-8 16 113 96-112 2 0 16 84 65-22  
6-10 15 229 242-30 -4-2 15 715 715 5 -7 7 15 110 103-109 10-8 16 165 226-65 4 0 16 298 296

10

8-10 15 144 181-49 -2-2 15 863 863 6 -5 7 15 132 117-80 -9-7 16 101 105-20 6 0 16 75 99-54  
10-10 15 0 1 -1 0-2 15 89 93-12 -3 7 15 210 144-30 -7-7 16 601 596 6 8 0 16 257 258 20  
-11-9 15 514 495 10 2-2 15 200 196 7 1 7 15 144 156-39 -5-7 16 444 450 6 -11 1 16 301 317 15  
-9-9 15 404 389 15 4-2 15 177 178 12 3 7 15 588 585 13 -3-7 16 251 259 23 -9 1 16 183 196-26  
-7-9 15 987 991 8 6-2 15 436 455 9 -4 8 15 552 526 19 -1-7 16 1078 1062 11 -7 1 16 588 601 12  
-5-9 15 584 577 5 8-2 15 270 272 15 -2 8 15 123 107-91 1-7 16 84 119-30 -5 1 16 129 131-23  
-3-9 15 1323 1290 13 -13-1 15 88 19-88 -5-17 16 157 129-59 3-7 16 412 419 11 -3 1 16 70 51-

20

-1-9 15 825 810 9 -11-1 15 160 140-20 -8-16 16 96 91-96 5-7 16 371 380 15 -1 1 16 101 92-12  
1-9 15 268 272 9 -9-1 15 722 722 6 -6-16 16 218 274-34 7-7 16 415 424 19 1 1 16 524 534 9  
3-9 15 0 37 -1 -7-1 15 433 451 7 -4-16 16 265 300 21 9-7 16 183 251-44 3 1 16 106 105-30  
5-9 15 281 302 20 -5-1 15 245 238 5 -9-15 16 298 344 27 11-7 16 212 203-48 5 1 16 187 185 17  
7-9 15 1018 1043 17 -3-1 15 190 193 5 -7-15 16 257 280-32 -10-6 16 264 275 15 7 1 16 85 43-

61

9-9 15 367 393 23 -1-1 15 527 532 5 -5-15 16 641 651 15 -8-6 16 791 778 7 -10 2 16 130 161-48  
-12-8 15 531 475 17 1-1 15 111 109-16 -3-15 16 238 253-25 -6-6 16 87 66-16 -8 2 16 204 184-

25

-10-8 15 2052 1980 27 3-1 15 394 397 8 5-15 16 170 145-50 -4-6 16 594 577 7 -6 2 16 65 58-65  
-8-8 15 412 419 7 5-1 15 748 750 8 -10-14 16 126 178-125 -2-6 16 372 366 5 -4 2 16 127 127-14  
-6-8 15 2076 2049 16 7-1 15 170 173-20 -8-14 16 194 195-42 0-6 16 180 162 12 -2 2 16 214 226

7

-4-8 15 1071 1054 11 9-1 15 494 505 11 -6-14 16 72 37-72 2-6 16 365 356 13 0 2 16 328 318 6  
-2-8 15 83 43-23 -12 0 15 621 615 15 -4-14 16 541 560 14 4-6 16 981 958 10 2 2 16 687 688 8  
0-8 15 1260 1247 20 -10 0 15 130 99-27 -2-14 16 81 24-80 6-6 16 76 53-76 4 2 16 74 53-43  
2-8 15 199 189 12 -8 0 15 64 83-37 2-14 16 0 27 -1 8-6 16 379 387 14 6 2 16 215 225 15  
4-8 15 2220 2218 31 -6 0 15 96 129-19 4-14 16 113 26-101 10-6 16 121 103-76 8 2 16 161 49-

39

6-8 15 293 322 22 -4 0 15 647 639 5 6-14 16 123 70-96 -11-5 16 433 423 17 -11 3 16 189 141-38  
8-8 15 395 438 18 -2 0 15 168 177 5 -11-13 16 99 132-99 -9-5 16 255 267 8 -9 3 16 67 50-67

10 -8 15 571 621 19 0 0 15 525 532 6 -9 -13 16 122 73 -102 -7 -5 16 719 719 6 -7 3 16 363 383 15  
-13 -7 15 1487 1455 22 2 0 15 812 813 7 -7 -13 16 627 671 14 -5 -5 16 580 576 5 -5 3 16 71 80 -34  
-9 -7 15 533 530 6 4 0 15 194 207 13 -5 -13 16 295 294 22 -3 -5 16 245 238 8 -3 3 16 0 6 -1  
-7 -7 15 1100 1090 10 6 0 15 57 42 -56 -3 -13 16 492 495 14 -1 -5 16 304 307 6 -1 3 16 73 63 -24  
-5 -7 15 242 247 6 8 0 15 334 323 22 -1 -13 16 67 53 -67 1 -5 16 160 149 8 1 3 16 67 56 -46  
-3 -7 15 2072 2050 20 -11 1 15 1010 1017 11 1 -13 16 135 129 -36 3 -5 16 408 411 5 3 3 16 240 252  
8  
-1 -7 15 83 57 -22 -9 1 15 365 390 8 3 -13 16 261 251 23 5 -5 16 160 137 -18 5 3 16 354 354 16  
1 -7 15 1499 1447 14 -7 1 15 1249 1234 12 5 -13 16 253 293 25 7 -5 16 124 139 -29 7 3 16 466 482  
11  
3 -7 15 1106 1129 15 -5 1 15 244 239 7 7 -13 16 144 108 -59 9 -5 16 340 333 15 -10 4 16 112 87 -  
111  
5 -7 15 418 423 12 -3 1 15 278 287 5 -12 -12 16 712 698 17 -12 -4 16 266 319 24 -8 4 16 397 374  
16  
7 -7 15 519 550 14 -1 1 15 89 46 -13 -10 -12 16 663 678 15 -10 -4 16 422 418 16 -6 4 16 651 652 14  
9 -7 15 538 546 16 1 1 15 843 824 10 -8 -12 16 481 505 17 -8 -4 16 700 682 7 -4 4 16 76 39 -33

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 12

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 4 16 391 385 10	7 -9 17 250 279 -29	-8 0 17 698 714 8	-4 -12 18 585 560 8	8 -4 18 116 144 -74
0 4 16 53 49 -52	9 -9 17 220 250 -37	-6 0 17 589 598 7	-2 -12 18 224 220 16	-11 -3 18 220 259 16
2 4 16 54 56 -53	-10 -8 17 211 212 15	-4 0 17 452 457 5	0 -12 18 354 345 10	-9 -3 18 63 52 -62
4 4 16 79 32 -58	-8 -8 17 210 207 11	-2 0 17 371 366 5	2 -12 18 221 217 -26	-7 -3 18 534 528 7
6 4 16 118 124 -38	-6 -8 17 408 388 17	0 0 17 714 713 8	4 -12 18 234 231 -27	-5 -3 18 48 29 -47
-9 5 16 156 146 -55	-4 -8 17 491 494 7	2 0 17 897 896 8	6 -12 18 515 568 19	-3 -3 18 154 151 9
-7 5 16 413 465 18	-2 -8 17 388 389 7	4 0 17 617 604 8	-11 -11 18 343 336 22	-1 -3 18 125 133 12
-5 5 16 373 366 17	0 -8 17 227 234 10	6 0 17 309 332 11	-9 -11 18 454 498 15	1 -3 18 265 271 6
-3 5 16 0 17 -1	2 -8 17 881 886 9	8 0 17 74 13 -74	-7 -11 18 754 727 13	3 -3 18 154 143 13
-1 5 16 90 56 -49	4 -8 17 781 775 13	-11 1 17 317 319 21	-5 -11 18 450 458 16	5 -3 18 108 86 -27
1 5 16 431 432 9	6 -8 17 926 918 15	-9 1 17 211 227 -24	-3 -11 18 41 25 -41	7 -3 18 486 463 15
3 5 16 741 739 9	8 -8 17 467 449 21	-7 1 17 451 448 8	-1 -11 18 1156 1125 12	-12 -2 18 476 490 19
5 5 16 567 553 10	10 -8 17 273 308 -33	-5 1 17 537 536 5	1 -11 18 170 169 -27	-10 -2 18 235 262
21				
-6 6 16 499 544 16	-9 -7 17 145 108 14	-3 1 17 85 75 -18	3 -11 18 945 946 15	-8 -2 18 334 333 22
-4 6 16 1057 1082 17	-7 -7 17 674 670 6	-1 1 17 375 380 6	5 -11 18 89 96 -89	-6 -2 18 62 24 -32
-2 6 16 127 73 -56	-5 -7 17 213 234 18	1 1 17 107 83 -23	7 -11 18 249 248 -32	-4 -2 18 374 370 5
0 6 16 1240 1258 18	-3 -7 17 140 98 -15	3 1 17 490 487 8	-10 -10 18 254 253 15	-2 -2 18 99 103 -14
2 6 16 1138 1146 12	-1 -7 17 642 631 7	5 1 17 565 564 8	-8 -10 18 149 66 -33	0 -2 18 311 303 7
4 6 16 847 874 14	1 -7 17 78 63 -32	7 1 17 252 264 16	-6 -10 18 76 28 -45	2 -2 18 607 617 8
-5 7 16 623 641 16	3 -7 17 70 14 -48	-10 2 17 86 84 -85	-4 -10 18 1042 1026 11	4 -2 18 454 457 7
-3 7 16 1104 1092 18	5 -7 17 233 203 24	-8 2 17 90 11 -90	-2 -10 18 501 506 7	6 -2 18 369 379 11
3 7 16 1163 1159 17	7 -7 17 449 450 15	-6 2 17 192 205 13	0 -10 18 387 395 8	8 -2 18 272 256 26
-5 -17 17 107 89 -107	9 -7 17 123 89 -88	-4 2 17 219 218 9	2 -10 18 0 52 -1	-11 -1 18 243 261 25
-8 -16 17 132 136 -131	-10 -6 17 199 219 20	-2 2 17 140 128 12	4 -10 18 458 458 15	-9 -1 18 104 59 -
62				
-6 -16 17 0 69 -1	-8 -6 17 464 463 6	0 2 17 245 252 18	6 -10 18 120 82 -71	-7 -1 18 517 523 6
-4 -16 17 140 14 -64	-6 -6 17 375 384 6	2 2 17 294 292 11	8 -10 18 438 467 24	-5 -1 18 282 295 5
-9 -15 17 493 568 17	-4 -6 17 850 819 7	4 2 17 137 92 -21	-9 -9 18 653 667 8	-3 -1 18 249 258 6
-7 -15 17 367 394 20	-2 -6 17 707 683 6	6 2 17 190 199 19	-7 -9 18 517 519 8	-1 -1 18 608 597 5
-5 -15 17 462 466 19	0 -6 17 306 313 7	-9 3 17 160 140 -38	-5 -9 18 371 365 10	1 -1 18 215 210 14
-3 -15 17 491 496 14	2 -6 17 219 219 10	-7 3 17 348 334 20	-3 -9 18 479 462 7	3 -1 18 80 58 -28

3-15 17 77 87 -77 4 -6 17 479 488 6 -5 3 17 80 53 -29 -1 -9 18 121 85 -22 5 -1 18 120 126 -25  
 -10-14 17 320 346 29 6 -6 17 134 106 -29 -3 3 17 186 214 11 1 -9 18 472 445 21 7 -1 18 624 628  
 10  
 -8-14 17 375 396 19 8 -6 17 136 117 -59 -1 3 17 332 316 8 3 -9 18 128 96 -33 -10 0 18 295 290 20  
 -6-14 17 152 153 -49 -11 -5 17 472 478 9 1 3 17 147 176 -17 5 -9 18 464 432 16 -8 0 18 775 766 13  
 -4-14 17 670 670 13 -9 -5 17 275 296 9 3 3 17 284 318 28 7 -9 18 121 27-121 -6 0 18 407 424 8  
 -2-14 17 382 403 15 -7 -5 17 778 780 6 5 3 17 717 713 9 9 -9 18 184 16 -54 -4 0 18 512 527 7  
 2-14 17 391 414 18 -5 -5 17 761 750 7 -8 4 17 548 535 15 -10 -8 18 315 324 12 -2 0 18 126 133 -15  
 4-14 17 0 54 -1 -3 -5 17 62 28 -23 -6 4 17 584 575 14 -8 -8 18 299 298 10 0 0 18 194 199 12  
 6-14 17 429 403 22 -1 -5 17 187 188 8 -4 4 17 100 40 -34 -6 -8 18 81 69 -29 2 0 18 230 245 10  
 -11-13 17 475 518 18 1 -5 17 65 46 -22 -2 4 17 649 658 12 -4 -8 18 836 837 9 4 0 18 540 531 8  
 -9-13 17 504 519 17 3 -5 17 474 475 6 0 4 17 79 64 -66 -2 -8 18 72 80 -34 6 0 18 261 274 23  
 -7-13 17 728 733 15 5 -5 17 160 164 -17 2 4 17 46 78 -46 0 -8 18 537 531 14 -11 1 18 333 350 20  
 -5-13 17 378 409 18 7 -5 17 131 145 -29 4 4 17 160 119 -25 2 -8 18 417 426 15 -9 1 18 140 147 -38  
 -3-13 17 496 474 14 -12 -4 17 406 376 21 6 4 17 0 15 -1 4 -8 18 76 44 -76 -7 1 18 159 172 -31  
 -1-13 17 705 683 8 -10 -4 17 250 261 18 -7 5 17 104 154 -104 6 -8 18 144 157 -41 -5 1 18 339 326  
 7  
 1-13 17 795 806 13 -8 -4 17 586 588 7 -5 5 17 228 246 -30 8 -8 18 590 624 17 -3 1 18 464 453 6  
 3-13 17 704 753 13 -6 -4 17 539 548 5 -3 5 17 434 449 11 -11 -7 18 586 629 13 -1 1 18 267 280 8  
 5-13 17 351 345 22 -4 -4 17 412 425 7 -1 5 17 105 92 -37 -9 -7 18 806 806 9 1 1 18 58 32 -57  
 7-13 17 335 286 29 -2 -4 17 473 469 4 1 5 17 126 119 -27 -7 -7 18 207 221 9 3 1 18 900 879 11  
 -12-12 17 913 911 15 0 -4 17 424 425 5 3 5 17 94 85 -45 -5 -7 18 565 571 8 5 1 18 574 566 9  
 -10-12 17 1006 1008 16 2 -4 17 625 610 5 5 5 17 602 588 14 -3 -7 18 995 1009 12 -10 2 18 586 598  
 15  
 -8-12 17 493 486 15 4 -4 17 459 453 5 -6 6 17 90 58 -90 -1 -7 18 1622 1592 16 -8 2 18 160 182 -38  
 -6-12 17 860 861 14 6 -4 17 342 335 10 -4 6 17 265 270 -29 1 -7 18 914 892 14 -6 2 18 720 733 13  
 -4-12 17 380 366 17 8 -4 17 185 193 -33 -2 6 17 239 271 -28 3 -7 18 320 321 10 -4 2 18 416 426 7  
 -2-12 17 1912 1876 31 -11 -3 17 99 79 -79 0 6 17 232 202 20 5 -7 18 1297 1302 19 -2 2 18 676 690  
 6  
 0-12 17 103 113 -32 -9 -3 17 310 315 10 2 6 17 863 865 10 7 -7 18 429 439 20 0 2 18 1103 1128  
 16  
 2-12 17 149 132 -36 -7 -3 17 1298 1296 10 -3 7 17 84 67 -84 9 -7 18 508 539 17 2 2 18 234 244 -33  
 4-12 17 1216 1177 19 -5 -3 17 561 569 6 -5 -17 18 435 459 19 -10 -6 18 1191 1210 18 4 2 18 1424  
 1443 14  
 6-12 17 360 356 25 -3 -3 17 1298 1277 9 -8 -16 18 328 351 -37 -8 -6 18 1227 1207 10 6 2 18 801 808  
 10  
 -11-11 17 1020 993 16 -1 -3 17 938 931 7 -6 -16 18 268 297 -34 -6 -6 18 1146 1134 9 -9 3 18 738 720  
 15  
 -9-11 17 1382 1366 20 1 -3 17 615 602 7 -4 -16 18 298 300 27 -4 -6 18 2522 2442 23 -7 3 18 1178 1168  
 18  
 -7-11 17 440 443 14 3 -3 17 100 8 -16 -9 -15 18 360 409 25 -2 -6 18 2440 2345 16 -5 3 18 1785 1785  
 18  
 -5-11 17 1099 1106 11 5 -3 17 256 262 14 -7 -15 18 507 539 20 0 -6 18 1421 1416 17 -3 3 18 2192  
 2189 21  
 -3-11 17 1320 1315 13 7 -3 17 1016 1006 16 -5 -15 18 544 537 17 2 -6 18 1283 1234 17 -1 3 18 600  
 629 11  
 -1-11 17 959 947 10 -12 -2 17 384 414 21 -3 -15 18 524 522 16 4 -6 18 979 978 8 1 3 18 1689 1710  
 18  
 1-11 17 1559 1528 22 -10 -2 17 1944 1897 29 3 -15 18 380 395 21 6 -6 18 1492 1426 22 3 3 18 1472  
 1443 15  
 3-11 17 408 422 16 -8 -2 17 592 602 7 -10 -14 18 0 76 -1 8 -6 18 842 843 15 5 3 18 760 749 10  
 5-11 17 994 1020 16 -6 -2 17 1789 1798 14 -8 -14 18 197 256 -43 -11 -5 18 502 478 10 -8 4 18 534 529  
 16  
 7-11 17 540 591 17 -4 -2 17 573 569 8 -6 -14 18 222 242 -31 -9 -5 18 271 261 11 -6 4 18 796 784

15  
-10-10 17 0 37 -1 -2 -2 17 118 118 -14 -4-14 18 236 199 -27 -7 -5 18 582 573 7 -4 4 18 510 500 9  
-8-10 17 89 99 -88 0 -2 17 1182 1169 8 -2-14 18 376 386 19 -5 -5 18 422 425 6 -2 4 18 462 480 23  
-6-10 17 84 53 -38 2 -2 17 169 153 10 0-14 18 273 254 25 -3 -5 18 61 22 -25 0 4 18 59 15 -59  
-4-10 17 74 45 -47 4 -2 17 2091 2076 16 2-14 18 234 244 -27 -1 -5 18 106 111 -14 2 4 18 245 255  
14  
-2-10 17 194 188 12 6 -2 17 615 614 8 4-14 18 91 55 -91 1 -5 18 258 253 7 4 4 18 184 100 -24  
0-10 17 226 222 12 8 -2 17 224 179 -29 -11-13 18 231 247 -41 3 -5 18 309 313 7 -7 5 18 356 399  
23  
2-10 17 287 285 16 -11 -1 17 580 566 10 -9-13 18 90 18 -89 5 -5 18 85 29 -40 -5 5 18 398 404 20  
4-10 17 234 230 22 -9 -1 17 434 447 12 -7-13 18 57 64 -56 7 -5 18 19 60 -19 -3 5 18 985 1006 11  
6-10 17 137 108 -46 -7 -1 17 80 85 -30 -5-13 18 146 70 -40 -12 -4 18 254 267 -29 -1 5 18 146 145 -  
32  
8-10 17 168 138 -58 -5 -1 17 869 871 6 -3-13 18 106 40 -64 -10 -4 18 112 117 -35 1 5 18 701 708 9  
-9 -9 17 111 147 -38 -3 -1 17 850 846 9 -1-13 18 136 163 -31 -8 -4 18 272 288 9 3 5 18 637 646 10  
-7 -9 17 222 213 9 -1 -1 17 856 863 6 1-13 18 124 72 -45 -6 -4 18 142 151 -17 -4 6 18 0 84 -1  
-5 -9 17 94 60 -26 1 -1 17 447 429 37 3-13 18 258 263 -27 -4 -4 18 694 684 5 0 6 18 95 36 -94  
-3 -9 17 185 186 14 3 -1 17 85 83 -24 5-13 18 139 125 -59 -2 -4 18 617 616 5 2 6 18 441 449 16  
-1 -9 17 179 180 -20 5 -1 17 195 194 -22 -12-12 18 102 82 -101 0 -4 18 160 156 9 -6-16 19 340 323  
27  
1 -9 17 504 499 9 7 -1 17 106 58 -38 -10-12 18 529 527 16 2 -4 18 261 247 7 -4-16 19 195 199 -49  
3 -9 17 44 47 -44 -12 0 17 806 796 16 -8-12 18 339 372 22 4 -4 18 369 378 6 -9-15 19 1305 1335  
20  
5 -9 17 140 11 -43 -10 0 17 419 437 14 -6-12 18 313 324 20 6 -4 18 261 249 21 -7-15 19 722 735  
17

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 13

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
-5-15 19 858 853 15	4 -6 19 1207 1206 12	-5 5 19 851 860 16	-10 -6 20 383 369 15	0 4 20 162 174 -
-3-15 19 808 804 14	6 -6 19 286 179 21	-3 5 19 334 330 14	-8 -6 20 755 756 9	2 4 20 230 254 -29
3-15 19 873 883 16	8 -6 19 837 824 16	-1 5 19 1028 1053 15	-6 -6 20 238 232 9	-3 5 20 128 120 -
-10-14 19 0 22 -1	-11 -5 19 90 27 -61	1 5 19 150 176 -26	-4 -6 20 274 262 16	-1 5 20 249 287 24
-8-14 19 246 254 -37	-9 -5 19 759 746 13	-6-16 20 307 340 25	-2 -6 20 128 105 -15	-6-16 21 337 341
-6-14 19 577 558 17	-7 -5 19 388 391 8	-4-16 20 151 76 -48	0 -6 20 943 920 10	-4-16 21 0 87 -1
-4-14 19 277 307 23	-5 -5 19 339 350 6	-7-15 20 402 390 28	2 -6 20 74 38 -73	-7-15 21 136 157 -
-2-14 19 335 364 16	-3 -5 19 635 628 5	-5-15 20 459 444 21	4 -6 20 498 510 8	-5-15 21 133 89 -78
0-14 19 495 489 15	-1 -5 19 495 494 5	-3-15 20 672 682 14	6 -6 20 871 834 15	-3-15 21 0 93 -1
2-14 19 189 157 -40	1 -5 19 700 689 5	1-15 20 506 528 16	-11 -5 20 577 570 13	1-15 21 257 274 -
4-14 19 0 39 -1	3 -5 19 357 362 7	3-15 20 626 651 15	-9 -5 20 744 748 12	-8-14 21 169 140 -58
-11-13 19 134 137 -80	5 -5 19 611 618 17	-10-14 20 236 200 -38	-7 -5 20 494 490 8	-6-14 21 162 192
-9-13 19 134 70 -87	7 -5 19 70 19 -70	-8-14 20 224 222 -37	-5 -5 20 93 72 -21	-4-14 21 343 357 20
-7-13 19 218 166 -34	-10 -4 19 612 623 12	-6-14 20 156 151 -45	-3 -5 20 65 42 -25	-2-14 21 217 221
-5-13 19 166 133 -35	-8 -4 19 517 502 11	-4-14 20 297 328 24	-1 -5 20 565 552 8	0-14 21 113 70 -



-3-13 19 64 5 -63 -6 -4 19 449 447 8 -2-14 20 0 95 -1 1 -5 20 239 232 9 2-14 21 194 159 -40  
 -1-13 19 96 73 -41 -4 -4 19 435 447 9 0-14 20 275 278 21 3 -5 20 860 860 8 -11-13 21 282 263 -31  
 1-13 19 399 368 17 -2 -4 19 605 603 5 2-14 20 405 415 19 5 -5 20 826 796 16 -9-13 21 490 477  
 20  
 3-13 19 0 50 -1 0 -4 19 379 381 6 4-14 20 195 185 -42 7 -5 20 79 60 -79 -7-13 21 737 734 15  
 5-13 19 99 154 -98 2 -4 19 717 707 6 -11-13 20 477 475 20 -12 -4 20 0 25 -1 -5-13 21 341 358 22  
 -12-12 19 223 184 -41 4 -4 19 817 806 7 -9-13 20 275 290 -29 -10 -4 20 416 447 13 -3-13 21 409 419  
 15  
 -10-12 19 454 430 20 6 -4 19 261 250 23 -7-13 20 558 579 16 -8 -4 20 487 481 12 -1-13 21 440 428  
 16  
 -8-12 19 658 645 15 -11 -3 19 226 246 23 -5-13 20 446 447 16 -6 -4 20 69 48 -46 1-13 21 126 22 -  
 45  
 -6-12 19 146 163 -51 -9 -3 19 131 169 -31 -3-13 20 128 90 -37 -4 -4 20 1049 1042 7 3-13 21 305 256  
 26  
 -4-12 19 408 401 9 -7 -3 19 443 438 11 -1-13 20 296 294 18 -2 -4 20 136 141 12 -12-12 21 98 53 -  
 97  
 -2-12 19 225 249 14 -5 -3 19 151 139 13 1-13 20 250 250 -28 0 -4 20 249 257 8 -10-12 21 670 670  
 16  
 0-12 19 581 577 8 -3 -3 19 328 327 7 3-13 20 130 145 -56 2 -4 20 564 549 5 -8-12 21 229 243 -33  
 2-12 19 417 412 13 -1 -3 19 139 132 12 5-13 20 98 18 -97 4 -4 20 247 247 14 -6-12 21 78 42 -56  
 4-12 19 328 325 21 1 -3 19 255 249 8 -12-12 20 104 48-103 6 -4 20 389 345 20 -4-12 21 114 133 -  
 33  
 6-12 19 967 1003 17 3 -3 19 616 615 7 -10-12 20 111 121-111 -11 -3 20 216 244 -25 -2-12 21 457 454  
 20  
 -11-11 19 110 44-109 5 -3 19 252 254 12 -8-12 20 106 21 -90 -9 -3 20 353 370 14 0-12 21 398 375  
 11  
 -9-11 19 337 329 22 7 -3 19 556 531 14 -6-12 20 635 643 14 -7 -3 20 213 202 19 2-12 21 437 423  
 17  
 -7-11 19 104 37 -30 -12 -2 19 373 385 19 -4-12 20 100 79 -33 -5 -3 20 184 165 15 4-12 21 276 298 -  
 30  
 -5-11 19 203 217 16 -10 -2 19 0 74 -1 -2-12 20 452 463 9 -3 -3 20 335 326 7 -11-11 21 66 11 -66  
 -3-11 19 145 165 -22 -8 -2 19 52 53 -51 0-12 20 411 420 10 -1 -3 20 56 38 -41 -9-11 21 549 562 10  
 -1-11 19 402 416 10 -6 -2 19 83 35 -47 2-12 20 205 194 -27 1 -3 20 103 60 -17 -7-11 21 168 160 -  
 28  
 1-11 19 197 178 -29 -4 -2 19 80 76 -19 4-12 20 231 240 -26 3 -3 20 218 220 14 -5-11 21 973 967  
 10  
 3-11 19 596 595 14 -2 -2 19 65 51 -27 6-12 20 315 335 22 5 -3 20 519 525 11 -3-11 21 751 736 9  
 5-11 19 162 146 -46 0 -2 19 391 390 6 -11-11 20 122 35 -78 -10 -2 20 170 228 -30 -1-11 21 600 608  
 9  
 7-11 19 119 47-119 2 -2 19 662 656 6 -9-11 20 81 81 -80 -8 -2 20 0 47 -1 1-11 21 148 137 -24  
 -10-10 19 155 131 -25 4 -2 19 324 319 9 -7-11 20 234 230 15 -6 -2 20 95 82 -35 3-11 21 117 106 -  
 59  
 -8-10 19 370 360 19 6 -2 19 382 380 11 -5-11 20 116 123 -30 -4 -2 20 392 405 6 5-11 21 559 594  
 16  
 -6-10 19 456 446 9 -11 -1 19 85 10 -84 -3-11 20 193 182 -29 -2 -2 20 947 933 7 -10-10 21 482 490  
 16  
 -4-10 19 290 291 16 -9 -1 19 265 257 18 -1-11 20 708 691 14 0 -2 20 453 454 6 -8-10 21 1821 1794  
 18  
 -2-10 19 379 378 8 -7 -1 19 523 513 7 1-11 20 469 460 13 2 -2 20 749 757 7 -6-10 21 480 482 9  
 0-10 19 582 582 8 -5 -1 19 65 68 -50 3-11 20 504 510 14 4 -2 20 478 479 8 -4-10 21 319 327 15  
 2-10 19 86 17 -86 -3 -1 19 99 91 -16 5-11 20 0 36 -1 6 -2 20 553 573 11 -2-10 21 1013 1017 11  
 4-10 19 201 212 -29 -1 -1 19 357 362 6 7-11 20 52 101 -52 -9 -1 20 1338 1338 20 0-10 21 603 611  
 8  
 6-10 19 106 54-106 1 -1 19 276 280 8 -10-10 20 1031 1032 11 -7 -1 20 511 517 13 2-10 21 1266 1244

19  
8-10 19 203 203 -57 3 -1 19 193 211 14 -8-10 20 1115 1121 12 -5 -1 20 1456 1464 12 4-10 21 53 62  
-53  
-9 -9 19 527 521 9 5 -1 19 166 141 -24 -6-10 20 984 998 10 -3 -1 20 1867 1872 19 6-10 21 942 939  
16  
-7 -9 19 393 402 9 7 -1 19 875 864 16 -4-10 20 1238 1215 12 -1 -1 20 2053 2075 19 -9 -9 21 831 817  
10  
-5 -9 19 735 744 8 -10 0 19 56 72 -56 -2-10 20 1437 1404 28 1 -1 20 1222 1231 10 -7 -9 21 535 541  
7  
-3 -9 19 644 643 8 -8 0 19 661 641 12 0-10 20 1692 1650 16 3 -1 20 702 702 7 -5 -9 21 734 724 9  
-1 -9 19 77 33 -39 -6 0 19 641 649 7 2-10 20 937 942 15 5 -1 20 1467 1466 15 -3 -9 21 588 584 20  
1 -9 19 71 30 -48 -4 0 19 670 683 6 4-10 20 552 578 15 -10 0 20 774 785 15 -1 -9 21 1077 1080 20  
3 -9 19 537 548 12 -2 0 19 192 193 12 6-10 20 836 833 17 -8 0 20 956 942 15 1 -9 21 817 802 9  
5 -9 19 191 182 -35 0 0 19 99 105 -30 -11 -9 20 298 332 20 -6 0 20 595 614 12 3 -9 21 646 615 14  
7 -9 19 293 285 -32 2 0 19 363 372 10 -9 -9 20 406 408 10 -4 0 20 1480 1491 12 5 -9 21 0 84 -1  
-10 -8 19 53 50 -52 4 0 19 445 443 9 -7 -9 20 709 700 7 -2 0 20 943 933 10 7 -9 21 207 223 -46  
-8 -8 19 504 500 15 6 0 19 342 344 25 -5 -9 20 366 375 13 0 0 20 383 394 8 -10 -8 21 450 451 14  
-6 -8 19 492 518 6 -9 1 19 83 17 -82 -3 -9 20 288 284 10 2 0 20 572 578 13 -8 -8 21 451 446 9  
-4 -8 19 220 227 10 -7 1 19 341 356 15 -1 -9 20 415 407 8 4 0 20 368 358 11 -6 -8 21 79 32 -31  
-2 -8 19 750 756 24 -5 1 19 137 130 -16 1 -9 20 115 45 -28 -9 1 20 331 342 19 -4 -8 21 215 219 10  
0 -8 19 44 22 -44 -3 1 19 490 500 6 3 -9 20 188 242 -31 -7 1 20 286 308 22 -2 -8 21 427 420 14  
2 -8 19 82 43 -34 -1 1 19 104 115 -26 5 -9 20 480 483 16 -5 1 20 342 345 11 0 -8 21 107 66 -29  
4 -8 19 0 25 -1 1 1 19 388 399 15 7 -9 20 335 366 27 -3 1 20 963 968 9 2 -8 21 645 629 11  
6 -8 19 457 463 19 3 1 19 468 454 9 -10 -8 20 112 127 -35 -1 1 20 428 450 9 4 -8 21 349 355 18  
8 -8 19 594 619 17 5 1 19 231 211 18 -8 -8 20 62 15 -61 1 1 20 502 514 9 6 -8 21 222 263 -30  
-11 -7 19 518 529 13 -8 2 19 122 181 -52 -6 -8 20 345 361 8 3 1 20 108 112 -33 8 -8 21 201 221 -47  
-9 -7 19 1411 1392 14 -6 2 19 771 775 13 -4 -8 20 272 251 18 5 1 20 554 524 14 -11 -7 21 169 182 -  
34  
-7 -7 19 338 334 7 -4 2 19 162 166 -19 -2 -8 20 621 623 8 -8 2 20 113 48 -75 -9 -7 21 220 227 15  
-5 -7 19 503 506 6 -2 2 19 227 219 11 0 -8 20 679 665 17 -6 2 20 373 405 18 -7 -7 21 298 304 11  
-3 -7 19 650 654 8 0 2 19 235 214 22 2 -8 20 429 422 12 -4 2 20 234 258 19 -5 -7 21 66 60 -38  
-1 -7 19 501 498 7 2 2 19 568 588 8 4 -8 20 0 57 -1 -2 2 20 158 208 -31 -3 -7 21 142 144 14  
1 -7 19 920 920 11 4 2 19 279 275 15 6 -8 20 224 235 -28 0 2 20 115 55 -40 -1 -7 21 45 28 -45  
3 -7 19 806 802 9 -7 3 19 555 573 17 8 -8 20 252 272 -43 2 2 20 95 129 -43 1 -7 21 121 114 -27  
5 -7 19 1052 1022 16 -5 3 19 541 550 22 -11 -7 20 226 258 -24 4 2 20 62 53 -61 3 -7 21 264 250 14  
7 -7 19 169 187 -42 -3 3 19 742 750 12 -9 -7 20 247 234 15 -7 3 20 286 287 26 5 -7 21 108 82 -60  
9 -7 19 132 57 -101 -1 3 19 971 992 15 -7 -7 20 42 20 -41 -5 3 20 97 51 -68 7 -7 21 466 485 19  
-10 -6 19 1310 1302 19 1 3 19 406 413 10 -5 -7 20 76 58 -31 -3 3 20 68 57 -67 -10 -6 21 414 385 15  
-8 -6 19 491 473 8 3 3 19 96 37 -44 -3 -7 20 269 279 8 -1 3 20 98 82 -64 -8 -6 21 289 314 11  
-6 -6 19 1457 1448 12 -6 4 19 840 821 16 -1 -7 20 543 549 6 1 3 20 309 298 14 -6 -6 21 329 326 12  
-4 -6 19 177 152 12 -4 4 19 426 397 28 1 -7 20 90 24 -33 3 3 20 363 391 13 -4 -6 21 440 447 7  
-2 -6 19 2148 2077 14 -2 4 19 370 386 16 3 -7 20 228 240 15 -6 4 20 239 216 -34 -2 -6 21 136 117 -  
21  
0 -6 19 92 70 -20 0 4 19 562 576 12 5 -7 20 282 286 22 -4 4 20 158 154 -46 0 -6 21 531 540 7  
2 -6 19 730 716 10 2 4 19 497 516 16 7 -7 20 457 436 19 -2 4 20 149 174 -39 2 -6 21 687 675 8

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 14

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
4 -6 21 450 442 10	3 -13 22 387 370 22	-6 -2 22 266 283 17	-7 -7 23 484 484 9	2 -10 24 62 18 -62
6 -6 21 688 690 13	-10 -12 22 260 282 -33	-4 -2 22 287 311 14	-5 -7 23 6 62 -5	4 -10 24 338 312 28
-11 -5 21 295 292 22	-8 -12 22 0 32 -1	-2 -2 22 162 157 -20	-3 -7 23 236 252 11	-9 -9 24 106 35 -76

-9 -5 21 363 340 15 -6 -12 22 330 342 33 0 -2 22 277 284 14 -1 -7 23 167 137 -21 -7 -9 24 462 474 8  
 -7 -5 21 454 456 8 -4 -12 22 88 25 -45 2 -2 22 105 111 -28 1 -7 23 54 27 -53 -5 -9 24 729 723 8  
 -5 -5 21 326 324 7 -2 -12 22 266 272 15 4 -2 22 121 77 -37 3 -7 23 113 55 -34 -3 -9 24 662 656 7  
 -3 -5 21 340 332 8 0 -12 22 154 162 -26 -9 -1 22 352 357 19 5 -7 23 291 286 25 -1 -9 24 427 416 9  
 -1 -5 21 747 737 6 2 -12 22 112 127 -61 -7 -1 22 523 544 15 -8 -6 23 659 649 9 1 -9 24 763 767 10  
 1 -5 21 185 178 12 4 -12 22 126 31 -74 -5 -1 22 313 326 9 -6 -6 23 255 280 10 3 -9 24 880 878 16  
 3 -5 21 97 60 -26 -11 -11 22 209 214 -34 -3 -1 22 206 200 12 -4 -6 23 128 129 -19 5 -9 24 352 328  
 25  
 5 -5 21 282 302 27 -9 -11 22 62 125 -62 -1 -1 22 45 47 -45 -2 -6 23 570 563 6 -8 -8 24 1112 1079 18  
 -10 -4 21 727 729 13 -7 -11 22 260 273 11 1 -1 22 108 107 -25 0 -6 23 264 256 11 -6 -8 24 1338 1331  
 11  
 -8 -4 21 160 160 -30 -5 -11 22 205 229 -34 3 -1 22 205 215 21 2 -6 23 535 528 9 -4 -8 24 1046 1036  
 12  
 -6 -4 21 522 511 8 -3 -11 22 152 129 -21 -8 0 22 0 22 -1 4 -6 23 288 292 19 -2 -8 24 1058 1039 9  
 -4 -4 21 1226 1216 9 -1 -11 22 392 409 9 -6 0 22 186 192 -35 -9 -5 23 896 885 15 0 -8 24 917 901  
 10  
 -2 -4 21 72 49 -27 1 -11 22 89 41 -52 -4 0 22 477 476 10 -7 -5 23 120 42 -25 2 -8 24 930 911 11  
 0 -4 21 172 173 14 3 -11 22 122 89 -51 -2 0 22 214 223 15 -5 -5 23 1191 1157 10 4 -8 24 674 660  
 17  
 2 -4 21 212 196 14 5 -11 22 47 31 -46 0 0 22 602 621 8 -3 -5 23 630 621 7 6 -8 24 542 532 19  
 4 -4 21 123 137 -29 -10 -10 22 711 692 13 2 0 22 128 117 -27 -1 -5 23 775 772 7 -7 -7 24 181 208 -  
 21  
 6 -4 21 154 68 -47 -8 -10 22 192 200 -31 -7 1 22 499 504 15 1 -5 23 122 94 -18 -5 -7 24 71 33 -43  
 -11 -3 21 170 173 -35 -6 -10 22 630 626 7 -5 1 22 275 281 15 3 -5 23 79 22 -47 -3 -7 24 135 119 -20  
 -9 -3 21 120 133 -47 -4 -10 22 73 51 -72 -3 1 22 129 129 -22 -8 -4 23 1496 1485 22 -1 -7 24 95 35 -  
 43  
 -7 -3 21 635 634 12 -2 -10 22 419 411 10 -1 1 22 500 510 9 -6 -4 23 106 67 -63 1 -7 24 238 249 18  
 -5 -3 21 165 166 -18 0 -10 22 1090 1067 11 1 1 22 563 573 9 -4 -4 23 323 331 10 3 -7 24 121 114 -  
 40  
 -3 -3 21 135 138 -15 2 -10 22 114 101 -49 -6 2 22 111 122 -83 -2 -4 23 931 913 7 5 -7 24 265 253 -  
 30  
 -1 -3 21 85 89 -25 4 -10 22 666 670 15 -4 2 22 890 901 10 0 -4 23 432 447 9 -8 -6 24 103 89 -39  
 1 -3 21 518 514 7 6 -10 22 179 200 -62 -2 2 22 186 202 -31 2 -4 23 1155 1144 17 -6 -6 24 600 593 8  
 3 -3 21 364 361 9 -9 -9 22 278 293 16 0 2 22 212 214 17 4 -4 23 276 272 18 -4 -6 24 19 25 -18  
 5 -3 21 364 366 13 -7 -9 22 448 448 8 -3 3 22 358 352 18 -9 -3 23 286 294 23 -2 -6 24 168 184 15  
 -10 -2 21 50 14 -50 -5 -9 22 643 639 7 -5 -15 23 301 331 31 -7 -3 23 62 128 -62 0 -6 24 202 193 20  
 -8 -2 21 190 230 -26 -3 -9 22 1178 1167 12 -3 -15 23 154 75 -50 -5 -3 23 96 143 -38 2 -6 24 78 16 -  
 78  
 -6 -2 21 690 701 8 -1 -9 22 251 271 14 -1 -15 23 64 44 -64 -3 -3 23 275 274 8 4 -6 24 187 224 -26  
 -4 -2 21 376 394 7 1 -9 22 314 322 13 -8 -14 23 693 759 16 -1 -3 23 334 341 10 -7 -5 24 400 394 11  
 -2 -2 21 1040 1027 9 3 -9 22 536 562 15 -6 -14 23 650 689 17 1 -3 23 96 52 -31 -5 -5 24 202 192 14  
 0 -2 21 174 181 17 5 -9 22 384 392 22 -4 -14 23 801 793 10 3 -3 23 131 119 -24 -3 -5 24 260 244 9  
 2 -2 21 180 200 15 7 -9 22 290 347 27 -2 -14 23 120 87 -39 -8 -2 23 602 604 14 -1 -5 24 411 410 7  
 4 -2 21 225 218 23 -10 -8 22 604 595 14 0 -14 23 749 747 15 -6 -2 23 97 97 -69 1 -5 24 231 212 12  
 -9 -1 21 1286 1253 19 -8 -8 22 105 48 -63 2 -14 23 739 728 16 -4 -2 23 248 255 11 3 -5 24 130 118 -  
 37  
 -7 -1 21 325 310 17 -6 -8 22 552 550 7 -9 -13 23 687 705 17 -2 -2 23 767 767 9 -8 -4 24 341 358 20  
 -5 -1 21 820 821 7 -4 -8 22 380 380 7 -7 -13 23 942 934 15 0 -2 23 241 257 12 -6 -4 24 578 570 9  
 -3 -1 21 305 310 9 -2 -8 22 76 86 -35 -5 -13 23 825 823 10 2 -2 23 648 650 7 -4 -4 24 77 71 -33  
 -1 -1 21 784 784 9 0 -8 22 415 419 9 -3 -13 23 933 920 20 -7 -1 23 334 325 19 -2 -4 24 178 169 14  
 1 -1 21 965 962 11 2 -8 22 711 702 9 -1 -13 23 843 826 17 -5 -1 23 74 32 -45 0 -4 24 1095 1071 8  
 3 -1 21 455 479 9 4 -8 22 87 38 -87 1 -13 23 897 898 16 -3 -1 23 404 403 8 2 -4 24 110 105 -30  
 5 -1 21 649 641 11 6 -8 22 165 183 -45 3 -13 23 898 922 17 -1 -1 23 62 29 -61 4 -4 24 532 539 17  
 -8 0 21 68 43 -67 -9 -7 22 393 394 11 -10 -12 23 0 51 -1 1 -1 23 192 188 16 -7 -3 24 410 410 15

-6 0 21 567 583 12 -7 -7 22 424 440 10 -8-12 23 276 300 26 -6 0 23 209 237 -31 -5 -3 24 611 594 9  
 -4 0 21 594 583 10 -5 -7 22 185 182 16 -6-12 23 139 176 -30 -4 0 23 76 6 -46 -3 -3 24 1099 1084 8  
 -2 0 21 1532 1531 15 -3 -7 22 130 123 -21 -4-12 23 241 249 15 -2 0 23 41 30 -41 -1 -3 24 347 356  
 13  
 0 0 21 305 315 11 -1 -7 22 352 338 9 -2-12 23 92 35 -49 0 0 23 333 341 9 1 -3 24 44 58 -43  
 2 0 21 51 129 -51 1 -7 22 109 97 -30 0-12 23 0 13 -1 -5 1 23 128 131 -35 3 -3 24 234 207 -30  
 4 0 21 736 722 10 3 -7 22 88 37 -45 2-12 23 195 192 -29 -3 1 23 142 61 -37 -6 -2 24 639 660 14  
 -7 1 21 999 1000 16 5 -7 22 243 246 25 4-12 23 122 114 -99 -1 1 23 300 341 22 -4 -2 24 101 119 -  
 29  
 -5 1 21 215 258 17 7 -7 22 313 341 29 -11-11 23 0 37 -1 -4 2 23 698 696 15 -2 -2 24 93 40 -44  
 -3 1 21 312 318 10 -10 -6 22 184 157 -33 -9-11 23 37 136 -36 -5-15 24 75 20 -75 0 -2 24 553 559  
 10  
 -1 1 21 267 285 14 -8 -6 22 190 202 17 -7-11 23 488 480 11 -3-15 24 92 59 -92 2 -2 24 568 573 17  
 1 1 21 109 22 -33 -6 -6 22 568 564 8 -5-11 23 293 301 12 -6-14 24 628 639 18 -5 -1 24 113 83 -31  
 3 1 21 823 838 10 -4 -6 22 0 44 -1 -3-11 23 90 114 -43 -4-14 24 272 259 18 -3 -1 24 150 95 -34  
 -6 2 21 321 344 21 -2 -6 22 243 241 9 -1-11 23 100 159 -40 -2-14 24 320 308 15 -1 -1 24 156 202 -  
 23  
 -4 2 21 245 247 15 0 -6 22 49 54 -49 1-11 23 228 224 21 0-14 24 114 131 -89 1 -1 24 326 335 14  
 -2 2 21 429 449 14 2 -6 22 1008 992 11 3-11 23 144 155 -50 -9-13 24 380 418 23 -4 0 24 357 381  
 11  
 0 2 21 280 262 19 4 -6 22 99 37 -45 5-11 23 110 26 -109 -7-13 24 195 224 -39 -2 0 24 414 453 17  
 2 2 21 407 410 21 -9 -5 22 761 750 14 -10-10 23 416 402 18 -5-13 24 149 160 -30 -3 1 24 913 904  
 14  
 -5 3 21 113 109 -49 -7 -5 22 1356 1338 13 -8-10 23 138 96 -28 -3-13 24 559 519 13 -6-14 25 443 451  
 20  
 -3 3 21 83 38 -82 -5 -5 22 710 702 11 -6-10 23 310 300 11 -1-13 24 127 114 -36 -4-14 25 78 63 -78  
 -1 3 21 199 197 -28 -3 -5 22 709 697 7 -4-10 23 207 209 14 1-13 24 714 711 16 -2-14 25 66 78 -65  
 1 3 21 98 69 -49 -1 -5 22 1947 1904 15 -2-10 23 234 219 14 -10-12 24 282 290 -34 -7-13 25 329 327  
 18  
 -4 4 21 121 30 -47 1 -5 22 1274 1248 9 0-10 23 904 892 10 -8-12 24 35 118 -34 -5-13 25 167 182 -  
 29  
 -2 4 21 99 135 -98 3 -5 22 910 929 8 2-10 23 420 421 17 -6-12 24 445 453 11 -3-13 25 292 314 17  
 -4-16 22 127 177 -86 5 -5 22 463 457 17 4-10 23 509 520 17 -4-12 24 143 145 -27 -1-13 25 198 190  
 -36  
 -7-15 22 262 281 -44 -10 -4 22 1174 1158 18 -9 -9 23 440 432 15 -2-12 24 183 220 -21 1-13 25 0 25  
 -1  
 -5-15 22 279 318 -34 -8 -4 22 1099 1104 17 -7 -9 23 108 51 -25 0-12 24 44 45 -44 -8-12 25 347 346  
 22  
 -3-15 22 106 118 -106 -6 -4 22 1104 1086 11 -5 -9 23 52 54 -52 2-12 24 142 97 -61 -6-12 25 322 312  
 15  
 -1-15 22 79 87 -78 -4 -4 22 1264 1257 9 -3 -9 23 279 278 11 -11-11 24 350 354 26 -4-12 25 442 439  
 12  
 1-15 22 156 83 -56 -2 -4 22 1147 1114 8 -1 -9 23 44 21 -44 -9-11 24 332 340 23 -2-12 25 197 225 -  
 22  
 -8-14 22 525 516 20 0 -4 22 1261 1257 9 1 -9 23 79 63 -78 -7-11 24 721 697 17 0-12 25 361 368  
 15  
 -6-14 22 854 857 17 2 -4 22 527 534 6 3 -9 23 360 334 20 -5-11 24 61 44 -60 2-12 25 130 115 -53  
 -4-14 22 866 846 16 4 -4 22 560 574 9 5 -9 23 237 200 -37 -3-11 24 92 67 -51 -9-11 25 410 435 18  
 -2-14 22 536 532 11 -9 -3 22 0 19 -1 -8 -8 23 479 478 10 -1-11 24 53 68 -52 -7-11 25 438 407 14  
 0-14 22 744 744 14 -7 -3 22 0 18 -1 -6 -8 23 487 493 7 1-11 24 130 108 -36 -5-11 25 316 331 14  
 2-14 22 887 885 15 -5 -3 22 12 41 -12 -4 -8 23 566 561 7 3-11 24 252 200 -29 -3-11 25 270 291 17  
 -9-13 22 220 249 -35 -3 -3 22 148 128 13 -2 -8 23 479 478 7 -10-10 24 122 34 -79 -1-11 25 136 61 -  
 33  
 -7-13 22 742 744 15 -1 -3 22 707 710 9 0 -8 23 174 180 -20 -8-10 24 301 273 22 1-11 25 256 275

18

-5-13 22 289 306 15 1-3 22 416 423 7 2-8 23 69 42 -69 -6-10 24 366 389 10 3-11 25 295 288 -31  
 -3-13 22 314 316 15 3-3 22 37 16 -36 4-8 23 161 11 -48 -4-10 24 91 101 -39 -10-10 25 258 225 -  
 33  
 -1-13 22 384 403 13 5-3 22 21 14 -21 6-8 23 123 38 -69 -2-10 24 499 502 8 -8-10 25 104 141 -83  
 1-13 22 149 117 -42 -8-2 22 0 11 -1 -9-7 23 365 365 12 0-10 24 139 120 -35 -6-10 25 145 137 -28

Table 4a. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in air

Page 15

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
-4-10 25 939 935 8	-4-2 25 338 327 14	3-7 26 494 494 13	1-9 27 279 267 17	1-9 28 148 116 -37
-2-10 25 210 203 15	-2-2 25 416 405 21	-8-6 26 328 341 18	-8-8 27 250 289 -26	-8-8 28 307 309
23				
0-10 25 92 33 -53	0-2 25 115 163 -71	-6-6 26 683 711 13	-6-8 27 105 68 -41	-6-8 28 197 201 -23
2-10 25 252 254 26	2-2 25 202 186 -33	-4-6 26 76 26 -49	-4-8 27 230 237 23	-4-8 28 98 98 -57
4-10 25 137 95 -55	-3-1 25 98 118 -86	-2-6 26 192 212 17	-2-8 27 249 261 21	-2-8 28 237 201 -48
-9-9 25 193 172 -35	-1-1 25 210 237 -32	0-6 26 108 6 -45	0-8 27 245 237 20	0-8 28 277 291 18
-7-9 25 932 939 10	-4 0 25 115 125 -83	2-6 26 106 67 -49	2-8 27 426 436 19	-7-7 28 325 298 22
-5-9 25 321 317 10	-2 0 25 224 228 -30	4-6 26 0 93 -1	-7-7 27 167 78 -41	-5-7 28 807 841 10
-3-9 25 90 31 -40	-7-13 26 138 113 -51	-7-5 26 453 448 15	-5-7 27 162 91 -27	-3-7 28 1156 1135
12				
-1-9 25 555 560 9	-5-13 26 91 68 -91	-5-5 26 79 71 -79	-3-7 27 157 168 -25	-1-7 28 840 844 11
1-9 25 268 281 18	-3-13 26 212 265 -25	-3-5 26 98 86 -37	-1-7 27 370 383 16	1-7 28 501 486 33
3-9 25 855 851 16	-1-13 26 417 405 19	-1-5 26 74 16 -47	1-7 27 113 43 -50	-6-6 28 888 897 14
-8-8 25 887 890 14	-8-12 26 540 530 19	1-5 26 136 51 -55	3-7 27 354 331 24	-4-6 28 726 744 10
-6-8 25 801 790 8	-6-12 26 736 739 11	3-5 26 570 563 17	-6-6 27 385 415 18	-2-6 28 447 450 19
-4-8 25 1070 1044 10	-4-12 26 1199 1184 13	-6-4 26 0 38 -1	-4-6 27 601 606 16	0-6 28 579 571
16				
-2-8 25 99 56 -42	-2-12 26 794 780 11	-4-4 26 525 523 8	-2-6 27 58 117 -58	-7-5 28 109 109-108
0-8 25 1090 1047 13	0-12 26 498 488 12	-2-4 26 117 27 -39	0-6 27 112 66 -45	-5-5 28 316 347
21				
2-8 25 897 913 10	-9-11 26 136 57 -68	0-4 26 486 506 17	2-6 27 218 250 -36	-3-5 28 231 243 18
4-8 25 555 553 16	-7-11 26 442 439 14	2-4 26 464 468 18	-7-5 27 253 250 25	-1-5 28 336 313 25
-7-7 25 246 273 16	-5-11 26 62 86 -61	-5-3 26 1349 1332 19	-5-5 27 133 175 -54	1-5 28 237 285 -
35				
-5-7 25 193 205 16	-3-11 26 29 63 -28	-3-3 26 1075 1083 16	-3-5 27 221 204 21	-6-4 28 291 293
22				
-3-7 25 494 504 8	-1-11 26 164 125 -28	-1-3 26 769 766 13	-1-5 27 74 9 -73	-4-4 28 254 246 -27
-1-7 25 153 161 -24	1-11 26 115 94 -47	1-3 26 1179 1153 17	1-5 27 154 126 -63	-2-4 28 237 250 -
29				
1-7 25 376 371 15	-10-10 26 308 297 29	-4-2 26 337 332 22	3-5 27 0 66 -1	0-4 28 412 410 20
3-7 25 282 296 17	-8-10 26 41 16 -40	-2-2 26 702 718 13	-6-4 27 118 55 -58	-5-3 28 152 136 -45
-8-6 25 619 604 14	-6-10 26 450 458 18	0-2 26 290 275 27	-4-4 27 737 735 13	-3-3 28 72 16 -72
-6-6 25 169 64 -31	-4-10 26 56 86 -56	-3-1 26 500 534 16	-2-4 27 158 108 -45	-1-3 28 184 156 -41
-4-6 25 313 330 9	-2-10 26 286 269 15	-1-1 26 304 312 23	0-4 27 145 180 -50	-4-2 28 259 280 -
27				
-2-6 25 343 353 9	0-10 26 95 6 -54	-4 0 26 97 48 -97	2-4 27 108 153-108	-2-2 28 531 555 17
0-6 25 508 516 20	2-10 26 94 9 -94	-2 0 26 133 28 -49	-5-3 27 278 241 25	-3-1 28 349 355 25
2-6 25 563 578 24	-9-9 26 372 383 19	-3-13 27 682 705 16	-3-3 27 82 55 -81	-5-9 29 269 226 21
4-6 25 138 150 -68	-7-9 26 269 272 27	-6-12 27 759 757 10	-1-3 27 472 472 18	-3-9 29 0 52 -1
-7-5 25 438 443 11	-5-9 26 173 182 -24	-4-12 27 760 766 10	1-3 27 109 138-108	-6-8 29 215 199 -
40				

-5 -5 25 146 141 -19 -3 -9 26 259 254 14 -2 -12 27 684 697 13 -4 -2 27 467 483 16 -4 -8 29 478 476  
12  
-3 -5 25 184 197 14 -1 -9 26 663 663 10 0 -12 27 626 601 15 -2 -2 27 206 234 -33 -2 -8 29 116 152 -  
55  
-1 -5 25 74 31 -37 1 -9 26 264 274 19 -7 -11 27 363 389 17 0 -2 27 607 621 17 -5 -7 29 120 111 -42  
1 -5 25 145 145 -21 3 -9 26 0 8 -1 -5 -11 27 630 641 21 -3 -1 27 0 42 -1 -3 -7 29 639 656 14  
3 -5 25 286 308 25 -8 -8 26 285 323 22 -3 -11 27 731 730 10 -1 -1 27 542 530 17 -1 -7 29 78 66 -78  
-6 -4 25 92 108 -50 -6 -8 26 852 833 10 -1 -11 27 517 517 11 -5 -11 28 511 527 28 -6 -6 29 570 581  
17  
-4 -4 25 196 209 13 -4 -8 26 586 575 8 -8 -10 27 209 225 -37 -3 -11 28 297 303 -40 -4 -6 29 602 617  
10  
-2 -4 25 175 163 -19 -2 -8 26 727 729 13 -6 -10 27 139 133 -35 -1 -11 28 489 467 18 -2 -6 29 629 641  
22  
0 -4 25 689 685 16 0 -8 26 249 264 18 -4 -10 27 167 190 -26 -6 -10 28 322 335 15 -5 -5 29 133 82 -  
64  
2 -4 25 235 278 -30 2 -8 26 210 206 -22 -2 -10 27 111 16 -52 -4 -10 28 319 313 17 -3 -5 29 114 63 -  
43  
4 -4 25 232 238 24 4 -8 26 693 708 16 0 -10 27 443 434 20 -2 -10 28 170 163 -35 -1 -5 29 78 42 -78  
-5 -3 25 76 23 -76 -7 -7 26 425 420 17 -9 -9 27 0 109 -1 0 -10 28 250 271 23 -6 -4 29 223 163 -38  
-3 -3 25 379 381 9 -5 -7 26 125 112 -25 -7 -9 27 282 325 24 -7 -9 28 341 348 22 -4 -4 29 447 446 18  
-1 -3 25 79 44 -41 -3 -7 26 606 615 8 -5 -9 27 70 40 -69 -5 -9 28 147 90 -32 -2 -4 29 153 148 -56  
1 -3 25 110 91 -85 -1 -7 26 228 235 19 -3 -9 27 51 30 -51 -3 -9 28 132 147 -40 -5 -3 29 91 119 -91  
3 -3 25 98 16 -98 1 -7 26 698 686 13 -1 -9 27 186 182 -24 -1 -9 28 219 232 22

Table 4b. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in DAC at 12.4 kbar

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				
1	1	0	440	441 3	3	1	1	927	962 12	5	1	2	69	107 -56	0	2	3	244	276 7	6	0	4	156	157 -42
3	1	0	1301	1405 8	0	2	1	383	429 4	0	2	2	224	274 4	2	2	3	302	303 4	1	1	4	3340	3091 16
0	2	0	98	69 3	2	2	1	1316	1313 9	2	2	2	459	463 3	4	2	3	50	56 -49	3	1	4	1835	1738 16
2	2	0	947	934 9	4	2	1	547	525 35	4	2	2	405	335 11	6	2	3	576	549 12	5	1	4	1144	1140 8
-1	3	0	89	113 11	-1	3	1	304	317 9	6	2	2	449	457 7	1	3	3	161	193 7	7	1	4	850	816 14
1	3	0	81	81 6	1	3	1	16	14 -16	1	3	2	423	433 5	3	3	3	560	445 20	0	2	4	2096	2175 23
3	3	0	648	647 7	3	3	1	332	305 11	3	3	2	414	371 10	5	3	3	173	152 13	2	2	4	2826	2592 14
5	3	0	469	450 12	5	3	1	77	62 16	5	3	2	239	235 9	7	3	3	346	407 15	4	2	4	2351	2279 19
0	4	0	174	199 4	0	4	1	80	121 13	0	4	2	27	27 -26	2	4	3	24	31 -23	6	2	4	498	518 9
2	4	0	98	110 8	2	4	1	293	331 14	4	4	2	970	941 9	4	4	3	181	168 11	3	3	4	676	688 8
4	4	0	255	238 11	6	4	1	340	324 31	1	5	2	2036	2055 13	6	4	3	244	188 26	5	3	4	213	173 19
6	4	0	38	52 -37	-1	5	1	1044	932 124	3	5	2	1599	1581 8	1	5	3	380	410 9	0	4	4	350	318 18
-1	5	0	394	370 11	1	5	1	758	643 17	5	5	2	249	216 23	3	5	3	638	677 7	2	4	4	217	199 6
1	5	0	261	230 7	3	5	1	313	311 5	7	5	2	1533	1488 11	5	5	3	160	147 -37	4	4	4	343	240 31
3	5	0	31	23 -30	5	5	1	193	120 30	0	6	2	2986	2872 34	0	6	3	317	254 34	6	4	4	96	171 -96
5	5	0	161	144 14	7	5	1	1113	1066 10	2	6	2	218	152 27	2	6	3	55	78 -40	3	5	4	479	496 22
7	5	0	324	363 29	0	6	1	224	228 10	4	6	2	639	634 16	4	6	3	425	435 51	5	5	4	142	150 27
0	6	0	24	15 -24	2	6	1	211	210 19	6	6	2	598	476 13	8	6	3	51	90 -50	4	6	4	216	226 14
2	6	0	20	26 -19	4	6	1	245	244 15	8	6	2	495	454 14	1	7	3	30	56 -30	8	6	4	50	50 -49
4	6	0	374	330 25	-1	7	1	298	356 21	1	7	2	484	514 9	3	7	3	130	143 25	1	7	4	318	334 70
6	6	0	78	81 -77	1	7	1	59	104 -58	5	7	2	862	798 16	5	7	3	581	430 18	5	7	4	308	215 32
-1	7	0	158	178 35	3	7	1	373	305 24	7	7	2	339	290 30	7	7	3	182	182 35	2	8	4	36	52 -36
1	7	0	149	130 29	5	7	1	251	237 34	9	7	2	356	342 58	9	7	3	252	287 -176	4	8	4	196	242 -44

3 7 0 46 46 -46	7 7 1 393 347 24	0 8 2 184 140 -116	2 8 3 449 503 13	8 8 4 61 52 -61
7 7 0 457 391 26	9 7 1 218 201 -217	2 8 2 112 149 -79	6 8 3 427 416 18	1 9 4 123 134 -64
0 8 0 505 498 9	0 8 1 198 369 -48	4 8 2 329 245 26	8 8 3 406 374 40	3 9 4 55 216 -54
2 8 0 271 215 18	2 8 1 287 305 15	8 8 2 29 67 -28	1 9 3 35 75 -34	7 9 4 282 270 24
4 8 0 346 260 24	4 8 1 412 403 49	3 9 2 123 93 -37	7 9 3 56 75 -55	4 10 4 539 549 18
6 8 0 632 620 28	6 8 1 471 428 22	5 9 2 405 338 22	2 10 3 34 112 -34	-3 -13 5 52 84 -51
-1 9 0 1701 1476 156	8 8 1 114 125 -113	2 10 2 109 212 -63	4 10 3 128 236 -100	-1 -13 5 168 274
33				
1 9 0 362 398 18	1 9 1 454 370 17	4 10 2 112 138 -77	6 10 3 177 242 -52	-4 -12 5 34 24 -34
3 9 0 1281 1173 9	3 9 1 305 316 18	1 11 2 107 69 -107	3 11 3 194 274 -53	-2 -12 5 76 70 -75
5 9 0 694 676 17	5 9 1 149 131 -46	5 11 2 92 109 -91	1 -13 4 198 145 -49	0 -12 5 76 172 -75
7 9 0 838 744 22	7 9 1 328 269 26	-3 -13 3 198 280 -45	-4 -12 4 14 34 -13	2 -12 5 291 228 18
0 10 0 441 512 11	4 10 1 38 57 -37	-1 -13 3 37 186 -37	-2 -12 4 35 64 -35	-3 -11 5 598 544 14
2 10 0 150 142 -49	1 11 1 169 287 -38	-4 -12 3 125 109 -39	0 -12 4 267 305 24	-1 -11 5 357 406 17
6 10 0 829 795 12	5 11 1 99 113 -99	-2 -12 3 669 647 11	-7 -11 4 53 128 -52	1 -11 5 132 156 26
1 11 0 729 767 33	2 12 1 38 40 -37	0 -12 3 63 218 -62	-5 -11 4 33 123 -33	-8 -10 5 209 181 32
3 11 0 19 33 -18	-3 -13 2 688 707 83	-7 -11 3 167 209 -45	-3 -11 4 441 403 13	-4 -10 5 34 74 -34
5 11 0 602 580 21	-1 -13 2 244 356 32	-3 -11 3 245 292 22	-1 -11 4 131 113 -29	-2 -10 5 259 233 34
-4 -12 1 125 236 -85	-4 -12 2 169 217 23	1 -11 3 104 143 -103	1 -11 4 34 58 -33	0 -10 5 126 95 -34
-2 -12 1 112 102 -112	-2 -12 2 202 245 22	-8 -10 3 98 117 -98	-8 -10 4 50 80 -50	2 -10 5 69 124 -69
0 -12 1 225 181 30	0 -12 2 110 175 -83	-6 -10 3 591 501 40	-6 -10 4 326 345 -76	-9 -9 5 208 210 38
-3 -11 1 118 162 -34	-7 -11 2 59 147 -58	-4 -10 3 345 293 16	-4 -10 4 448 376 19	1 -9 5 67 88 -67
-1 -11 1 34 126 -33	-5 -11 2 293 249 28	-2 -10 3 43 99 -42	-2 -10 4 182 187 -87	3 -9 5 169 231 17
-6 -10 1 361 275 23	-6 -10 2 405 320 58	0 -10 3 269 320 30	0 -10 4 420 425 16	-2 -8 5 662 712 18
0 -10 1 36 127 -35	0 -10 2 35 48 -35	-9 -9 3 204 244 33	-9 -9 4 308 286 48	0 -8 5 724 617 12
-9 -9 1 528 555 60	2 -10 2 331 286 23	-3 -9 3 173 186 24	-5 -9 4 259 207 28	-3 -7 5 419 399 5
-7 -9 1 635 637 19	-9 -9 2 230 258 45	-1 -9 3 123 101 20	-3 -9 4 666 640 9	-1 -7 5 508 517 7
-5 -9 1 502 491 35	-7 -9 2 80 171 -80	1 -9 3 296 312 14	-1 -9 4 530 525 9	1 -7 5 1046 1025 9
-3 -9 1 626 583 12	-5 -9 2 229 245 -61	3 -9 3 640 623 43	1 -9 4 349 387 12	3 -7 5 57 115 -56
-1 -9 1 224 207 33	-1 -9 2 222 248 18	-4 -8 3 93 158 -93	3 -9 4 536 556 54	-6 -6 5 469 391 29
1 -9 1 1016 1051 66	1 -9 2 543 484 70	-2 -8 3 244 223 21	-10 -8 4 418 340 29	-4 -6 5 531 536 10
-8 -8 1 95 134 -95	-4 -8 2 142 150 21	0 -8 3 184 163 11	-4 -8 4 799 821 24	-2 -6 5 916 889 24
-6 -8 1 399 340 27	-2 -8 2 288 247 15	-5 -7 3 562 638 16	-2 -8 4 2170 2047 28	0 -6 5 461 436 4
-4 -8 1 149 126 23	0 -8 2 188 207 9	-3 -7 3 733 709 5	0 -8 4 201 186 16	2 -6 5 237 252 7
-2 -8 1 578 568 18	-9 -7 2 64 87 -64	-1 -7 3 235 195 5	2 -8 4 1195 1143 11	4 -6 5 104 104 19
0 -8 1 203 224 12	-5 -7 2 461 471 12	1 -7 3 263 259 16	-5 -7 4 1428 1518 11	-5 -5 5 207 202 15
2 -8 1 137 138 -46	-3 -7 2 489 536 72	3 -7 3 160 143 16	-3 -7 4 1311 1234 5	-1 -5 5 104 122 7
-9 -7 1 190 259 -175	3 -7 2 29 52 -28	-4 -6 3 287 217 17	-1 -7 4 1008 1002 4	3 -5 5 445 412 7
-5 -7 1 197 161 38	-4 -6 2 514 516 9	-2 -6 3 36 33 -36	1 -7 4 1077 1074 11	5 -5 5 163 154 22
-3 -7 1 20 5 -20	-2 -6 2 104 110 9	2 -6 3 212 203 8	3 -7 4 530 549 13	-2 -4 5 296 283 5
-1 -7 1 244 231 9	0 -6 2 31 33 -31	-5 -5 3 393 355 8	-4 -6 4 266 261 14	0 -4 5 202 208 4
1 -7 1 31 61 -30	2 -6 2 930 954 6	-3 -5 3 120 160 -53	-2 -6 4 36 51 -21	2 -4 5 397 353 9
-6 -6 1 445 344 24	-5 -5 2 763 566 96	-1 -5 3 295 193 6	0 -6 4 259 233 5	4 -4 5 1218 1216 6
-4 -6 1 549 558 17	-3 -5 2 640 580 18	1 -5 3 264 232 10	2 -6 4 26 54 -26	-5 -3 5 389 463 6
-2 -6 1 269 271 9	-1 -5 2 1204 1205 9	3 -5 3 36 78 -36	-3 -5 4 243 246 21	-3 -3 5 362 375 6
0 -6 1 448 446 4	1 -5 2 1133 1137 8	-2 -4 3 276 288 4	-1 -5 4 162 146 10	-1 -3 5 249 230 10
2 -6 1 489 528 16	3 -5 2 201 191 7	0 -4 3 364 347 4	1 -5 4 316 298 8	1 -3 5 287 305 4
-7 -5 1 43 62 -42	-4 -4 2 1076 1118 10	2 -4 3 432 377 12	3 -5 4 182 188 7	-2 -2 5 691 702 5
-3 -5 1 192 174 12	-2 -4 2 809 881 5	4 -4 3 415 430 5	0 -4 4 161 159 4	0 -2 5 69 99 6
-1 -5 1 15 97 -14	0 -4 2 2329 2240 12	-3 -3 3 1003 954 6	2 -4 4 219 154 15	4 -2 5 198 198 8
1 -5 1 270 226 8	2 -4 2 3019 2830 20	-1 -3 3 864 881 4	4 -4 4 429 455 6	6 -2 5 390 407 23
-4 -4 1 246 228 -59	-5 -3 2 991 989 6	1 -3 3 1835 1799 8	-1 -3 4 257 247 6	-3 -1 5 470 478 10
-2 -4 1 48 48 8	-3 -3 2 1803 1811 22	3 -3 3 740 750 8	1 -3 4 630 652 3	-1 -1 5 267 226 6
0 -4 1 213 205 5	-1 -3 2 519 531 4	-4 -2 3 1077 1031 16	3 -3 4 333 317 5	1 -1 5 283 304 5

2-4 1 22 36-21	1-3 2 2020 2011 11	-2-2 3 316 330 15	5-3 4 221 226 12	3-1 5 103 122-102
-5-3 1 390 428 4	3-3 2 878 845 15	0-2 3 372 386 5	-4-2 4 31 106-31	5-1 5 92 75 14
-3-3 1 636 659 9	-4-2 2 44 130 -43	2-2 3 882 868 5	-2-2 4 405 421 3	-2 0 5 320 308 24
-1-3 1 262 272 4	0-2 2 192 180 3	3-1 3 242 223 3	0-2 4 146 141 6	0 0 5 172 153 5
1-3 1 493 495 4	2-2 2 709 692 5	5-1 3 21 25-20	4-2 4 324 297 23	2 0 5 97 99 5
-4-2 1 300 294 18	1-1 2 86 77 2	0 0 3 356 345 2	-3-1 4 339 352 6	4 0 5 158 177 11
-2-2 1 495 544 4	3-1 2 520 526 4	2 0 3 854 853 4	1-1 4 188 185 6	6 0 5 94 91 -93
2-2 1 572 571 6	2 0 2 63 74 4	4 0 3 464 521 9	3-1 4 165 142 3	-1 1 5 137 152 -37
1-1 1 135 125 1	4 0 2 341 349 43	1 1 3 607 643 7	5-1 4 92 133 11	1 1 5 370 402 7
2 0 1 94 113 3	1 1 2 157 154 6	3 1 3 135 118 5	2 0 4 566 572 4	3 1 5 648 621 12
1 1 1 173 161 4	3 1 2 360 363 4	5 1 3 492 498 6	4 0 4 910 829 20	5 1 5 255 257 10

Table 4b. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in DAC at 12.4 kbar

Page 2

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
7 1 5 164 122 32	-1 1 6 28 42 -27	7-1 7 746 759 54	6 0 8 326 274 14	7-1 9 482 410 51
0 2 5 379 352 12	1 1 6 399 402 17	-2 0 7 296 229 21	8 0 8 418 363 53	9-1 9 328 338 35
2 2 5 246 204 11	3 1 6 405 392 7	0 0 7 409 434 6	1 1 8 74 84 15	0 0 9 38 185 -37
4 2 5 531 499 5	0 2 6 20 167 -20	4 0 7 1233 1210 11	3 1 8 188 170 17	2 0 9 85 142 13
1 3 5 984 892 34	2 2 6 19 9 -18	6 0 7 357 326 28	5 1 8 354 304 19	4 0 9 258 278 12
3 3 5 59 71 -15	4 2 6 352 337 7	1 1 7 381 340 21	7 1 8 325 290 -76	8 0 9 218 169 -65
5 3 5 166 151 18	6 2 6 241 215 32	3 1 7 239 270 11	9 1 8 172 214 -62	1 1 9 207 179 8
2 4 5 860 878 8	8 2 6 251 185 40	5 1 7 369 314 12	0 2 8 525 491 9	3 1 9 140 173 27
4 4 5 145 148 27	1 3 6 267 252 8	4 2 7 390 375 7	2 2 8 581 461 26	5 1 9 151 168 20
6 4 5 689 691 14	3 3 6 144 154 16	6 2 7 330 323 19	4 2 8 589 607 31	7 1 9 162 179 20
5 5 5 399 421 13	5 3 6 317 237 15	1 3 7 65 80 -19	6 2 8 503 442 41	9 1 9 189 199 -46
4 6 5 352 364 19	2 4 6 172 189 -49	3 3 7 276 362 14	8 2 8 642 592 20	4 2 9 261 294 21
6 6 5 218 218 -59	6 4 6 621 592 13	5 3 7 487 536 19	3 3 8 596 601 21	6 2 9 119 60 -88
8 6 5 105 135 -83	1 5 6 122 132 17	7 3 7 544 436 22	5 3 8 1932 1883 8	8 2 9 207 161 45
1 7 5 653 649 13	5 5 6 455 500 12	9 3 7 481 450 26	7 3 8 314 306 18	3 3 9 393 326 -93
3 7 5 242 283 24	7 5 6 120 160 -58	2 4 7 111 181 -111	9 3 8 614 439 27	7 3 9 178 194 29
5 7 5 301 371 27	9 5 6 201 188 40	4 4 7 121 144 27	0 4 8 400 342 16	9 3 9 256 250 33
7 7 5 490 398 102	2 6 6 449 424 30	6 4 7 269 232 37	2 4 8 1007 1071 12	2 4 9 527 516 32
2 8 5 37 56 -36	4 6 6 1006 989 7	3 5 7 28 112 -27	4 4 8 731 805 22	4 4 9 163 195 27
4 8 5 33 40 -32	6 6 6 236 196 22	5 5 7 176 177 -70	6 4 8 279 319 19	6 4 9 104 147 -64
6 8 5 130 127 -80	8 6 6 402 483 18	7 5 7 41 93 -41	8 4 8 336 352 25	8 4 9 130 131 -122
3 9 5 34 175 -34	3 7 6 786 859 12	9 5 7 285 383 31	3 5 8 631 666 17	3 5 9 692 554 13
5 9 5 156 211 -74	5 7 6 681 690 19	4 6 7 176 310 -42	5 5 8 194 185 -143	5 5 9 393 396 17
7 9 5 240 231 52	7 7 6 455 534 19	6 6 7 211 273 19	7 5 8 72 131 -72	7 5 9 548 583 36
4 10 5 80 256 -79	4 8 6 630 633 78	3 7 7 358 537 20	4 6 8 69 213 -69	4 6 9 501 600 -142
-3-13 6 639 649 11	6 8 6 572 605 14	7 7 7 41 77 -40	8 6 8 36 74 -36	6 6 9 172 186 28
-1-13 6 38 56 -37	5 9 6 36 97 -35	4 8 7 98 217 -98	5 7 8 42 46 -42	5 7 9 50 120 -49
1-13 6 478 466 73	-2-14 7 124 127 -123	6 8 7 113 116 -112	7 7 8 53 229 -53	-3-13 10 38 41 -37
-2-12 6 573 560 11	-3-13 7 238 212 26	5 9 7 155 201 -155	6 8 8 148 116 -147	-1-13 10 120 158 -31
0-12 6 512 483 28	-1-13 7 177 208 -73	-3-13 8 191 185 -47	-1-13 9 132 101 -48	-8-12 10 56 243 -56
2-12 6 431 406 36	1-13 7 96 96 -96	-1-13 8 122 101 -91	1-13 9 143 144 27	-2-12 10 228 197 37
-7-11 6 181 228 -52	-4-12 7 321 296 -103	1-13 8 107 128 -36	0-12 9 230 237 22	0-12 10 95 83 -39
-5-11 6 869 723 56	-2-12 7 194 200 29	-2-12 8 72 40 -72	2-12 9 269 269 15	2-12 10 314 317 11
-3-11 6 849 812 24	0-12 7 207 266 17	0-12 8 107 127 -33	-7-11 9 94 103 -94	-7-11 10 52 182 -52



-1-11 6 932 927 18 2-12 7 329 331 19 2-12 8 133 139 -41 -1-11 9 161 158 -48 -3-11 10 454 403  
 11  
 1-11 6 610 570 11 -7-11 7 408 422 41 -7-11 8 53 127 -52 1-11 9 323 300 15 -1-11 10 85 108 -84  
 3-11 6 447 410 34 -3-11 7 33 75 -33 -3-11 8 138 159 -52 3-11 9 298 270 25 3-11 10 308 272 14  
 -8-10 6 361 370 19 -1-11 7 1255 1267 16 -1-11 8 293 294 19 5-11 9 298 250 38 5-11 10 309 352  
 45  
 -2-10 6 208 220 23 1-11 7 220 177 19 1-11 8 299 252 12 -2-10 9 122 135 -34 -8-10 10 653 600  
 13  
 2-10 6 23 41 -23 3-11 7 482 486 20 3-11 8 317 312 24 0-10 9 69 71 -69 -2-10 10 659 533 19  
 4-10 6 217 186 45 -8-10 7 426 379 17 -8-10 8 223 201 30 2-10 9 223 188 14 0-10 10 1209 1123  
 28  
 3-9 6 400 446 13 -4-10 7 337 275 38 -2-10 8 31 77 -31 4-10 9 87 94 -63 2-10 10 883 811 7  
 -4-8 6 45 126 -45 -2-10 7 285 265 30 0-10 8 345 285 27 -9-9 9 269 251 41 4-10 10 613 574 12  
 -2-8 6 234 222 16 0-10 7 323 296 9 2-10 8 34 52 -33 -3-9 9 110 128 -24 -9-9 10 511 423 32  
 0-8 6 424 341 19 2-10 7 596 542 19 -9-9 8 343 297 22 -1-9 9 561 556 14 -1-9 10 767 736 13  
 2-8 6 206 178 39 4-10 7 156 174 -61 -3-9 8 235 237 11 1-9 9 456 390 17 1-9 10 886 865 22  
 4-8 6 71 142 -71 -9-9 7 45 45 -44 -1-9 8 234 231 21 3-9 9 137 173 -33 3-9 10 411 332 18  
 -3-7 6 225 210 16 -1-9 7 49 56 -49 3-9 8 361 339 30 5-9 9 213 218 46 5-9 10 330 317 29  
 -1-7 6 336 326 6 3-9 7 391 368 14 5-9 8 36 41 -35 -10-8 9 210 184 47 -10-8 10 269 248 -84  
 1-7 6 289 263 8 -10-8 7 176 194 -40 -10-8 8 225 235 42 -2-8 9 106 125 -24 0-8 10 196 229 26  
 3-7 6 300 294 12 -2-8 7 623 642 12 -2-8 8 252 283 11 0-8 9 487 457 26 2-8 10 198 207 18  
 5-7 6 658 623 34 0-8 7 168 137 13 0-8 8 855 848 15 4-8 9 296 339 19 4-8 10 212 245 19  
 -6-6 6 142 138 -52 2-8 7 210 191 19 2-8 8 358 340 12 -3-7 9 95 118 -53 -3-7 10 382 356 16  
 -4-6 6 36 64 -35 4-8 7 575 549 8 4-8 8 319 307 24 -1-7 9 358 376 12 -1-7 10 179 222 13  
 -2-6 6 26 26 -25 -3-7 7 30 195 -29 -1-7 8 1188 1203 6 1-7 9 359 356 15 1-7 10 126 138 -48  
 0-6 6 393 386 4 -1-7 7 167 172 13 1-7 8 208 187 18 3-7 9 29 44 -28 3-7 10 314 267 14  
 2-6 6 157 142 8 1-7 7 252 218 15 3-7 8 309 247 13 5-7 9 36 37 -36 -4-6 10 356 352 21  
 4-6 6 404 354 23 3-7 7 322 267 24 5-7 8 531 522 11 -2-6 9 499 418 42 0-6 10 183 215 14  
 -5-5 6 218 205 14 5-7 7 399 393 12 -2-6 8 2362 2269 33 0-6 9 135 151 10 2-6 10 538 508 10  
 -1-5 6 258 217 10 -4-6 7 122 111 -43 0-6 8 2005 1935 7 2-6 9 905 847 4 6-6 10 440 322 14  
 1-5 6 566 504 23 -2-6 7 321 286 23 2-6 8 1390 1276 7 4-6 9 452 369 11 -7-5 10 150 204 -55  
 3-5 6 31 71 -30 0-6 7 371 381 3 4-6 8 358 331 16 6-6 9 907 883 37 -5-5 10 122 123 -40  
 5-5 6 195 185 15 2-6 7 186 156 16 6-6 8 1403 1370 29 -3-5 9 460 481 10 -3-5 10 237 204 15  
 -2-4 6 516 452 11 4-6 7 411 390 17 -3-5 8 1084 1050 11 -1-5 9 2122 2000 68 -1-5 10 386 440 20  
 2-4 6 407 322 22 -5-5 7 614 624 13 -1-5 8 1399 1112 63 1-5 9 25 26 -24 1-5 10 387 385 10  
 4-4 6 313 292 5 -3-5 7 764 757 10 1-5 8 491 525 6 3-5 9 494 521 12 3-5 10 236 185 11  
 -5-3 6 954 969 5 -1-5 7 406 428 28 3-5 8 382 337 12 5-5 9 680 614 16 5-5 10 316 274 16  
 -3-3 6 1191 1092 8 1-5 7 98 107 9 5-5 8 426 416 13 -6-4 9 689 652 8 -6-4 10 177 218 23  
 -1-3 6 506 524 8 5-5 7 217 205 26 7-5 8 654 598 15 -4-4 9 108 96 17 -4-4 10 184 137 15  
 1-3 6 619 659 3 -4-4 7 371 298 20 -4-4 8 300 258 8 0-4 9 368 388 7 -2-4 10 135 145 16  
 3-3 6 579 498 12 0-4 7 403 393 18 0-4 8 449 388 21 2-4 9 245 244 6 0-4 10 90 146 -89  
 5-3 6 2158 2042 34 4-4 7 423 366 13 2-4 8 228 223 5 4-4 9 894 856 8 2-4 10 225 225 10  
 -4-2 6 747 2420-261 -5-3 7 33 72 -32 4-4 8 309 267 7 6-4 9 86 132 -69 4-4 10 231 193 19  
 -2-2 6 4139 3739 35 -1-3 7 226 238 9 6-4 8 266 245 20 8-4 9 217 239 -59 6-4 10 424 338 42  
 0-2 6 386 434 4 1-3 7 524 510 6 -5-3 8 151 172 20 -5-3 9 177 179 22 -3-3 10 285 269 9  
 2-2 6 2275 2205 12 3-3 7 329 296 8 1-3 8 436 410 7 1-3 9 95 126 13 -1-3 10 244 252 10  
 4-2 6 1997 1922 20 5-3 7 57 87 -57 3-3 8 455 453 6 3-3 9 334 309 12 1-3 10 169 168 14  
 6-2 6 1377 1286 23 7-3 7 393 291 17 5-3 8 55 100 -54 5-3 9 205 158 33 3-3 10 325 340 20  
 -3-1 6 858 875 9 -2-2 7 335 336 7 2-2 8 457 470 24 7-3 9 246 284 -56 5-3 10 201 168 10  
 -1-1 6 507 473 12 0-2 7 237 236 11 4-2 8 333 280 7 -4-2 9 31 66 -31 7-3 10 191 222 37  
 1-1 6 229 226 6 2-2 7 1064 1035 7 6-2 8 183 171 30 2-2 9 324 343 7 -2-2 10 243 189 9  
 5-1 6 443 485 18 4-2 7 25 38 -24 8-2 8 415 412 24 4-2 9 740 748 3 0-2 10 428 405 7  
 -2 0 6 501 490 14 6-2 7 172 234 25 1-1 8 403 365 5 6-2 9 456 346 38 2-2 10 755 759 9  
 0 0 6 133 96 7 -1-1 7 267 275 5 5-1 8 255 224 12 8-2 9 589 518 17 4-2 10 190 155 21

2 0 6 388 380 12 1 -1 7 37 37 -36 7 -1 8 331 299 23 1 -1 9 72 116 -21 6 -2 10 543 504 10  
 4 0 6 243 220 9 3 -1 7 98 82 8 0 0 8 138 235 28 3 -1 9 240 207 9 8 -2 10 270 287 27  
 6 0 6 69 62 -69 5 -1 7 1489 1409 12 2 0 8 221 205 7 5 -1 9 172 155 -93 -3 -1 10 305 296 11

Table 4b. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in DAC at 12.4 kbar

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 -1 10 2974 2890 39	4 2 11 747 818 10	-6 -10 13 448 410 66	7 -3 14 61 111 -60	-6 -8 17 178 169
35				
1 -1 10 876 857 20	6 2 11 232 230 24	0 -10 13 258 225 49	4 -2 14 41 132 -41	4 -8 17 312 342 21
3 -1 10 814 840 15	8 2 11 155 154 -69	2 -10 13 441 432 11	6 -2 14 317 280 17	-7 -7 17 347 302 24
5 -1 10 1040 1022 7	5 3 11 288 342 24	4 -10 13 358 345 14	1 -1 14 215 283 35	3 -7 17 35 39 -35
7 -1 10 532 533 12	7 3 11 261 269 -77	-7 -9 13 241 250 38	7 -1 14 185 260 32	5 -7 17 39 94 -39
9 -1 10 805 753 12	4 4 11 111 145 -111	1 -9 13 318 284 27	0 0 14 453 380 54	-4 -6 17 44 365 -43
-2 0 10 2221 2158 90	6 4 11 139 226 -40	3 -9 13 168 156 25	4 0 14 524 569 30	-5 -5 17 435 368 37
0 0 10 1765 1710 5	5 5 11 108 150 -62	5 -9 13 206 230 16	6 0 14 425 457 12	5 -5 17 38 90 -37
2 0 10 1397 1097 103	7 5 11 495 446 65	-8 -8 13 54 52 -53	5 1 14 31 80 -30	4 -4 17 177 222 -117
4 0 10 261 219 34	6 6 11 37 184 -37	4 -8 13 34 27 -34	4 2 14 203 296 -75	6 -4 17 31 121 -30
6 0 10 1222 1242 12	-1 -13 12 181 214 20	6 -8 13 105 103 -59	6 2 14 198 174 35	-5 -3 17 311 226
58				
8 0 10 598 587 30	1 -13 12 401 445 16	-7 -7 13 179 435 -68	3 3 14 514 464 38	5 -3 17 154 120 -66
-1 1 10 263 213 14	-2 -12 12 36 159 -35	-3 -7 13 159 187 -158	-7 -11 15 245 272 33	0 -2 17 599 549
33				
3 1 10 62 113 -61	2 -12 12 141 115 21	1 -7 13 296 273 23	1 -11 15 104 140 -63	6 -2 17 221 264 -
194				
5 1 10 156 124 32	-7 -11 12 106 133 -106	3 -7 13 34 56 -34	-8 -10 15 361 357 22	2 0 17 323 365 -76
2 2 10 117 149 -39	-1 -11 12 168 148 33	5 -7 13 96 116 -39	-6 -10 15 51 64 -50	3 1 17 186 242 -91
4 2 10 246 266 19	1 -11 12 378 379 15	7 -7 13 135 209 -32	2 -10 15 291 263 41	-7 -9 18 216 290 30
6 2 10 236 217 22	3 -11 12 91 99 -45	2 -6 13 220 195 39	4 -10 15 123 111 -30	-5 -9 18 52 95 -51
-1 3 10 124 142 -124	-8 -10 12 321 336 20	4 -6 13 34 94 -33	-9 -9 15 140 125 -116	-8 -8 18 83 109 -
82				
3 3 10 85 180 -84	-6 -10 12 50 167 -50	6 -6 13 113 197 -26	-7 -9 15 483 460 32	-4 -8 18 263 322 40
4 4 10 36 117 -35	0 -10 12 33 86 -33	-3 -5 13 295 318 21	5 -9 15 98 129 -55	-9 -7 18 339 393 68
8 4 10 181 174 -56	2 -10 12 236 259 13	-1 -5 13 463 454 24	-8 -8 15 215 218 31	-7 -7 18 131 137 -
130				
5 5 10 82 98 -82	4 -10 12 74 75 -73	1 -5 13 770 790 8	2 -8 15 35 77 -34	-5 -7 18 237 225 40
7 5 10 379 413 28	6 -10 12 322 230 37	3 -5 13 438 409 28	4 -8 15 1044 993 14	-8 -6 18 676 481 39
4 6 10 173 139 -40	-9 -9 12 110 204 -109	5 -5 13 111 100 20	6 -8 15 55 142 -54	-6 -6 18 555 500 29
6 6 10 35 56 -34	-1 -9 12 205 246 39	7 -5 13 244 234 33	-9 -7 15 302 276 30	4 -6 18 469 451 75
5 7 10 475 465 53	1 -9 12 446 423 25	-6 -4 13 323 281 43	1 -7 15 707 684 14	-7 -5 18 315 282 -72
-1 -13 11 187 245 30	5 -9 12 405 381 22	-4 -4 13 1225 1099 9	3 -7 15 575 513 31	2 -2 18 326 318
51				
1 -13 11 137 149 25	-10 -8 12 48 116 -48	-2 -4 13 882 930 12	5 -7 15 178 195 23	1 -1 18 50 120 -49
-2 -12 11 35 155 -34	2 -8 12 258 228 18	0 -4 13 1368 1287 37	2 -6 15 453 412 18	0 0 18 107 95 -
106				
-7 -11 11 272 301 -65	4 -8 12 300 260 13	2 -4 13 395 372 9	4 -6 15 175 172 30	-7 -9 19 94 208 -93
-1 -11 11 44 148 -44	6 -8 12 319 317 17	4 -4 13 37 28 -37	6 -6 15 125 147 -124	-5 -9 19 335 356 59
1 -11 11 356 360 13	-9 -7 12 128 225 -128	6 -4 13 613 580 26	-1 -5 15 44 87 -44	-6 -8 19 183 199 -
54				
3 -11 11 345 356 13	-5 -7 12 278 293 45	-3 -3 13 298 242 23	3 -5 15 256 225 30	-4 -8 19 55 93 -55
-8 -10 11 659 659 29	1 -7 12 178 196 23	-1 -3 13 542 538 20	5 -5 15 69 108 -69	-5 -7 19 218 245 -67
-2 -10 11 522 534 15	3 -7 12 190 171 29	3 -3 13 1003 945 18	7 -5 15 38 82 -37	-3 -7 19 242 300 41

0-10 11 745 755 23	7-7 12 37 50 -37	5-3 13 491 496 37	0-4 15 143 300-100	-8-6 19 283 183 -67
4-10 11 79 78 -78	-6-6 12 201 346 31	7-3 13 121 176 -38	4-4 15 342 363 12	-6-6 19 693 639 17
6-10 11 622 542 27	-2-6 12 816 834 36	-2-2 13 742 607 34	6-4 15 449 411 15	-4-6 19 88 89 -88
-1-9 11 739 719 21	0-6 12 28 81 -28	0-2 13 257 246 20	-3-3 15 124 127-124	-7-5 19 274 191 51
1-9 11 565 565 22	6-6 12 362 339 17	2-2 13 398 437 12	-1-3 15 90 179 -89	-5-5 19 187 118 -97
3-9 11 1186 1126 7	-3-5 12 262 265 16	4-2 13 341 346 13	5-3 15 115 120 -34	0-4 19 55 123 -55
5-9 11 236 231 14	1-5 12 755 783 5	6-2 13 285 314 35	7-3 15 213 193 30	1-3 19 54 117 -53
-4-8 11 347 414 27	3-5 12 1284 1263 16	8-2 13 186 247 35	-2-2 15 426 467 15	-2-2 19 52 42 -51
0-8 11 27 33 -26	5-5 12 58 35 -58	-3-1 13 37 53 -37	6-2 15 149 147 -39	0-2 19 149 169-109
2-8 11 79 73 -79	7-5 12 440 492 13	-1-1 13 216 198 21	5-1 15 344 325 25	2-2 19 313 281 64
6-8 11 85 122 -50	-4-4 12 1225 1096 18	3-1 13 32 15 -32	7-1 15 37 123 -37	-1-1 19 159 180 -99
-5-7 11 324 315 23	2-4 12 1372 1391 24	5-1 13 322 347 24	4 0 15 118 103 -92	1-1 19 49 116 -48
-1-7 11 29 66 -29	4-4 12 787 754 20	7-1 13 190 165 29	1 1 15 39 369 -39	-5-9 20 167 188-166
3-7 11 378 307 19	6-4 12 427 431 19	2 0 13 353 383 30	5 1 15 223 316 24	-6-8 20 151 164-151
-4-6 11 205 179 21	8-4 12 696 725 29	4 0 13 85 201 -85	4 2 15 51 93 -50	-4-8 20 93 105 -93
0-6 11 273 310 7	-5-3 12 583 584 13	6 0 13 238 234 37	1 3 15 339 287 52	-3-7 20 114 173-113
2-6 11 645 602 23	1-3 12 272 176 51	5 1 13 284 296 22	3 3 15 331 292 53	-6-6 20 53 52 -53
4-6 11 411 392 10	3-3 12 123 147 -28	7 1 13 238 280 39	5 3 15 629 687 33	-2-6 20 51 58 -51
6-6 11 520 508 9	5-3 12 212 251 32	5 3 13 113 183 -56	2 4 15 447 367 41	-5-5 20 53 73 -52
8-6 11 456 465 28	7-3 12 181 236 22	4 4 13 176 194-109	-7-11 16 246 272 52	-1-5 20 264 237
45				
-5-5 11 336 264 18	-4-2 12 293 294 17	1 5 13 619 469 32	1-11 16 46 108 -45	-4-4 20 428 463 22
1-5 11 133 156 17	2-2 12 177 195 17	-1-13 14 407 374 38	-8-10 16 173 175 -56	-2-4 20 53 61 -52
3-5 11 237 203 23	4-2 12 157 167 -52	2-12 14 123 233-122	-6-10 16 116 108 -68	0-4 20 43 182 -
43				
5-5 11 34 40 -33	6-2 12 63 115 -63	-7-11 14 354 313 39	2-10 16 112 177 -44	-3-3 20 87 205 -87
7-5 11 76 77 -76	8-2 12 49 35 -49	-8-10 14 114 109-114	4-10 16 158 179 -55	-4-2 20 236 160 -83
-2-4 11 221 215 22	1-1 12 131 177 -48	-6-10 14 51 74 -50	-9-9 16 53 105 -52	-2-2 20 402 429 29
0-4 11 304 363 19	3-1 12 77 158 -76	0-10 14 35 16 -35	-7-9 16 207 214 31	0-2 20 237 222 -55
4-4 11 28 22 -27	7-1 12 34 20 -33	2-10 14 260 284 25	-8-8 16 187 224 38	-3-1 20 1064 867 27
6-4 11 274 275 23	9-1 12 156 117 -68	4-10 14 242 229 14	2-8 16 275 282 -62	-1-1 20 995 960 25
8-4 11 108 96 -43	-2 0 12 220 208 18	-7-9 14 63 69 -62	4-8 16 191 255 21	1-1 20 590 570 116
-5-3 11 460 471 41	0 0 12 266 234 23	1-9 14 478 441 31	-7-7 16 336 229 57	-2 0 20 516 425 46
-3-3 11 446 398 11	4 0 12 167 227 24	3-9 14 269 295 21	-5-7 16 280 216 -66	0 0 20 53 173 -53
1-3 11 27 73 -27	6 0 12 163 194 -37	5-9 14 293 264 13	3-7 16 45 237 -44	-1 1 20 251 185 -95
3-3 11 138 170 24	8 0 12 36 128 -36	-8-8 14 396 374 17	5-7 16 124 156 -83	-5-9 21 378 326-214
5-3 11 328 340 39	-1 1 12 337 265 42	2-8 14 953 932 24	-8-6 16 426 331 46	-6-8 21 54 83 -54
7-3 11 339 327 21	3 1 12 192 270-119	4-8 14 1008 967 16	2-6 16 217 171 25	-4-8 21 55 112 -55
9-3 11 39 76 -39	7 1 12 87 122 -87	6-8 14 347 366 11	4-6 16 445 441 27	-5-7 21 54 32 -53
0-2 11 514 540 22	4 2 12 148 150 -62	1-7 14 290 316 22	3-5 16 235 220 45	-3-7 21 55 96 -54
2-2 11 27 39 -26	6 2 12 35 146 -34	3-7 14 235 215 28	5-5 16 36 58 -35	-6-6 21 133 151-132
4-2 11 469 345 59	5 3 12 97 215 -73	5-7 14 353 283 25	4-4 16 528 567 20	-2-6 21 45 48 -45
8-2 11 174 168 33	7 3 12 452 404-125	-4-6 14 394 373 15	6-4 16 164 168 -49	-7-5 21 242 195-
116				
3-1 11 234 245 13	4 4 12 120 150 -71	2-6 14 204 217 -57	5-3 16 707 717 12	-5-5 21 56 121 -56
7-1 11 180 168 20	6 4 12 582 594 37	4-6 14 87 61 -47	4-2 16 578 661 25	-3-5 21 163 202 -68
9-1 11 316 283 31	3 5 12 748 676 31	-5-5 14 170 224 -57	6-2 16 179 246 34	-1-5 21 267 301-218
2 0 11 763 774 14	5 5 12 553 601 18	3-5 14 59 161 -58	2 2 16 344 318 59	-6-4 21 229 250 -58
4 0 11 358 356 42	-1-13 13 39 106 -38	2-4 14 316 242 17	4 2 16 57 26 -56	-4-4 21 571 578 37
6 0 11 858 849 15	0-12 13 370 362 31	4-4 14 220 228 37	-7-11 17 60 148 -59	-3-3 21 56 72 -56
8 0 11 37 84 -36	-1-11 13 35 85 -35	6-4 14 362 408 33	2-10 17 86 139 -85	-2-2 21 495 455 51
1 1 11 565 615 15	1-11 13 221 265 28	-5-3 14 382 326 -87	-9-9 17 66 49 -66	-1-1 21 426 346 61
5 1 11 78 89 -78	3-11 13 37 19 -37	1-3 14 462 499 23	-7-9 17 51 82 -50	1-1 21 554 399-133
7 1 11 291 271 -76	-8-10 13 352 278 20	5-3 14 115 136-103	-8-8 17 52 64 -51	-2 0 21 715 646 35

Table 3b. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in DAC at 12.4 kbar

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	h k l 10Fo 10Fc 10s
0 0 21 56 158 -55	-6 -6 22 246 203 -62	-3 -5 22 180 286 -155	-2 -4 22 587 494 -140	
-4 -8 22 62 126 -61	-2 -6 22 58 77 -57	-1 -5 22 846 891 187	-1 -3 22 247 300 -76	
-5 -7 22 45 94 -44	-5 -5 22 232 272 -64	-4 -4 22 563 555 46		

Table 4c. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in DAC at 35.7 kbar

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
-1 1 0 511 510 5	2 6 1 176 193 13	6 -10 3 289 313 20	2 -2 4 15 20 -15	3 3 5 66 55 -46
1 1 0 447 442 2	4 6 1 133 181 19	-9 -9 3 205 222 44	1 -1 4 186 173 3	5 3 5 141 108 20
3 1 0 1419 1407 16	-1 7 1 335 359 12	7 -9 3 152 253 -152	3 -1 4 176 169 5	9 3 5 358 341 35
-2 2 0 919 875 11	2 8 1 304 346 26	-4 -8 3 149 180 39	5 -1 4 147 147 12	-2 4 5 87 133 -39
0 2 0 84 91 4	-7 9 1 119 128 42	-2 -8 3 46 165 -45	2 0 4 635 613 3	0 4 5 326 331 4
2 2 0 879 878 4	-5 9 1 8 46 -7	-1 -7 3 144 154 20	6 0 4 147 151 45	2 4 5 805 800 14
6 2 0 181 184 12	-3 9 1 202 209 36	3 -7 3 173 175 25	-3 1 4 1743 1743 18	4 4 5 86 136 25
-3 3 0 285 319 25	7 9 1 197 242 34	0 -6 3 39 77 15	-1 1 4 551 500 7	10 4 5 276 316 45
-1 3 0 67 111 17	-4 10 1 46 48 -46	2 -6 3 236 206 13	1 1 4 3112 3060 26	-3 5 5 367 319 9
1 3 0 89 89 7	4 10 1 50 92 -49	4 -6 3 199 228 15	5 1 4 1252 1217 4	-7 7 5 389 383 21
3 3 0 671 627 3	6 10 1 70 112 -70	-5 -5 3 394 388 6	-2 2 4 1085 1109 14	-5 7 5 583 573 11
5 3 0 495 465 9	-3 11 1 362 372 20	1 -5 3 285 281 20	0 2 4 2154 2206 13	7 7 5 322 383 66
0 4 0 189 176 28	5 11 1 55 128 -55	3 -5 3 44 42 -29	2 2 4 2728 2626 41	-6 8 5 307 289 24
2 4 0 63 111 -33	-7 -11 2 117 153 -116	5 -5 3 173 196 18	4 2 4 2373 2301 19	-5 9 5 28 86 -27
4 4 0 259 266 6	-5 -11 2 373 248 39	-2 -4 3 243 250 2	6 2 4 518 494 9	-3 9 5 232 255 20
-5 5 0 139 183 15	3 -11 2 136 187 19	0 -4 3 331 340 3	-5 3 4 23 102 -23	5 9 5 232 184 76
-3 5 0 567 561 9	5 -11 2 144 142 16	4 -4 3 580 491 23	3 3 4 675 637 9	-4 10 5 149 151 19
5 5 0 31 114 -30	-8 -10 2 54 42 -53	-3 -3 3 943 930 6	5 3 4 201 166 12	-6 -12 6 139 240 -60
-2 6 0 161 141 8	-6 -10 2 318 314 66	-1 -3 3 887 886 2	-4 4 4 69 88 23	2 -12 6 502 464 10
0 6 0 19 10 -19	6 -10 2 53 99 -52	1 -3 3 1889 1772 15	-2 4 4 536 501 9	4 -12 6 81 76 30
4 6 0 364 303 10	-9 -9 2 210 250 55	-2 -2 3 298 290 5	2 4 4 209 156 20	-7 -11 6 253 310 37
6 6 0 46 102 -45	-7 -9 2 128 147 -62	0 -2 3 362 356 4	6 4 4 239 250 19	-5 -11 6 871 839 18
-1 7 0 64 182 -64	7 -9 2 76 270 -76	2 -2 3 934 927 5	10 4 4 132 145 -84	3 -11 6 466 477 35
3 7 0 46 74 -46	-4 -8 2 162 164 20	1 -1 3 53 71 22	-1 5 4 351 328 7	5 -11 6 525 554 11
7 7 0 476 390 105	-3 -7 2 550 535 10	3 -1 3 216 212 4	3 5 4 467 505 34	-8 -10 6 451 443 39
9 7 0 401 285 36	3 -7 2 111 86 23	0 0 3 360 333 5	5 5 4 128 128 32	6 -10 6 156 157 19
-2 8 0 207 177 13	-2 -6 2 89 106 11	2 0 3 868 836 2	9 5 4 115 150 -114	-2 -8 6 178 215 21
8 8 0 315 332 32	0 -6 2 23 92 -22	-3 1 3 590 606 13	-2 6 4 139 118 16	0 -8 6 359 364 15
-7 9 0 710 634 73	2 -6 2 950 937 21	1 1 3 568 579 6	4 6 4 268 240 19	-4 -6 6 53 79 -22
7 9 0 887 922 13	4 -6 2 52 89 -51	3 1 3 115 94 4	8 6 4 38 69 -37	0 -6 6 351 352 5
-6 10 0 358 369 18	-5 -5 2 467 588 114	5 1 3 487 463 7	-7 7 4 283 277 30	2 -6 6 213 197 8
-4 10 0 1094 1095 18	-1 -5 2 34 1210 -33	-2 2 3 366 368 6	7 7 4 58 136 -57	4 -6 6 334 342 12
6 10 0 821 833 37	3 -5 2 273 278 6	0 2 3 308 309 5	-6 8 4 192 189 32	-5 -5 6 246 226 10
-3 11 0 385 400 23	5 -5 2 274 298 10	2 2 3 228 196 5	-7 9 4 97 135 -96	3 -5 6 80 92 14
5 11 0 592 576 43	-2 -4 2 819 888 4	4 2 3 12 76 -11	3 9 4 134 206 -88	-2 -4 6 535 465 165
5 -11 1 99 70 28	0 -4 2 2210 2261 18	6 2 3 548 566 12	5 9 4 50 84 -50	0 -4 6 424 438 7

-6-10	1	124	146-124	4-4	2	2918	2774	35	-5	3	3	174	234	29	7	9	4	327	339	98	4-4	6	357	291	23			
4-10	1	164	174	16	-5-3	2	1084	1092	7	-1	3	3	25	80-24	-6	10	4	485	558	55	-3-3	6	1194	1087	8			
6-10	1	195	223	25	-3-3	2	1871	1857	8	1	3	3	251	197	11	-4	10	4	155	180	21	-1-3	6	545	535	4		
-9-9	1	434	521	30	-1-3	2	546	526	3	7	3	3	306	368	27	4	10	4	766	706	30	1-3	6	643	669	6		
-7-9	1	567	573	34	1-3	2	2173	2010	19	-4	4	3	68	73	19	-6-12	5	56	59-56		3-3	6	116	450-55				
7-9	1	539	468	83	3-3	2	1059	849	12	-1	5	3	428	439	13	2-12	5	206	198	17	5-3	6	2282	2119	9			
-8-8	1	106	188-106		-2-2	2	176	317	26	1	5	3	343	348	12	4-12	5	29	31-28		-2-2	6	3907	3784	22			
-9-7	1	287	276	33	0-2	2	202	186	2	9	5	3	163	221	63	-5-11	5	93	129-92		0-2	6	410	430	4			
3-7	1	417	353	7	2-2	2	738	714	6	-2	6	3	35	52-35		3-11	5	103	133	34	4-2	6	2073	1979	16			
-2-6	1	222	214	14	1-1	2	96	83	3	2	6	3	106	99-106		5-11	5	188	199	21	-3-1	6	863	878	37			
0-6	1	357	386	5	3-1	2	526	551	16	8	6	3	118	127-52		-8-10	5	152	164-71		-1-1	6	459	485	5			
2-6	1	517	468	9	-1	1	2	83	62	2	10	6	3	165	167	64	-6-10	5	164	427-99		1-1	6	247	223	6		
4-6	1	411	415	9	1	1	2	167	139	6	-3	7	3	420	384	10	6-10	5	26	20-26		-2	0	6	492	505	7	
-3-5	1	216	213	4	3	1	2	397	403	3	3	7	3	96	102-96		-2-8	5	586	634	14	0	0	6	101	73	5	
-1-5	1	34	114-34		5	1	2	62	67	16	7	7	3	133	199	43	0-8	5	560	586	14	4	0	6	200	198	6	
3-5	1	569	551	4	-2	2	2	120	114	5	-6	8	3	314	255	26	-1-7	5	479	469	13	-3	1	6	219	246	37	
5-5	1	77	95	22	0	2	2	255	280	6	8	8	3	557	341	40	3-7	5	79	86-78		-1	1	6	28	58-27		
-2-4	1	21	29-20		2	2	2	436	460	4	-7	9	3	66	102-65		-4-6	5	513	534	8	1	1	6	236	383	14	
0-4	1	147	153	12	-5	3	2	360	317	55	-5	9	3	297	305	9	-2-6	5	929	889	5	3	1	6	432	422	14	
4-4	1	27	41-26		-3	3	2	26	355-25		7	9	3	54	102-53		0-6	5	444	483	6	-4	2	6	27	59-26		
-7-3	1	411	433	20	-1	3	2	50	55	16	-4	10	3	544	541	20	2-6	5	322	234	14	0	2	6	96	143	16	
-5-3	1	412	404	7	1	3	2	451	426	5	4	10	3	123	236-123		4-6	5	112	120	31	6	2	6	267	247	26	
-3-3	1	597	587	4	3	3	2	380	370	59	6	10	3	211	238	59	-5-5	5	176	150	12	-5	3	6	459	475	7	
-1-3	1	246	250	6	5	3	2	274	255	6	-3	11	3	351	297	17	-1-5	5	145	195	19	-3	3	6	265	253	10	
1-3	1	556	525	6	-6	4	2	158	161-83		4-12	4	29	98-29		3-5	5	474	475	8	-1	3	6	140	149	10		
3-3	1	37	71-37		-4	4	2	225	222	7	3-11	4	27	54-27		-2-4	5	312	292	4	1	3	6	267	283	10		
-4-2	1	413	325	75	4	4	2	951	990	10	5-11	4	153	189	17	0-4	5	194	208	5	9	3	6	282	324	33		
-2-2	1	577	577	2	-5	5	2	65	79-30		-8-10	4	54	112-54		2-4	5	216	306	29	-6	4	6	29	60-28			
2-2	1	614	575	5	-3	5	2	1281	1222	13	-6-10	4	410	388	18	4-4	5	1350	1197	24	-4	4	6	198	186	10		
-1-1	1	7	100-7		-1	5	2	1773	1710	16	-4-10	4	107	329-107		-3-3	5	426	355	14	-2	4	6	207	235	17		
1-1	1	119	115	3	1	5	2	2052	2102	15	6-10	4	193	218	31	-1-3	5	277	251	4	0	4	6	150	152	13		
4	0	1	209	215	18	3	5	2	1764	1717	12	7-9	4	82	219-81		1-3	5	308	282	4	-7	5	6	50	149-49		
1	1	1	152	142	3	5	5	2	216	201	15	-2-8	4	2152	2133	21	-2-2	5	653	640	3	-5	5	6	294	318	12	
3	1	1	1018	1014	3	10	6	2	727	826	19	0-8	4	114	167	17	0-2	5	106	93	4	-3	5	6	92	81	18	
-2	2	1	1213	1153	11	-1	7	2	580	601	12	-1-7	4	1049	1039	16	2-2	5	20	23-20		1	5	6	176	202	41	
0	2	1	391	426	5	1	7	2	575	486	119	3-7	4	632	546	15	4-2	5	123	113	10	9	5	6	159	216	61	
2	2	1	1291	1251	3	-7	9	2	27	150-27		-4-6	4	214	188	11	-1-1	5	220	205	5	-6	6	6	615	576	31	
4	2	1	523	494	20	-5	9	2	225	212	13	-2-6	4	56	88-24		1-1	5	324	320	5	2	6	6	358	388	29	
-5	3	1	499	494	56	5	9	2	416	363	26	0-6	4	181	198	7	-2	0	5	341	325	8	8	6	6	539	536	20
-1	3	1	311	293	4	-4	10	2	329	342	9	2-6	4	53	73-30		0	0	5	187	161	4	-7	7	6	848	738	28
1	3	1	19	64-18		-2	10	2	26	92-25		4-6	4	108	92	22	2	0	5	105	100	6	7	7	6	548	618	27
-6	4	1	471	432	24	-3	11	2	177	238	61	-5-5	4	63	84-63		4	0	5	125	116	8	-6	8	6	1212	1114	25
-4	4	1	584	613	11	5	11	2	59	115-59		3-5	4	215	228	8	6	0	5	50	49-50		4	8	6	729	658	34
-2	4	1	373	337	73	-6-12	3	308	311	59	5-5	4	35	109-35		-3	1	5	169	165	9	6	8	6	615	587	42	
0	4	1	73	139	9	4-12	3	318	261	43	0-4	4	136	139	8	-1	1	5	173	165	6	-5	9	6	107	111	25	
4	4	1	29	61-29		-7-11	3	242	241	33	4-4	4	548	455	21	1	1	5	376	361	8	3	9	6	694	603	41	
6	4	1	352	365	11	-5-11	3	40	68-39		-3-3	4	21	56-21		7	1	5	27	49-26		-6-12	7	352	342	33		
-5	5	1	37	31-36		3-11	3	231	232	27	-1-3	4	281	254	3	-4	2	5	282	321	9	-4-12	7	219	240	91		
-3	5	1	793	779	12	5-11	3	29	69-28		1-3	4	677	667	3	0	2	5	410	387	5	2-12	7	371	351	14		
3	5	1	320	275	12	-8-10	3	48	97-48		3-3	4	317	291	16	4	2	5	612	590	13	4-12	7	444	367	45		
5	5	1	116	110	35	-6-10	3	423	466	18	-2-2	4	427	374	9	-3	3	5	106	94	11	-7-11	7	419	388	25		

Table 4c. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in DAC at 35.7 kbar

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
-5-11 7 642 621 18	2 0 8 224 199 8	-6 8 9 381 368 18	-5 -3 11 517 477 25	-5-11 13 39 52 -39
3-11 7 504 484 27	4 0 8 74 136 -73	-4 8 9 150 171 16	-3 -3 11 433 384 7	-1-11 13 80 111 -80
5-11 7 668 617 46	-3 1 8 108 122 9	-2 8 9 623 453 29	-1 -3 11 232 230 7	1-11 13 325 309 22
-8-10 7 463 388 32	1 1 8 63 86 24	-3 9 9 236 251-134	3 -3 11 149 160 32	-8-10 13 317 314 33
2-10 7 540 619 66	9 1 8 246 232 54	-5-13 10 419 419 35	7 -3 11 35 386 -35	-6-10 13 431 394 24
4-10 7 209 214 19	-2 2 8 1001 964 11	-6-12 10 211 269 32	0 -2 11 536 545 10	2-10 13 439 453 27
6-10 7 291 243 62	0 2 8 499 479 8	-4-12 10 148 184 38	2 -2 11 124 152-124	4-10 13 416 356 32
-1 -9 7 63 92 -63	8 2 8 599 662 23	-2-12 10 38 135 -37	4 -2 11 428 366 36	-7 -9 13 220 228 27
7 -9 7 61 96 -60	-1 3 8 1323 1328 17	-7-11 10 188 169 24	6 -2 11 115 95 -53	1 -9 13 141 308 59
-2 -8 7 661 642 11	9 3 8 372 457 35	-5-11 10 379 336 14	8 -2 11 172 145 39	3 -9 13 86 146 -85
0 -8 7 114 120 14	-2 4 8 2037 1949 25	-8-10 10 766 695 20	-3 -1 11 186 206 24	5 -9 13 231 261 44
7 -7 7 50 89 -49	0 4 8 329 303 21	-4-10 10 668 614 33	-1 -1 11 247 228 8	4 -8 13 38 42 -37
-4 -6 7 121 91 38	8 4 8 305 352 33	4-10 10 614 578 25	7 -1 11 119 168 -56	6 -8 13 59 131 -59
-2 -6 7 264 256 7	-3 5 8 510 501 7	6-10 10 220 241-115	-4 0 11 727 711 15	-7 -7 13 388 399 26
0 -6 7 347 348 5	1 5 8 251 253 32	-9 -9 10 592 530 27	2 0 11 922 896 16	-3 -7 13 184 197 14
-5 -5 7 433 574 163	7 5 8 53 72 -52	3 -9 10 389 411 53	-3 1 11 964 929 14	-1 -7 13 155 181 22
-3 -5 7 761 735 5	6 6 8 52 43 -51	5 -9 10 316 371 34	-1 1 11 1172 1189 122	5 -7 13 91 131 -90
1 -5 7 127 102 5	-5 7 8 248 246 83	7 -9 10 550 539 42	1 1 11 629 588 16	4 -6 13 47 68 -47
-4 -4 7 410 343 10	-6 8 8 28 70 -28	4 -8 10 160 222 -85	7 1 11 289 314 17	6 -6 13 231 179 29
0 -4 7 31 368 -30	-4 8 8 220 250 11	6 -8 10 50 54 -49	-2 2 11 680 648 11	-3 -5 13 328 294 17
2 -4 7 80 84 11	-5 9 8 176 215 35	-3 -7 10 421 392 10	2 2 11 176 193 -94	-1 -5 13 506 501 8
-5 -3 7 39 15 -38	-5-13 9 118 162 -75	-1 -7 10 235 169 10	6 2 11 307 281 40	-4 -4 13 885 1126 141
-1 -3 7 276 294 5	-6-12 9 174 173 37	5 -7 10 46 42 -45	8 2 11 164 99 45	-2 -4 13 917 911 16
3 -3 7 373 340 6	-4-12 9 37 96 -36	-4 -6 10 344 315 14	-3 3 11 284 287 16	0 -4 13 1279 1211 15
-2 -2 7 263 281 5	-2-12 9 108 97-108	2 -6 10 510 507 6	-1 3 11 99 295 -98	2 -4 13 377 468-211
0 -2 7 234 245 4	-7-11 9 82 85 -81	-5 -5 10 37 97 -37	7 3 11 310 354 40	6 -4 13 677 636 15
4 -2 7 33 49 -33	-5-11 9 77 66 -76	-3 -5 10 205 204 8	6 4 11 89 168 -89	-3 -3 13 181 152 16
-1 -1 7 282 265 3	3-11 9 363 268 43	-1 -5 10 465 475 13	-7 5 11 425 283 113	-1 -3 13 639 612 12
1 -1 7 27 20 -26	5-11 9 269 241 88	-4 -4 10 127 177 24	-3 5 11 330 276 17	7 -3 13 146 176 50
3 -1 7 15 15 -14	-8-10 9 52 70 -51	-2 -4 10 164 168 8	5 5 11 52 134 -52	-2 -2 13 577 540 8
5 -1 7 1513 1474 12	4-10 9 129 121-129	0 -4 10 125 132	6 -6 6 11 28 27 -28	0 -2 13 332 293 12
-2 0 7 310 236 13	6-10 9 297 336 66	-3 -3 10 262 238 8	-4 6 11 381 367 21	6 -2 13 316 345 16
0 0 7 389 426 8	-9 -9 9 335 247 36	-1 -3 10 249 254 5	-5 7 11 182 197 12	8 -2 13 249 291 81
4 0 7 1178 1179 28	5 -9 9 91 160 -90	1 -3 10 209 178 5	-3-13 12 797 651 23	-1 -1 13 131 164 25
3 1 7 301 280 9	7 -9 9 60 282 -60	3 -3 10 372 357 10	-6-12 12 234 280 27	7 -1 13 155 195 46
5 1 7 475 362 24	6 -8 9 53 86 -53	-2 -2 10 211 199 8	-4-12 12 206 204 25	6 0 13 236 220 20
9 1 7 309 289 45	-3 -7 9 135 124 16	0 -2 10 461 433 8	-2-12 12 144 204 43	8 0 13 114 228 -80
-4 2 7 64 84 13	-1 -7 9 359 350 24	2 -2 10 800 799 13	-7-11 12 189 146 65	-3 1 13 81 146 -81
4 2 7 392 409 17	1 -7 9 344 318 9	8 -2 10 313 328 75	-1-11 12 124 166 44	-1 1 13 10 46 -10
-5 3 7 541 562 12	-2 -6 9 421 375 11	-3 -1 10 292 274 13	-8-10 12 325 325 21	5 1 13 51 267 -51
-3 3 7 378 395 18	0 -6 9 234 203 38	-1 -1 10 2957 2891 20	-2-10 12 226 230 35	7 1 13 227 244 30
-1 3 7 382 373 11	2 -6 9 977 906 19	1 -1 10 934 916 12	6-10 12 161 189-161	-6 4 13 60 104 -59
1 3 7 34 62 -33	6 -6 9 1139 939 23	3 -1 10 845 806 8	5 -9 12 438 440 35	4 4 13 165 207-165
3 3 7 435 327 29	-3 -5 9 476 498 6	9 -1 10 907 794 24	-2 -8 12 400 374 28	-7 5 13 279 250 49
5 3 7 369 409 24	-1 -5 9 2080 2004 10	-2 0 10 2334 2184 28	6 -8 12 317 362 34	-5 5 13 246 255 31
9 3 7 367 425 30	1 -5 9 42 50 -42	0 0 10 1740 1718 22	1 -7 12 170 157 17	-3 5 13 276 291 28
-4 4 7 66 64 -65	3 -5 9 502 500 10	8 0 10 603 646 15	-2 -6 12 823 801 4	-1 5 13 57 105 -56
2 4 7 223 249 22	-6 -4 9 758 698 14	-5 1 10 173 200 11	6 -6 12 68 322 -67	1 5 13 468 457 43
4 4 7 35 92 -34	-4 -4 9 86 108 35	-1 1 10 285 258 11	-3 -5 12 293 254 16	5 5 13 57 58 -56
8 4 7 37 78 -37	0 -4 9 456 436 7	9 1 10 78 114 -78	-1 -5 12 794 778 15	-4 6 13 134 160 37
-1 5 7 23 38 -23	2 -4 9 278 258 9	-4 2 10 454 457 11	1 -5 12 843 792 11	-3 7 13 638 593 46

9 5 7 402 386 36 4 -4 9 927 886 19 -2 2 10 422 442 18 3 -5 12 1322 1273 18 -1-13 14 500 390 72  
6 6 7 132 222 40 -5 -3 9 167 182 20 0 2 10 50 122 -50 5 -5 12 33 33 -32 -6-12 14 211 192 28  
8 6 7 35 59 -35 1 -3 9 118 96 5 -1 3 10 169 172 13 -4 -4 12 1246 1140 16 -4-12 14 259 223 31  
-7 7 7 30 11 -29 -4 -2 9 34 26 -33 -6 4 10 31 177 -30 -5 -3 12 595 581 31 -2-12 14 203 214 21  
-6 8 7 141 126 19 2 -2 9 344 295 9 -2 4 10 40 126 -40 1 -3 12 202 178 10 -7-11 14 327 335 33  
-4 8 7 354 344 7 4 -2 9 768 759 7 -7 5 10 379 296 46 7 -3 12 270 203 32 -5-11 14 320 279 51  
-5 9 7 458 456 7 -3 -1 9 618 646 14 7 5 10 326 376 66 -4 -2 12 327 288 33 -3-11 14 132 118 27  
-3 9 7 264 173 21 1 -1 9 77 99 9 -6 6 10 28 75 -28 2 -2 12 216 195 30 -1-11 14 33 103 -33  
-6-12 8 45 45 -44 7 -1 9 190 333 59 4 6 10 127 127 -126 -3 -1 12 114 261 -113 1 -11 14 40 56 -39  
-4-12 8 37 83 -37 -4 0 9 536 456 7 6 6 10 62 40 -61 1 -1 12 120 159 39 -8-10 14 75 98 -75  
-9-11 8 431 333 30 -2 0 9 497 504 17 -5 7 10 332 331 16 3 -1 12 164 166 22 -6-10 14 51 108 -51  
-7-11 8 162 143 31 0 0 9 182 187 16 -4 8 10 97 139 32 -4 0 12 165 227 -164 2 -10 14 264 264 29  
-5-11 8 50 77 -50 2 0 9 159 179 11 -2 8 10 908 842 35 -2 0 12 273 250 18 4 -10 14 314 212 48  
5-11 8 328 333 66 4 0 9 284 248 17 2 8 10 740 619 36 0 0 12 238 214 14 3 -9 14 371 338 18  
-8-10 8 208 173 56 8 0 9 74 122 -74 -5-13 11 514 433 29 8 0 12 145 164 37 5 -9 14 224 276 55  
-9-9 8 329 297 34 -5 1 9 430 428 13 -6-12 11 152 177 -72 -5 1 12 154 179 22 -8 -8 14 453 361 77  
-1 -9 8 109 182 21 -3 1 9 223 217 8 -4-12 11 83 90 -83 -1 1 12 354 260 28 4 -8 14 1000 996 17  
-2 -8 8 238 233 -119 -1 1 9 15 34 -14 -2-12 11 150 151 -94 7 1 12 57 130 -56 6 -8 14 142 411 -142  
2 -8 8 396 337 37 1 1 9 212 191 8 -7-11 11 283 281 24 0 2 12 43 82 -43 5 -7 14 323 279 31  
-3 -7 8 782 785 76 3 1 9 118 170 27 3-11 11 457 381 56 4 2 12 139 138 -138 -4 -6 14 448 427 19  
1 -7 8 140 134 7 9 1 9 131 168 -131 -8-10 11 660 587 22 5 3 12 38 176 -37 -2 -6 14 36 62 -36  
-2 -6 8 2419 2338 11 -4 2 9 215 217 11 0-10 11 662 714 9 7 3 12 321 378 38 0 -6 14 210 197 17  
0 -6 8 2019 1961 14 -2 2 9 447 400 5 6-10 11 583 627 46 -4 4 12 179 152 -115 1 -5 14 421 410 25  
-3 -5 8 1109 1086 6 0 2 9 27 75 -26 5 -9 11 231 211 40 4 4 12 52 170 -52 5 -5 14 64 70 -63  
-1 -5 8 1183 1138 9 8 2 9 42 53 -41 7 -9 11 670 491 48 -7 5 12 454 409 24 6 -4 14 414 436 15  
1 -5 8 536 564 5 -3 3 9 582 510 16 -4 -8 11 361 385 26 -5 5 12 974 906 22 -5 -3 14 347 318 26  
5 -5 8 336 391 39 -1 3 9 23 40 -22 6 -8 11 60 73 -60 3 5 12 631 705 28 1 -3 14 511 535 17  
-4 -4 8 329 282 9 7 3 9 202 195 33 -5 -7 11 397 300 21 5 5 12 539 638 38 7 -3 14 128 115 -65  
2 -4 8 237 245 7 -4 4 9 181 168 19 -6 -6 11 50 96 -49 -6 6 12 102 91 23 6 -2 14 321 286 35  
4 -4 8 295 269 18 2 4 9 547 564 27 -4 -6 11 162 147 21 -4 6 12 414 434 16 -3 -1 14 141 213 -101  
-5 -3 8 99 128 -98 -7 5 9 994 857 11 -2 -6 11 461 376 52 -2 6 12 639 547 27 1 -1 14 177 225 -106  
3 -3 8 522 463 7 7 5 9 572 606 48 0 -6 11 352 322 14 -3 7 12 203 271 69 7 -1 14 205 231 22  
2 -2 8 563 437 21 -6 6 9 206 225 25 -5 -5 11 290 269 16 -6-12 13 107 160 -71 -2 0 14 327 308 18  
6 -2 8 234 206 24 4 6 9 516 530 43 1 -5 11 139 162 14 -4-12 13 358 306 18 0 0 14 333 396 44  
3 -1 8 43 86 -43 6 6 9 54 143 -54 -2 -4 11 201 212 11 -2-12 13 273 229 29 6 0 14 510 503 16  
-4 0 8 264 238 6 -7 7 9 317 319 13 0 -4 11 391 389 8 0-12 13 429 402 20 5 1 14 57 137 -57

Table 4c. Observed and calculated structure factors for pyroxmangite in DAC at 35.7 kbar

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
4 2 14 324 306 50	-5-11 16 495 503 22	3 -5 17 279 267 14	0 2 18 546 543 34	0 -8 20 363 388 68
6 2 14 138 170-137	-3-11 16 560 525 20	5 -5 17 89 147 -89	2 2 18 56 116 -56	2 -8 20 189 181 61
3 3 14 422 511 39	-1-11 16 501 461 16	4 -4 17 259 273 37	-5 3 18 681 815 47	-3 -7 20 152 156 -94
-6 4 14 120 138-120	1-11 16 79 183 -79	3 -3 17 52 47 -52	-3 3 18 981 1014 40	1 -7 20 63 52 -63
-4 4 14 250 243 26	-6-10 16 159 157-159	5 -3 17 75 95 -74	-1 3 18 389 356 55	3 -7 20 74 163 -73
0 4 14 241 289 97	-4-10 16 152 222 24	-4 -2 17 226 233 54	-3-11 19 41 98 -41	-4 -6 20 85 152 -85
2 4 14 209 136-122	-2-10 16 231 214 23	0 -2 17 617 580 31	-1-11 19 239 208 48	-2 -6 20 55 28 -55
4 4 14 59 190 -58	0-10 16 38 104 -38	4 -2 17 994 986 9	0-10 19 303 267 28	0 -6 20 470 462 20
-5 5 14 71 159 -71	2-10 16 184 204 26	2 0 17 300 327 34	-7 -9 19 108 232-107	2 -6 20 48 36 -48
-4-12 15 108 80-108	4-10 16 135 175-134	-5 1 17 316 317 70	-5 -9 19 370 341 26	-1 -5 20 304 316 33

-2-12 15 292 277 20	-7-9 16 261 246 31	-3 1 17 48 26 -47	-3-9 19 391 354 137	1-5 20 160 165 50
0-12 15 42 73 -42	1-9 16 194 176 33	-1 1 17 261 224 37	-1-9 19 39 68 -39	3-5 20 408 470 85
-7-11 15 341 282 43	3-9 16 64 51 -63	3 1 17 288 282 78	-6-8 19 207 204 49	-4-4 20 450 470 33
-5-11 15 566 440 42	5-9 16 61 118 -60	-4 2 17 133 173 32	-4-8 19 54 115 -53	-2-4 20 52 75 -51
-3-11 15 415 348 14	-8-8 16 130 207-129	-2 2 17 55 127 -54	-2-8 19 383 348 37	0-4 20 61 126 -
60				
-1-11 15 123 176 -52	2-8 16 307 272 15	0 2 17 83 91 -82	-7-7 19 56 40 -55	2-4 20 235 225 31
1-11 15 122 132 39	4-8 16 213 224 20	-5 3 17 17 36 -17	-5-7 19 224 220 40	-3-3 20 83 176 -82
-8-10 15 427 362 43	-7-7 16 179 215 53	-3 3 17 141 149 -76	-3-7 19 308 300 32	-4-2 20 208 194 -
95				
-4-10 15 88 132 -47	3-7 16 244 228 24	-1 3 17 155 136-155	1-7 19 529 528 18	-2-2 20 475 451
39				
2-10 15 265 294 16	5-7 16 118 221-117	-4 4 17 90 69 -89	3-7 19 356 328 15	0-2 20 261 250 27
4-10 15 61 71 -61	4-6 16 522 457 17	-2 4 17 367 308 43	-6-6 19 711 672 24	2-2 20 351 331 70
-7-9 15 554 452 33	-6-4 16 95 94 -95	-5-11 18 90 142 -89	-2-6 19 884 922 14	-3-1 20 858 893 38
5-9 15 129 133-128	2-4 16 92 120 -62	-1-11 18 626 568 15	0-6 19 32 25 -31	-1-1 20 1007 976 19
-8-8 15 199 222 50	4-4 16 625 577 15	-4-10 18 607 546 37	2-6 19 250 283 17	1-1 20 662 631 12
0-8 15 605 651 98	6-4 16 129 173 -60	-2-10 18 130 221 -69	4-6 19 646 643 11	-6 0 20 309 234 20
4-8 15 1061 1037 12	5-3 16 760 754 9	0-10 18 135 156 31	-5-5 19 125 140-125	-4 0 20 684 686
194				
5-7 15 140 180 25	4-2 16 581 653 14	-7-9 18 311 292 30	-1-5 19 217 229 33	-2 0 20 420 454 23
4-6 15 211 216 20	6-2 16 283 281 25	-3-9 18 267 211 24	1-5 19 333 317 22	0 0 20 143 176 -60
6-6 15 209 134 63	-4 0 16 432 359 12	1-9 18 203 198 24	3-5 19 53 144 -53	-1 1 20 185 213 53
-1-5 15 43 63 -43	6 0 16 41 94 -41	3-9 18 41 57 -40	-4-4 19 143 164-122	-4-8 21 56 75 -56
5-5 15 125 128 44	-4 2 16 99 70 -59	-4-8 18 401 344 25	-2-4 19 207 232 72	-3-7 21 57 74 -57
-2-4 15 43 42 -42	0 2 16 76 101 -75	0-8 18 230 219 28	0-4 19 147 121 50	-6-6 21 136 188-136
0-4 15 104 275-104	2 2 16 308 366 37	2-8 18 211 189 17	2-4 19 355 301 32	-2-6 21 59 88 -58
6-4 15 364 390 24	-5 3 16 59 45 -59	-7-7 18 117 160-117	4-4 19 442 408 34	0-6 21 157 201 50
-3-3 15 84 79 -83	-3 3 16 29 55 -29	-5-7 18 319 247 61	-5-3 19 53 70 -52	-5-5 21 105 112-104
-1-3 15 133 160 30	-6 4 16 64 288 -63	1-7 18 496 448 13	-3-3 19 243 188 46	-3-5 21 269 231 41
3-3 15 34 130 -33	-4 4 16 36 65 -36	3-7 18 125 141 36	-1-3 19 116 162-115	-1-5 21 307 323 56
5-3 15 112 70 -56	-2 4 16 225 183 46	-6-6 18 544 541 13	1-3 19 146 144 53	-4-4 21 620 590 25
7-3 15 225 189 89	-2-12 17 797 796 18	2-6 18 633 611 15	3-3 19 366 308 29	-2-4 21 79 107 -78
-2-2 15 459 447 12	-5-11 17 467 494 27	4-6 18 474 484 13	-2-2 19 57 48 -57	0-4 21 64 113 -64
6-2 15 199 181 30	-3-11 17 702 614 37	1-5 18 48 124 -47	0-2 19 114 131-114	-3-3 21 79 85 -78
5-1 15 359 344 27	-1-11 17 486 374 22	3-5 18 77 115 -76	2-2 19 308 324 36	-1-3 21 72 74 -72
7-1 15 145 110 -77	1-11 17 713 694 95	2-4 18 81 137 -80	-1-1 19 233 178 41	-4-2 21 202 190-
125				
2 0 15 348 320 51	-2-10 17 174 142 32	4-4 18 84 124 -83	1-1 19 57 105 -57	-2-2 21 505 480 26
1 1 15 493 408 76	0-10 17 146 128 35	3-3 18 53 71 -53	-6 0 19 377 332 19	-3-1 21 114 168-113
3 1 15 167 409-132	2-10 17 113 127-113	2-2 18 361 351 38	-4 0 19 470 380 37	-1-1 21 345 330
22				
5 1 15 262 282 39	-7-9 17 43 104 -43	4-2 18 174 186-173	-2 0 19 150 159 61	-2 0 21 669 645 23
-5 3 15 610 578 47	-3-9 17 37 54 -37	1-1 18 62 94 -62	0 0 19 87 82 -86	-3-7 22 56 69 -56
1 3 15 261 267 58	1-9 17 344 299 18	-4 0 18 210 228 48	2 0 19 252 267 46	-5-5 22 392 344 56
-6 4 15 64 176 -63	-8-8 17 55 59 -54	-2 0 18 53 81 -53	-5 1 19 64 102 -63	-3-5 22 318 294 30
-4 4 15 168 169 31	2-8 17 480 427 15	0 0 18 97 82 -97	-3 1 19 229 235 44	-1-5 22 1074 905 254
-2 4 15 110 125-110	4-8 17 388 342 25	2 0 18 58 123 -57	1 1 19 271 219 41	-4-4 22 664 596 27
0 4 15 215 233 58	-7-7 17 290 327 35	-5 1 18 173 163 56	-2 2 19 182 185-182	-2-4 22 533 511 51
-5 5 15 309 287 35	3-7 17 52 41 -52	-3 1 18 205 248 55	0 2 19 155 189-154	-1-3 22 260 341 94
-6-12 16 300 269 45	5-7 17 84 125 -83	3 1 18 483 398 56	-2-10 20 665 683 15	
-4-12 16 598 651 23	-4-6 17 419 356 36	-6 2 18 420 342 21	-1-9 20 114 164 -79	
-2-12 16 845 795 10	2-6 17 146 159 -87	-4 2 18 232 253 45	-6-8 20 191 191 59	
0-12 16 517 443 54	4-6 17 191 165 19	-2 2 18 389 346 30	-4-8 20 139 122-139	



