

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabesiz

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
2	0	0	783	722	3	6	6	0	377	390	2	4	13	0	33	23	4	-1	2	1	116	118	1	-2	5	1	338	342								
4	0	0	710	659	3	7	6	0	107	104	1	5	13	0	19	5	9	0	2	1	395	388	1	-1	5	1	848	838								
6	0	0	189	163	1	8	6	0	295	289	2	6	13	0	114	115	2	1	2	115	118	1	0	5	1	190	176									
8	0	0	438	453	2	9	6	0	84	78	1	7	13	0	222	220	3	2	2	425	422	2	1	5	1	848	841									
10	0	0	464	468	4	10	6	0	339	337	3	8	13	0	10	6	10	3	2	602	624	2	2	5	1	337	342									
12	0	0	39	48	3	11	6	0	115	116	1	9	13	0	109	107	3	4	2	185	185	1	3	5	1	344	337									
14	0	0	29	16	8	12	6	0	55	56	3	10	13	0	88	103	4	5	2	341	354	1	4	5	1	135	136									
16	0	0	77	78	6	13	6	0	82	84	3	0	14	0	486	477	7	6	2	479	485	1	5	5	1	300	296									
1	1	0	345	385	2	14	6	0	123	129	3	0	14	0	111	111	1	7	2	181	176	1	6	5	1	240	236									
2	1	0	24	9	1	15	6	0	76	74	8	1	14	0	140	139	2	8	2	328	321	1	7	5	1	56	55									
3	1	0	1752	1727	8	1	7	0	47	40	1	2	14	0	71	66	2	9	2	181	176	1	8	5	1	192	190									
4	1	0	196	205	1	2	7	0	215	211	1	4	14	0	36	27	5	10	2	138	144	1	9	5	1	153	153									
5	1	0	419	406	1	3	7	0	1185	1188	5	5	14	0	125	127	3	11	2	160	163	1	10	5	1	45	50									
6	1	0	405	433	1	4	7	0	99	104	1	6	14	0	268	257	4	12	2	94	103	1	11	5	1	151	142									
7	1	0	405	397	1	5	7	0	177	187	1	7	14	0	43	26	6	13	2	78	79	1	12	5	1	95	88									
8	1	0	195	200	1	6	7	0	106	107	1	8	14	0	31	34	9	14	2	101	94	2	13	5	1	44	39									
9	1	0	115	115	1	7	7	0	449	447	3	9	14	0	140	146	7	15	2	65	58	4	14	5	1	182	170									
10	1	0	90	92	1	8	7	0	25	12	2	1	15	0	80	89	2	16	2	64	70	9	15	5	1	100	103									
11	1	0	88	86	1	9	7	0	132	124	1	2	15	0	148	147	2	16	2	93	99	3	15	6	1	30	44									
12	1	0	43	44	2	10	7	0	82	83	1	3	15	0	329	324	5	-15	3	89	92	2	-15	6	1	200	200									
13	1	0	203	197	2	11	7	0	177	180	2	4	15	0	23	4	12	-13	3	54	48	2	-13	6	1	11	11									
14	1	0	12	22	11	12	7	0	111	110	2	5	15	0	160	154	3	-12	3	39	33	3	-12	6	1	93	93									
15	1	0	25	11	9	13	7	0	278	277	5	6	15	0	22	2	15	-11	3	300	298	2	-11	6	1	107	106									
16	1	0	60	43	11	14	7	0	117	113	4	7	15	0	30	29	15	-10	3	82	84	1	-10	6	1	192	191									
0	2	0	1205	1210	7	0	8	0	874	873	5	0	16	0	35	32	13	-9	3	164	163	1	-9	6	1	104	98									
1	2	0	357	374	1	1	8	0	122	121	1	1	16	0	25	21	9	-8	3	108	106	1	-8	6	1	99	99									
2	2	0	278	245	1	2	8	0	488	497	2	2	16	0	23	29	11	-7	3	986	1009	4	-7	6	1	233	236									
3	2	0	502	230	1	3	8	0	8	11	7	3	16	0	38	45	5	-6	3	185	189	1	-6	6	1	689	693									
4	2	0	548	572	2	4	8	0	454	467	2	4	16	0	58	60	3	-5	3	221	221	1	-5	6	1	67	54									
5	2	0	388	388	1	5	8	0	132	126	1	5	16	0	32	7	12	-4	3	413	405	1	-4	6	1	775	773									
6	2	0	385	388	1	6	8	0	169	177	1	1	0	1	16	5	1	-3	3	888	915	4	-3	6	1	102	101									
7	2	0	150	151	1	7	8	0	125	127	1	2	0	1	431	430	1	-2	3	111	94	1	-2	6	1	337	330									
8	2	0	333	335	1	8	8	0	98	95	1	3	0	1	162	142	1	-1	3	1445	1418	6	-1	6	1	181	206									
9	2	0	16	13	3	9	8	0	109	110	2	0	0	1	323	378	1	0	3	41	21	1	0	6	1	23	25									
10	2	0	156	153	1	10	8	0	190	194	2	5	0	1	516	538	2	0	3	1453	1420	7	0	6	1	180	205									
11	2	0	25	13	3	11	8	0	38	39	3	6	0	1	1100	1062	4	1	3	109	93	1	1	6	1	337	331									
12	2	0	78	80	1	12	8	0	45	45	5	7	0	1	29	2	1	3	893	919	4	3	6	1	102	101										

13	2	0	245	235	2	13	8	0	116	109	3	8	0	1	43	33	1	4	3	1	412	405	1	4	6	1	771	772
14	2	0	35	27	4	14	8	0	43	63	10	9	0	1	159	163	1	5	3	1	222	222	1	5	6	1	68	55
15	2	0	74	70	5	1	9	0	456	449	2	10	0	1	49	34	1	6	3	1	188	190	1	6	6	1	685	691
16	2	0	25	23	24	2	9	0	110	110	1	11	0	1	57	61	1	7	3	1	985	1009	4	7	6	1	234	237
1	3	0	483	494	2	3	9	0	74	74	1	12	0	1	182	182	1	8	3	1	109	106	1	8	6	1	105	100
2	3	0	291	321	1	4	9	0	81	82	1	13	0	1	19	15	1	9	3	1	163	164	1	9	6	1	102	99
3	3	0	208	231	1	5	9	0	122	123	1	14	0	1	389	374	4	10	3	1	80	83	1	10	6	1	190	189
4	3	0	447	451	1	6	9	0	14	8	4	15	0	1	73	70	4	11	3	1	299	297	2	11	6	1	104	107
5	3	0	295	298	1	7	9	0	206	210	1	16	0	1	219	221	6	12	3	1	35	33	3	12	6	1	95	93
6	3	0	123	130	1	8	9	0	23	23	3	-16	1	1	121	128	9	13	3	1	47	49	3	13	6	1	0	12
7	3	0	1038	1030	4	9	9	0	253	245	3	-15	1	1	80	81	3	14	3	1	93	90	2	14	6	1	203	201
8	3	0	166	165	1	10	9	0	279	260	3	-14	1	1	172	164	2	15	3	1	98	99	4	15	6	1	34	44
9	3	0	190	194	1	11	9	0	89	90	2	-13	1	1	96	97	1	14	4	1	75	77	4	14	7	1	85	59
10	3	0	124	127	1	12	9	0	27	29	12	-12	1	1	121	125	1	14	4	1	257	260	4	14	7	1	84	83
11	3	0	289	283	2	13	9	0	97	95	5	-11	1	1	155	159	2	13	4	1	65	64	3	13	7	1	32	28
12	3	0	22	1	5	0	10	0	1038	1034	8	-10	1	1	155	159	1	12	4	1	24	22	5	11	7	1	32	28
13	3	0	371	359	4	1	10	0	123	118	1	-9	1	1	355	349	1	11	4	1	102	101	1	10	7	1	246	240
14	3	0	106	103	2	2	10	0	343	341	2	-8	1	1	81	75	1	10	4	1	137	136	1	9	7	1	323	320
15	3	0	28	16	9	3	10	0	122	119	1	-7	1	1	406	403	1	9	4	1	124	122	1	8	7	1	169	166
0	4	0	719	748	4	4	10	0	270	269	2	-6	1	1	261	266	1	8	4	1	182	177	1	7	7	1	475	475
1	4	0	143	128	1	5	10	0	179	181	1	-5	1	1	395	356	1	7	4	1	178	184	1	6	7	1	162	166
2	4	0	125	164	1	6	10	0	48	44	1	-4	1	1	238	238	1	6	4	1	664	665	3	5	7	1	356	366
3	4	0	129	137	1	7	10	0	36	40	2	-3	1	1	980	965	3	5	4	1	58	56	1	4	7	1	158	151
4	4	0	421	357	1	8	10	0	340	342	4	-2	1	1	283	292	1	4	4	1	1230	1216	5	3	7	1	622	612
5	4	0	161	149	1	9	10	0	18	33	9	-1	1	1	846	823	4	4	4	1	472	491	2	2	7	1	274	278
6	4	0	245	247	1	10	10	0	448	433	6	1	1	1	846	824	4	3	4	1	896	896	3	1	7	1	896	884
7	4	0	221	227	1	11	10	0	121	115	3	2	1	1	286	292	1	2	4	1	259	264	1	0	7	1	328	335
8	4	0	414	416	2	12	10	0	39	13	10	3	1	1	987	966	3	1	4	1	257	267	1	1	7	1	898	886
9	4	0	112	113	1	13	10	0	47	47	13	4	1	1	236	236	1	4	4	1	408	404	1	4	7	1	156	164
10	4	0	621	609	5	1	11	0	231	230	1	8	1	1	81	73	1	5	4	1	62	57	1	5	7	1	477	474
11	4	0	23	31	4	2	11	0	92	93	1	7	1	1	352	349	2	6	4	1	661	664	3	6	7	1	156	164
12	4	0	49	56	2	3	11	0	477	472	3	6	1	1	261	267	1	7	4	1	474	492	2	7	7	1	364	365
13	4	0	144	145	2	4	11	0	14	10	13	8	1	1	81	73	1	8	4	1	1240	1216	5	8	7	1	156	164
14	4	0	196	190	3	5	11	0	131	131	1	9	1	1	352	349	2	9	4	1	661	664	3	9	7	1	477	474
15	4	0	9	0	9	6	11	0	13	1	12	10	1	1	161	161	1	10	4	1	175	183	1	10	7	1	167	167
1	5	0	418	405	1	7	11	0	249	248	2	11	1	1	257	252	2	11	4	1	181	178	1	11	7	1	324	319
2	5	0	407	424	1	8	11	0	85	83	2	12	1	1	122	124	1	12	4	1	125	121	1	12	7	1	138	138
3	5	0	224	230	1	9	11	0	22	9	7	13	1	1	97	97	2	13	4	1	135	135	1	13	7	1	242	240
4	5	0	248	264	1	10	11	0	123	121	3	14	1	1	168	165	2	14	4	1	106	100	1	14	7	1	31	28
5	5	0	121	113	1	11	11	0	238	234	4	15	1	1	85	80	4	15	4	1	135	135	1	15	7	1	77	83
6	5	0	119	109	1	12	11	0	0	15	1	16	1	1	120	127	6	16	4	1	69	65	4	16	7	1	61	58
7	5	0	180	193	1	0	12	0	367	367	3	-16	2	1	67	70	8	14	4	1	263	259	5	14	8	1	160	162

8	5	0	114	116	1	1	12	0	13	8	12	-15	2	1	67	59	4	15	4	1	74	78	4	-13	8	1	1	23	18	23
9	5	0	21	18	2	2	12	0	283	283	2	-14	2	1	94	92	2	-15	5	1	103	102	4	-12	8	1	1	73	74	3
10	5	0	168	169	1	3	12	0	247	240	2	-13	2	1	75	79	2	-14	5	1	178	170	3	-11	8	1	1	93	95	2
11	5	0	139	135	1	4	12	0	30	35	4	-12	2	1	104	106	1	-13	5	1	38	39	6	-10	8	1	1	214	210	2
12	5	0	62	67	2	5	12	0	94	94	2	-11	2	1	162	164	1	-12	5	1	92	87	2	-9	8	1	1	98	99	1
13	5	0	196	184	3	6	12	0	31	13	5	-10	2	1	140	143	1	-11	5	1	148	141	1	-8	8	1	1	114	114	1
14	5	0	165	165	3	7	12	0	127	126	2	-9	2	1	181	174	1	-10	5	1	51	51	2	-7	8	1	1	164	158	1
15	5	0	46	48	6	8	12	0	80	89	2	-8	2	1	329	321	1	-9	5	1	153	153	1	-6	8	1	1	340	338	2
0	6	0	1376	1333	8	9	12	0	31	24	5	-7	2	1	214	214	1	-8	5	1	190	192	1	-5	8	1	1	96	97	1
1	6	0	383	394	1	10	12	0	27	26	7	-6	2	1	475	482	1	-7	5	1	61	57	1	-4	8	1	1	396	391	2
2	6	0	79	63	1	11	12	0	87	88	3	-5	2	1	343	354	1	-6	5	1	242	236	1	-3	8	1	1	147	149	1
3	6	0	367	369	1	1	13	0	225	223	2	-4	2	1	189	187	1	-5	5	1	299	295	1	-2	8	1	1	663	668	3
4	6	0	162	142	1	2	13	0	14	14	9	-3	2	1	603	623	2	-4	5	1	135	136	1	-1	8	1	1	183	184	1
5	6	0	151	154	1	3	13	0	499	486	5	-2	2	1	427	422	1	-3	5	1	346	338	1	0	8	1	1	31	5	1

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabesiz

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	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	8	1	186	183	1	-11	12	1	50	48	7	5	0	2	78	66	1	0	3	2	206	210	1	0	6	2	1176	1166	1	0	6	2	1176	1166	1
2	8	1	662	669	3	-10	12	1	61	61	3	6	0	2	721	745	2	1	3	2	932	938	4	1	6	2	255	253	1	6	2	255	253	1	
3	8	1	146	149	1	-9	12	1	110	107	2	7	0	2	163	167	1	2	3	2	579	613	2	2	6	2	526	519	2	6	2	526	519	2	
4	8	1	404	395	2	-8	12	1	113	115	2	8	0	2	650	682	3	3	3	2	64	77	1	3	6	2	82	76	3	6	2	82	76	3	
5	8	1	96	97	1	-7	12	1	122	116	2	9	0	2	194	197	1	4	3	2	230	233	1	4	6	2	145	139	4	6	2	145	139	4	
6	8	1	340	337	2	-6	12	1	109	105	2	10	0	2	606	608	4	5	3	2	268	268	1	5	6	2	147	148	5	6	2	147	148	5	
7	8	1	162	157	1	-5	12	1	78	80	2	11	0	2	141	140	1	6	3	2	306	303	1	6	6	2	665	675	6	6	2	665	675	6	
8	8	1	110	116	1	-4	12	1	198	201	2	12	0	2	21	13	5	7	3	2	325	301	1	7	6	2	139	141	7	6	2	139	141	7	
9	8	1	93	98	1	-3	12	1	132	133	1	13	0	2	147	144	1	8	3	2	90	89	1	8	6	2	345	343	8	6	2	345	343	8	
10	8	1	218	210	2	-2	12	1	93	91	1	14	0	2	138	134	2	9	3	2	192	194	1	9	6	2	152	155	9	6	2	152	155	9	
11	8	1	94	95	2	-1	12	1	167	160	1	15	0	2	37	37	6	10	3	2	87	83	1	10	6	2	268	266	10	6	2	268	266	10	
12	8	1	73	75	3	0	12	1	95	95	1	16	0	2	34	28	19	11	3	2	227	228	2	11	6	2	77	77	11	6	2	77	77	11	
13	8	1	22	17	21	1	12	1	164	160	1	-16	1	2	71	76	15	12	3	2	93	98	2	12	6	2	132	123	12	6	2	132	123	12	
14	8	1	168	161	5	2	12	1	94	94	1	-15	1	2	34	25	10	13	3	2	477	468	5	13	6	2	190	188	13	6	2	190	188	13	
-13	9	1	62	74	6	3	12	1	141	134	1	-14	1	2	55	49	3	14	3	2	27	19	11	14	6	2	173	171	14	6	2	173	171	14	
-12	9	1	20	39	19	4	12	1	196	199	2	-13	1	2	247	245	2	15	3	2	88	91	4	15	6	2	52	50	15	6	2	52	50	15	
-11	9	1	73	78	3	5	12	1	74	81	1	-12	1	2	125	125	1	15	4	2	83	75	5	15	7	2	66	60	15	7	2	66	60	15	
-10	9	1	128	131	2	6	12	1	105	104	1	-11	1	2	94	101	1	14	4	2	159	152	2	14	7	2	299	295	14	7	2	299	295	14	
-9	9	1	76	71	2	7	12	1	117	114	2	-10	1	2	237	236	1	13	4	2	129	129	2	13	7	2	99	92	13	7	2	99	92	13	
-8	9	1	58	61	1	8	12	1	116	117	2	-9	1	2	106	96	1	12	4	2	196	190	2	12	7	2	203	201	12	7	2	203	201	12	
-7	9	1	333	339	3	9	12	1	104	107	2	-8	1	2	213	223	1	11	4	2	38	34	3	11	7	2	70	64	11	7	2	70	64	11	
-6	9	1	134	137	1	10	12	1	54	61	4	-7	1	2	308	314	1	10	4	2	534	529	4	10	7	2	46	42	10	7	2	46	42	10	
-5	9	1	299	299	2	11	12	1	41	48	5	-6	1	2	205	225	1	9	4	2	51	56	1	9	7	2	136	134	9	7	2	136	134	9	
-4	9	1	63	60	1	-10	13	1	69	74	6	-5	1	2	966	957	3	8	4	2	159	158	1	8	7	2	408	403	8	7	2	408	403	8	
-3	9	1	217	220	1	-9	13	1	148	154	3	-4	1	2	97	85	1	7	4	2	40	37	1	7	7	2	128	127	7	7	2	128	127	7	
-2	9	1	173	180	1	-8	13	1	122	122	3	-3	1	2	726	719	2	6	4	2	537	537	2	6	7	2	201	206	6	7	2	201	206	6	
-1	9	1	351	349	1	-7	13	1	290	279	4	-2	1	2	127	138	1	5	4	2	236	239	1	5	7	2	125	131	5	7	2	125	131	5	
0	9	1	104	104	1	-6	13	1	45	35	5	-1	1	2	502	500	2	4	4	2	293	268	1	4	7	2	858	880	4	7	2	858	880	4	
1	9	1	350	349	2	-5	13	1	94	97	3	0	1	2	104	102	1	3	4	2	247	250	1	3	7	2	146	150	3	7	2	146	150	3	
2	9	1	175	179	1	-4	13	1	154	151	2	1	1	2	501	500	2	2	4	2	247	250	1	2	7	2	146	150	2	7	2	146	150	2	
3	9	1	220	220	1	-3	13	1	261	258	3	1	1	2	127	139	1	1	4	2	212	198	1	1	7	2	497	509	1	7	2	497	509	1	
4	9	1	64	59	1	-2	13	1	83	78	1	0	4	2	721	716	3	0	4	2	39	83	1	0	7	2	30	31	0	7	2	30	31	0	
5	9	1	297	298	2	-1	13	1	283	278	3	1	1	2	97	86	1	1	4	2	214	199	1	1	7	2	499	510	1	7	2	499	510	1	
6	9	1	137	137	1	0	13	1	93	91	1	2	1	2	966	958	3	2	4	2	589	568	2	2	7	2	856	878	2	7	2	856	878	2	
7	9	1	335	339	2	1	13	1	282	279	2	6	1	2	205	225	1	3	4	2	249	250	1	3	7	2	126	131	3	7	2	126	131	3	
8	9	1	58	60	2	2	13	1	82	78	1	7	1	2	309	313	1	4	4	2	295	270	1	4	7	2	199	206	4	7	2	199	206	4	
9	9	1	80	74	1	3	13	1	259	259	3	8	1	2	212	224	1	5	4	2	234	238	1	5	7	2	128	128	5	7	2	128	128	5	

10	9	1	125	130	2	4	13	1	154	151	2	9	1	2	106	95	1	6	4	2	540	538	2	7	7	2	403	402	3
11	9	1	82	78	2	5	13	1	98	97	2	10	1	2	235	235	1	7	4	2	38	36	1	8	7	2	134	134	1
12	9	1	25	39	9	6	13	1	38	35	4	11	1	2	94	102	1	8	4	2	155	155	1	9	7	2	42	41	2
13	9	1	72	75	4	7	13	1	291	278	4	12	1	2	127	126	1	9	4	2	56	57	1	10	7	2	61	63	2
13	10	1	47	32	10	8	13	1	125	123	2	13	1	2	245	243	2	10	4	2	534	529	4	11	7	2	208	201	2
13	10	1	83	86	3	9	13	1	152	154	3	14	1	2	57	49	3	11	4	2	32	32	3	12	7	2	96	91	2
11	10	1	58	55	4	10	13	1	58	72	5	15	1	2	29	27	11	12	4	2	200	190	2	13	7	2	307	295	5
10	10	1	291	287	5	-9	14	1	50	55	9	16	1	2	58	77	5	13	4	2	135	129	2	14	7	2	59	62	5
-9	10	1	30	15	5	-8	14	1	96	102	3	-16	2	2	67	52	21	14	4	2	162	152	3	-14	8	2	88	120	5
-8	10	1	77	74	1	-7	14	1	57	52	5	-15	2	2	14	14	13	15	4	2	77	75	4	-13	8	2	195	190	5
-7	10	1	39	40	2	-6	14	1	319	309	4	-14	2	2	147	145	2	-15	5	2	65	63	5	-12	8	2	106	112	3
-6	10	1	424	417	3	-5	14	1	17	7	16	-13	2	2	243	241	2	-14	5	2	68	71	3	-11	8	2	23	24	8
-5	10	1	84	89	1	-4	14	1	482	463	6	-12	2	2	216	211	2	-13	5	2	143	145	2	-10	8	2	293	281	3
-4	10	1	468	468	3	-3	14	1	127	121	2	-11	2	2	88	87	1	-12	5	2	81	86	2	-9	8	2	32	34	2
-3	10	1	59	59	1	-2	14	1	164	162	2	-10	2	2	259	262	1	-11	5	2	157	158	1	-8	8	2	225	218	2
-2	10	1	113	112	1	-1	14	1	83	86	1	-9	2	2	88	86	1	-10	5	2	257	254	2	-7	8	2	73	70	1
-1	10	1	268	268	1	0	14	1	18	7	6	-8	2	2	572	576	2	-9	5	2	120	116	1	-6	8	2	58	59	1
0	10	1	49	43	1	1	14	1	89	86	1	-7	2	2	167	165	1	-8	5	2	62	61	1	-5	8	2	197	205	1
1	10	1	272	269	1	2	14	1	169	163	2	-6	2	2	241	231	1	-7	5	2	354	356	2	-4	8	2	214	220	1
2	10	1	109	112	1	3	14	1	123	122	2	-5	2	2	243	257	1	-6	5	2	427	432	2	-3	8	2	35	37	1
3	10	1	62	59	1	4	14	1	474	462	7	-4	2	2	380	364	1	-5	5	2	837	838	4	-2	8	2	449	451	2
4	10	1	466	467	3	5	14	1	0	7	1	-3	2	2	381	394	1	-4	5	2	66	61	1	-1	8	2	86	85	1
5	10	1	87	88	1	6	14	1	317	307	4	-2	2	2	1243	1207	6	-3	5	2	188	188	1	0	8	2	688	710	3
6	10	1	421	416	3	7	14	1	51	52	3	-1	2	2	42	47	1	-2	5	2	411	427	1	1	8	2	84	85	1
7	10	1	41	39	2	8	14	1	96	103	3	0	2	2	94	99	1	-1	5	2	484	473	2	2	8	2	447	452	2
8	10	1	84	74	2	-7	15	1	0	8	1	1	2	2	42	47	1	0	5	2	260	281	1	3	8	2	34	36	1
9	10	1	27	16	6	-6	15	1	138	137	3	2	2	2	1258	1208	6	1	5	2	485	473	2	4	8	2	213	221	1
10	10	1	291	289	4	-5	15	1	158	157	3	3	2	2	382	394	1	2	5	2	410	427	1	5	8	2	206	205	1
11	10	1	54	55	4	-4	15	1	42	35	5	4	2	2	387	365	1	3	5	2	189	186	1	6	8	2	62	60	1
12	10	1	69	86	5	-3	15	1	142	143	3	5	2	2	241	257	1	4	5	2	65	61	1	7	8	2	72	70	2
13	10	1	43	30	14	-2	15	1	83	86	3	6	2	2	243	233	1	5	5	2	842	835	4	8	8	2	220	217	2
12	11	1	69	73	5	-1	15	1	165	162	2	7	2	2	167	164	1	6	5	2	429	432	2	9	8	2	34	34	3
11	11	1	121	123	2	0	15	1	47	45	3	8	2	2	582	581	2	7	5	2	352	356	2	10	8	2	286	281	4
10	11	1	18	17	18	1	15	1	173	163	2	9	2	2	86	87	1	8	5	2	61	59	1	11	8	2	32	24	5
9	11	1	269	261	3	2	15	1	87	86	2	10	2	2	257	261	1	9	5	2	121	116	1	12	8	2	110	112	2
8	11	1	105	109	2	3	15	1	147	142	2	11	2	2	89	87	1	10	5	2	257	254	2	13	8	2	187	189	4
7	11	1	330	329	4	4	15	1	36	35	6	12	2	2	219	212	2	11	5	2	158	156	2	14	8	2	110	121	5
6	11	1	148	146	2	5	15	1	158	158	3	13	2	2	246	240	2	12	5	2	80	86	2	13	9	2	182	188	4
5	11	1	45	41	2	6	15	1	147	137	3	14	2	2	146	145	2	13	5	2	148	145	2	-12	9	2	74	80	3
4	11	1	108	109	1	7	15	1	8	9	7	15	2	2	21	13	21	14	5	2	77	72	3	-11	9	2	277	266	4
-3	11	1	214	211	2	-5	16	1	8	15	7	16	2	2	35	50	15	15	5	2	65	63	5	-10	9	2	79	85	3
-2	11	1	96	101	1	-4	16	1	240	244	5	-15	3	2	89	92	3	-15	6	2	47	52	11	-9	9	2	155	159	2

-1	11	1	262	264	2	-3	16	1	69	75	3	-14	3	2	15	20	14	-14	6	2	174	170	4	-8	9	2	107	109	1	11
0	11	1	45	40	2	-2	16	1	173	176	4	-13	3	2	478	468	5	-13	6	2	199	188	3	-7	9	2	116	115	1	11
1	11	1	265	266	2	-1	16	1	79	87	3	-12	3	2	97	97	2	-12	6	2	133	125	2	-6	9	2	85	85	1	11
2	11	1	104	102	1	0	16	1	132	126	3	-11	3	2	222	228	2	-11	6	2	78	77	1	-5	9	2	331	333	2	11
3	11	1	215	211	1	1	16	1	85	87	4	-10	3	2	85	81	1	-10	6	2	268	264	2	-4	9	2	109	110	1	11
4	11	1	109	109	1	2	16	1	172	177	3	-9	3	2	192	195	1	-9	6	2	155	156	1	-3	9	2	159	169	1	11
5	11	1	42	40	2	3	16	1	66	75	3	-8	3	2	91	91	1	-8	6	2	343	346	2	-2	9	2	65	66	1	11
6	11	1	149	146	1	4	16	1	240	244	5	-7	3	2	324	304	1	-7	6	2	140	141	1	-1	9	2	322	319	1	11
7	11	1	333	329	3	5	16	1	0	14	1	-6	3	2	306	303	1	-6	6	2	664	675	3	0	9	2	65	59	1	11
8	11	1	104	108	2	0	0	2	1173	1223	12	-5	3	2	267	265	1	-5	6	2	146	148	1	1	9	2	318	317	1	11
9	11	1	269	262	3	1	0	2	99	105	1	-4	3	2	227	233	1	-4	6	2	140	137	1	2	9	2	65	67	1	11
10	11	1	27	16	8	2	0	2	294	319	1	-3	3	2	72	83	1	-3	6	2	80	75	1	3	9	2	162	171	1	11
11	11	1	125	123	3	3	0	2	62	38	1	-2	3	2	578	614	2	-2	6	2	521	517	2	4	9	2	111	110	1	11
12	11	1	66	73	5	4	0	2	57	55	1	-1	3	2	934	939	4	-1	6	2	258	253	1	5	9	2	334	332	3	11

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabesi2

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	9	2	87	86	1	2	13	2	80	81	1	2	13	2	80	81	1	13	7	3	77	77	81	3
7	9	2	113	113	1	3	13	2	312	308	3	12	1	3	193	192	2	14	7	3	79	79	82	4
8	9	2	110	108	2	4	13	2	108	110	2	13	1	3	133	135	2	-14	8	3	60	60	69	9
9	9	2	151	158	2	5	13	2	121	121	2	14	1	3	187	176	3	-13	8	3	54	54	49	4
10	9	2	77	86	2	6	13	2	97	97	2	15	1	3	169	171	4	-12	8	3	272	272	266	4
11	9	2	273	267	4	7	13	2	102	99	2	16	1	3	121	131	6	-11	8	3	119	119	114	2
12	9	2	82	80	4	8	13	2	57	56	3	-15	2	3	34	25	8	-10	8	3	44	44	44	3
13	9	2	189	187	4	9	13	2	27	19	8	-14	2	3	90	94	2	-9	8	3	213	203	2	2
12	10	2	48	37	5	10	13	2	60	68	5	-13	2	3	17	15	8	-8	8	3	78	77	1	1
11	10	2	46	53	5	-8	14	2	58	47	6	-12	2	3	396	384	4	-7	8	3	107	107	1	1
10	10	2	400	388	5	-7	14	2	69	76	4	-11	2	3	190	189	1	-6	8	3	410	414	3	3
-9	10	2	83	87	1	-6	14	2	197	204	4	-10	2	3	372	377	2	-5	8	3	102	104	1	1
-8	10	2	486	474	4	-5	14	2	124	127	3	-9	2	3	181	176	1	-4	8	3	285	283	2	2
-7	10	2	71	70	1	-4	14	2	102	97	2	-8	2	3	139	139	1	-3	8	3	76	71	1	1
-6	10	2	74	71	1	-3	14	2	51	39	3	-7	2	3	380	383	1	-2	8	3	434	433	2	2
-5	10	2	139	138	1	-2	14	2	133	132	2	-6	2	3	571	564	2	-1	8	3	91	88	1	1
-4	10	2	177	175	1	-1	14	2	31	29	3	-5	2	3	91	99	1	0	8	3	250	247	1	1
-3	10	2	110	109	1	0	14	2	384	373	4	-4	2	3	838	819	3	1	8	3	88	88	1	1
-2	10	2	192	199	1	1	14	2	37	30	4	-3	2	3	454	472	1	2	8	3	439	435	2	2
-1	10	2	117	117	1	2	14	2	139	132	2	-2	2	3	953	952	4	3	8	3	79	72	1	1
0	10	2	485	480	3	3	14	2	47	39	4	-1	2	3	150	137	1	4	8	3	286	281	2	2
1	10	2	117	118	1	4	14	2	104	98	2	0	2	3	534	544	2	5	8	3	102	104	1	1
2	10	2	192	199	1	5	14	2	131	128	2	1	2	3	149	137	1	6	8	3	102	104	1	1
3	10	2	107	108	1	6	14	2	196	205	4	2	2	3	959	951	5	7	8	3	406	412	3	3
4	10	2	177	175	1	7	14	2	74	75	3	3	2	3	453	473	2	8	8	3	105	108	1	1
5	10	2	141	140	1	8	14	2	59	50	4	4	2	3	833	813	3	9	8	3	73	76	2	2
6	10	2	67	68	1	-7	15	2	124	141	5	5	2	3	94	99	1	10	8	3	215	204	2	2
7	10	2	69	69	1	-6	15	2	28	14	14	6	2	3	576	565	2	11	8	3	44	43	3	3
8	10	2	484	475	5	-5	15	2	164	161	3	7	2	3	380	384	1	12	8	3	116	114	2	2
9	10	2	84	87	2	-4	15	2	81	80	3	8	2	3	137	137	1	13	8	3	263	267	4	4
10	10	2	399	388	5	-3	15	2	242	237	4	9	2	3	179	175	1	14	8	3	51	50	5	5
11	10	2	49	51	3	-2	15	2	36	33	6	10	2	3	371	378	2	-13	9	3	66	68	15	15
12	10	2	36	34	8	-1	15	2	91	97	2	11	2	3	188	189	2	-12	9	3	79	78	4	4
11	11	2	41	48	7	0	15	2	75	77	2	12	2	3	392	383	4	-11	9	3	107	97	2	2
1	11	2	130	132	3	1	15	2	94	97	2	13	2	3	24	14	6	-10	9	3	183	182	2	2
0	11	2	88	94	3	2	15	2	38	34	4	14	2	3	93	95	2	-9	9	3	354	353	3	3
9	11	2	117	118	2	3	15	2	241	238	4	15	2	3	27	25	17	-8	9	3	84	84	1	1

-8	11	2	170	161	2	81	81	3	-15	3	121	127	3	-14	6	3	181	192	5	-7	9	3	318	319
-7	11	2	274	264	3	157	161	3	-14	3	39	40	5	-13	6	3	126	117	4	-6	9	3	135	132
-6	11	2	29	23	4	13	14	12	-13	3	96	92	2	-12	6	3	210	211	2	-5	9	3	193	195
-5	11	2	315	309	3	141	142	4	-12	3	230	229	2	-11	6	3	148	145	2	-4	9	3	133	135
-4	11	2	110	113	1	109	114	4	-11	3	64	57	1	-10	6	3	102	98	1	-3	9	3	443	447
-3	11	2	411	405	3	83	84	3	-10	3	156	154	1	-9	6	3	71	71	1	-2	9	3	62	64
-2	11	2	130	129	1	168	173	3	-9	3	367	367	2	-8	6	3	85	78	1	-1	9	3	374	370
-1	11	2	243	243	2	34	31	8	-8	3	118	121	1	-7	6	3	125	124	1	0	9	3	219	232
0	11	2	58	57	1	59	51	4	-7	3	811	845	3	-6	6	3	515	522	3	1	9	3	376	370
1	11	2	242	243	1	27	29	8	-6	3	332	337	1	-5	6	3	250	258	1	2	9	3	63	63
2	11	2	127	128	1	167	175	3	-5	3	373	383	1	-4	6	3	358	363	2	3	9	3	444	450
3	11	2	407	403	3	82	86	3	-4	3	82	80	1	-3	6	3	125	126	1	4	9	3	137	136
4	11	2	108	113	1	112	114	4	-3	3	432	413	2	-2	6	3	302	298	1	5	9	3	196	196
5	11	2	311	307	3	200	222	1	-2	3	103	102	1	-1	6	3	157	166	1	6	9	3	135	131
6	11	2	26	23	5	190	167	1	-1	3	704	715	3	0	6	3	278	274	1	7	9	3	317	321
7	11	2	265	264	3	222	217	1	0	3	70	60	1	1	6	3	156	166	1	8	9	3	83	87
8	11	2	166	163	2	300	248	1	1	3	699	711	3	2	6	3	309	301	1	9	9	3	352	353
9	11	2	114	119	2	293	303	1	2	3	103	102	1	3	6	3	126	126	1	10	9	3	181	182
10	11	2	86	94	2	548	548	2	3	3	437	413	2	4	6	3	360	361	2	11	9	3	93	95
11	11	2	123	130	3	133	137	1	4	3	84	80	1	5	6	3	253	258	1	12	9	3	76	84
12	11	2	33	49	11	158	163	1	5	3	373	381	1	6	6	3	516	521	3	13	9	3	85	79
11	12	2	61	61	8	329	227	1	6	3	336	336	1	7	6	3	125	123	1	-12	10	3	101	98
10	12	2	83	80	3	315	319	2	7	3	116	119	1	8	6	3	86	79	1	-11	10	3	134	129
-9	12	2	72	77	4	194	187	1	8	3	116	119	1	9	6	3	70	72	1	-10	10	3	245	241
-8	12	2	259	256	4	126	130	1	9	3	365	367	2	10	6	3	101	96	2	-9	10	3	185	177
-7	12	2	94	93	2	171	165	2	10	3	156	154	1	11	6	3	142	144	2	-8	10	3	227	219
-6	12	2	136	136	2	286	277	3	11	3	63	58	2	12	6	3	215	211	3	-7	10	3	109	102
-5	12	2	0	7	1	46	50	7	12	3	230	229	2	13	6	3	117	117	3	-6	10	3	102	106
-4	12	2	98	97	1	269	283	11	13	3	95	94	2	14	6	3	182	192	4	-5	10	3	21	16
-3	12	2	102	106	1	144	133	9	14	3	49	39	5	-14	7	3	90	81	5	-4	10	3	393	390
-2	12	2	335	328	3	175	172	3	15	3	131	128	4	-13	7	3	79	83	4	-3	10	3	66	63
-1	12	2	92	91	1	184	175	2	-15	4	57	55	5	-12	7	3	150	147	3	-2	10	3	81	80
0	12	2	195	200	1	135	134	2	-14	4	168	163	3	-11	7	3	157	152	2	-1	10	3	44	45
1	12	2	92	91	1	196	193	2	-13	4	189	182	2	-10	7	3	100	100	1	0	10	3	226	220
2	12	2	332	328	3	278	273	2	-12	4	204	200	2	-9	7	3	261	260	2	1	10	3	46	44
3	12	2	107	106	2	200	195	1	-11	4	28	26	4	-8	7	3	57	59	1	2	10	3	83	81
4	12	2	102	96	2	381	376	2	-10	4	143	143	1	-7	7	3	446	448	3	3	10	3	66	64
5	12	2	0	6	1	53	53	1	-9	4	234	237	1	-6	7	3	278	283	2	4	10	3	394	388
6	12	2	137	137	2	340	331	1	-8	4	71	69	1	-5	7	3	78	82	1	5	10	3	14	16
7	12	2	95	92	2	89	98	1	-7	4	338	344	1	-4	7	3	44	46	1	6	10	3	102	106
8	12	2	259	257	4	128	130	1	-6	4	512	521	2	-3	7	3	470	478	2	7	10	3	111	103
9	12	2	77	76	2	288	298	1	-5	4	178	178	1	-2	7	3	138	141	1	8	10	3	223	219



10	12	2	77	81	2	-3	1	3	275	279	1	-4	4	3	866	860	4	-1	7	3	124	123	1	9	10	3	181	176	2
11	12	2	47	61	8	-2	1	3	353	365	1	-3	4	3	175	185	1	0	7	3	271	270	1	10	10	3	239	242	3
10	13	2	60	67	6	-1	1	3	898	931	4	-2	4	3	574	534	2	1	7	3	124	121	1	11	10	3	129	129	2
-9	13	2	38	20	6	0	1	3	356	345	2	-1	4	3	325	335	1	2	7	3	135	141	1	12	10	3	96	96	3
-8	13	2	54	55	5	1	1	3	901	930	5	0	4	3	138	118	1	3	7	3	478	481	2	-12	11	3	111	116	14
-7	13	2	100	102	2	2	1	3	353	365	1	1	4	3	324	336	1	4	7	3	40	45	1	-11	11	3	139	135	3
-6	13	2	96	98	2	3	1	3	275	273	1	2	4	3	575	531	2	5	7	3	76	85	1	-10	11	3	98	93	3
-5	13	2	122	124	2	4	1	3	288	298	1	3	4	3	175	184	1	6	7	3	280	282	2	-9	11	3	203	202	3
-4	13	2	108	110	2	5	1	3	127	127	1	4	4	3	866	860	4	7	7	3	441	447	4	-8	11	3	19	18	10
-3	13	2	315	309	3	6	1	3	85	95	1	5	4	3	178	178	1	8	7	3	57	60	2	-7	11	3	280	276	3
-2	13	2	84	82	1	7	1	3	340	330	1	6	4	3	508	517	3	9	7	3	264	261	2	-6	11	3	108	108	1
-1	13	2	277	278	2	8	1	3	53	53	1	7	4	3	337	344	2	10	7	3	99	98	2	-5	11	3	163	163	2
0	13	2	104	103	1	9	1	3	388	378	2	8	4	3	72	71	1	11	7	3	153	153	2	-4	11	3	60	57	1
1	13	2	279	278	2	10	1	3	197	195	1	9	4	3	238	239	2	12	7	3	146	147	2	-3	11	3	171	168	1

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabes12

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	11	3	22	25	3	-2	16	3	190	198	4	-6	3	4	51	51	1	-5	6	4	229	233	1	4	9	4	46	51	1
-1	11	3	178	177	1	-1	16	3	79	75	3	-5	3	4	341	346	1	-4	6	4	420	428	2	5	9	4	644	645	6
0	11	3	28	27	3	0	16	3	51	63	4	-4	3	4	228	238	1	-3	6	4	169	170	1	6	9	4	64	66	2
1	11	3	183	178	1	1	16	3	73	77	4	-3	3	4	185	180	1	-2	6	4	542	538	2	7	9	4	64	64	2
2	11	3	27	24	3	2	16	3	192	200	4	-2	3	4	530	551	2	-1	6	4	103	111	1	8	9	4	112	114	2
3	11	3	170	169	1	3	16	3	40	31	6	-1	3	4	264	284	1	0	6	4	57	53	1	9	9	4	174	173	2
4	11	3	59	58	2	4	16	3	189	200	6	0	3	4	530	551	2	1	6	4	101	109	1	10	9	4	50	42	3
5	11	3	161	162	2	1	0	4	380	358	2	1	3	4	266	291	1	2	6	4	545	543	2	11	9	4	282	274	3
6	11	3	112	109	2	2	0	4	899	901	4	2	3	4	532	552	2	3	6	4	169	171	1	12	9	4	119	121	3
7	11	3	283	276	2	3	0	4	14	2	1	3	3	4	184	175	1	4	6	4	422	427	2	13	9	4	132	148	4
8	11	3	23	18	5	4	0	4	34	38	1	4	3	4	226	238	1	5	6	4	231	232	1	-12	10	4	130	131	5
9	11	3	203	203	3	5	0	4	700	706	2	5	3	4	344	345	1	6	6	4	420	431	3	-11	10	4	139	144	3
10	11	3	89	94	2	6	0	4	200	178	1	6	3	4	50	51	1	7	6	4	98	95	1	-10	10	4	208	217	3
11	11	3	127	136	3	7	0	4	491	511	2	7	3	4	170	169	1	8	6	4	370	370	3	-9	10	4	149	149	2
12	11	3	91	114	4	8	0	4	44	47	1	8	3	4	186	184	1	9	6	4	91	91	2	-8	10	4	286	288	3
11	12	3	89	92	8	9	0	4	96	100	1	9	3	4	273	277	2	10	6	4	198	200	2	-7	10	4	97	100	1
10	12	3	67	73	4	10	0	4	231	235	1	10	3	4	89	92	1	11	6	4	128	129	2	-6	10	4	137	137	1
-9	12	3	91	96	3	11	0	4	158	162	1	11	3	4	336	330	3	12	6	4	294	292	4	-5	10	4	102	104	1
-8	12	3	182	181	3	12	0	4	192	192	2	12	3	4	328	319	3	13	6	4	107	104	3	-4	10	4	169	171	1
-7	12	3	72	69	2	13	0	4	126	129	2	13	3	4	286	277	4	14	6	4	132	145	3	-3	10	4	81	87	1
-6	12	3	165	169	2	14	0	4	44	38	4	14	3	4	155	148	3	-14	7	4	152	148	6	-2	10	4	400	400	3
-5	12	3	43	46	3	15	0	4	169	159	4	15	3	4	115	114	5	-13	7	4	157	155	3	-1	10	4	63	63	1
-4	12	3	311	308	3	-15	1	4	180	184	3	-15	4	4	179	193	4	-12	7	4	154	154	2	0	10	4	400	400	2
-3	12	3	43	47	2	-14	1	4	98	99	2	-14	4	4	162	163	3	-11	7	4	131	136	2	1	10	4	66	62	1
-2	12	3	318	317	3	-13	1	4	206	201	2	-13	4	4	128	125	2	-10	7	4	131	129	1	2	10	4	403	401	2
-1	12	3	105	105	1	-12	1	4	149	147	1	-12	4	4	242	239	3	-9	7	4	293	295	3	3	10	4	87	87	1
0	12	3	16	7	7	-11	1	4	281	278	2	-11	4	4	209	205	2	-8	7	4	195	193	1	4	10	4	175	171	1
1	12	3	102	104	1	-10	1	4	133	130	1	-10	4	4	315	314	3	-7	7	4	101	104	1	5	10	4	98	102	1
2	12	3	317	314	3	-9	1	4	145	152	1	-9	4	4	113	107	1	-6	7	4	70	71	1	6	10	4	135	135	2
3	12	3	43	47	2	-8	1	4	249	241	1	-8	4	4	432	430	2	-5	7	4	240	248	2	7	10	4	98	101	2
4	12	3	312	304	3	-7	1	4	202	202	1	-7	4	4	140	139	1	-4	7	4	27	25	2	8	10	4	290	288	4
5	12	3	49	46	2	-6	1	4	166	166	1	-6	4	4	82	85	1	-3	7	4	395	410	2	9	10	4	149	150	2
6	12	3	165	169	2	-5	1	4	817	810	3	-5	4	4	55	56	1	-2	7	4	236	241	1	10	10	4	211	218	3
7	12	3	73	70	2	-4	1	4	251	249	1	-4	4	4	279	293	1	-1	7	4	281	278	1	11	10	4	151	143	3
8	12	3	185	180	3	-3	1	4	906	893	4	-3	4	4	157	166	1	0	7	4	17	2	1	12	10	4	128	132	3
9	12	3	99	97	3	-2	1	4	404	410	2	-2	4	4	182	168	1	1	7	4	285	282	1	-11	11	4	149	143	3
10	12	3	69	74	3	-1	1	4	828	835	4	-1	4	4	114	100	1	2	7	4	237	241	1	-10	11	4	132	129	3

11	12	3	75	92	6	0	1	4	169	158	1	0	4	4	448	394	2	3	7	4	397	412	2	-9	11	4	155	150	2	
10	13	3	64	76	16	1	1	4	825	836	4	1	4	4	115	100	1	4	7	4	29	24	2	-8	11	4	80	77	2	
-9	13	3	203	209	5	2	1	4	406	409	2	2	4	4	183	172	1	5	7	4	239	248	1	-7	11	4	173	176	2	
-8	13	3	72	64	4	3	1	4	908	894	4	3	4	4	158	167	1	6	7	4	67	71	1	-6	11	4	72	74	1	
-7	13	3	250	249	4	4	1	4	253	249	1	4	4	4	282	292	1	7	7	4	100	102	3	-5	11	4	299	295	3	
-6	13	3	54	55	3	5	1	4	824	815	3	5	4	4	56	58	1	8	8	7	4	192	192	2	-4	11	4	125	129	1
-5	13	3	163	158	2	6	1	4	164	167	1	6	4	4	79	86	1	9	9	7	4	295	298	3	-3	11	4	90	93	1
-4	13	3	116	111	2	7	1	4	199	200	1	7	4	4	142	138	2	10	10	7	4	133	129	1	-2	11	4	105	100	1
-3	13	3	258	248	2	8	1	4	251	241	1	8	4	4	424	429	2	11	11	7	4	133	139	2	-1	11	4	88	88	1
-2	13	3	84	85	1	9	1	4	145	153	1	9	4	4	113	106	1	12	12	7	4	152	153	2	0	11	4	30	25	3
-1	13	3	253	251	2	10	1	4	130	130	1	10	4	4	315	316	2	13	13	7	4	156	153	3	1	11	4	89	89	1
0	13	3	38	35	2	11	1	4	278	279	2	11	4	4	212	205	2	14	14	7	4	136	149	4	2	11	4	105	101	1
1	13	3	256	250	2	12	1	4	150	149	2	12	4	4	245	240	3	-13	8	4	4	51	57	5	3	11	4	89	91	1
2	13	3	88	87	1	13	1	4	201	200	2	13	4	4	130	125	2	-12	8	4	4	36	28	3	6	11	4	76	74	2
3	13	3	253	249	3	14	1	4	182	185	4	15	4	4	183	193	5	-9	9	8	4	99	97	2	7	11	4	176	174	2
4	13	3	115	112	2	15	1	4	90	98	2	-15	5	4	179	184	6	-8	8	4	4	389	386	3	8	11	4	77	76	2
5	13	3	160	156	2	-15	2	4	44	47	6	-14	5	4	134	133	4	-7	8	4	4	41	46	2	9	11	4	151	150	3
6	13	3	49	54	3	-14	2	4	54	52	4	-14	5	4	159	161	3	-6	8	4	4	245	247	2	10	11	4	132	130	3
7	13	3	255	249	4	-13	2	4	90	91	2	-13	5	4	77	78	2	-5	8	4	4	71	74	1	11	11	4	134	142	3
8	13	3	55	63	3	-12	2	4	208	199	2	-12	5	4	407	399	4	-4	8	4	4	147	150	1	-10	12	4	95	98	3
9	13	3	207	209	4	-11	2	4	70	71	1	-11	5	4	117	121	1	-3	8	4	4	170	174	1	-9	12	4	59	61	5
10	13	3	67	77	10	-10	2	4	91	91	1	-10	5	4	165	169	1	-2	8	4	4	388	382	2	-8	12	4	326	317	5
-8	14	3	80	88	4	-9	2	4	57	53	1	-9	5	4	109	105	1	-1	8	4	4	94	95	1	-7	12	4	79	76	3
-7	14	3	91	90	3	-8	2	4	836	833	4	-8	5	4	199	198	1	0	8	4	4	707	727	3	-6	12	4	183	179	2
-6	14	3	219	213	4	-7	2	4	240	243	1	-7	5	4	607	608	4	1	8	4	4	96	96	1	-5	12	4	30	31	3
-5	14	3	82	78	3	-6	2	4	193	196	1	-6	5	4	272	273	1	2	8	4	4	389	388	2	-4	12	4	125	127	1
-4	14	3	405	396	6	-5	2	4	82	79	1	-5	5	4	398	396	2	3	8	4	4	173	176	1	-3	12	4	54	55	2
-3	14	3	16	11	15	-4	2	4	203	220	1	-4	5	4	667	656	3	5	8	4	4	72	74	1	-1	12	4	401	394	3
-2	14	3	140	143	2	-3	2	4	188	173	1	-3	5	4	222	236	1	4	8	4	4	146	151	1	-2	12	4	4	4	1
-1	14	3	75	74	2	-2	2	4	209	162	1	-2	5	4	394	395	1	9	8	4	4	100	97	2	3	12	4	397	391	3
0	14	3	129	133	2	-1	2	4	218	212	1	-1	5	4	270	271	1	10	8	4	4	31	30	2	4	12	4	286	288	2
1	14	3	76	76	2	0	2	4	190	205	1	0	5	4	665	656	3	7	8	4	4	46	47	2	1	12	4	95	91	1
2	14	3	138	142	2	1	2	4	219	213	1	1	5	4	220	236	1	8	8	4	4	386	387	4	2	12	4	397	391	3
3	14	3	17	11	16	2	2	4	203	155	1	2	5	4	394	395	1	9	8	4	4	100	97	2	3	12	4	52	53	2
4	14	3	414	396	5	3	2	4	184	172	1	3	5	4	270	271	1	11	8	4	4	31	30	2	4	12	4	131	128	2
5	14	3	75	79	2	4	2	4	205	219	1	4	5	4	607	606	4	11	8	4	4	193	185	3	5	12	4	29	31	5
6	14	3	210	213	4	5	2	4	76	80	1	5	5	4	112	114	1	12	8	4	4	123	128	2	6	12	4	184	177	2
7	14	3	88	89	3	6	2	4	195	198	1	6	5	4	197	198	2	13	8	4	4	66	56	4	7	12	4	75	76	2
8	14	3	74	88	3	7	2	4	242	244	1	7	5	4	106	106	2	-13	9	4	4	142	149	6	8	12	4	323	315	4
-7	15	3	21	16	20	8	2	4	834	835	4	8	5	4	170	169	1	-12	9	4	4	114	122	3	9	12	4	56	60	5
-6	15	3	35	23	8	9	2	4	51	53	1	9	5	4	119	121	2	-11	9	4	4	278	273	4	10	12	4	101	98	3
-5	15	3	141	145	4	10	2	4	89	90	1	10	5	4	119	121	2	-11	9	4	4	278	273	4	10	12	4	101	98	3

-4	15	3	29	25	6	11	2	4	403	398	4	-10	9	4	49	41	2	-9	13	4	133	139	4
-3	15	3	70	73	3	12	2	4	77	77	2	-9	9	4	173	172	2	-8	13	4	65	67	4
-2	15	3	31	29	5	13	2	4	158	161	3	-8	9	4	113	114	1	-7	13	4	104	109	3
-1	15	3	240	239	3	14	2	4	129	134	3	-7	9	4	63	63	1	-6	13	4	42	49	4
0	15	3	53	45	3	15	2	4	180	183	7	-6	9	4	68	64	1	-5	13	4	256	258	4
1	15	3	244	239	3	-15	3	4	135	144	3	-5	9	4	655	645	6	-4	13	4	61	62	2
2	15	3	23	28	7	-14	3	4	111	104	3	-4	9	4	53	50	1	-3	13	4	217	218	2
3	15	3	73	74	3	-13	3	4	302	293	3	-3	9	4	169	165	1	-2	13	4	142	139	2
4	15	3	17	25	17	-12	3	4	129	128	2	-2	9	4	127	126	1	-1	13	4	242	239	2
5	15	3	149	145	3	-11	3	4	198	200	2	-1	9	4	182	180	1	0	13	4	24	26	4
6	15	3	31	24	9	-10	3	4	95	92	1	0	9	4	57	56	1	1	13	4	242	241	2
7	15	3	0	18	1	-9	3	4	373	373	3	1	9	4	190	184	1	2	13	4	144	140	2
-4	16	3	187	198	6	-8	3	4	93	95	1	2	9	4	128	126	1	3	13	4	221	218	2
-3	16	3	23	31	16	-7	3	4	422	432	2	3	9	4	167	167	1	4	13	4	62	63	2

3	3	6	218	212	1	8	6	6	451	455	5	-4	10	6	126	128	1	7	14	6	67	75	5	-13	3	7	110	111	3
4	3	6	79	77	1	9	6	6	146	137	3	-3	10	6	154	153	1	-5	15	6	259	261	12	-12	3	7	128	127	2
5	3	6	237	240	1	10	6	6	74	65	2	-2	10	6	368	370	3	-4	15	6	135	139	4	-11	3	7	126	126	2
6	3	6	63	55	2	11	6	6	84	83	2	-1	10	6	66	69	1	-3	15	6	72	78	4	-10	3	7	98	97	2
7	3	6	252	255	2	12	6	6	195	188	3	0	10	6	46	45	1	-2	15	6	30	20	7	-9	3	7	213	207	2
8	3	6	139	140	1	13	6	6	123	122	3	1	10	6	69	70	1	-1	15	6	32	36	7	-8	3	7	89	88	1
9	3	6	333	328	2	14	6	6	43	32	10	2	10	6	367	371	3	0	15	6	81	84	3	-7	3	7	171	166	1
10	3	6	28	24	4	-13	7	6	71	74	4	3	10	6	154	153	1	1	15	6	46	38	5	-6	3	7	284	292	1
11	3	6	247	236	2	-12	7	6	58	59	3	4	10	6	125	127	2	2	15	6	11	20	11	-5	3	7	823	832	4
12	3	6	143	148	2	-11	7	6	96	90	2	5	10	6	123	118	2	3	15	6	77	77	3	-4	3	7	37	33	1
13	3	6	94	95	2	-10	7	6	65	66	2	6	10	6	363	366	4	4	15	6	136	139	4	-3	3	7	277	280	1
14	3	6	90	94	4	-9	7	6	407	396	3	7	10	6	60	59	3	5	15	6	227	264	7	-2	3	7	67	69	1
15	3	6	115	139	5	-8	7	6	85	86	1	8	10	6	236	230	3	-1	16	6	44	57	12	-1	3	7	797	788	3
14	4	6	82	85	4	-7	7	6	17	19	3	9	10	6	104	100	2	0	16	6	44	25	12	0	3	7	322	315	1

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabes12

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	3	7	796	789	4	7	6	7	130	130	2	-5	10	7	98	100	1	2	15	7	79	85	4	3	3	8	358	357	2
2	3	7	69	70	1	8	6	7	200	204	3	-4	10	7	185	185	2	3	15	7	41	47	8	4	3	8	232	225	1
3	3	7	279	279	1	9	6	7	40	43	3	-3	10	7	136	132	1	4	15	7	51	40	6	5	3	8	340	345	2
4	3	7	35	33	1	10	6	7	209	206	2	-2	10	7	360	356	3	0	0	8	481	521	3	6	3	8	92	100	1
5	3	7	821	833	5	11	6	7	91	94	2	-1	10	7	66	68	2	1	0	8	40	23	1	7	3	8	376	371	3
6	3	7	283	293	2	12	6	7	272	265	4	0	10	7	165	168	1	2	0	8	1047	1051	6	8	3	8	48	51	2
7	3	7	169	165	1	13	6	7	23	18	22	1	10	7	68	68	1	3	0	8	379	392	2	9	3	8	279	274	2
8	3	7	89	89	1	14	6	7	118	124	7	2	10	7	369	358	3	4	0	8	281	267	1	10	3	8	141	136	2
9	3	7	213	208	2	-13	7	7	123	131	4	3	10	7	137	132	2	5	0	8	266	269	1	11	3	8	154	156	2
10	3	7	92	96	1	-12	7	7	128	127	3	4	10	7	186	185	2	6	0	8	462	473	2	12	3	8	95	93	2
11	3	7	126	125	2	-11	7	7	110	112	2	5	10	7	100	101	2	7	0	8	43	51	1	13	3	8	77	83	5
12	3	7	126	127	2	-10	7	7	72	83	2	6	10	7	73	75	2	8	0	8	122	117	1	14	3	8	68	55	6
13	3	7	111	113	3	-9	7	7	171	169	2	7	10	7	57	50	3	9	0	8	91	93	1	-14	4	8	59	65	8
14	3	7	59	57	5	-8	7	7	125	122	1	8	10	7	300	297	5	10	0	8	188	184	2	-13	4	8	123	122	3
14	4	7	68	74	5	-7	7	7	181	185	1	9	10	7	132	126	2	11	0	8	32	32	4	-12	4	8	239	241	4
13	4	7	39	19	8	-6	7	7	28	29	1	10	10	7	14	4	14	12	0	8	128	128	3	-11	4	8	114	113	2
12	4	7	178	175	3	-5	7	7	423	422	3	11	10	7	103	107	3	13	0	8	125	122	3	-10	4	8	98	101	2
11	4	7	102	99	2	-4	7	7	145	147	1	-10	11	7	123	122	4	14	0	8	42	50	6	-9	4	8	81	85	2
10	4	7	164	163	1	-3	7	7	349	351	2	-9	11	7	86	95	3	14	1	8	57	49	6	-8	4	8	179	170	1
-9	4	7	124	130	1	-2	7	7	101	98	1	-8	11	7	82	85	2	-14	1	8	167	166	3	-7	4	8	96	92	1
-8	4	7	355	354	3	-1	7	7	317	312	2	-7	11	7	20	25	9	-13	1	8	34	45	5	-6	4	8	444	448	3
-7	4	7	106	104	1	0	7	7	268	272	2	-6	11	7	109	106	2	-12	1	8	97	102	2	-5	4	8	106	109	1
-6	4	7	198	203	1	1	7	7	316	311	2	-5	11	7	299	287	3	-11	1	8	37	29	3	-4	4	8	696	716	4
-5	4	7	35	28	1	2	7	7	101	98	1	-4	11	7	67	67	1	-10	1	8	129	132	1	-3	4	8	194	202	1
-4	4	7	119	110	1	3	7	7	355	352	2	-3	11	7	108	107	1	-9	1	8	93	94	1	-2	4	8	275	274	1
-3	4	7	72	73	1	4	7	7	145	147	1	-2	11	7	146	145	2	-8	1	8	259	255	2	-1	4	8	339	337	1
-2	4	7	923	922	4	5	7	7	418	420	3	-1	11	7	326	319	3	-6	1	8	111	109	1	0	4	8	895	883	4
-1	4	7	68	72	1	6	7	7	30	31	2	0	11	7	211	205	3	-5	1	8	753	752	4	1	4	8	337	336	2
0	4	7	268	261	1	7	7	7	180	185	2	1	11	7	324	319	3	-4	1	8	456	465	2	2	4	8	269	271	1
1	4	7	71	72	1	8	7	7	126	122	2	2	11	7	147	145	2	-3	1	8	585	595	3	3	4	8	192	201	1
2	4	7	925	923	5	9	7	7	171	168	3	3	11	7	109	108	1	-2	1	8	197	203	1	4	4	8	695	715	4
3	4	7	76	73	1	10	7	7	72	84	2	4	11	7	64	67	2	-1	1	8	390	394	2	5	4	8	109	109	1
4	4	7	114	107	1	11	7	7	109	112	2	5	11	7	281	286	4	0	1	8	188	194	1	6	4	8	449	448	3
5	4	7	35	28	1	12	7	7	131	129	3	6	11	7	100	105	2	1	1	8	393	394	2	7	4	8	89	92	1
6	4	7	200	203	1	13	7	7	124	129	4	7	11	7	29	27	8	2	1	8	200	203	1	8	4	8	177	167	2
7	4	7	101	104	1	-13	8	7	71	58	9	8	11	7	86	86	3	3	1	8	588	598	3	9	4	8	87	84	1
8	4	7	351	353	3	-12	8	7	215	208	4	9	11	7	88	95	3	4	1	8	461	465	2	10	4	8	102	102	2

9	4	7	128	130	1	-11	8	7	91	97	3	10	11	7	115	122	3	5	1	8	752	753	4	11	4	8	110	114	2
10	4	7	160	163	2	-10	8	7	161	166	2	-9	12	7	61	70	4	6	1	8	116	108	1	12	4	8	239	240	4
11	4	7	99	99	2	-9	8	7	131	127	2	-8	12	7	177	179	3	7	1	8	257	256	1	13	4	8	121	121	4
12	4	7	170	174	3	-8	8	7	328	320	3	-7	12	7	79	80	3	8	1	8	98	95	1	14	4	8	44	67	6
13	4	7	19	18	19	-7	8	7	94	96	1	-6	12	7	59	60	3	9	1	8	130	130	1	-14	5	8	51	58	26
14	4	7	70	76	4	-6	8	7	299	300	2	-5	12	7	76	82	2	10	1	8	30	28	4	-13	5	8	103	110	3
14	5	7	74	76	6	-5	8	7	238	234	2	-4	12	7	370	358	4	11	1	8	100	101	2	-12	5	8	114	119	2
13	5	7	76	73	3	-4	8	7	442	442	3	-3	12	7	146	151	2	12	1	8	39	44	4	-11	5	8	86	86	3
12	5	7	112	114	2	-3	8	7	214	213	2	-2	12	7	262	259	3	13	1	8	169	167	3	-10	5	8	82	83	2
11	5	7	275	276	3	-2	8	7	316	319	2	-1	12	7	100	103	2	14	1	8	56	49	5	-9	5	8	166	168	2
10	5	7	106	104	1	-1	8	7	91	90	1	0	12	7	196	193	2	-14	2	8	75	69	4	-8	5	8	29	26	3
-9	5	7	301	297	3	0	8	7	64	69	1	1	12	7	103	102	2	-13	2	8	52	55	4	-7	5	8	257	259	2
-8	5	7	146	146	1	1	8	7	88	91	1	2	12	7	258	258	3	-12	2	8	175	172	3	-6	5	8	90	87	1
-7	5	7	139	132	1	2	8	7	319	322	2	3	12	7	149	150	2	-11	2	8	97	99	2	-5	5	8	506	515	4
-6	5	7	50	56	1	3	8	7	217	213	1	4	12	7	371	358	4	-10	2	8	79	79	2	-4	5	8	358	358	2
-5	5	7	186	179	1	4	8	7	448	445	3	5	12	7	76	82	2	-9	2	8	72	74	1	-3	5	8	491	494	2
-5	5	7	155	159	1	5	8	7	233	234	2	6	12	7	63	60	3	-8	2	8	218	222	2	-2	5	8	111	113	1
-4	5	7	216	217	1	6	8	7	300	300	3	7	12	7	80	80	3	-7	2	8	351	350	2	-1	5	8	183	184	1
-3	5	7	195	196	1	7	8	7	93	96	2	8	12	7	170	179	4	-6	2	8	405	408	2	0	5	8	124	122	1
-2	5	7	888	884	4	8	8	7	326	320	3	9	12	7	68	69	4	-5	2	8	29	26	1	1	5	8	185	185	1
0	5	7	315	316	1	9	8	7	131	127	2	-8	13	7	90	93	5	-4	2	8	598	601	3	2	5	8	110	113	1
1	5	7	891	884	5	10	8	7	165	166	3	-7	13	7	52	47	5	-3	2	8	237	235	1	3	5	8	486	493	3
2	5	7	196	196	1	11	8	7	99	98	3	-6	13	7	70	64	4	-2	2	8	428	426	2	4	5	8	355	358	2
3	5	7	217	217	1	12	8	7	200	209	4	-5	13	7	178	178	3	-1	2	8	179	184	1	5	5	8	512	516	3
4	5	7	153	158	1	13	8	7	55	58	6	-4	13	7	43	44	4	0	2	8	141	131	1	6	5	8	91	87	1
5	5	7	178	176	1	-12	9	7	37	42	9	-3	13	7	70	73	2	1	2	8	183	185	1	7	5	8	250	259	2
6	5	7	51	56	1	-11	9	7	214	214	5	-2	13	7	19	2	10	2	2	8	428	425	2	8	5	8	29	26	5
7	5	7	134	132	2	-10	9	7	85	81	2	-1	13	7	279	274	3	3	2	8	237	235	1	9	5	8	168	168	2
8	5	7	155	148	2	-9	9	7	171	178	2	0	13	7	66	67	3	4	2	8	590	601	4	10	5	8	81	81	2
9	5	7	302	297	3	-8	9	7	200	197	2	1	13	7	275	274	4	5	2	8	34	28	1	11	5	8	90	86	2
10	5	7	103	104	1	-7	9	7	36	33	3	2	13	7	14	1	14	6	2	8	405	410	2	12	5	8	117	119	3
11	5	7	273	276	3	-6	9	7	42	43	3	3	13	7	71	73	3	7	2	8	350	352	2	13	5	8	111	111	3
12	5	7	113	114	3	-5	9	7	266	264	3	4	13	7	42	43	4	8	2	8	221	224	2	-13	6	8	75	76	4
13	5	7	73	75	3	-4	9	7	79	75	1	5	13	7	187	179	3	9	2	8	71	73	2	-12	6	8	174	181	3
14	5	7	79	77	4	-3	9	7	274	275	2	6	13	7	70	64	3	10	2	8	76	78	2	-11	6	8	58	54	4
14	6	7	111	125	9	-2	9	7	54	55	1	7	13	7	52	47	4	11	2	8	96	99	2	-10	6	8	58	57	3
13	6	7	24	18	11	-1	9	7	441	440	3	8	13	7	88	93	4	12	2	8	183	174	2	-9	6	8	116	120	2
12	6	7	273	263	5	0	9	7	92	87	1	-7	14	7	55	46	7	13	2	8	54	56	4	-8	6	8	247	248	2
11	6	7	90	94	2	1	9	7	440	439	3	-6	14	7	85	91	4	14	2	8	72	71	4	-7	6	8	182	187	2
10	6	7	210	206	2	2	9	7	55	55	1	-5	14	7	38	34	6	-14	3	8	60	55	6	-6	6	8	297	298	2
-9	6	7	37	42	3	3	9	7	277	276	2	-4	14	7	77	76	3	-13	3	8	72	83	4	-5	6	8	146	143	1
-8	6	7	208	200	2	4	9	7	76	75	2	-3	14	7	106	107	3	-12	2	8	104	94	2	-4	6	8	314	311	2

-7	6	7	128	129	1	5	9	7	270	265	3	-2	14	7	263	261	5	-11	3	8	153	156	2	-3	6	8	253	255	1
-6	6	7	124	120	1	6	9	7	44	43	2	-1	14	7	15	3	14	-10	3	8	136	137	2	-2	6	8	288	286	2
-5	6	7	274	274	2	7	9	7	25	32	5	0	14	7	179	178	3	-9	3	8	275	276	3	-1	6	8	147	150	1
-4	6	7	441	451	2	8	9	7	200	198	3	1	14	7	19	3	19	-8	3	8	51	52	1	0	6	8	663	672	4
-3	6	7	119	115	1	9	9	7	172	179	3	2	14	7	277	262	4	-7	3	8	371	372	2	1	6	8	146	150	1
-2	6	7	349	355	2	10	9	7	81	81	2	3	14	7	102	108	3	-6	3	8	96	98	1	2	6	8	287	286	1
-1	6	7	139	142	1	11	9	7	222	215	3	4	14	7	66	75	4	-5	3	8	340	342	2	2	6	8	249	253	2
0	6	7	32	23	1	12	9	7	41	43	5	5	14	7	21	34	21	-4	3	8	225	224	1	4	6	8	308	310	2
1	6	7	139	142	1	-11	10	7	103	107	4	6	14	7	86	91	3	-3	3	8	360	354	2	5	6	8	143	143	1
2	6	7	355	358	2	-10	10	7	26	1	12	-3	15	7	58	47	7	-2	3	8	311	320	1	6	6	8	294	297	2
3	6	7	119	114	1	-9	10	7	128	127	2	-2	15	7	73	86	4	-1	3	8	270	267	1	7	6	8	186	186	2
4	6	7	446	454	3	-8	10	7	304	297	4	-1	15	7	269	280	6	0	3	8	242	244	1	8	6	8	249	247	3
5	6	7	273	273	2	-7	10	7	50	51	2	0	15	7	214	214	4	1	3	8	268	267	1	9	6	8	117	122	2
6	6	7	122	118	1	-6	10	7	76	75	2	1	15	7	281	278	4	2	3	8	311	320	1	10	6	8	58	57	3



Table 1. Observed and calculated structure factors for nabesiz

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
11	6	8	53	54	3	2	10	8	166	164	2	13	3	9	112	122	4	-2	7	9	199	200	1
12	6	8	164	180	4	3	10	8	205	197	2	14	3	9	58	80	7	-1	7	9	439	430	3
13	6	8	70	78	4	4	10	8	249	247	3	-13	4	9	32	35	10	0	7	9	208	205	1
13	7	8	139	144	6	5	10	8	97	97	2	-12	4	9	165	164	3	1	7	9	436	429	3
12	7	8	42	32	7	6	10	8	329	325	5	-11	4	9	122	121	2	2	7	9	197	200	1
11	7	8	32	26	7	7	10	8	50	49	3	-10	4	9	186	178	2	3	7	9	108	113	1
10	7	8	30	25	4	8	10	8	164	166	3	-9	4	9	178	180	3	4	7	9	46	46	1
-9	7	8	194	190	2	9	10	8	71	70	4	-8	4	9	189	191	2	5	7	9	309	309	3
-8	7	8	115	117	1	10	10	8	101	106	3	-7	4	9	103	107	1	6	7	9	33	34	6
-7	7	8	211	208	2	11	10	8	39	38	8	-6	4	9	260	260	2	7	7	9	304	301	3
-6	7	8	137	139	1	-10	11	8	58	65	6	-5	4	9	154	147	1	8	7	9	158	153	2
-5	7	8	142	143	1	-9	11	8	170	171	3	-4	4	9	215	211	1	9	7	9	93	94	2
-4	7	8	45	44	1	-8	11	8	74	76	3	-3	4	9	141	146	1	10	7	9	137	133	3
-3	7	8	374	373	2	-7	11	8	137	137	3	-2	4	9	680	677	4	11	7	9	184	188	4
-2	7	8	55	54	1	-6	11	8	184	178	3	-1	4	9	314	315	1	12	7	9	92	92	3
0	7	8	353	350	2	-5	11	8	293	282	4	0	4	9	649	666	3	-12	8	9	96	110	4
1	7	8	145	148	1	-4	11	8	200	193	2	1	4	9	310	316	2	-11	8	9	124	126	4
2	7	8	348	351	2	-3	11	8	498	487	5	2	4	9	680	676	4	-10	8	9	246	236	4
3	7	8	54	54	1	-2	11	8	134	136	2	3	4	9	139	144	1	-9	8	9	37	23	4
4	7	8	377	374	3	-1	11	8	211	208	2	4	4	9	210	210	1	-8	8	9	215	211	2
5	7	8	44	45	1	0	11	8	64	65	2	5	4	9	155	147	1	-7	8	9	39	41	3
6	7	8	142	143	1	1	11	8	211	207	2	6	4	9	266	261	3	-6	8	9	51	51	2
7	7	8	137	139	2	2	11	8	134	136	2	7	4	9	103	107	2	-5	8	9	137	137	2
8	7	8	213	209	2	3	11	8	501	487	5	8	4	9	194	191	2	-4	8	9	143	141	1
9	7	8	116	116	2	4	11	8	194	192	2	9	4	9	181	180	2	-3	8	9	195	195	2
10	7	8	195	192	3	5	11	8	277	280	4	10	4	9	182	179	2	-2	8	9	444	439	3
11	7	8	14	24	14	6	11	8	182	177	3	11	4	9	123	122	3	-1	8	9	168	167	2
12	7	8	37	26	6	7	11	8	134	136	2	12	4	9	166	165	3	0	8	9	502	500	5
13	7	8	39	32	7	8	11	8	77	76	4	13	4	9	0	37	1	1	8	9	168	169	1
12	8	8	133	143	6	9	11	8	164	169	4	-13	5	9	125	123	4	2	8	9	446	440	4
11	8	8	119	128	4	10	11	8	58	64	4	-12	5	9	51	43	4	3	8	9	195	196	2
10	8	8	86	80	3	-9	12	8	9	11	9	-11	5	9	284	272	4	4	8	9	142	143	2
-9	8	8	156	156	3	-8	12	8	205	196	4	-10	5	9	93	88	2	5	8	9	137	137	2
-8	8	8	53	53	4	-7	12	8	134	134	3	-9	5	9	318	317	3	6	8	9	64	51	2
-7	8	8	167	163	2	-6	12	8	171	176	4	-8	5	9	205	203	2	7	8	9	50	42	3
-6	8	8	164	167	2	-5	12	8	53	53	3	-7	5	9	295	291	2	8	8	9	213	212	3
-6	8	8	372	366	3	-4	12	8	172	168	2	-6	5	9	103	111	1	9	8	9	34	22	6

-5	8	8	8	128	125	1	-3	12	8	8	47	53	2	-14	2	9	88	104	4	-5	5	9	145	139	2	10	8	9	244	234	4
-4	8	8	8	471	472	4	-2	12	8	8	215	212	3	-13	2	9	70	71	6	-4	5	9	133	134	1	11	8	9	124	126	3
-3	8	8	8	139	135	1	-1	12	8	8	177	172	2	-12	2	9	147	155	3	-3	5	9	473	476	3	12	8	9	99	112	6
-2	8	8	8	286	283	2	0	12	8	8	269	264	3	-11	2	9	216	214	2	-2	5	9	146	150	1	-11	9	9	176	182	4
-1	8	8	8	127	123	1	1	12	8	8	175	171	2	-10	2	9	304	294	3	-1	5	9	492	505	2	-10	9	9	28	34	11
0	8	8	8	184	187	1	2	12	8	8	207	210	3	-9	2	9	49	49	2	0	5	9	108	112	1	-9	9	9	169	164	3
1	8	8	8	122	123	1	3	12	8	8	40	52	4	-8	2	9	263	258	2	1	5	9	495	505	3	-8	9	9	116	118	2
2	8	8	8	283	283	2	4	12	8	8	169	167	3	-7	2	9	51	48	1	2	5	9	149	150	1	-7	9	9	102	98	2
3	8	8	8	139	135	1	5	12	8	8	51	52	3	-6	2	9	172	173	1	3	5	9	469	476	3	-6	9	9	139	136	2
4	8	8	8	473	471	6	6	12	8	8	179	177	4	-5	2	9	225	226	1	4	5	9	134	135	1	-5	9	9	178	178	2
5	8	8	8	126	126	2	7	12	8	8	139	134	3	-4	2	9	195	197	1	5	5	9	142	138	1	-4	9	9	165	170	2
6	8	8	8	374	367	3	8	12	8	8	188	194	4	-3	2	9	39	38	1	6	5	9	106	110	2	-3	9	9	347	339	4
7	8	8	8	173	169	2	9	12	8	8	19	12	18	-2	2	9	385	383	2	7	5	9	286	292	3	-2	9	9	150	147	2
8	8	8	8	168	163	2	-8	13	8	8	74	76	9	-1	2	9	259	263	1	8	5	9	202	204	2	-1	9	9	198	198	2
9	8	8	8	52	51	3	-7	13	8	8	93	105	3	0	2	9	799	814	5	9	5	9	316	317	4	0	9	9	42	38	2
10	8	8	8	159	157	3	-6	13	8	8	128	131	4	1	2	9	255	261	1	10	5	9	91	88	2	1	9	9	197	195	2
11	8	8	8	78	81	3	-5	13	8	8	66	63	4	2	2	9	381	381	2	11	5	9	276	271	4	2	9	9	144	146	1
12	8	8	8	118	126	3	-4	13	8	8	84	84	3	3	2	9	41	39	1	12	5	9	54	43	5	3	9	9	347	338	4
12	9	8	8	99	98	6	-3	13	8	8	93	100	2	4	2	9	191	194	1	13	5	9	131	126	4	4	9	9	167	170	2
11	9	8	8	69	77	3	-2	13	8	8	77	76	2	5	2	9	168	173	1	-13	6	9	54	24	15	5	9	9	184	178	3
-9	9	8	8	20	29	9	0	13	8	8	18	25	18	6	2	9	53	48	1	-12	6	9	107	115	3	6	9	9	137	136	2
-8	9	8	8	84	89	2	1	13	8	8	179	176	3	7	2	9	263	257	2	-11	6	9	115	111	3	7	9	9	103	100	2
-7	9	8	8	298	292	3	2	13	8	8	79	76	3	8	2	9	43	49	4	-10	6	9	109	107	2	8	9	9	118	118	3
-6	9	8	8	65	58	2	3	13	8	8	105	102	2	9	2	9	43	49	4	-9	6	9	75	72	2	9	9	9	165	163	3
-5	9	8	8	391	388	5	4	13	8	8	79	83	4	10	2	9	297	290	4	-8	6	9	149	146	2	10	9	9	34	34	7
-4	9	8	8	124	121	1	5	13	8	8	62	61	4	11	2	9	217	214	3	-7	6	9	90	92	2	11	9	9	177	181	4
-3	9	8	8	264	262	2	6	13	8	8	133	132	3	12	2	9	145	154	3	-6	6	9	111	106	2	-10	10	9	22	22	21
-2	9	8	8	117	117	2	7	13	8	8	87	106	3	13	2	9	74	70	5	-5	6	9	165	164	2	-9	10	9	124	127	3
-1	9	8	8	118	114	1	8	13	8	8	81	75	3	14	2	9	89	105	5	-4	6	9	51	45	1	-8	10	9	210	210	3
0	9	8	8	13	6	6	-6	14	8	8	112	118	6	-14	3	9	73	81	5	-3	6	9	47	45	1	-7	10	9	110	107	3
1	9	8	8	115	114	1	-5	14	8	8	74	72	6	-13	3	9	112	121	5	-2	6	9	304	303	2	-6	10	9	127	124	2
2	9	8	8	113	118	1	-4	14	8	8	236	238	6	-12	3	9	165	162	3	-1	6	9	158	156	1	-5	10	9	129	128	2
3	9	8	8	268	262	2	-3	14	8	8	111	110	3	-11	3	9	258	251	3	0	6	9	445	440	3	-4	10	9	198	199	3
4	9	8	8	120	122	2	-2	14	8	8	97	95	3	-10	3	9	81	89	2	1	6	9	157	155	1	-3	10	9	115	111	2
5	9	8	8	398	390	4	-1	14	8	8	157	157	3	-9	3	9	161	168	2	2	6	9	301	300	2	-2	10	9	197	196	2
6	9	8	8	62	58	3	0	14	8	8	154	161	3	-8	3	9	148	146	1	3	6	9	47	45	1	-1	10	9	136	135	2
7	9	8	8	292	292	4	1	14	8	8	158	157	3	-7	3	9	273	269	2	4	6	9	44	45	1	0	10	9	77	77	2
8	9	8	8	83	89	2	2	14	8	8	98	95	3	-6	3	9	88	93	1	5	6	9	165	165	2	1	10	9	136	136	2
9	9	8	8	26	27	8	3	14	8	8	108	109	3	-5	3	9	449	453	3	6	6	9	108	105	2	2	10	9	192	196	2
10	9	8	8	65	78	4	4	14	8	8	237	238	5	-4	3	9	139	137	1	7	6	9	86	92	2	3	10	9	114	112	2
11	9	8	8	109	115	3	5	14	8	8	67	72	4	-3	3	9	321	323	2	8	6	9	141	147	2	4	10	9	200	199	2
														-2	3	9	324	320	2	9	6	9	65	71	2	5	10	9	124	128	2

12	9	8	85	96	4	6	14	8	125	121	17	-1	3	9	721	725	4	10	6	9	103	106	2	6	10	9	128	123	3
11	10	8	41	37	15	-3	15	8	82	91	7	0	3	9	119	115	1	11	6	9	108	112	2	7	10	9	111	106	3
10	10	8	105	105	3	-2	15	8	45	62	10	1	3	9	715	724	4	12	6	9	114	116	4	8	10	9	211	211	4
-9	10	8	70	72	3	-1	15	8	112	126	4	2	3	9	325	319	2	13	6	9	27	26	27	9	10	9	125	127	4
-8	10	8	152	165	2	0	15	8	96	109	3	3	3	9	320	321	2	-12	7	9	82	91	3	10	10	9	6	20	6
-7	10	8	50	49	3	1	15	8	114	127	3	4	3	9	142	138	1	-11	7	9	191	188	3	-9	11	9	146	146	4
-6	10	8	330	326	5	2	15	8	58	62	5	5	3	9	452	455	3	-10	7	9	136	133	2	-8	11	9	38	38	5
-5	10	8	100	98	2	3	15	8	76	92	5	6	3	9	89	93	1	-9	7	9	90	93	2	-7	11	9	71	68	3
-4	10	8	248	249	3	1	0	9	27	18	1	7	3	9	264	268	2	-8	7	9	156	153	2	-6	11	9	102	108	2
-3	10	8	199	198	2	2	0	9	30	25	1	8	3	9	145	146	2	-7	7	9	293	298	3	-5	11	9	230	226	3
-2	10	8	165	164	2	3	0	9	83	87	1	9	3	9	158	165	2	-6	7	9	35	35	2	-4	11	9	72	67	2
-1	10	8	177	173	2	4	0	9	329	326	2	10	3	9	89	88	2	-5	7	9	318	312	3	-3	11	9	255	250	3
0	10	8	231	228	2	5	0	9	206	204	1	11	3	9	260	252	4	-4	7	9	46	46	1	-2	11	9	88	89	2
1	10	8	172	172	2	6	0	9	230	239	1	12	3	9	161	162	3	-3	7	9	116	112	1	-1	11	9	243	239	3

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabesi2

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	11	9	64	66	2	8	1	10	106	109	2	-8	5	10	272	270	3	11	8	10	29	32	9	6	13	10	96	105	7
1	11	9	245	240	3	9	1	10	154	158	2	-7	5	10	363	354	3	-11	9	10	115	112	5	-3	14	10	50	60	7
2	11	9	89	89	2	10	1	10	109	107	2	-6	5	10	48	44	2	-10	9	10	118	113	3	-2	14	10	53	44	5
3	11	9	249	251	3	11	1	10	102	98	2	-5	5	10	167	163	1	-9	9	10	48	49	4	-1	14	10	28	14	10
4	11	9	70	67	2	12	1	10	155	157	4	-4	5	10	156	151	1	-8	9	10	134	131	2	0	14	10	67	70	5
5	11	9	227	227	4	13	1	10	126	122	3	-3	5	10	311	308	2	-7	9	10	210	209	3	1	14	10	29	12	10
6	11	9	96	107	3	14	1	10	42	22	42	-2	5	10	67	67	1	-6	9	10	35	34	3	2	14	10	42	43	6
7	11	9	79	71	3	-13	2	10	120	121	4	-1	5	10	195	199	1	-5	9	10	162	163	2	3	14	10	54	61	5
8	11	9	14	37	13	-12	2	10	68	68	4	0	5	10	128	129	1	-4	9	10	132	132	2	4	14	10	75	81	8
9	11	9	140	145	4	-11	2	10	95	91	3	1	5	10	198	200	2	-3	9	10	291	288	3	1	0	11	61	58	1
-8	12	9	153	156	4	-10	2	10	150	153	2	2	5	10	69	66	1	-2	9	10	180	181	2	2	0	11	207	226	2
-7	12	9	22	14	15	-9	2	10	94	96	2	3	5	10	307	305	2	-1	9	10	423	419	5	3	0	11	208	208	1
-6	12	9	45	44	6	-8	2	10	195	195	2	4	5	10	151	149	1	0	9	10	24	36	4	4	0	11	192	194	2
-5	12	9	20	21	12	-7	2	10	151	149	1	5	5	10	161	160	2	1	9	10	426	421	5	5	0	11	180	181	1
-4	12	9	27	27	6	-6	2	10	404	405	3	6	5	10	49	43	3	2	9	10	183	181	2	6	0	11	248	244	3
-3	12	9	85	88	3	-5	2	10	280	279	2	7	5	10	356	353	4	3	9	10	289	288	3	7	0	11	80	84	2
-2	12	9	359	349	5	-4	2	10	527	528	3	8	5	10	274	269	3	4	9	10	133	133	2	8	0	11	210	208	2
-1	12	9	38	34	3	-3	2	10	26	17	2	9	5	10	237	226	3	5	9	10	164	163	2	9	0	11	37	44	3
0	12	9	319	316	3	-2	2	10	116	119	1	10	5	10	201	199	3	6	9	10	38	32	5	10	0	11	0	10	1
1	12	9	34	32	4	-1	2	10	54	53	1	11	5	10	23	22	9	7	9	10	209	208	4	11	0	11	29	4	8
2	12	9	354	346	5	0	2	10	283	284	2	12	5	10	142	138	3	8	9	10	126	131	3	12	0	11	194	191	4
3	12	9	84	86	2	1	2	10	55	52	1	-12	6	10	178	171	4	9	9	10	39	49	5	13	0	11	182	191	4
4	12	9	25	25	10	2	2	10	115	119	1	-11	6	10	64	64	3	10	9	10	117	114	3	-13	1	11	299	298	6
5	12	9	28	22	7	3	2	10	26	17	2	-10	6	10	152	149	2	11	9	10	102	110	9	-12	1	11	54	48	6
6	12	9	45	44	5	4	2	10	521	528	3	-9	6	10	218	213	3	-10	10	10	115	115	5	-11	1	11	271	268	4
7	12	9	0	14	1	5	2	10	281	280	2	-8	6	10	343	338	4	-9	10	10	72	77	4	-10	1	11	114	112	2
8	12	9	138	155	4	6	2	10	400	407	3	-7	6	10	143	139	2	-8	10	10	62	58	3	-9	1	11	102	103	1
-7	13	9	91	107	5	7	2	10	154	151	1	-6	6	10	295	286	3	-7	10	10	50	56	3	-8	1	11	150	148	2
-6	13	9	36	36	7	8	2	10	196	195	2	-5	6	10	139	141	1	-6	10	10	231	225	3	-7	1	11	176	182	2
-5	13	9	50	46	7	9	2	10	95	95	2	-4	6	10	281	277	2	-5	10	10	150	152	3	-6	1	11	137	136	1
-4	13	9	75	83	3	10	2	10	155	154	2	-3	6	10	179	178	1	-4	10	10	64	65	2	-5	1	11	34	31	2
-3	13	9	50	60	4	11	2	10	90	92	2	-2	6	10	148	149	1	-3	10	10	97	92	2	-4	1	11	151	150	1
-2	13	9	35	47	6	12	2	10	67	67	4	-1	6	10	86	89	1	-2	10	10	36	36	3	-3	1	11	291	291	2
-1	13	9	148	151	3	13	2	10	119	121	4	0	6	10	286	286	2	-1	10	10	107	108	2	-2	1	11	210	208	1
0	13	9	67	68	3	-13	3	10	142	151	4	1	6	10	90	90	1	0	10	10	319	308	3	-1	1	11	138	133	1
1	13	9	154	151	3	-12	3	10	51	52	5	2	6	10	148	148	1	1	10	10	106	108	2	0	1	11	239	244	2
2	13	9	50	47	4	-11	3	10	126	126	2	3	6	10	177	178	1	2	10	10	37	35	4	1	1	11	140	136	1

3	13	9	56	60	3	-10	3	10	91	91	2	4	6	10	271	275	3	3	10	10	94	93	2	2	1	11	206	206	1
4	13	9	83	84	3	-9	3	10	107	107	2	5	6	10	134	140	1	4	10	10	65	66	2	3	1	11	284	287	2
5	13	9	37	44	6	-8	3	10	188	185	2	6	6	10	285	283	3	5	10	10	156	152	2	4	1	11	151	151	2
6	13	9	38	35	7	-7	3	10	283	277	2	7	6	10	138	138	2	6	10	10	234	225	3	5	1	11	34	32	2
7	13	9	88	106	8	-6	3	10	204	201	2	8	6	10	338	338	5	7	10	10	50	56	4	6	1	11	135	135	1
-5	14	9	45	47	10	-5	3	10	55	50	1	9	6	10	217	213	3	8	10	10	60	58	4	7	1	11	169	178	2
-4	14	9	110	120	7	-4	3	10	62	69	1	10	6	10	150	149	2	9	10	10	71	76	4	8	1	11	149	147	2
-3	14	9	86	82	3	-3	3	10	266	260	1	11	6	10	60	63	4	10	10	10	106	114	5	9	1	11	102	102	2
-2	14	9	258	257	5	-2	3	10	304	309	2	12	6	10	173	171	5	-9	11	10	107	129	5	10	1	11	108	111	3
-1	14	9	63	66	4	-1	3	10	156	160	1	-12	7	10	77	62	7	-8	11	10	40	41	6	11	1	11	280	268	4
0	14	9	94	95	3	0	3	10	69	71	1	-11	7	10	59	52	4	-7	11	10	217	213	3	12	1	11	60	47	5
1	14	9	65	65	3	1	3	10	156	163	1	-10	7	10	39	41	5	-6	11	10	127	122	3	13	1	11	294	297	6
2	14	9	253	256	5	2	3	10	311	310	2	-9	7	10	205	201	2	-5	11	10	134	130	2	13	1	11	64	81	5
3	14	9	79	82	3	3	3	10	266	262	2	-8	7	10	41	42	3	-4	11	10	158	161	3	-13	2	11	44	47	6
4	14	9	119	121	3	4	3	10	68	69	1	-7	7	10	205	201	2	-3	11	10	369	363	5	-11	2	11	239	233	4
5	14	9	47	47	8	5	3	10	52	51	1	-6	7	10	244	241	3	-2	11	10	52	55	3	-10	2	11	339	328	4
-1	15	9	158	172	10	6	3	10	193	201	2	-5	7	10	128	132	2	-1	11	10	278	271	3	-9	2	11	177	173	2
0	15	9	21	39	20	7	3	10	275	276	3	-4	7	10	70	69	2	0	11	10	21	14	6	-8	2	11	227	229	3
1	15	9	177	171	10	8	3	10	185	185	3	-3	7	10	217	210	2	1	11	10	274	272	4	-7	2	11	211	211	2
0	0	10	678	699	6	9	3	10	105	105	2	-2	7	10	12	12	5	2	11	10	61	56	3	-6	2	11	379	377	3
1	0	10	81	80	1	10	3	10	92	92	2	-1	7	10	96	91	1	3	11	10	374	363	5	-5	2	11	80	78	1
2	0	10	18	19	3	11	3	10	119	125	3	0	7	10	62	60	1	4	11	10	135	129	3	-4	2	11	111	109	1
3	0	10	45	43	1	12	3	10	47	50	5	1	7	10	95	92	1	5	11	10	162	160	3	-3	2	11	35	28	2
4	0	10	239	237	2	13	3	10	151	152	4	2	7	10	17	10	4	6	11	10	125	125	3	-2	2	11	100	100	1
5	0	10	63	63	1	-13	4	10	74	80	4	3	7	10	211	207	2	7	11	10	207	212	4	-1	2	11	286	289	2
6	0	10	407	404	3	-12	4	10	139	134	3	4	7	10	62	70	2	8	11	10	32	41	8	0	2	11	572	573	4
7	0	10	34	28	2	-11	4	10	50	52	4	5	7	10	126	134	2	9	11	10	134	128	8	1	2	11	287	290	2
8	0	10	233	231	2	-10	4	10	212	208	3	6	7	10	241	242	3	-8	12	10	118	102	9	2	2	11	101	98	1
9	0	10	261	259	2	-9	4	10	145	146	2	7	7	10	202	201	3	-7	12	10	114	117	3	3	2	11	39	28	2
10	0	10	182	182	3	-8	4	10	144	145	2	8	7	10	39	42	4	-6	12	10	225	221	5	4	2	11	115	110	1
11	0	10	76	75	3	-7	4	10	161	156	1	9	7	10	160	164	3	-5	12	10	108	103	3	5	2	11	77	79	1
12	0	10	182	185	3	-6	4	10	197	199	2	10	7	10	42	41	5	-4	12	10	287	282	5	6	2	11	373	377	4
13	0	10	14	12	13	-5	4	10	168	169	1	11	7	10	50	51	5	-3	12	10	28	31	7	7	2	11	209	210	3
14	0	10	53	46	11	-4	4	10	285	277	2	12	7	10	59	63	7	-2	12	10	0	12	1	8	2	11	224	227	3
14	1	10	25	21	24	-3	4	10	143	141	1	-11	8	10	40	32	6	-1	12	10	19	19	10	9	2	11	178	172	2
13	1	10	120	123	3	-2	4	10	96	97	1	-10	8	10	185	186	3	0	12	10	44	39	3	10	2	11	332	327	5
12	1	10	158	157	3	-1	4	10	175	172	1	-9	8	10	36	41	5	1	12	10	31	19	6	11	2	11	235	231	4
11	1	10	104	99	2	0	4	10	599	584	3	-8	8	10	138	138	2	2	12	10	20	12	13	12	2	11	49	47	7
10	1	10	109	107	2	1	4	10	174	172	1	-7	8	10	151	149	2	3	12	10	25	30	9	13	2	11	65	80	8
-9	1	10	158	158	2	2	4	10	96	98	1	-6	8	10	323	321	4	4	12	10	284	283	7	-13	3	11	39	34	11
-8	1	10	111	108	1	3	4	10	145	141	1	-5	8	10	187	182	3	5	12	10	97	102	3	-12	3	11	24	8	24
-7	1	10	375	376	3	4	4	10	285	278	2	-4	8	10	314	312	3	6	12	10	228	221	5	-11	3	11	102	112	3

-6	1	10	232	231	2	5	4	10	164	168	2	-3	8	10	83	82	1	7	12	10	112	115	4	-10	3	11	181	177	3
-5	1	10	164	160	1	6	4	10	202	199	2	-2	8	10	138	140	1	8	12	10	91	101	8	-9	3	11	101	97	2
-4	1	10	123	127	1	7	4	10	152	155	2	-1	8	10	196	194	2	-6	13	10	103	105	5	-8	3	11	62	60	2
-3	1	10	543	548	4	8	4	10	142	146	2	0	8	10	106	101	1	-5	13	10	60	62	4	-7	3	11	352	347	4
-2	1	10	325	338	2	9	4	10	151	146	2	1	8	10	195	195	2	-4	13	10	34	23	5	-6	3	11	115	115	1
-1	1	10	306	314	2	10	4	10	207	208	3	2	8	10	139	141	1	-3	13	10	65	57	3	-5	3	11	137	136	1
0	1	10	54	60	1	11	4	10	40	52	5	3	8	10	78	84	2	-2	13	10	19	7	18	-4	3	11	118	125	1
1	1	10	305	312	2	12	4	10	139	135	4	4	8	10	312	311	4	-1	13	10	80	87	3	-3	3	11	339	336	3
2	1	10	326	338	2	13	4	10	79	81	4	5	8	10	187	181	2	0	13	10	48	46	5	-2	3	11	153	152	1
3	1	10	549	551	3	-13	5	10	42	36	11	6	8	10	322	321	5	1	13	10	88	88	3	-1	3	11	453	448	3
4	1	10	126	128	1	-12	5	10	138	137	4	7	8	10	148	148	2	2	13	10	23	9	12	0	3	11	203	198	1
5	1	10	166	161	1	-11	5	10	18	23	18	8	8	10	136	137	3	3	13	10	54	55	4	1	3	11	458	450	3
6	1	10	232	233	2	-10	5	10	203	199	3	9	8	10	32	40	8	4	13	10	35	23	8	2	3	11	152	154	1
7	1	10	370	376	3	-9	5	10	227	227	3	10	8	10	187	186	3	5	13	10	56	62	5	3	3	11	343	338	2

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabes12

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	3	11	123	125	1	-3	7	11	91	92	1	7	11	11	79	73	4	12	2	12	98	104	4
5	3	11	134	136	1	-2	7	11	95	96	1	8	11	11	62	69	4	-12	3	12	137	146	4
6	3	11	115	115	2	-1	7	11	99	101	1	-7	12	11	52	38	7	-11	3	12	88	86	3
7	3	11	352	348	4	0	7	11	76	79	1	-6	12	11	107	110	3	-10	3	12	72	68	3
8	3	11	61	60	4	1	7	11	99	98	1	-5	12	11	93	95	3	-9	3	12	147	153	3
9	3	11	96	96	2	2	7	11	96	94	1	-4	12	11	76	80	3	-8	3	12	123	123	2
10	3	11	174	176	3	3	7	11	90	91	1	-3	12	11	0	11	1	-7	3	12	156	155	2
11	3	11	113	110	3	4	7	11	138	133	2	-2	12	11	177	182	3	-6	3	12	37	37	1
12	3	11	35	8	11	5	7	11	63	58	3	-1	12	11	112	112	3	-5	3	12	282	280	2
13	3	11	64	34	12	6	7	11	160	167	3	0	12	11	397	389	8	-4	3	12	165	165	2
12	4	11	107	116	4	7	7	11	298	286	4	1	12	11	109	111	3	-3	3	12	170	161	1
11	4	11	68	73	3	8	7	11	48	48	3	2	12	11	180	181	4	-2	3	12	125	123	1
10	4	11	167	168	3	9	7	11	198	196	3	3	12	11	19	11	18	-1	3	12	104	107	1
-9	4	11	124	122	2	10	7	11	146	144	3	4	12	11	85	79	4	0	3	12	121	128	1
-8	4	11	159	162	2	11	7	11	114	127	3	5	12	11	96	96	3	1	3	12	107	109	1
-7	4	11	214	214	3	-11	8	11	154	153	5	6	12	11	105	110	4	2	3	12	122	122	1
-6	4	11	217	215	2	-10	8	11	219	210	3	7	12	11	41	37	14	3	3	12	167	162	2
-5	4	11	58	66	1	-9	8	11	68	71	3	5	13	11	74	83	8	4	3	12	165	165	2
-4	4	11	227	229	2	-8	8	11	216	221	3	-4	13	11	46	54	8	5	3	12	280	279	3
-3	4	11	111	107	1	-7	8	11	60	64	3	-3	13	11	232	234	5	6	3	12	44	38	3
-2	4	11	89	89	1	-6	8	11	153	150	2	-2	13	11	99	99	3	7	3	12	154	155	3
-1	4	11	28	27	1	-5	8	11	21	9	8	-1	13	11	92	100	3	8	3	12	123	124	3
0	4	11	133	127	1	-4	8	11	292	292	4	0	13	11	26	31	10	9	3	12	151	153	3
1	4	11	28	28	2	-3	8	11	64	61	2	1	13	11	99	101	3	10	3	12	75	69	4
2	4	11	89	89	1	-2	8	11	39	38	2	2	13	11	106	101	3	11	3	12	90	84	3
3	4	11	110	108	1	-1	8	11	110	115	2	3	13	11	237	234	5	12	3	12	146	146	5
4	4	11	228	228	2	0	8	11	347	340	3	4	13	11	45	56	6	-12	4	12	64	66	5
5	4	11	65	67	2	1	8	11	113	115	1	5	13	11	77	83	7	-11	4	12	100	102	3
6	4	11	208	212	3	2	8	11	40	36	3	-1	14	11	20	31	19	-10	4	12	187	186	3
7	4	11	214	215	3	3	8	11	59	62	2	0	14	11	54	58	8	-9	4	12	113	112	2
8	4	11	162	163	3	4	8	11	295	292	4	1	14	11	29	31	28	-8	4	12	99	99	2
9	4	11	124	123	2	5	8	11	0	9	1	0	0	12	40	28	3	-7	4	12	75	75	2
10	4	11	164	169	3	6	8	11	143	149	2	1	0	12	13	11	6	-6	4	12	222	224	2
11	4	11	76	72	4	7	8	11	61	64	4	2	0	12	177	179	2	-5	4	12	75	72	1
12	4	11	111	116	3	8	8	11	218	222	4	3	0	12	204	205	2	-4	4	12	147	148	1
12	5	11	29	11	17	9	8	11	64	71	4	4	0	12	24	20	4	-3	4	12	106	109	1
11	5	11	210	211	4	10	8	11	208	209	4	5	0	12	58	62	1	-2	4	12	117	123	1

10	5	11	38	39	4	11	8	11	153	153	13	6	0	12	278	282	3	-1	4	12	161	161	1	-2	8	12	13	13	12
-9	5	11	98	105	2	-10	9	11	94	97	4	7	0	12	301	298	4	0	4	12	340	342	3	-1	8	12	28	23	4
-8	5	11	83	82	2	-9	9	11	61	66	4	8	0	12	107	105	3	1	4	12	161	161	2	0	8	12	37	32	2
-7	5	11	242	233	3	-8	9	11	109	106	3	9	0	12	65	70	3	2	4	12	119	124	1	1	8	12	21	22	5
-6	5	11	101	99	1	-7	9	11	174	175	2	10	0	12	261	250	3	3	4	12	104	109	2	2	8	12	14	15	13
-5	5	11	145	145	2	-6	9	11	76	77	3	11	0	12	103	105	3	4	4	12	144	148	2	3	8	12	66	60	2
-4	5	11	127	125	1	-5	9	11	81	80	2	12	0	12	166	166	3	5	4	12	75	71	2	4	8	12	287	282	5
-3	5	11	455	443	3	-4	9	11	183	173	2	-12	1	12	142	141	4	6	4	12	223	222	3	5	8	12	172	172	3
-2	5	11	161	159	1	-3	9	11	241	239	3	-11	1	12	211	214	4	7	4	12	82	76	3	6	8	12	183	180	3
-1	5	11	258	248	2	-2	9	11	89	94	1	-10	1	12	104	108	2	8	4	12	103	99	2	7	8	12	77	75	3
0	5	11	103	100	1	-1	9	11	117	113	1	-9	1	12	65	66	3	9	4	12	112	111	2	8	8	12	67	63	3
1	5	11	255	247	2	0	9	11	34	39	3	-8	1	12	210	206	2	10	4	12	180	184	4	9	8	12	39	34	5
2	5	11	163	159	2	1	9	11	109	111	1	-7	1	12	412	405	4	11	4	12	98	102	4	10	8	12	188	195	5
3	5	11	448	443	4	2	9	11	90	92	1	-6	1	12	142	137	2	12	4	12	84	84	2	10	8	12	107	109	3
4	5	11	125	124	2	3	9	11	242	239	3	-5	1	12	81	79	1	-12	5	12	71	74	28	-8	9	12	119	116	3
5	5	11	148	146	2	4	9	11	182	172	2	-4	1	12	117	120	1	-11	5	12	111	115	3	-7	9	12	295	292	5
6	5	11	100	99	3	5	9	11	79	79	3	-3	1	12	104	112	1	-10	5	12	50	54	4	-6	9	12	67	63	3
7	5	11	234	233	3	6	9	11	83	77	3	-2	1	12	166	158	2	-9	5	12	245	232	3	-5	9	12	112	116	2
8	5	11	73	81	3	7	9	11	171	176	3	-1	1	12	357	358	3	-8	5	12	220	218	3	-4	9	12	62	63	2
9	5	11	99	104	3	8	9	11	105	105	3	0	1	12	98	106	1	-7	5	12	477	468	5	-3	9	12	256	250	3
10	5	11	38	39	4	9	9	11	65	67	4	1	1	12	358	359	3	-6	5	12	113	111	2	-2	9	12	190	190	3
11	5	11	211	211	4	10	9	11	90	96	4	2	1	12	166	160	1	-5	5	12	113	106	2	-1	9	12	188	190	3
12	5	11	30	13	23	-9	10	11	32	15	10	3	1	12	110	113	1	-4	5	12	35	32	3	0	9	12	54	55	2
12	6	11	97	91	12	-8	10	11	60	63	4	4	1	12	119	120	2	-3	5	12	106	107	1	1	9	12	183	188	3
11	6	11	146	143	3	-7	10	11	71	70	3	5	1	12	87	80	2	-2	5	12	133	128	1	2	9	12	187	190	2
10	6	11	215	211	4	-6	10	11	80	80	3	6	1	12	146	136	2	-1	5	12	349	341	3	3	9	12	251	249	3
-9	6	11	74	70	3	-5	10	11	108	102	2	7	1	12	406	404	5	0	5	12	121	121	1	4	9	12	63	62	3
-8	6	11	136	135	2	-4	10	11	243	240	4	8	1	12	205	205	2	1	5	12	353	340	3	5	9	12	105	115	2
-7	6	11	140	137	2	-3	10	11	46	46	3	9	1	12	62	67	2	2	5	12	129	127	2	6	9	12	61	64	3
-6	6	11	170	172	2	-2	10	11	57	57	2	10	1	12	100	109	2	3	5	12	100	103	2	7	9	12	289	292	6
-5	6	11	44	49	3	-1	10	11	68	69	2	11	1	12	216	214	4	4	5	12	35	32	3	8	9	12	108	117	3
-4	6	11	62	61	2	0	10	11	128	123	2	12	1	12	138	141	4	5	5	12	108	106	2	9	9	12	100	108	4
-3	6	11	148	146	1	1	10	11	74	70	3	-12	2	12	97	104	4	6	5	12	105	110	2	-8	10	12	109	113	3
-2	6	11	185	184	2	2	10	11	55	56	3	-11	2	12	84	84	3	7	5	12	475	469	6	-7	10	12	63	63	4
-1	6	11	148	145	1	3	10	11	42	45	3	-10	2	12	232	223	3	8	5	12	217	218	4	-6	10	12	108	106	3
0	6	11	384	380	3	4	10	11	241	240	4	-9	2	12	71	72	2	9	5	12	243	232	4	-5	10	12	111	111	3
1	6	11	144	143	1	5	10	11	103	102	2	-8	2	12	98	96	2	10	5	12	55	54	4	-4	10	12	169	166	3
2	6	11	185	183	1	6	10	11	75	79	3	-7	2	12	69	70	2	11	5	12	118	117	3	-3	10	12	28	32	5
3	6	11	141	146	2	7	10	11	70	70	4	-6	2	12	317	312	3	12	5	12	106	75	25	-2	10	12	97	98	2
4	6	11	63	59	2	8	10	11	66	63	4	-5	2	12	244	241	2	-11	6	12	87	80	4	-1	10	12	98	98	2
5	6	11	49	51	3	9	10	11	0	16	1	-4	2	12	313	305	3	-10	6	12	99	101	3	0	10	12	145	139	3
6	6	11	173	171	2	-8	11	11	62	70	5	-3	2	12	103	102	1	-9	6	12	158	154	3	1	10	12	103	98	2



7	6	11	143	138	2	-7	11	11	81	77	3	-2	2	12	72	68	1	-8	6	12	59	63	3	2	10	12	103	99	2
8	6	11	134	136	3	-6	11	11	32	27	6	-1	2	12	138	133	1	-7	6	12	153	159	2	3	10	12	30	33	7
9	6	11	70	71	3	-5	11	11	85	86	3	0	2	12	11	6	4	-6	6	12	183	188	2	4	10	12	174	166	3
10	6	11	215	212	4	-4	11	11	118	117	2	1	2	12	137	133	1	-5	6	12	218	212	3	5	10	12	103	111	2
11	6	11	143	145	3	-3	11	11	124	124	2	2	2	12	74	70	1	-4	6	12	398	387	4	6	10	12	101	107	3
12	6	11	108	91	18	-2	11	11	43	35	3	3	2	12	102	102	1	-3	6	12	66	68	2	7	10	12	60	63	5
11	7	11	110	126	4	-1	11	11	99	102	2	4	2	12	311	305	3	-2	6	12	148	150	2	8	10	12	102	112	3
10	7	11	145	143	3	0	11	11	46	45	3	5	2	12	246	241	2	-1	6	12	53	52	1	-7	11	12	191	207	5
-9	7	11	199	195	4	1	11	11	100	102	2	6	2	12	313	314	4	0	6	12	227	226	2	-6	11	12	118	120	3
-8	7	11	47	47	3	2	11	11	37	34	4	7	2	12	65	71	2	1	6	12	51	52	1	-5	11	12	73	77	3
-7	7	11	293	287	3	3	11	11	115	125	3	8	2	12	94	96	2	2	6	12	152	150	2	-4	11	12	103	107	3
-6	7	11	169	168	2	4	11	11	114	117	3	9	2	12	70	72	2	3	6	12	74	69	2	-3	11	12	223	219	3
-5	7	11	62	57	2	5	11	11	84	87	3	10	2	12	222	222	4	4	6	12	394	387	5	-2	11	12	128	129	2
-4	7	11	133	132	2	6	11	11	23	25	12	11	2	12	85	85	4	5	6	12	218	213	3	-1	11	12	104	114	3

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabesi2

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	11	12	21	4	12	-5	3	13	161	164	2	-1	7	13	179	180	3	8	0	14	19	2	14	10	4	14	109	112	4
1	11	12	108	112	3	-4	3	13	41	40	2	0	7	13	88	93	1	9	0	14	104	105	3	-10	5	14	47	33	8
2	11	12	128	128	3	-3	3	13	211	206	2	1	7	13	186	180	2	10	0	14	51	38	4	-9	5	14	119	122	3
3	11	12	217	218	5	-2	3	13	141	137	1	2	7	13	89	91	2	11	0	14	0	9	1	-8	5	14	178	175	3
4	11	12	104	106	3	-1	3	13	119	120	1	3	7	13	88	88	2	-11	1	14	212	215	5	-7	5	14	246	235	3
5	11	12	74	77	3	0	3	13	38	31	2	4	7	13	127	127	2	-10	1	14	166	166	4	-6	5	14	109	101	2
6	11	12	123	119	4	1	3	13	120	120	2	5	7	13	145	140	3	-9	1	14	160	152	5	-5	5	14	167	166	2
7	11	12	208	207	7	2	3	13	136	136	2	6	7	13	176	169	3	-8	1	14	97	97	3	-4	5	14	33	37	4
-5	12	12	129	134	3	3	3	13	210	205	3	7	7	13	75	81	3	-7	1	14	218	225	3	-3	5	14	159	160	2
-4	12	12	292	282	5	4	3	13	45	40	3	8	7	13	37	21	7	-6	1	14	73	74	2	-2	5	14	159	156	2
-3	12	12	133	134	3	5	3	13	157	161	2	9	7	13	184	187	4	-5	1	14	133	130	2	-1	5	14	310	301	3
-2	12	12	73	76	4	6	3	13	179	176	3	10	7	13	75	88	6	-4	1	14	101	103	1	0	5	14	198	195	2
-1	12	12	108	112	3	7	3	13	261	259	3	-9	8	13	172	182	4	-3	1	14	391	382	4	1	5	14	301	301	3
0	12	12	83	85	4	8	3	13	74	77	3	-8	8	13	144	147	3	-2	1	14	264	263	3	2	5	14	153	155	2
1	12	12	106	114	3	9	3	13	182	181	3	-7	8	13	56	50	5	-1	1	14	445	437	5	3	5	14	160	158	3
2	12	12	66	78	5	10	3	13	87	81	3	-6	8	13	170	168	3	0	1	14	142	138	2	4	5	14	31	38	4
3	12	12	138	135	3	11	3	13	95	103	4	-5	8	13	33	38	6	1	1	14	449	439	5	5	5	14	164	166	3
4	12	12	280	281	8	-11	4	13	70	68	5	-4	8	13	68	70	3	2	1	14	261	263	3	6	5	14	99	100	3
5	12	12	128	134	7	-10	4	13	162	158	4	-3	8	13	86	86	2	3	1	14	388	382	5	7	5	14	243	234	4
-3	13	12	32	47	22	-9	4	13	101	109	3	-2	8	13	65	70	2	4	1	14	104	102	2	8	5	14	169	175	4
-2	13	12	65	67	6	-8	4	13	234	227	3	-1	8	13	222	213	4	5	1	14	133	131	2	9	5	14	116	122	3
-1	13	12	89	101	4	-7	4	13	42	48	3	0	8	13	466	445	6	6	1	14	72	75	3	10	5	14	68	34	8
0	13	12	38	26	8	-6	4	13	320	316	4	1	8	13	218	213	3	7	1	14	227	225	3	-10	6	14	56	66	7
1	13	12	99	101	4	-5	4	13	131	131	2	2	8	13	67	71	2	8	1	14	99	98	2	-9	6	14	114	120	3
2	13	12	59	66	5	-4	4	13	49	56	2	3	8	13	80	85	2	9	1	14	153	154	3	-8	6	14	127	127	3
3	13	12	36	48	10	-3	4	13	27	20	3	4	8	13	61	69	3	10	1	14	160	168	4	-7	6	14	128	129	3
1	0	13	16	12	4	-2	4	13	157	154	1	5	8	13	47	39	5	11	1	14	178	215	5	-6	6	14	224	219	3
2	0	13	70	65	1	-1	4	13	153	156	1	6	8	13	167	166	3	-11	2	14	69	64	9	-5	6	14	146	141	3
3	0	13	93	94	2	0	4	13	331	333	3	7	8	13	39	51	5	-10	2	14	94	93	3	-4	6	14	234	228	3
4	0	13	14	19	13	1	4	13	151	154	2	8	8	13	146	148	4	-9	2	14	67	71	4	-3	6	14	55	52	2
5	0	13	45	42	2	2	4	13	158	152	2	9	8	13	188	181	5	-8	2	14	127	121	2	-2	6	14	158	159	2
6	0	13	250	251	3	3	4	13	21	19	7	-8	9	13	47	49	5	-7	2	14	61	67	2	-1	6	14	43	38	2
7	0	13	80	91	2	4	4	13	59	58	2	-7	9	13	152	151	3	-6	2	14	343	333	3	0	6	14	45	40	2
8	0	13	247	249	3	5	4	13	122	130	2	-6	9	13	54	49	5	-5	2	14	181	184	2	1	6	14	34	39	3
9	0	13	147	149	3	6	4	13	318	316	5	-5	9	13	39	43	5	-4	2	14	405	402	4	2	6	14	162	161	2
10	0	13	28	2	8	7	4	13	43	48	4	-4	9	13	103	111	2	-3	2	14	113	108	2	3	6	14	53	52	2
11	0	13	25	23	12	8	4	13	237	227	4	-3	9	13	363	343	5	-2	2	14	71	75	2	4	6	14	226	227	4

12	0	13	106	108	9	4	13	102	110	3	-2	9	13	187	188	4	-1	2	14	139	143	2	5	6	14	140	140	3
12	1	13	126	150	8	4	13	159	158	3	-1	9	13	22	38	10	0	2	14	136	130	2	6	6	14	214	218	4
11	1	13	68	69	5	4	13	75	69	6	0	9	13	17	8	17	1	2	14	138	143	2	7	6	14	127	129	3
10	1	13	81	83	3	-11	5	36	46	13	1	9	13	37	38	4	2	2	14	74	73	2	8	6	14	127	127	3
-9	1	13	118	126	3	-10	5	53	54	7	2	9	13	195	188	3	3	2	14	114	109	2	9	6	14	108	120	4
-8	1	13	62	62	2	-9	5	42	43	6	3	9	13	353	344	6	4	2	14	406	403	5	10	6	14	67	66	8
-7	1	13	179	182	3	-8	5	102	103	2	4	9	13	108	112	3	5	2	14	184	185	2	-9	7	14	206	200	6
-6	1	13	97	101	2	-7	5	390	376	5	5	9	13	41	43	5	6	2	14	339	334	5	-8	7	14	89	87	3
-5	1	13	97	98	1	-6	5	148	151	2	6	9	13	48	48	5	7	2	14	70	67	4	-7	7	14	63	57	4
-4	1	13	153	155	2	-5	5	130	132	2	7	9	13	154	152	3	8	2	14	114	120	3	-6	7	14	77	75	3
-3	1	13	376	369	3	-4	5	80	80	2	8	9	13	47	49	5	9	2	14	75	73	4	-5	7	14	108	110	2
-2	1	13	69	67	2	-3	5	365	354	4	-7	10	13	47	45	6	10	2	14	94	92	4	-4	7	14	71	75	3
-1	1	13	15	20	10	-2	5	268	262	2	-6	10	13	191	190	4	11	2	14	77	65	11	-3	7	14	21	25	8
0	1	13	99	94	1	-1	5	236	240	2	-5	10	13	124	125	3	-11	3	14	101	89	6	-2	7	14	46	53	4
1	1	13	28	20	4	0	5	70	74	1	-4	10	13	54	59	4	-10	3	14	64	65	5	-1	7	14	163	165	3
2	1	13	71	66	1	1	5	233	240	3	-3	10	13	58	61	5	-9	3	14	267	263	5	0	7	14	119	119	2
3	1	13	377	370	4	2	5	269	264	3	-2	10	13	61	60	3	-8	3	14	91	97	2	1	7	14	164	167	2
4	1	13	152	156	2	3	5	365	356	4	-1	10	13	56	58	3	-7	3	14	101	101	2	2	7	14	47	53	2
5	1	13	90	96	2	4	5	77	81	2	0	10	13	67	69	3	-6	3	14	24	32	5	3	7	14	25	26	7
6	1	13	97	99	2	5	5	129	132	2	1	10	13	59	59	4	-5	3	14	273	273	3	4	7	14	78	76	3
7	1	13	182	181	3	6	5	146	152	3	2	10	13	59	58	4	-4	3	14	114	117	1	5	7	14	108	108	3
8	1	13	59	61	2	7	5	383	377	5	3	10	13	59	60	3	-3	3	14	64	59	1	6	7	14	71	76	3
9	1	13	120	126	2	8	5	105	103	3	4	10	13	59	59	4	-2	3	14	153	152	2	7	7	14	61	57	5
10	1	13	78	82	3	9	5	45	43	7	5	10	13	123	125	4	-1	3	14	176	177	2	8	7	14	89	87	4
11	1	13	69	66	5	10	5	59	54	4	6	10	13	184	189	4	0	3	14	131	127	1	9	7	14	195	200	8
12	1	13	150	149	13	11	5	40	47	32	7	10	13	50	44	4	1	3	14	177	177	2	-8	8	14	43	54	7
11	2	13	57	42	6	-10	6	212	213	4	-6	11	13	20	41	19	2	3	14	154	153	3	-7	8	14	151	145	3
10	2	13	355	343	6	-9	6	122	120	3	-5	11	13	102	103	3	3	3	14	63	60	2	-6	8	14	268	255	4
-9	2	13	165	164	3	-8	6	195	186	3	-4	11	13	63	66	5	4	3	14	114	116	3	-5	8	14	172	160	3
-8	2	13	226	227	3	-7	6	42	43	4	-3	11	13	203	195	3	5	3	14	278	272	3	-4	8	14	197	201	3
-7	2	13	47	50	2	-6	6	235	240	3	-2	11	13	97	93	4	6	3	14	33	32	6	-3	8	14	86	83	3
-6	2	13	275	273	3	-5	6	69	71	2	-1	11	13	64	68	4	7	3	14	97	102	3	-2	8	14	146	139	4
-5	2	13	111	116	1	-4	6	81	85	2	0	11	13	53	45	4	8	3	14	97	96	3	-1	8	14	92	90	4
-4	2	13	175	173	2	-3	6	33	33	4	1	11	13	68	69	4	9	3	14	264	264	5	0	8	14	0	6	1
-3	2	13	78	79	1	-2	6	52	53	2	2	11	13	93	95	4	10	3	14	56	67	5	1	8	14	90	89	2
-2	2	13	31	35	2	-1	6	169	167	2	3	11	13	191	197	5	11	3	14	94	91	7	2	8	14	139	140	2
-1	2	13	176	171	2	0	6	357	344	4	4	11	13	58	67	5	-10	4	14	109	110	3	3	8	14	82	84	2
0	2	13	608	596	6	1	6	170	167	2	5	11	13	96	101	4	-9	4	14	65	65	5	4	8	14	208	202	3
1	2	13	182	173	2	2	6	56	54	2	6	11	13	34	39	1	-8	4	14	71	69	2	5	8	14	170	160	3
2	2	13	28	37	4	3	6	29	31	4	-4	12	13	34	38	15	-7	4	14	80	84	2	6	8	14	261	255	6
3	2	13	76	79	2	4	6	75	82	2	-3	12	13	44	34	10	-6	4	14	203	206	3	7	8	14	143	145	3

4	2	13	171	172	2	5	6	13	65	72	3	-2	12	13	72	69	7	-5	4	14	95	100	2	8	8	14	50	54	10
5	2	13	113	115	2	6	6	13	234	240	3	-1	12	13	108	107	4	-4	4	14	152	154	2	-7	9	14	95	112	5
6	2	13	275	274	3	7	6	13	48	43	4	0	12	13	247	247	5	-3	4	14	155	152	2	-6	9	14	71	68	4
7	2	13	46	49	4	8	6	13	191	188	4	1	12	13	101	107	4	-2	4	14	223	222	3	-5	9	14	78	86	3
8	2	13	232	226	4	9	6	13	122	120	4	2	12	13	60	69	5	-1	4	14	169	162	2	-4	9	14	182	181	4
9	2	13	167	164	3	10	6	13	214	214	4	3	12	13	33	35	9	0	4	14	150	136	1	-3	9	14	199	190	5
10	2	13	353	341	6	-10	7	13	81	89	5	4	12	13	0	38	1	1	4	14	167	163	2	-2	9	14	235	226	4
11	2	13	46	42	7	-9	7	13	178	186	3	0	0	14	275	273	6	2	4	14	221	223	3	-1	9	14	247	243	5
12	2	13	58	41	13	-8	7	13	19	21	19	1	0	14	38	39	4	3	4	14	154	153	3	0	9	14	0	6	1
11	3	13	98	102	4	-7	7	13	67	79	2	2	0	14	230	230	3	4	4	14	157	156	2	1	9	14	245	244	5
10	3	13	87	81	3	-6	7	13	172	168	2	3	0	14	154	152	2	5	4	14	102	100	2	2	9	14	235	226	5
-9	3	13	186	182	3	-5	7	13	141	138	3	4	0	14	197	195	2	6	4	14	208	207	3	3	9	14	195	191	4
-8	3	13	75	78	3	-4	7	13	123	126	2	5	0	14	72	69	2	7	4	14	88	83	3	4	9	14	184	180	4
-7	3	13	259	260	3	-3	7	13	88	87	2	6	0	14	109	108	2	8	4	14	68	70	4	5	9	14	87	84	4
-6	3	13	180	178	2	-2	7	13	87	90	2	7	0	14	145	139	3	9	4	14	65	65	4	6	9	14	73	69	3

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabesi2

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	9	14	104	112	6	7	3	15	112	118	3	-6	9	15	30	18	14	-7	4	16	110	118	4
-6	10	14	48	58	6	8	3	15	23	24	13	-5	9	15	121	119	4	-6	4	16	172	181	3
-5	10	14	35	44	11	9	3	15	35	21	9	-4	9	15	122	122	5	-5	4	16	100	86	3
-4	10	14	78	85	4	10	3	15	57	22	20	-3	9	15	186	189	4	-4	4	16	230	224	4
-3	10	14	65	70	4	-9	4	15	65	70	4	-2	9	15	122	123	3	-3	4	16	277	268	5
-2	10	14	246	244	5	-8	4	15	241	237	4	-1	9	15	144	138	4	-2	4	16	249	246	5
-1	10	14	181	181	4	-7	4	15	40	43	6	0	9	15	196	193	5	-1	4	16	84	84	3
0	10	14	110	112	3	-6	4	15	105	108	2	1	9	15	130	138	4	0	4	16	16	4	15
1	10	14	177	181	4	-5	4	15	56	58	3	2	9	15	121	121	4	1	4	16	87	84	2
2	10	14	241	245	6	-4	4	15	63	61	2	3	9	15	198	189	5	2	4	16	249	247	4
3	10	14	76	71	5	-3	4	15	203	196	2	4	9	15	124	122	4	3	4	16	280	268	4
4	10	14	80	85	4	-2	4	15	274	258	4	5	9	15	119	120	3	4	4	16	232	223	4
5	10	14	49	43	5	-1	4	15	149	153	2	6	9	15	17	20	16	5	4	16	88	86	3
6	10	14	60	56	6	0	4	15	342	339	5	-4	10	15	48	52	12	6	4	16	182	180	4
-4	11	14	44	47	8	1	4	15	155	153	2	-3	10	15	133	140	4	7	4	16	117	118	3
-3	11	14	194	186	5	2	4	15	270	259	4	-2	10	15	167	166	4	8	4	16	78	74	5
-2	11	14	145	139	4	3	4	15	203	196	3	-1	10	15	35	33	14	-8	5	16	75	97	10
-1	11	14	205	206	5	4	4	15	60	62	2	0	10	15	12	7	11	-7	5	16	76	86	4
0	11	14	168	162	5	5	4	15	66	59	3	1	10	15	48	32	9	-6	5	16	80	82	4
1	11	14	214	209	5	6	4	15	104	108	3	2	10	15	169	167	5	-5	5	16	62	65	4
2	11	14	143	139	3	7	4	15	45	41	6	3	10	15	130	141	6	-4	5	16	123	126	3
3	11	14	197	186	7	8	4	15	237	238	5	4	10	15	46	53	9	-3	5	16	92	92	3
4	11	14	40	46	17	9	4	15	73	72	4	-1	11	15	74	59	13	-2	5	16	47	40	5
0	12	14	0	27	1	-9	5	15	100	114	5	0	11	15	80	52	13	-1	5	16	124	121	3
1	0	15	237	228	3	-8	5	15	30	15	9	1	11	15	35	59	15	0	5	16	16	6	16
2	0	15	388	382	6	-7	5	15	270	268	4	0	0	16	151	154	4	1	5	16	125	122	2
3	0	15	203	195	3	-6	5	15	107	104	2	1	0	16	14	23	13	2	2	17	46	41	4
4	0	15	76	75	2	-5	5	15	35	32	4	2	0	16	355	339	4	3	5	16	101	93	3
5	0	15	113	114	2	-4	5	15	126	120	2	3	0	16	172	171	3	4	5	16	133	126	3
6	0	15	114	119	3	-3	5	15	230	234	3	4	0	16	223	226	4	5	5	16	76	65	4
7	0	15	125	121	3	-2	5	15	126	129	2	5	0	16	53	52	6	6	5	16	88	81	4
8	0	15	232	227	4	-1	5	15	142	140	2	6	0	16	278	274	5	7	5	16	84	86	4
9	0	15	57	66	6	0	5	15	14	10	14	7	0	16	289	288	7	8	5	16	83	96	4
10	0	15	68	49	7	1	5	15	147	141	2	8	0	16	200	200	5	-7	6	16	152	168	5
10	1	15	34	30	11	2	5	15	126	129	2	9	0	16	54	64	5	-6	6	16	180	185	5
-9	1	15	44	49	9	3	5	15	229	233	4	-9	1	16	120	145	4	-5	6	16	25	27	11
-8	1	15	24	4	13	4	5	15	115	120	3	-8	1	16	49	57	9	-4	6	16	178	171	5

-7	1	15	195	195	4	5	5	15	14	32	13	-7	1	16	62	57	5	-3	6	16	202	197	5	-1	3	17	103	111	3
-6	1	15	190	193	3	6	5	15	111	105	3	-6	1	16	97	94	3	-2	6	16	276	268	5	0	3	17	43	42	4
-5	1	15	277	270	4	7	5	15	278	268	5	-5	1	16	35	34	9	-1	6	16	91	88	4	1	3	17	105	110	2
-4	1	15	200	190	3	8	5	15	0	16	1	-4	1	16	145	140	2	0	6	16	46	45	5	2	3	17	31	36	6
-3	1	15	103	107	2	9	5	15	108	113	5	-3	1	16	179	177	3	1	6	16	88	88	4	3	3	17	134	134	2
-2	1	15	106	104	2	-9	6	15	41	40	40	-2	1	16	135	127	2	2	6	16	273	268	6	4	3	17	235	229	5
-1	1	15	91	84	3	-8	6	15	182	185	4	-1	1	16	310	301	5	3	6	16	205	197	4	5	3	17	367	347	8
0	1	15	178	173	2	-7	6	15	14	33	13	0	1	16	173	168	3	4	6	16	172	172	4	6	3	17	163	168	5
1	1	15	88	84	2	-6	6	15	123	121	2	1	1	16	310	302	4	5	6	16	27	27	11	7	3	17	98	105	4
2	1	15	103	103	2	-5	6	15	88	85	3	2	1	16	140	128	2	6	6	16	182	185	4	-7	4	17	114	112	12
3	1	15	104	107	2	-4	6	15	166	153	3	3	1	16	181	177	3	7	6	16	165	168	5	-6	4	17	138	142	4
4	1	15	201	190	3	-3	6	15	133	133	2	4	1	16	140	139	2	-6	7	16	21	33	21	-5	4	17	70	70	4
5	1	15	276	269	4	-2	6	15	292	277	4	5	1	16	37	35	6	-5	7	16	33	39	8	-4	4	17	72	69	3
6	1	15	194	192	3	-1	6	15	146	143	3	6	1	16	90	95	3	-4	7	16	112	118	4	-3	4	17	91	90	3
7	1	15	191	196	4	0	6	15	200	197	3	7	1	16	61	58	5	-3	7	16	110	122	4	-2	4	17	240	242	6
8	1	15	32	6	9	1	6	15	144	143	3	8	1	16	54	57	6	-2	7	16	46	61	4	-1	4	17	121	122	4
9	1	15	56	49	6	2	6	15	294	277	4	9	1	16	131	149	5	-1	7	16	366	342	7	0	4	17	68	63	3
10	1	15	42	30	10	3	6	15	131	133	2	-9	2	16	30	44	29	0	7	16	310	290	7	1	4	17	125	123	2
11	2	15	138	148	7	4	6	15	159	153	3	-8	2	16	67	70	4	1	7	16	366	342	11	2	4	17	242	242	4
-9	2	15	95	94	4	5	6	15	80	84	3	-7	2	16	35	38	7	2	7	16	54	61	6	3	4	17	85	89	3
-8	2	15	99	99	3	6	6	15	111	120	3	-6	2	16	149	146	3	3	7	16	126	124	4	4	4	17	67	69	4
-7	2	15	31	34	6	7	6	15	46	34	8	-5	2	16	122	117	2	4	7	16	108	118	4	5	4	17	67	70	5
-6	2	15	118	122	2	8	6	15	186	186	5	-4	2	16	41	44	4	5	7	16	40	37	7	6	4	17	136	141	4
-5	2	15	108	109	2	9	6	15	41	39	17	-3	2	16	60	65	3	6	7	16	31	31	26	7	4	17	97	111	4
-4	2	15	162	165	2	-8	7	15	60	65	6	-2	2	16	109	109	2	-5	8	16	83	88	5	-6	5	17	52	55	5
-3	2	15	71	76	2	-7	7	15	133	136	3	-1	2	16	107	100	2	-4	8	16	160	163	4	-5	5	17	24	18	17
-2	2	15	95	102	2	-6	7	15	196	197	4	0	2	16	22	15	7	-3	8	16	77	79	4	-4	5	17	41	38	6
-1	2	15	265	256	3	-5	7	15	358	340	7	1	2	16	106	100	2	-2	8	16	46	45	5	-3	5	17	72	77	5
0	2	15	570	556	7	-4	7	15	191	188	4	2	2	16	107	108	2	-1	8	16	90	97	3	-2	5	17	75	67	5
1	2	15	265	257	3	-3	7	15	124	127	3	3	2	16	60	66	2	0	8	16	102	106	5	-1	5	17	96	91	3
2	2	15	96	102	2	-2	7	15	112	108	3	4	2	16	44	47	4	1	8	16	89	96	5	0	5	17	81	87	3
3	2	15	69	75	2	-1	7	15	230	229	5	5	2	16	117	117	3	2	8	16	60	47	8	1	5	17	98	91	5
4	2	15	164	165	3	0	7	15	103	104	3	6	2	16	144	145	4	3	8	16	75	77	8	2	5	17	69	68	3
5	2	15	108	107	2	1	7	15	234	231	4	7	2	16	41	38	6	4	8	16	159	162	4	3	5	17	73	77	3
6	2	15	125	121	3	3	7	15	111	109	2	8	2	16	65	71	5	5	8	16	77	88	6	4	5	17	39	39	6
7	2	15	46	34	5	3	7	15	128	128	2	9	2	16	43	45	13	-4	9	16	70	36	26	5	5	17	16	18	15
8	2	15	100	97	3	4	7	15	190	188	3	-9	3	16	225	221	8	-3	9	16	147	159	5	6	5	17	57	55	6
9	2	15	86	93	4	5	7	15	350	341	7	-8	3	16	104	108	3	-2	9	16	77	80	4	-6	6	17	94	93	9
10	2	15	125	147	5	6	7	15	201	198	4	-7	3	16	38	29	8	-1	9	16	160	168	5	-5	6	17	91	100	3
11	3	15	47	22	13	7	7	15	137	137	4	-6	3	16	43	44	6	0	9	16	68	71	4	-4	6	17	107	108	4
-9	3	15	38	23	8	8	7	15	63	65	5	-5	3	16	88	88	2	1	9	16	163	168	6	-3	6	17	150	146	5

-8	3	15	24	10	7	8	15	35	45	8	-4	3	16	58	58	5	2	9	16	78	80	6	-2	6	17	166	167	5
-7	3	15	123	2	-6	8	15	52	47	5	-3	3	16	15	23	14	3	9	16	160	159	8	-1	6	17	146	142	3
-6	3	15	186	3	-5	8	15	57	51	5	-2	3	16	156	150	3	-1	10	16	93	77	15	0	6	17	36	25	9
-5	3	15	378	5	-4	8	15	145	146	3	-1	3	16	412	397	5	0	10	16	6	7	6	1	6	17	142	142	5
-4	3	15	122	2	-3	8	15	180	176	4	0	3	16	379	364	4	1	10	16	64	77	25	2	6	17	164	167	4
-3	3	15	277	3	-2	8	15	116	120	3	1	3	16	415	398	5	1	0	17	218	215	4	3	6	17	150	147	5
-2	3	15	117	2	-1	8	15	160	161	4	2	3	16	153	151	3	2	0	17	349	342	6	4	6	17	110	108	4
-1	3	15	108	2	0	8	15	291	281	7	3	3	16	31	23	4	3	0	17	195	187	3	5	6	17	96	101	3
0	3	15	64	2	1	8	15	175	162	4	4	3	16	52	57	3	4	0	17	114	114	3	6	6	17	98	93	6
1	3	15	100	2	2	8	15	116	120	3	5	3	16	91	90	2	5	0	17	0	6	1	-5	7	17	254	271	8
2	3	15	121	2	3	8	15	176	176	3	6	3	16	45	45	8	6	0	17	67	73	4	-4	7	17	207	191	6
3	3	15	278	4	4	8	15	152	146	3	7	3	16	39	30	6	7	0	17	162	165	5	-3	7	17	81	88	4
4	3	15	126	2	5	8	15	52	49	4	8	3	16	99	109	3	8	0	17	176	177	10	-2	7	17	82	84	4
5	3	15	373	5	6	8	15	55	48	5	9	3	16	221	222	17	-8	1	17	158	125	11	-1	7	17	129	132	4
6	3	15	194	3	7	8	15	52	44	6	-8	4	16	73	75	4	-7	1	17	115	117	4	0	7	17	57	64	7

Table 1. Observed and calculated structure factors for nabes12

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	7	17	134	132	4	0	1	18	161	159	3	-1	3	18	170	158	4
2	7	17	92	83	5	1	1	18	128	133	3	0	3	18	232	228	5
3	7	17	93	90	6	2	1	18	71	76	3	1	3	18	162	160	3
4	7	17	174	192	5	3	1	18	39	36	7	2	3	18	91	93	3
5	7	17	263	271	14	4	1	18	21	33	20	3	3	18	68	73	6
-3	8	17	36	29	23	5	1	18	53	52	6	4	3	18	85	78	4
-2	8	17	160	151	7	6	1	18	87	92	6	5	3	18	51	53	6
-1	8	17	77	77	6	-6	2	18	25	29	24	6	3	18	89	98	5
0	8	17	0	4	1	-5	2	18	96	90	5	-5	4	18	22	42	22
1	8	17	61	78	6	-4	2	18	92	94	4	-4	4	18	145	153	4
2	8	17	165	152	11	-3	2	18	72	75	3	-3	4	18	168	170	4
3	8	17	14	28	13	-2	2	18	126	123	3	-2	4	18	135	133	5
0	0	18	0	0	1	-1	2	18	82	84	3	-1	4	18	72	70	5
1	0	18	69	75	3	0	2	18	36	40	7	0	4	18	32	39	9
2	0	18	233	238	6	1	2	18	79	84	3	1	4	18	70	70	4
3	0	18	228	225	6	2	2	18	115	123	3	2	4	18	124	133	3
4	0	18	214	212	5	3	2	18	72	75	3	3	4	18	161	169	4
5	0	18	38	11	10	4	2	18	92	94	4	4	4	18	146	150	4
6	0	18	127	139	4	5	2	18	90	90	4	5	4	18	40	42	9
-6	1	18	77	91	4	6	2	18	23	29	22	-4	5	18	68	87	6
-5	1	18	34	53	11	-6	3	18	131	98	18	-3	5	18	158	163	4
-4	1	18	38	34	7	-5	3	18	51	52	6	-2	5	18	156	163	4
-3	1	18	49	35	6	-4	3	18	81	78	5	-1	5	18	132	133	4
-2	1	18	79	77	3	-3	3	18	84	74	3	0	5	18	32	34	14
-1	1	18	131	133	3	-2	3	18	96	92	4	1	5	18	136	133	4
1	19	103	111	111	5	4	1	19	103	103	5	4	1	19	103	103	5
2	19	62	25	25	11	-4	2	19	62	62	4	-4	2	19	62	62	4
3	19	80	93	93	4	-3	2	19	80	80	7	-3	2	19	80	80	7
4	19	41	40	40	7	-2	2	19	41	41	20	-2	2	19	41	41	20
5	19	18	28	28	18	-1	2	19	18	18	5	-1	2	19	18	18	5
6	19	107	109	109	3	0	2	19	107	107	4	0	2	19	107	107	4
7	19	27	26	26	10	1	2	19	27	27	7	1	2	19	27	27	7
8	19	39	41	41	9	2	2	19	39	39	8	2	2	19	39	39	8
9	19	86	95	95	5	3	2	19	86	86	7	3	2	19	86	86	7
10	19	34	25	25	10	4	2	19	34	34	5	4	2	19	34	34	5
11	19	59	65	65	4	-3	3	19	59	59	7	-3	3	19	59	59	7
12	19	55	57	57	4	-2	3	19	55	55	8	-2	3	19	55	55	8
13	19	123	130	130	4	-1	3	19	123	123	8	-1	3	19	123	130	4
14	19	112	112	112	5	0	3	19	112	112	4	0	3	19	112	112	5
15	19	135	130	130	4	1	3	19	135	130	7	1	3	19	135	130	4
16	19	46	57	57	17	2	3	19	46	46	1	2	3	19	46	46	1
17	19	68	66	66	12	3	3	19	68	68	21	3	3	19	68	66	12
18	19	0	33	33	1	-3	4	19	0	0	4	-3	4	19	0	33	1
19	19	94	108	108	3	-2	4	19	94	94	3	-2	4	19	94	94	3
20	19	64	69	69	5	-1	4	19	64	64	3	-1	4	19	64	69	5
21	19	19	22	22	18	0	4	19	19	19	3	0	4	19	19	19	3
22	19	81	71	71	8	1	4	19	81	81	4	1	4	19	81	71	8
23	19	98	109	109	10	2	4	19	98	98	3	2	4	19	98	109	10
24	19	71	87	87	10	0	5	19	71	71	4	0	5	19	71	87	10
25	19	106	113	113	4	3	1	19	106	106	4	3	1	19	106	113	4



**NABESITE, Na<sub>2</sub>BeSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>•4H<sub>2</sub>O, A NEW MINERAL SPECIES  
FROM THE ILÍMAUSSAQ ALKALINE COMPLEX, SOUTH GREENLAND\***

OLE V. PETERSEN<sup>§</sup>

*Geologisk Museum, Øster Voldgade 5-7, DK-1350 København K, Denmark*

GERALD GIESTER

*Institut für Mineralogie und Kristallographie, Geozentrum, Universität Wien, Althanstr. 14, A-1090 Wien, Austria*

FRANZ BRANDSTÄTTER AND GERHARD NIEDERMAYR

*Naturhistorisches Museum Wien, Mineralogisch-Petrographische Abteilung, Postfach 417, A-1014 Wien, Austria*

ABSTRACT

Nabesite is found in complex tugtupite-bearing albitites on the Kvanefjeld Plateau, in the northwesternmost part of the Ilímaussaq alkaline complex, South Greenland. It occurs in cavities, covered with albite crystals, in association with gmelinite, neptunite, analcime, gonnardite, lovdarite, trona(?) and opal(?). Nabesite forms aggregates of thin platy crystals, in parallel or subparallel orientation, the individual crystals show the pinacoids {100}, {010}, {001}, and {111} and {111}, both sphenoids, and range in size from 0.05 × 0.5 × 0.5 to 0.2 × 5 × 5 mm. The mineral is colorless and transparent, it has a white streak, and the luster is vitreous. The Mohs hardness is 5–6, it is brittle and shows good cleavage on {110} and {001}, and the fracture is uneven. Nabesite is biaxial negative with  $n_{\alpha} = 1.499(1)$ ,  $n_{\beta} = 1.507(1)$  and  $n_{\gamma} = 1.511(1)$ ,  $2V_{\alpha}$  (measured) 65(5)°,  $2V_{\alpha}$  (calculated) 70°, and has  $X = a$ ,  $Y = c$  and  $Z = b$ .  $D_{\text{meas}} = 2.16(2)$  g/cm<sup>3</sup>,  $D_{\text{calc}} = 2.21$  and  $2.22$  g/cm<sup>3</sup> for  $V$  derived from powder and single-crystal diffraction data, respectively. Data from EMP, SEM-EDS and results of the refinement of the crystal structure gave: Na<sub>2</sub>O 13.8, K<sub>2</sub>O 0.34, BeO 6.26, CaO 0.13, SiO<sub>2</sub> 62.4, H<sub>2</sub>O 18.05, total 100.98 wt%. The ideal formula is Na<sub>2</sub>BeSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>•4H<sub>2</sub>O. The strongest lines on the X-ray powder-diffraction pattern [ $d$  in Å(I)( $hkl$ )] are: 6.11(80)(111), 5.97(100)(002), 3.09(70)(310), 3.06(50)(222) and 2.988(60)(311). The unit-cell parameters refined from the powder data are:  $a$  9.722(1),  $b$  10.142(1),  $c$  12.030(1) Å,  $V$  1186.2 Å<sup>3</sup>. The structure was determined by single-crystal X-ray diffraction. Nabesite crystallizes in the orthorhombic space-group P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>,  $a$  9.748(1),  $b$  10.133(1),  $c$  11.954(2) Å,  $V$  1180.8(2) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ . A total of 5704 unique reflections (at 293 K) gave a final  $R1$  factor of 0.028 ( $wR2 = 0.078$ ). The [SiO<sub>4</sub>] tetrahedra form sheets consisting of a combination of 4- and 8-membered rings, which are interconnected *via* the [BeO<sub>4</sub>] tetrahedra (a spiro-5 arrangement as secondary building unit) to form a framework. Channels house octahedrally coordinated sodium atoms and H<sub>2</sub>O molecules with a well-established system of hydrogen bonds. Nabesite is a zeolite with a new type of framework; the framework density is 16.94 T / 1000 Å<sup>3</sup>. Relationships to the crystal structure of weinebeneite are evident.

*Keywords:* nabesite, new mineral species, crystal structure, zeolite, Ilímaussaq alkaline complex, Greenland.

SOMMAIRE

On trouve la nabesite dans des venues complexes d'albitites à tugtupite sur le plateau de Kvanefjeld, à l'extrême nord-ouest du complexe alcalin d'Ilímaussaq, dans le sud du Groënland. Elle se présente en cavités, revouverte de cristaux d'albite, en association avec gmelinite, neptunite, analcime, gonnardite, lovdarite, trona(?) et opale(?). La nabesite forme des agrégats de minces cristaux en plaquette parallèles ou subparallèles; les cristaux individuels montrent les pinacoïdes {100}, {010}, {001}, ainsi que {111} et {111}, tous deux sphénoïdes, et varient entre 0.05 × 0.5 × 0.5 et 0.2 × 5 × 5 mm en taille. Il s'agit d'un minéral incolore et transparent, dont la rayure est blanche, et l'éclat, vitreux. La dureté de Mohs est entre 5 et 6. C'est un minéral cassant qui montre un bon clivage sur {110} et {001}, et la fracture est inégale. La nabesite est biaxe négative, avec  $n_{\alpha} = 1.499(1)$ ,  $n_{\beta} = 1.507(1)$  et  $n_{\gamma} = 1.511(1)$ ,  $2V_{\alpha}$  mesuré de 65(5)°,  $2V_{\alpha}$  calculé de 70°, avec  $X = a$ ,  $Y = c$  et  $Z = b$ . La densité mesurée est égale à 2.16(2) g/cm<sup>3</sup>, tandis que la densité calculée est égale à 2.21 et 2.22 g/cm<sup>3</sup> pour un volume  $V$  dérivé à partir de données en diffraction X sur poudre et sur cristal unique, respectivement. Les données obtenues par microsonde électronique, par microscopie

\* Contribution to the mineralogy of Ilímaussaq, no. 104.

<sup>§</sup> E-mail address: ovp@savik.geomus.ku.dk