

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	0	-56	712	695	13	-2	0	-50	360	383	9	-2	3	-48	562	562	10	1	4	-46	230	241	10	5	3	-44	197	183	4
0	0	-56	273	266	7	-1	0	-50	179	152	6	-1	3	-48	148	143	5	2	4	-46	214	225	14	-3	4	-44	194	203	5
1	0	-56	290	283	7	0	0	-50	259	259	6	0	3	-48	280	292	6	3	4	-46	76	78	10	-2	4	-44	287	286	11
2	0	-56	51	63	13	1	0	-50	199	191	6	1	3	-48	221	241	16	-5	1	-45	52	41	9	-1	4	-44	261	252	4
0	1	-56	210	214	9	2	0	-50	740	744	9	2	3	-48	255	256	5	-4	1	-45	91	40	7	0	4	-44	99	90	9
1	1	-56	95	69	6	3	0	-50	120	124	8	3	3	-48	328	308	5	-3	1	-45	850	859	8	1	4	-44	156	162	6
2	1	-56	349	348	5	4	0	-50	197	188	9	4	3	-48	211	208	5	-2	1	-45	198	169	8	2	4	-44	410	429	12
-1	1	-55	86	24	13	5	0	-50	78	93	11	0	4	-48	83	78	11	-1	1	-45	159	152	4	3	4	-44	273	276	6
0	1	-55	244	207	5	-4	1	-50	120	129	7	1	4	-48	156	137	7	0	1	-45	320	297	4	4	4	-44	328	333	5
1	1	-55	296	279	9	-3	1	-50	569	569	14	-5	1	-47	114	97	7	1	1	-45	248	253	9	-6	1	-43	216	217	5
2	1	-55	135	105	6	-2	1	-50	105	80	7	-4	1	-47	72	34	8	2	1	-45	283	291	4	-5	1	-43	90	88	6
0	2	-55	505	511	9	-1	1	-50	241	252	9	-3	1	-47	577	549	8	3	1	-45	67	67	7	-4	1	-43	140	155	5
1	2	-55	32	42	32	0	1	-50	90	70	9	-2	1	-47	610	604	5	4	1	-45	277	263	4	-3	1	-43	65	80	7
-2	0	-54	245	226	10	1	1	-50	402	396	4	-1	1	-47	55	57	11	5	1	-45	155	145	5	-2	1	-43	308	311	4
-1	0	-54	311	285	10	2	1	-50	138	104	5	0	1	-47	141	131	4	6	1	-45	152	115	7	-1	1	-43	237	273	3
0	0	-54	431	446	7	3	1	-50	61	76	8	1	1	-47	660	671	6	-5	2	-45	588	585	14	0	1	-43	488	473	5
1	0	-54	70	74	10	4	1	-50	80	48	20	2	1	-47	469	450	19	-4	2	-45	446	427	6	1	1	-43	88	76	8
2	0	-54	282	274	6	5	1	-50	161	165	7	3	1	-47	403	412	7	-3	2	-45	92	74	5	2	1	-43	257	252	4
3	0	-54	475	464	10	-3	2	-50	101	82	7	4	1	-47	407	405	7	-2	2	-45	530	524	5	3	1	-43	163	188	8
-2	1	-54	142	124	9	-2	2	-50	369	371	17	5	1	-47	406	411	10	-1	2	-45	648	659	9	4	1	-43	477	496	5
-1	1	-54	283	277	6	-1	2	-50	200	185	5	-4	2	-47	128	98	12	0	2	-45	244	237	5	5	1	-43	283	275	5
0	1	-54	512	506	13	0	2	-50	289	293	9	-3	2	-47	286	293	7	1	2	-45	222	222	4	6	1	-43	128	75	14
1	1	-54	460	454	5	1	2	-50	152	164	8	-2	2	-47	209	197	6	2	2	-45	345	349	6	-5	2	-43	453	462	6
2	1	-54	216	209	4	2	2	-50	173	163	5	-1	2	-47	651	639	8	3	2	-45	220	239	4	-4	2	-43	217	199	8
3	1	-54	316	303	5	3	2	-50	167	163	5	0	2	-47	140	135	11	4	2	-45	98	111	5	-3	2	-43	52	39	7
-1	2	-54	335	301	5	4	2	-50	136	123	5	1	2	-47	51	23	9	5	2	-45	195	188	4	-2	2	-43	395	410	4
0	2	-54	119	85	7	-2	3	-50	96	90	6	2	2	-47	651	640	6	-4	3	-45	54	28	11	-1	2	-43	239	236	5
1	2	-54	69	44	11	-1	3	-50	299	287	5	3	2	-47	216	211	4	-3	3	-45	298	296	8	0	2	-43	138	98	5
2	2	-54	250	245	5	0	3	-50	615	631	9	4	2	-47	140	95	4	-2	3	-45	84	83	7	1	2	-43	282	294	6
-2	1	-53	77	85	13	1	3	-50	320	311	8	5	2	-47	337	345	5	-1	3	-45	65	63	11	2	2	-43	153	153	4
-1	1	-53	290	269	12	2	3	-50	495	495	7	-3	3	-47	189	172	4	0	3	-45	232	251	5	3	2	-43	278	276	4
0	1	-53	714	680	11	3	3	-50	82	64	8	-2	3	-47	215	205	16	1	3	-45	121	66	11	4	2	-43	772	784	8
1	1	-53	403	366	5	-4	1	-49	171	192	12	-1	3	-47	258	263	5	2	3	-45	344	363	5	5	2	-43	101	100	7
2	1	-53	97	65	6	-3	1	-49	203	170	5	0	3	-47	160	152	7	3	3	-45	170	187	4	6	2	-43	260	271	5
3	1	-53	282	279	5	-2	1	-49	160	166	5	1	3	-47	421	425	7	4	3	-45	245	239	5	-4	3	-43	335	350	5
-2	2	-53	210	165	5	-1	1	-49	276	268	5	2	3	-47	138	96	15	5	3	-45	63	65	7	-3	3	-43	118	104	8
-1	2	-53	525	522	6	0	1	-49	177	185	4	3	3	-47	72	54	8	-2	4	-45	163	165	5	-2	3	-43	327	328	4
0	2	-53	136	102	6	1	1	-49	620	592	5	4	3	-47	113	83	6	-1	4	-45	286	274	6	-1	3	-43	123	107	5
1	2	-53	259	244	5	2	1	-49	290	282	8	-1	4	-47	249	251	10	0	4	-45	81	45	10	0	3	-43	178	180	5
2	2	-53	517	511	6	3	1	-49	76	65	7	0	4	-47	130	105	9	1	4	-45	162	145	7	1	3	-43	83	78	8
3	2	-53	242	228	10	4	1	-49	233	235	6	1	4	-47	134	108	8	2	4	-45	207	204	6	2	3	-43	110	87	9
-3	0	-52	98	122	15	5	1	-49	167	166	5	2	4	-47	260	264	7	3	4	-45	114	97	8	3	3	-43	92	109	11
-2	0	-52	121	94	12	-3	2	-49	104	98	7	-5	0	-46	237	227	7	-5	0	-44	257	262	7	4	3	-43	77	42	7
-1	0	-52	1078	1054	11	-2	2	-49	208	204	4	-4	0	-46	590	589	11	-4	0	-44	383	358	9	5	3	-43	38	39	9

0 0-52 156 168 7 -1 2-49 192 164 5 -3 0-46 291 292 6 -3 0-44 38 30 13 -3 4-43 213 213 4  
1 0-52 50 57 12 0 2-49 109 68 6 -2 0-46 764 756 13 -2 0-44 106 113 7 -2 4-43 148 134 5  
2 0-52 637 608 8 1 2-49 366 361 4 -1 0-46 529 523 7 -1 0-44 733 731 8 -1 4-43 158 151 7  
3 0-52 187 190 6 2 2-49 297 307 8 0 0-46 139 131 7 0 0-44 529 524 7 0 4-43 85 100 9  
4 0-52 50 78 25 3 2-49 311 319 5 1 0-46 330 329 6 1 0-44 199 202 5 1 4-43 54 54 10  
-3 1-52 366 360 15 4 2-49 86 96 10 2 0-46 130 119 7 2 0-44 560 556 7 2 4-43 136 91 7  
-2 1-52 88 77 10 -2 3-49 216 240 4 3 0-46 686 686 8 3 0-44 353 376 6 3 4-43 484 491 10  
-1 1-52 187 172 5 -1 3-49 100 81 8 4 0-46 675 675 12 4 0-44 72 82 13 4 4-43 128 127 6  
0 1-52 222 166 7 0 3-49 202 164 12 5 0-46 350 364 7 5 0-44 214 237 9 0 5-43 326 318 7  
1 1-52 590 581 13 1 3-49 278 276 6 6 0-46 477 502 8 6 0-44 273 285 7 -6 0-42 147 172 8  
2 1-52 267 242 9 2 3-49 115 74 8 -5 1-46 94 100 7 -5 1-44 96 83 6 -5 0-42 568 597 8  
3 1-52 177 167 5 3 3-49 352 341 5 -4 1-46 291 287 12 -4 1-44 81 42 15 -4 0-42 28 9 28  
4 1-52 156 136 6 -4 0-48 401 396 10 -3 1-46 475 453 6 -3 1-44 271 211 17 -3 0-42 184 200 6  
-2 2-52 312 317 5 -3 0-48 171 162 10 -2 1-46 629 631 13 -2 1-44 157 172 4 -2 0-42 226 247 4  
-1 2-52 548 551 22 -2 0-48 435 438 10 -1 1-46 59 39 8 -1 1-44 78 47 5 -1 0-42 976 958 10  
0 2-52 153 143 7 -1 0-48 91 84 8 0 1-46 85 27 5 0 1-44 532 537 5 0 0-42 458 451 6  
1 2-52 63 49 8 0 0-48 289 301 6 1 1-46 315 297 10 1 1-44 108 99 5 1 0-42 61 53 9  
2 2-52 198 187 9 1 0-48 230 248 6 2 1-46 102 93 6 2 1-44 331 320 17 2 0-42 391 400 6  
3 2-52 118 104 7 2 0-48 737 715 9 3 1-46 193 177 6 3 1-44 143 133 5 3 0-42 65 65 9  
0 3-52 405 401 8 3 0-48 407 426 6 4 1-46 452 454 5 4 1-44 364 370 10 4 0-42 1268 1290 18  
1 3-52 410 410 7 4 0-48 404 407 9 5 1-46 344 342 5 5 1-44 147 131 5 5 0-42 184 187 8  
-3 1-51 402 383 8 5 0-48 206 218 7 6 1-46 182 197 6 6 1-44 152 140 5 6 0-42 337 336 7  
-2 1-51 152 107 8 -4 1-48 193 201 5 -4 2-46 130 100 6 -5 2-44 276 242 20 7 0-42 277 297 7  
-1 1-51 222 226 5 -3 1-48 514 509 12 -3 2-46 147 147 4 -4 2-44 294 288 5 -6 1-42 216 213 4  
0 1-51 209 219 4 -2 1-48 233 203 5 -2 2-46 81 65 10 -3 2-44 134 102 5 -5 1-42 63 47 7  
1 1-51 305 298 15 -1 1-48 86 96 6 -1 2-46 303 285 5 -2 2-44 215 205 4 -4 1-42 365 390 6  
2 1-51 306 290 8 0 1-48 177 163 7 0 2-46 261 246 5 -1 2-44 119 51 14 -3 1-42 82 70 7  
3 1-51 116 98 6 1 1-48 371 333 5 1 2-46 148 148 4 0 2-44 332 358 6 -2 1-42 367 354 10  
4 1-51 223 231 9 2 1-48 620 641 12 2 2-46 273 265 13 1 2-44 85 37 17 -1 1-42 137 92 5  
-3 2-51 133 95 7 3 1-48 150 124 5 3 2-46 145 142 4 2 2-44 291 294 5 0 1-42 458 460 11  
-2 2-51 269 279 6 4 1-48 116 55 5 4 2-46 345 373 4 3 2-44 67 68 5 1 1-42 76 70 5  
-1 2-51 345 338 6 5 1-48 191 172 5 5 2-46 117 82 11 4 2-44 310 301 14 2 1-42 300 311 4  
0 2-51 157 131 5 -4 2-48 179 181 5 -3 3-46 132 139 5 5 2-44 69 65 7 3 1-42 146 145 7  
1 2-51 57 49 8 -3 2-48 137 125 12 -2 3-46 359 358 5 6 2-44 192 209 5 4 1-42 352 345 4  
2 2-51 141 138 6 -2 2-48 120 95 5 -1 3-46 82 37 7 -4 3-44 256 255 5 5 1-42 240 241 8  
3 2-51 135 120 6 -1 2-48 314 303 4 0 3-46 347 347 5 -3 3-44 870 868 7 6 1-42 235 257 5  
4 2-51 167 129 12 0 2-48 228 245 5 1 3-46 880 878 10 -2 3-44 71 90 11 7 1-42 114 120 6  
-1 3-51 66 19 14 1 2-48 64 74 6 2 3-46 387 399 5 -1 3-44 53 11 7 -5 2-42 79 48 8  
0 3-51 138 142 9 2 2-48 153 131 5 3 3-46 155 140 5 0 3-44 87 87 6 -4 2-42 178 169 11  
1 3-51 121 87 13 3 2-48 259 293 5 4 3-46 299 300 9 1 3-44 317 324 6 -3 2-42 38 18 9  
2 3-51 198 201 7 4 2-48 209 216 6 -2 4-46 146 121 6 2 3-44 529 539 13 -2 2-42 292 301 5  
-4 0-50 401 407 10 5 2-48 50 48 9 -1 4-46 173 140 7 3 3-44 163 163 4 -1 2-42 314 319 5  
-3 0-50 211 227 10 -3 3-48 443 433 5 0 4-46 346 368 7 4 3-44 490 497 5 0 2-42 332 334 8

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	2-42	123	114	5	0	0-40	1377	1366	14	4	2-39	184	182	4	-4	4-38	336	337	5	2	0-36	2051	2047	19					
2	2-42	241	231	10	1	0-40	338	338	6	5	2-39	210	204	4	-3	4-38	145	140	7	3	0-36	189	193	5					
3	2-42	384	391	4	2	0-40	513	516	7	6	2-39	85	72	6	-2	4-38	251	256	4	4	0-36	509	497	7					
4	2-42	104	69	8	3	0-40	651	654	8	7	2-39	260	243	5	-1	4-38	738	750	13	5	0-36	374	377	6					
5	2-42	319	326	6	4	0-40	176	205	8	-5	3-39	110	99	9	0	4-38	304	298	7	6	0-36	72	85	9					
6	2-42	183	168	9	5	0-40	335	363	9	-4	3-39	114	112	9	1	4-38	152	138	5	7	0-36	403	431	7					
-5	3-42	56	45	12	6	0-40	706	700	9	-3	3-39	314	313	4	2	4-38	337	341	5	8	0-36	52	27	14					
-4	3-42	331	333	12	7	0-40	449	436	7	-2	3-39	77	64	6	3	4-38	141	131	5	-7	1-36	175	156	9					
-3	3-42	489	488	7	-6	1-40	250	234	9	-1	3-39	50	72	7	4	4-38	190	190	10	-6	1-36	129	121	5					
-2	3-42	328	341	4	-5	1-40	95	95	5	0	3-39	96	62	5	5	4-38	80	72	12	-5	1-36	205	206	4					
-1	3-42	298	313	4	-4	1-40	415	421	11	1	3-39	34	39	12	-3	5-38	77	37	16	-4	1-36	141	134	4					
0	3-42	405	432	6	-3	1-40	165	162	3	2	3-39	263	270	4	-2	5-38	183	200	9	-3	1-36	609	625	8					
1	3-42	527	530	7	-2	1-40	275	277	4	3	3-39	50	60	8	-1	5-38	84	64	7	-2	1-36	426	428	6					
2	3-42	254	266	5	-1	1-40	78	41	5	4	3-39	370	372	4	0	5-38	69	77	8	-1	1-36	124	102	4					
3	3-42	43	37	20	0	1-40	520	509	5	5	3-39	103	89	5	1	5-38	41	53	11	0	1-36	73	79	5					
4	3-42	155	140	8	1	1-40	338	325	4	6	3-39	244	208	5	2	5-38	137	150	6	1	1-36	253	254	3					
5	3-42	117	107	8	2	1-40	117	100	4	-4	4-39	290	294	7	3	5-38	38	50	13	2	1-36	156	89	4					
-3	4-42	55	44	8	3	1-40	86	106	5	-3	4-39	303	303	10	-7	1-37	266	273	5	3	1-36	268	273	4					
-2	4-42	357	362	12	4	1-40	160	127	4	-2	4-39	282	299	4	-6	1-37	147	136	4	4	1-36	178	185	4					
-1	4-42	145	155	7	5	1-40	306	339	5	-1	4-39	129	74	10	-5	1-37	94	73	5	5	1-36	296	314	12					
0	4-42	553	561	7	6	1-40	397	412	5	0	4-39	116	111	6	-4	1-37	331	344	6	6	1-36	683	688	10					
1	4-42	274	265	6	7	1-40	75	59	7	1	4-39	293	311	6	-3	1-37	328	338	3	7	1-36	172	90	4					
2	4-42	631	646	8	-6	2-40	244	269	6	2	4-39	545	547	11	-2	1-37	237	261	7	-6	2-36	137	123	6					
3	4-42	146	126	5	-5	2-40	223	219	7	3	4-39	317	313	4	-1	1-37	181	175	3	-5	2-36	453	457	9					
4	4-42	198	203	8	-4	2-40	301	307	8	4	4-39	211	210	4	0	1-37	224	214	3	-4	2-36	62	51	5					
-1	5-42	164	165	5	-3	2-40	211	212	14	5	4-39	54	30	9	1	1-37	157	150	11	-3	2-36	120	95	10					
0	5-42	391	393	7	-2	2-40	272	273	6	-2	5-39	396	382	9	2	1-37	249	225	5	-2	2-36	356	351	4					
1	5-42	52	52	14	-1	2-40	379	335	5	-1	5-39	172	160	7	3	1-37	106	96	8	-1	2-36	87	80	7					
2	5-42	249	250	6	0	2-40	167	127	8	0	5-39	259	245	6	4	1-37	64	81	6	0	2-36	415	432	4					
-6	1-41	196	191	4	1	2-40	233	237	4	1	5-39	134	113	11	5	1-37	435	430	5	1	2-36	343	360	10					
-5	1-41	219	238	4	2	2-40	386	396	3	2	5-39	154	145	5	6	1-37	405	405	5	2	2-36	450	465	27					
-4	1-41	365	358	7	3	2-40	260	245	23	3	5-39	389	390	7	7	1-37	152	129	6	3	2-36	268	284	7					
-3	1-41	40	45	8	4	2-40	213	217	11	-7	0-38	354	356	7	-6	2-37	274	267	5	4	2-36	308	320	4					
-2	1-41	143	119	4	5	2-40	195	189	12	-6	0-38	236	220	6	-5	2-37	719	734	5	5	2-36	230	257	4					
-1	1-41	252	266	3	6	2-40	211	210	9	-5	0-38	687	702	9	-4	2-37	272	290	4	6	2-36	241	224	5					
0	1-41	285	248	8	-5	3-40	257	272	7	-4	0-38	975	980	9	-3	2-37	262	258	4	7	2-36	95	58	7					
1	1-41	414	408	4	-4	3-40	141	141	5	-3	0-38	103	109	6	-2	2-37	352	367	8	-6	3-36	395	403	7					
2	1-41	196	195	4	-3	3-40	582	577	5	-2	0-38	236	235	4	-1	2-37	601	605	25	-5	3-36	79	54	9					
3	1-41	47	50	12	-2	3-40	230	238	4	-1	0-38	1078	1085	9	0	2-37	178	171	3	-4	3-36	439	442	4					
4	1-41	653	651	5	-1	3-40	69	27	6	0	0-38	637	623	7	1	2-37	166	155	4	-3	3-36	231	244	4					
5	1-41	100	72	30	0	3-40	230	232	5	1	0-38	135	117	6	2	2-37	554	568	4	-2	3-36	192	190	11					
6	1-41	104	54	6	1	3-40	76	88	7	2	0-38	625	628	7	3	2-37	182	184	7	-1	3-36	191	205	4					
7	1-41	206	219	6	2	3-40	617	609	5	3	0-38	866	864	9	4	2-37	177	160	8	0	3-36	590	580	5					
-6	2-41	86	80	10	3	3-40	62	49	7	4	0-38	192	192	5	5	2-37	179	190	4	1	3-36	131	149	3					

-5 2-41 88 86 7 4 3-40 398 390 4 5 0-38 595 607 8 6 2-37 715 726 7 2 3-36 817 806 6  
 -4 2-41 95 60 8 5 3-40 81 68 8 6 0-38 1088 1093 12 7 2-37 133 116 5 3 3-36 369 369 4  
 -3 2-41 138 116 4 6 3-40 181 203 5 7 0-38 132 109 8 -6 3-37 175 173 7 4 3-36 416 421 4  
 -2 2-41 308 309 4 -4 4-40 574 569 6 -6 1-38 120 102 5 -5 3-37 121 134 8 5 3-36 270 275 4  
 -1 2-41 388 379 10 -3 4-40 216 199 4 -5 1-38 94 78 5 -4 3-37 82 48 5 6 3-36 241 222 6  
 0 2-41 846 863 12 -2 4-40 431 446 5 -4 1-38 274 268 4 -3 3-37 41 41 9 -5 4-36 499 525 7  
 1 2-41 309 323 4 -1 4-40 196 181 10 -3 1-38 213 196 4 -2 3-37 434 450 4 -4 4-36 211 211 8  
 2 2-41 305 296 3 0 4-40 296 297 13 -2 1-38 68 40 6 -1 3-37 74 76 9 -3 4-36 295 276 8  
 3 2-41 583 582 6 1 4-40 144 116 7 -1 1-38 109 119 4 0 3-37 528 546 5 -2 4-36 95 62 8  
 4 2-41 279 294 4 2 4-40 364 357 7 0 1-38 199 163 8 1 3-37 134 139 4 -1 4-36 274 266 6  
 5 2-41 425 422 4 3 4-40 610 614 12 1 1-38 570 588 5 2 3-37 197 175 4 0 4-36 80 63 6  
 6 2-41 440 430 5 4 4-40 447 455 5 2 1-38 416 407 4 3 3-37 139 146 4 1 4-36 133 153 5  
 -5 3-41 55 67 14 5 4-40 114 82 11 3 1-38 166 171 4 4 3-37 189 173 5 2 4-36 541 543 5  
 -4 3-41 217 227 4 -2 5-40 169 164 5 4 1-38 206 216 4 5 3-37 70 66 5 3 4-36 125 115 5  
 -3 3-41 106 55 7 -1 5-40 250 240 7 5 1-38 160 137 5 6 3-37 201 174 5 4 4-36 377 377 4  
 -2 3-41 71 50 6 0 5-40 90 69 9 6 1-38 188 204 5 -5 4-37 254 261 12 5 4-36 396 401 5  
 -1 3-41 243 269 4 1 5-40 115 108 6 7 1-38 341 345 5 -4 4-37 99 105 7 6 4-36 142 133 10  
 0 3-41 55 27 8 2 5-40 183 201 13 -6 2-38 192 206 5 -3 4-37 195 205 5 -3 5-36 45 74 12  
 1 3-41 180 185 5 3 5-40 58 38 9 -5 2-38 268 254 11 -2 4-37 149 137 4 -2 5-36 41 3 11  
 2 3-41 82 61 19 -6 1-39 137 109 5 -4 2-38 92 67 8 -1 4-37 303 299 9 -1 5-36 31 49 16  
 3 3-41 28 37 16 -5 1-39 153 147 4 -3 2-38 150 149 4 0 4-37 306 319 5 0 5-36 164 169 8  
 4 3-41 243 238 5 -4 1-39 309 307 4 -2 2-38 371 376 8 1 4-37 45 52 9 1 5-36 294 300 4  
 5 3-41 58 67 6 -3 1-39 350 343 4 -1 2-38 481 467 16 2 4-37 552 569 5 2 5-36 191 193 5  
 6 3-41 188 177 5 -2 1-39 181 162 4 0 2-38 228 245 3 3 4-37 108 98 5 3 5-36 120 144 6  
 -4 4-41 124 109 11 -1 1-39 131 123 3 1 2-38 248 248 13 4 4-37 83 75 6 4 5-36 69 46 6  
 -3 4-41 84 78 6 0 1-39 761 766 6 2 2-38 174 139 12 5 4-37 268 274 4 -7 1-35 196 199 7  
 -2 4-41 147 139 5 1 1-39 221 211 4 3 2-38 122 100 4 -3 5-37 275 265 4 -6 1-35 147 134 4  
 -1 4-41 593 592 12 2 1-39 232 231 3 4 2-38 321 332 4 -2 5-37 76 96 8 -5 1-35 78 72 7  
 0 4-41 261 261 6 3 1-39 109 106 4 5 2-38 169 185 11 -1 5-37 236 244 5 -4 1-35 48 74 7  
 1 4-41 439 451 7 4 1-39 204 202 4 6 2-38 238 224 7 0 5-37 145 153 5 -3 1-35 163 112 7  
 2 4-41 395 388 5 5 1-39 73 79 7 7 2-38 157 154 5 1 5-37 97 89 5 -2 1-35 167 147 4  
 3 4-41 202 166 5 6 1-39 119 92 6 -5 3-38 145 131 8 2 5-37 86 91 7 -1 1-35 374 391 4  
 4 4-41 241 242 11 7 1-39 224 201 4 -4 3-38 130 122 4 3 5-37 141 135 6 0 1-35 62 97 5  
 -1 5-41 150 143 5 -6 2-39 127 111 8 -3 3-38 214 221 5 4 5-37 135 119 6 1 1-35 540 526 4  
 0 5-41 166 179 8 -5 2-39 235 229 7 -2 3-38 556 538 5 -7 0-36 113 97 9 2 1-35 787 777 9  
 1 5-41 495 486 6 -4 2-39 707 714 14 -1 3-38 67 58 6 -6 0-36 513 515 7 3 1-35 89 49 10  
 2 5-41 238 230 5 -3 2-39 307 314 4 0 3-38 439 433 7 -5 0-36 646 649 8 4 1-35 193 201 4  
 -6 0-40 96 81 9 -2 2-39 266 265 7 1 3-38 204 216 4 -4 0-36 544 562 6 5 1-35 196 195 4  
 -5 0-40 796 812 9 -1 2-39 1088 1093 10 2 3-38 260 280 5 -3 0-36 167 181 4 6 1-35 545 556 13  
 -4 0-40 641 646 8 0 2-39 239 246 6 3 3-38 133 129 4 -2 0-36 224 226 4 7 1-35 666 679 6  
 -3 0-40 201 206 6 1 2-39 354 350 5 4 3-38 529 528 5 -1 0-36 951 975 8 8 1-35 457 449 5  
 -2 0-40 115 102 5 2 2-39 623 628 6 5 3-38 51 78 7 0 0-36 698 705 6 -7 2-35 44 79 13  
 -1 0-40 429 437 5 3 2-39 500 495 5 6 3-38 464 463 6 1 0-36 624 613 7 -6 2-35 73 82 9

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	2	-35	431	421	11	-1	2	-34	449	458	4	3	3	-33	164	168	3	2	3	-32	881	869	7	0	4	-31	197	203	8
-4	2	-35	222	237	4	0	2	-34	374	400	3	4	3	-33	48	38	6	3	3	-32	192	193	9	1	4	-31	137	140	5
-3	2	-35	92	133	5	1	2	-34	499	507	4	5	3	-33	100	55	6	4	3	-32	189	187	3	2	4	-31	87	61	5
-2	2	-35	840	846	18	2	2	-34	359	340	24	6	3	-33	168	69	27	5	3	-32	235	233	4	3	4	-31	120	121	4
-1	2	-35	122	84	4	3	2	-34	60	56	8	7	3	-33	59	36	14	6	3	-32	660	681	7	4	4	-31	132	116	4
0	2	-35	142	79	8	4	2	-34	512	534	8	-5	4	-33	106	63	6	7	3	-32	265	253	7	5	4	-31	235	223	4
1	2	-35	707	698	14	5	2	-34	66	40	5	-4	4	-33	246	247	5	-6	4	-32	88	80	9	6	4	-31	170	153	5
2	2	-35	1200	1203	15	6	2	-34	154	141	10	-3	4	-33	581	592	5	-5	4	-32	234	220	5	-4	5	-31	468	470	8
3	2	-35	511	511	6	7	2	-34	165	149	8	-2	4	-33	256	278	9	-4	4	-32	177	153	5	-3	5	-31	594	599	6
4	2	-35	169	137	14	-6	3	-34	234	227	7	-1	4	-33	315	329	4	-3	4	-32	133	105	4	-2	5	-31	373	373	4
5	2	-35	310	327	4	-5	3	-34	47	46	11	0	4	-33	92	108	5	-2	4	-32	386	377	5	-1	5	-31	91	66	8
6	2	-35	244	246	5	-4	3	-34	391	391	5	1	4	-33	137	111	5	-1	4	-32	83	79	6	0	5	-31	362	363	4
7	2	-35	367	384	6	-3	3	-34	99	115	5	2	4	-33	271	277	4	0	4	-32	609	609	6	1	5	-31	338	342	4
-6	3	-35	370	370	7	-2	3	-34	707	698	6	3	4	-33	250	247	8	1	4	-32	333	332	6	2	5	-31	97	89	6
-5	3	-35	57	57	12	-1	3	-34	86	59	5	4	4	-33	93	79	8	2	4	-32	172	175	4	3	5	-31	27	38	18
-4	3	-35	169	160	3	0	3	-34	624	626	5	5	4	-33	257	266	4	3	4	-32	208	192	3	4	5	-31	360	357	4
-3	3	-35	164	178	4	1	3	-34	200	197	3	6	4	-33	189	148	5	4	4	-32	198	196	4	5	5	-31	196	195	6
-2	3	-35	248	245	4	2	3	-34	324	304	4	-4	5	-33	108	81	7	5	4	-32	219	221	7	-2	6	-31	105	88	6
-1	3	-35	116	100	9	3	3	-34	375	370	3	-3	5	-33	323	323	12	6	4	-32	576	588	11	-1	6	-31	160	162	5
0	3	-35	157	107	10	4	3	-34	257	252	3	-2	5	-33	225	230	4	-4	5	-32	138	138	7	0	6	-31	210	210	4
1	3	-35	91	91	7	5	3	-34	603	611	5	-1	5	-33	188	184	5	-3	5	-32	136	86	7	1	6	-31	131	118	5
2	3	-35	304	280	7	6	3	-34	604	594	6	0	5	-33	718	701	8	-2	5	-32	217	215	8	2	6	-31	148	142	6
3	3	-35	233	227	4	7	3	-34	126	96	9	1	5	-33	400	404	4	-1	5	-32	299	311	8	3	6	-31	165	141	5
4	3	-35	113	98	4	-5	4	-34	392	412	5	2	5	-33	444	451	6	0	5	-32	223	220	6	-8	0	-30	52	68	11
5	3	-35	395	399	4	-4	4	-34	159	122	12	3	5	-33	242	247	6	1	5	-32	93	100	5	-7	0	-30	177	180	5
6	3	-35	266	254	5	-3	4	-34	111	95	5	4	5	-33	499	485	12	2	5	-32	262	300	11	-6	0	-30	463	461	7
7	3	-35	172	142	7	-2	4	-34	205	213	4	5	5	-33	456	438	5	3	5	-32	45	49	10	-5	0	-30	320	330	6
-5	4	-35	118	140	8	-1	4	-34	97	91	5	-1	6	-33	141	123	8	4	5	-32	205	220	4	-4	0	-30	356	371	5
-4	4	-35	462	489	9	0	4	-34	360	349	4	0	6	-33	152	161	5	5	5	-32	60	35	8	-3	0	-30	1676	1697	12
-3	4	-35	83	94	6	1	4	-34	273	267	5	1	6	-33	370	374	5	-2	6	-32	244	247	4	-2	0	-30	105	115	4
-2	4	-35	430	439	7	2	4	-34	99	92	5	2	6	-33	48	46	11	-1	6	-32	462	480	6	-1	0	-30	694	691	6
-1	4	-35	88	54	5	3	4	-34	81	87	5	-7	0	-32	305	339	6	0	6	-32	93	79	6	0	0	-30	761	769	6
0	4	-35	151	152	5	4	4	-34	282	286	5	-6	0	-32	569	592	8	1	6	-32	178	165	4	1	0	-30	535	564	6
1	4	-35	460	469	5	5	4	-34	231	228	6	-5	0	-32	169	190	6	2	6	-32	25	15	24	2	0	-30	594	596	7
2	4	-35	404	429	4	6	4	-34	103	59	15	-4	0	-32	369	374	5	-7	1	-31	231	217	5	3	0	-30	617	662	7
3	4	-35	186	201	4	-4	5	-34	44	53	14	-3	0	-32	73	92	5	-6	1	-31	723	723	5	4	0	-30	597	604	7
4	4	-35	131	98	4	-3	5	-34	299	298	5	-2	0	-32	204	216	3	-5	1	-31	169	203	3	5	0	-30	385	399	6
5	4	-35	108	52	12	-2	5	-34	255	254	5	-1	0	-32	612	620	5	-4	1	-31	155	168	3	6	0	-30	582	591	7
6	4	-35	235	213	6	-1	5	-34	174	166	5	0	0	-32	364	394	4	-3	1	-31	763	762	12	7	0	-30	90	95	8
-4	5	-35	108	127	8	0	5	-34	64	68	10	1	0	-32	812	826	8	-2	1	-31	564	552	10	8	0	-30	807	817	9
-3	5	-35	101	90	6	1	5	-34	262	252	4	2	0	-32	169	193	5	-1	1	-31	311	310	11	-8	1	-30	137	108	6
-2	5	-35	78	98	7	2	5	-34	168	171	5	3	0	-32	566	573	7	0	1	-31	453	478	5	-7	1	-30	465	477	5
-1	5	-35	30	52	15	3	5	-34	211	196	5	4	0	-32	1185	1207	12	1	1	-31	711	717	5	-6	1	-30	592	589	5
0	5	-35	36	42	17	4	5	-34	163	148	6	5	0	-32	318	324	6	2	1	-31	204	213	3	-5	1	-30	183	184	3

1 5-35 238 247 7 -1 6-34 114 100 7 6 0-32 572 587 7 3 1-31 201 181 3 -4 1-30 300 304 3  
2 5-35 101 99 6 0 6-34 66 51 8 7 0-32 451 448 7 4 1-31 553 558 5 -3 1-30 523 532 9  
3 5-35 75 101 7 1 6-34 161 137 8 8 0-32 398 416 7 5 1-31 82 41 5 -2 1-30 306 301 5  
4 5-35 721 704 6 -7 1-33 244 230 5 -7 1-32 318 348 6 6 1-31 199 189 4 -1 1-30 291 295 4  
0 6-35 219 216 5 -6 1-33 86 73 5 -6 1-32 140 91 4 7 1-31 175 152 4 0 1-30 310 250 13  
-7 0-34 107 90 8 -5 1-33 198 189 3 -5 1-32 267 268 3 8 1-31 842 847 11 1 1-30 244 253 3  
-6 0-34 227 229 6 -4 1-33 109 83 4 -4 1-32 152 154 3 -7 2-31 89 91 8 2 1-30 170 128 5  
-5 0-34 152 162 6 -3 1-33 455 446 3 -3 1-32 502 508 4 -6 2-31 239 255 6 3 1-30 306 325 7  
-4 0-34 419 402 5 -2 1-33 891 880 5 -2 1-32 1026 1034 18 -5 2-31 369 366 6 4 1-30 982 980 13  
-3 0-34 526 532 4 -1 1-33 133 109 4 -1 1-32 357 370 4 -4 2-31 206 183 4 5 1-30 345 349 5  
-2 0-34 1338 1347 11 0 1-33 232 255 3 0 1-32 299 308 3 -3 2-31 477 498 15 6 1-30 240 243 4  
-1 0-34 598 615 5 1 1-33 587 580 4 1 1-32 509 506 6 -2 2-31 672 671 5 7 1-30 486 502 5  
0 0-34 306 317 4 2 1-33 854 836 16 2 1-32 82 98 7 -1 2-31 51 69 5 8 1-30 484 477 11  
1 0-34 150 146 5 3 1-33 739 759 5 3 1-32 388 375 4 0 2-31 441 437 8 -7 2-30 62 15 8  
2 0-34 87 92 7 4 1-33 691 706 5 4 1-32 309 278 4 1 2-31 698 724 16 -6 2-30 66 56 8  
3 0-34 332 328 5 5 1-33 448 456 7 5 1-32 350 356 6 2 2-31 517 517 7 -5 2-30 51 17 9  
4 0-34 620 618 7 6 1-33 106 98 5 6 1-32 167 169 8 3 2-31 320 326 3 -4 2-30 434 438 5  
5 0-34 96 75 8 7 1-33 264 250 4 7 1-32 232 229 4 4 2-31 161 141 6 -3 2-30 399 408 12  
6 0-34 285 292 6 8 1-33 136 101 8 8 1-32 363 322 5 5 2-31 149 166 4 -2 2-30 283 247 3  
7 0-34 236 237 6 -7 2-33 272 273 5 -7 2-32 361 364 6 6 2-31 43 33 8 -1 2-30 146 157 4  
8 0-34 572 587 8 -6 2-33 318 318 5 -6 2-32 77 65 7 7 2-31 213 210 5 0 2-30 298 298 15  
-7 1-34 351 369 6 -5 2-33 236 240 3 -5 2-32 287 291 4 8 2-31 202 205 7 1 2-30 87 88 9  
-6 1-34 242 253 4 -4 2-33 129 94 5 -4 2-32 159 160 3 -7 3-31 115 111 8 2 2-30 357 368 3  
-5 1-34 117 95 7 -3 2-33 555 545 7 -3 2-32 272 242 3 -6 3-31 345 340 7 3 2-30 169 177 16  
-4 1-34 176 187 3 -2 2-33 741 739 10 -2 2-32 192 167 3 -5 3-31 306 317 8 4 2-30 332 348 3  
-3 1-34 324 343 3 -1 2-33 562 529 14 -1 2-32 228 215 6 -4 3-31 48 35 8 5 2-30 126 113 4  
-2 1-34 175 120 7 0 2-33 154 65 6 0 2-32 459 465 9 -3 3-31 207 189 5 6 2-30 107 112 6  
-1 1-34 156 131 3 1 2-33 263 253 4 1 2-32 253 252 18 -2 3-31 165 175 4 7 2-30 215 227 7  
0 1-34 48 75 6 2 2-33 413 418 3 2 2-32 151 81 11 -1 3-31 79 49 7 8 2-30 151 107 7  
1 1-34 470 458 6 3 2-33 75 84 4 3 2-32 60 67 5 0 3-31 77 81 4 -7 3-30 160 127 7  
2 1-34 1088 1073 9 4 2-33 445 443 8 4 2-32 242 242 3 1 3-31 188 167 4 -6 3-30 442 436 6  
3 1-34 151 88 7 5 2-33 161 179 4 5 2-32 105 97 5 2 3-31 332 312 8 -5 3-30 174 166 4  
4 1-34 128 101 4 6 2-33 323 328 5 6 2-32 59 46 13 3 3-31 119 108 4 -4 3-30 175 184 4  
5 1-34 269 280 4 7 2-33 199 189 4 7 2-32 201 200 14 4 3-31 149 90 5 -3 3-30 1244 1220 9  
6 1-34 81 68 15 -6 3-33 153 153 8 8 2-32 245 260 7 5 3-31 71 93 16 -2 3-30 426 426 4  
7 1-34 311 296 4 -5 3-33 101 108 7 -6 3-32 466 457 7 6 3-31 157 119 20 -1 3-30 268 267 9  
8 1-34 245 238 4 -4 3-33 71 71 7 -5 3-32 117 85 7 7 3-31 294 291 8 0 3-30 225 216 3  
-7 2-34 134 100 6 -3 3-33 70 82 6 -4 3-32 430 428 5 -6 4-31 53 63 12 1 3-30 176 155 3  
-6 2-34 298 305 5 -2 3-33 437 425 10 -3 3-32 107 84 5 -5 4-31 298 304 5 2 3-30 1125 1118 7  
-5 2-34 108 125 11 -1 3-33 372 386 9 -2 3-32 444 442 4 -4 4-31 268 260 5 3 3-30 380 399 4  
-4 2-34 446 473 13 0 3-33 156 151 3 -1 3-32 190 187 8 -3 4-31 361 354 4 4 3-30 1213 1213 8  
-3 2-34 369 375 8 1 3-33 368 361 3 0 3-32 279 280 3 -2 4-31 261 260 9 5 3-30 72 19 7  
-2 2-34 370 368 11 2 3-33 365 370 4 1 3-32 1214 1179 7 -1 4-31 257 269 8 6 3-30 411 438 4

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	3	-30	302	290	7	2	4	-29	188	170	3	6	3	-28	419	426	6	-3	4	-27	102	106	6	-4	3	-26	1003	997	11
-6	4	-30	309	315	6	3	4	-29	128	113	4	7	3	-28	140	125	12	-2	4	-27	62	51	6	-3	3	-26	453	453	8
-5	4	-30	66	23	7	4	4	-29	245	257	4	-6	4	-28	160	148	6	-1	4	-27	358	366	4	-2	3	-26	535	521	5
-4	4	-30	642	646	7	5	4	-29	335	326	7	-5	4	-28	271	280	4	0	4	-27	154	161	5	-1	3	-26	195	198	11
-3	4	-30	420	427	15	6	4	-29	451	460	6	-4	4	-28	449	466	6	1	4	-27	209	201	7	0	3	-26	532	505	4
-2	4	-30	225	242	7	7	4	-29	320	334	8	-3	4	-28	130	136	6	2	4	-27	406	407	4	1	3	-26	249	241	3
-1	4	-30	63	56	6	-5	5	-29	135	114	5	-2	4	-28	450	460	5	3	4	-27	183	191	4	2	3	-26	677	661	4
0	4	-30	80	85	7	-4	5	-29	228	221	4	-1	4	-28	178	189	4	4	4	-27	403	406	4	3	3	-26	612	632	4
1	4	-30	207	213	12	-3	5	-29	41	41	11	0	4	-28	334	323	4	5	4	-27	187	179	5	4	3	-26	127	114	4
2	4	-30	578	586	4	-2	5	-29	208	211	4	1	4	-28	542	537	5	6	4	-27	557	559	6	5	3	-26	333	333	4
3	4	-30	366	371	6	-1	5	-29	274	253	5	2	4	-28	760	763	5	7	4	-27	320	320	10	6	3	-26	144	127	5
4	4	-30	224	204	4	0	5	-29	455	464	5	3	4	-28	73	102	5	-5	5	-27	170	153	5	7	3	-26	145	103	7
5	4	-30	447	450	4	1	5	-29	299	311	4	4	4	-28	110	92	4	-4	5	-27	377	393	4	8	3	-26	90	75	8
6	4	-30	332	333	6	2	5	-29	104	89	5	5	4	-28	95	31	6	-3	5	-27	311	330	7	-6	4	-26	307	316	6
-5	5	-30	183	204	6	3	5	-29	153	165	8	6	4	-28	259	242	10	-2	5	-27	361	346	5	-5	4	-26	155	141	4
-4	5	-30	60	54	10	4	5	-29	381	417	4	7	4	-28	274	297	7	-1	5	-27	384	367	5	-4	4	-26	434	431	5
-3	5	-30	51	78	9	5	5	-29	179	166	8	-5	5	-28	109	79	6	0	5	-27	483	506	5	-3	4	-26	307	298	5
-2	5	-30	239	259	4	-3	6	-29	200	187	6	-4	5	-28	47	52	8	1	5	-27	417	424	4	-2	4	-26	684	686	6
-1	5	-30	57	37	10	-2	6	-29	178	185	5	-3	5	-28	148	150	6	2	5	-27	506	505	5	-1	4	-26	267	304	7
0	5	-30	123	116	7	-1	6	-29	149	119	5	-2	5	-28	44	50	8	3	5	-27	464	480	5	0	4	-26	116	103	5
1	5	-30	124	123	5	0	6	-29	375	352	10	-1	5	-28	434	441	5	4	5	-27	113	129	12	1	4	-26	151	147	4
2	5	-30	113	128	6	1	6	-29	132	126	6	0	5	-28	247	251	4	5	5	-27	395	395	11	2	4	-26	103	88	12
3	5	-30	167	165	6	2	6	-29	242	238	8	1	5	-28	100	97	5	6	5	-27	389	397	5	3	4	-26	260	255	3
4	5	-30	188	183	7	3	6	-29	108	103	6	2	5	-28	283	290	5	-3	6	-27	43	12	12	4	4	-26	571	570	6
5	5	-30	72	60	10	-8	0	-28	355	342	7	3	5	-28	273	269	4	-2	6	-27	207	206	5	5	4	-26	161	149	4
-2	6	-30	82	70	7	-7	0	-28	862	846	8	4	5	-28	122	110	6	-1	6	-27	77	80	8	6	4	-26	158	149	5
-1	6	-30	291	314	5	-6	0	-28	165	168	5	5	5	-28	352	355	5	0	6	-27	102	98	6	7	4	-26	217	171	18
0	6	-30	377	385	6	-5	0	-28	1028	1010	11	-3	6	-28	227	239	5	1	6	-27	278	264	4	-5	5	-26	391	383	7
1	6	-30	195	205	4	-4	0	-28	133	147	4	-2	6	-28	218	211	5	2	6	-27	460	468	6	-4	5	-26	158	165	4
2	6	-30	255	251	5	-3	0	-28	277	286	3	-1	6	-28	385	395	5	3	6	-27	74	85	7	-3	5	-26	147	160	7
3	6	-30	230	249	5	-2	0	-28	135	159	3	0	6	-28	412	433	8	4	6	-27	330	339	7	-2	5	-26	165	169	5
-8	1	-29	179	178	5	-1	0	-28	363	381	4	1	6	-28	144	130	5	-8	0	-26	239	231	7	-1	5	-26	346	333	5
-7	1	-29	689	694	7	0	0	-28	705	691	6	2	6	-28	304	279	5	-7	0	-26	229	226	5	0	5	-26	187	199	10
-6	1	-29	162	137	3	1	0	-28	706	713	7	3	6	-28	194	192	5	-6	0	-26	32	41	17	1	5	-26	362	359	4
-5	1	-29	136	140	3	2	0	-28	427	453	5	-8	1	-27	179	176	4	-5	0	-26	833	829	7	2	5	-26	220	226	4
-4	1	-29	66	85	7	3	0	-28	228	246	5	-7	1	-27	163	146	5	-4	0	-26	208	216	4	3	5	-26	155	152	9
-3	1	-29	468	476	5	4	0	-28	953	931	9	-6	1	-27	212	199	4	-3	0	-26	244	252	3	4	5	-26	311	308	6
-2	1	-29	160	152	2	5	0	-28	289	289	5	-5	1	-27	344	373	3	-2	0	-26	110	120	4	5	5	-26	129	113	9
-1	1	-29	267	284	3	6	0	-28	40	46	13	-4	1	-27	1041	1031	8	-1	0	-26	673	716	6	6	5	-26	159	152	5
0	1	-29	1011	992	6	7	0	-28	69	78	9	-3	1	-27	425	446	4	0	0	-26	1668	1672	13	-3	6	-26	118	106	8
1	1	-29	165	153	3	8	0	-28	44	41	13	-2	1	-27	309	304	2	1	0	-26	418	405	5	-2	6	-26	383	374	8
2	1	-29	800	840	11	-8	1	-28	305	316	5	-1	1	-27	766	785	4	2	0	-26	391	401	5	-1	6	-26	68	34	7
3	1	-29	280	285	10	-7	1	-28	324	307	4	0	1	-27	1460	1434	8	3	0	-26	178	174	4	0	6	-26	517	517	5
4	1	-29	1437	1427	11	-6	1	-28	357	371	4	1	1	-27	615	607	5	4	0	-26	49	32	8	1	6	-26	112	99	5

5 1-29 171 134 3 -5 1-28 76 65 5 2 1-27 419 417 10 5 0-26 308 326 5 2 6-26 74 77 6  
6 1-29 283 281 4 -4 1-28 138 42 8 3 1-27 427 426 4 6 0-26 442 447 6 3 6-26 288 277 5  
7 1-29 126 83 4 -3 1-28 131 106 3 4 1-27 138 103 3 7 0-26 481 473 7 4 6-26 62 69 12  
8 1-29 230 219 9 -2 1-28 224 212 6 5 1-27 689 700 12 8 0-26 76 61 9 -8 1-25 426 425 5  
-7 2-29 326 331 5 -1 1-28 337 360 7 6 1-27 530 510 8 9 0-26 75 90 10 -7 1-25 226 233 4  
-6 2-29 296 288 4 0 1-28 1488 1490 27 7 1-27 80 87 5 -8 1-26 59 42 8 -6 1-25 338 329 4  
-5 2-29 59 65 8 1 1-28 208 175 7 8 1-27 94 88 5 -7 1-26 140 130 5 -5 1-25 477 491 8  
-4 2-29 325 316 5 2 1-28 743 766 5 -8 2-27 112 110 7 -6 1-26 301 315 4 -4 1-25 1117 1098 16  
-3 2-29 684 698 5 3 1-28 411 430 4 -7 2-27 111 91 6 -5 1-26 244 289 15 -3 1-25 671 674 4  
-2 2-29 748 750 5 4 1-28 507 471 5 -6 2-27 318 311 9 -4 1-26 1416 1407 9 -2 1-25 190 148 6  
-1 2-29 88 73 4 5 1-28 419 420 4 -5 2-27 145 152 4 -3 1-26 152 129 6 -1 1-25 770 775 5  
0 2-29 327 334 3 6 1-28 206 182 4 -4 2-27 153 131 3 -2 1-26 657 666 4 0 1-25 532 569 11  
1 2-29 484 509 12 7 1-28 123 114 4 -3 2-27 327 359 3 -1 1-26 274 213 3 1 1-25 209 164 3  
2 2-29 131 102 10 8 1-28 99 78 7 -2 2-27 184 160 10 0 1-26 525 485 8 2 1-25 1044 1037 7  
3 2-29 198 188 3 -7 2-28 159 144 5 -1 2-27 620 622 5 1 1-26 692 709 17 3 1-25 514 554 4  
4 2-29 140 118 3 -6 2-28 361 376 4 0 2-27 148 93 14 2 1-26 243 176 19 4 1-25 175 136 3  
5 2-29 112 102 4 -5 2-28 61 80 8 1 2-27 454 460 5 3 1-26 138 108 3 5 1-25 130 135 3  
6 2-29 184 188 4 -4 2-28 312 314 3 2 2-27 289 297 2 4 1-26 447 457 4 6 1-25 303 208 6  
7 2-29 240 242 5 -3 2-28 181 184 4 3 2-27 266 257 5 5 1-26 262 258 3 7 1-25 359 357 4  
8 2-29 646 658 8 -2 2-28 454 457 3 4 2-27 1058 1062 7 6 1-26 995 1000 9 8 1-25 61 19 10  
-7 3-29 183 175 6 -1 2-28 51 66 5 5 2-27 208 204 3 7 1-26 247 240 4 9 1-25 72 47 13  
-6 3-29 117 98 7 0 2-28 231 222 2 6 2-27 211 205 4 8 1-26 240 266 4 -8 2-25 222 192 8  
-5 3-29 135 142 5 1 2-28 69 48 4 7 2-27 321 340 6 9 1-26 80 76 17 -7 2-25 57 67 8  
-4 3-29 71 73 7 2 2-28 215 214 4 8 2-27 285 280 14 -8 2-26 336 339 11 -6 2-25 126 121 5  
-3 3-29 85 94 12 3 2-28 276 284 3 -7 3-27 185 127 7 -7 2-26 46 55 10 -5 2-25 386 376 6  
-2 3-29 260 261 4 4 2-28 331 322 4 -6 3-27 189 195 4 -6 2-26 246 251 7 -4 2-25 820 800 5  
-1 3-29 244 247 5 5 2-28 371 391 4 -5 3-27 162 147 4 -5 2-26 110 117 5 -3 2-25 490 497 7  
0 3-29 114 78 16 6 2-28 89 86 5 -4 3-27 133 93 16 -4 2-26 301 304 3 -2 2-25 733 727 9  
1 3-29 66 46 4 7 2-28 67 29 16 -3 3-27 105 77 5 -3 2-26 99 69 4 -1 2-25 1135 1132 7  
2 3-29 190 116 7 8 2-28 333 332 9 -2 3-27 90 88 6 -2 2-26 515 521 4 0 2-25 1125 1120 6  
3 3-29 263 264 3 -7 3-28 779 784 8 -1 3-27 529 543 8 -1 2-26 351 315 4 1 2-25 395 402 3  
4 3-29 250 186 10 -6 3-28 215 227 6 0 3-27 508 507 19 0 2-26 462 482 3 2 2-25 840 858 5  
5 3-29 339 345 4 -5 3-28 136 134 6 1 3-27 218 215 4 1 2-26 170 156 2 3 2-25 360 346 4  
6 3-29 124 126 11 -4 3-28 538 544 6 2 3-27 256 266 3 2 2-26 401 414 3 4 2-25 644 640 7  
7 3-29 317 325 6 -3 3-28 587 563 5 3 3-27 452 465 10 3 2-26 431 439 3 5 2-25 192 202 3  
-6 4-29 305 307 6 -2 3-28 802 804 6 4 3-27 74 73 8 4 2-26 524 538 10 6 2-25 235 243 6  
-5 4-29 71 67 7 -1 3-28 668 667 5 5 3-27 112 91 5 5 2-26 66 62 7 7 2-25 75 72 9  
-4 4-29 187 153 5 0 3-28 1454 1451 13 6 3-27 215 211 6 6 2-26 223 214 4 8 2-25 184 122 18  
-3 4-29 97 72 8 1 3-28 297 289 5 7 3-27 141 130 6 7 2-26 44 30 13 -7 3-25 308 299 5  
-2 4-29 160 160 4 2 3-28 449 433 3 8 3-27 156 156 6 8 2-26 330 337 6 -6 3-25 136 119 5  
-1 4-29 43 20 8 3 3-28 180 186 5 -6 4-27 144 143 6 -7 3-26 533 542 7 -5 3-25 379 375 3  
0 4-29 139 125 4 4 3-28 616 613 5 -5 4-27 86 74 6 -6 3-26 56 47 7 -4 3-25 460 469 10  
1 4-29 133 113 4 5 3-28 345 346 6 -4 4-27 285 277 5 -5 3-26 591 607 4 -3 3-25 49 25 8





2 6-25 221 231 4 -5 5-24 157 142 5 -6 5-23 244 245 4 3 3-22 375 371 3 -1 3-21 142 123 9  
 3 6-25 224 230 5 -4 5-24 247 242 5 -5 5-23 562 565 5 4 3-22 412 428 5 0 3-21 195 178 9  
 4 6-25 151 158 7 -3 5-24 232 221 5 -4 5-23 178 188 4 5 3-22 686 684 6 1 3-21 73 66 5  
 -8 0-24 445 439 10 -2 5-24 161 169 4 -3 5-23 359 359 7 6 3-22 194 200 5 2 3-21 57 73 10  
 -7 0-24 265 280 5 -1 5-24 57 68 15 -2 5-23 267 279 5 7 3-22 248 252 5 3 3-21 187 195 3  
 -6 0-24 58 82 10 0 5-24 327 330 4 -1 5-23 312 305 4 8 3-22 91 82 12 4 3-21 144 146 3  
 -5 0-24 757 765 7 1 5-24 225 238 5 0 5-23 322 312 10 -7 4-22 351 341 5 5 3-21 220 229 6  
 -4 0-24 1710 1680 12 2 5-24 335 351 8 1 5-23 53 19 6 -6 4-22 170 159 5 6 3-21 108 114 6  
 -3 0-24 178 193 3 3 5-24 196 204 5 2 5-23 277 284 4 -5 4-22 499 488 5 7 3-21 94 75 12  
 -2 0-24 378 392 3 4 5-24 204 234 10 3 5-23 138 128 4 -4 4-22 99 78 6 8 3-21 326 321 7  
 -1 0-24 434 483 4 5 5-24 58 68 8 4 5-23 268 266 5 -3 4-22 407 415 5 -7 4-21 85 55 7  
 0 0-24 959 948 9 6 5-24 422 434 5 5 5-23 143 132 6 -2 4-22 257 252 4 -6 4-21 70 71 8  
 1 0-24 803 824 8 -4 6-24 410 414 11 6 5-23 191 193 9 -1 4-22 440 436 8 -5 4-21 122 119 6  
 2 0-24 111 80 5 -3 6-24 96 91 13 -4 6-23 247 245 8 0 4-22 728 699 5 -4 4-21 693 698 7  
 3 0-24 934 938 9 -2 6-24 88 84 6 -3 6-23 61 65 10 1 4-22 187 172 6 -3 4-21 284 284 5  
 4 0-24 500 513 6 -1 6-24 416 414 5 -2 6-23 341 349 5 2 4-22 1155 1146 6 -2 4-21 771 769 9  
 5 0-24 78 103 7 0 6-24 147 147 4 -1 6-23 77 61 6 3 4-22 250 241 3 -1 4-21 344 349 7  
 6 0-24 1604 1612 16 1 6-24 142 143 4 0 6-23 94 83 6 4 4-22 854 859 7 0 4-21 458 452 7  
 7 0-24 419 405 6 2 6-24 232 228 4 1 6-23 213 218 4 5 4-22 574 570 5 1 4-21 984 993 6  
 8 0-24 326 324 6 3 6-24 38 46 12 2 6-23 383 372 4 6 4-22 443 452 11 2 4-21 842 842 8  
 9 0-24 262 253 8 4 6-24 218 228 7 3 6-23 257 262 4 7 4-22 185 148 7 3 4-21 542 545 4  
 -8 1-24 666 673 6 -8 1-23 416 415 9 4 6-23 147 137 8 -6 5-22 224 234 6 4 4-21 229 206 16  
 -7 1-24 138 130 5 -7 1-23 367 382 7 -8 0-22 715 713 13 -5 5-22 129 110 8 5 4-21 264 267 10  
 -6 1-24 289 299 3 -6 1-23 160 149 6 -7 0-22 322 337 6 -4 5-22 63 69 5 6 4-21 84 113 6  
 -5 1-24 198 155 3 -5 1-23 912 921 5 -6 0-22 656 648 8 -3 5-22 236 245 4 7 4-21 531 548 8  
 -4 1-24 220 202 4 -4 1-23 286 293 3 -5 0-22 364 368 5 -2 5-22 123 131 9 -6 5-21 95 62 5  
 -3 1-24 379 347 4 -3 1-23 944 957 7 -4 0-22 1168 1144 8 -1 5-22 174 171 5 -5 5-21 271 262 4  
 -2 1-24 134 103 2 -2 1-23 558 554 3 -3 0-22 748 776 5 0 5-22 468 481 4 -4 5-21 107 141 9  
 -1 1-24 424 448 16 -1 1-23 109 106 3 -2 0-22 778 784 6 1 5-22 140 136 6 -3 5-21 169 151 4  
 0 1-24 699 686 4 0 1-23 192 107 14 -1 0-22 137 135 2 2 5-22 564 570 7 -2 5-21 317 337 5  
 1 1-24 248 257 3 1 1-23 115 108 3 0 0-22 267 265 4 3 5-22 105 102 4 -1 5-21 32 29 8  
 2 1-24 1377 1383 16 2 1-23 817 754 7 1 0-22 1157 1176 11 4 5-22 165 147 5 0 5-21 135 103 4  
 3 1-24 249 251 6 3 1-23 387 412 3 2 0-22 3751 3843 37 5 5-22 50 44 9 1 5-21 221 213 3  
 4 1-24 388 402 4 4 1-23 218 237 3 3 0-22 402 421 5 6 5-22 116 107 6 2 5-21 290 290 9  
 5 1-24 122 102 4 5 1-23 342 343 4 4 0-22 46 29 8 -4 6-22 322 334 5 3 5-21 144 151 3  
 6 1-24 721 721 13 6 1-23 569 553 8 5 0-22 403 410 6 -3 6-22 144 128 7 4 5-21 596 591 7  
 7 1-24 42 44 11 7 1-23 123 129 4 6 0-22 1242 1207 13 -2 6-22 242 233 6 5 5-21 158 165 6  
 8 1-24 66 41 9 8 1-23 59 27 7 7 0-22 809 846 9 -1 6-22 185 175 4 6 5-21 347 332 9  
 9 1-24 260 260 6 9 1-23 295 305 8 8 0-22 48 57 12 0 6-22 233 231 4 -4 6-21 56 37 9  
 -8 2-24 296 285 5 -8 2-23 961 934 8 9 0-22 123 122 10 1 6-22 255 278 4 -3 6-21 278 262 6  
 -7 2-24 45 48 8 -7 2-23 363 383 5 -8 1-22 89 63 6 2 6-22 809 814 7 -2 6-21 391 416 7  
 -6 2-24 318 321 4 -6 2-23 437 448 4 -7 1-22 195 206 4 3 6-22 87 91 5 -1 6-21 337 346 4  
 -5 2-24 178 158 3 -5 2-23 591 592 6 -6 1-22 66 35 5 4 6-22 345 355 6 0 6-21 222 222 4

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	6-21	272	250	8	-1	4-20	202	133	4	7	3-19	107	115	8	-2	2-18	313	300	15	4	1-17	643	653	5					
2	6-21	158	158	4	0	4-20	1313	1280	9	8	3-19	198	162	12	-1	2-18	138	123	3	5	1-17	385	388	3					
3	6-21	150	138	4	1	4-20	822	817	6	-7	4-19	285	275	4	0	2-18	929	928	7	6	1-17	197	191	7					
4	6-21	256	272	12	2	4-20	540	508	9	-6	4-19	314	324	4	1	2-18	350	353	15	7	1-17	177	173	17					
5	6-21	517	502	11	3	4-20	102	79	9	-5	4-19	219	209	5	2	2-18	393	405	6	8	1-17	824	835	18					
-1	7-21	216	224	6	4	4-20	556	545	5	-4	4-19	459	466	5	3	2-18	61	53	6	9	1-17	128	135	8					
0	7-21	185	176	5	5	4-20	329	337	7	-3	4-19	918	915	9	4	2-18	457	432	9	-8	2-17	225	243	5					
1	7-21	257	254	5	6	4-20	112	92	5	-2	4-19	441	418	4	5	2-18	170	168	5	-7	2-17	190	172	3					
-9	0-20	89	108	16	7	4-20	187	159	6	-1	4-19	771	787	7	6	2-18	247	258	8	-6	2-17	1038	1042	7					
-8	0-20	706	713	13	-6	5-20	170	160	4	0	4-19	205	209	3	7	2-18	238	232	8	-5	2-17	132	104	3					
-7	0-20	253	280	5	-5	5-20	37	32	9	1	4-19	178	141	3	8	2-18	94	58	12	-4	2-17	359	328	7					
-6	0-20	189	183	5	-4	5-20	407	409	7	2	4-19	143	155	8	9	2-18	350	370	9	-3	2-17	1330	1314	8					
-5	0-20	695	708	8	-3	5-20	65	29	5	3	4-19	440	439	3	-8	3-18	284	283	4	-2	2-17	1054	1054	6					
-4	0-20	122	124	3	-2	5-20	589	590	5	4	4-19	491	501	7	-7	3-18	229	228	4	-1	2-17	499	475	4					
-3	0-20	1138	1130	7	-1	5-20	208	205	3	5	4-19	287	292	4	-6	3-18	55	68	6	0	2-17	841	847	6					
-2	0-20	3358	3385	23	0	5-20	82	99	4	6	4-19	300	307	5	-5	3-18	263	253	3	1	2-17	855	869	6					
-1	0-20	47	53	4	1	5-20	197	191	3	7	4-19	164	160	8	-4	3-18	457	452	5	2	2-17	383	378	4					
0	0-20	1130	1099	11	2	5-20	204	202	3	-6	5-19	129	127	4	-3	3-18	57	63	11	3	2-17	871	855	13					
1	0-20	671	660	7	3	5-20	218	243	4	-5	5-19	95	87	8	-2	3-18	261	290	3	4	2-17	1165	1172	21					
2	0-20	1557	1512	15	4	5-20	183	178	7	-4	5-19	141	106	4	-1	3-18	237	213	3	5	2-17	127	124	5					
3	0-20	467	472	5	5	5-20	68	39	7	-3	5-19	300	293	4	0	3-18	224	237	5	6	2-17	51	56	12					
4	0-20	248	269	4	6	5-20	202	205	5	-2	5-19	168	176	4	1	3-18	495	473	3	7	2-17	222	224	9					
5	0-20	62	77	7	-4	6-20	135	141	5	-1	5-19	456	446	4	2	3-18	629	630	7	8	2-17	548	559	7					
6	0-20	373	376	5	-3	6-20	414	462	7	0	5-19	682	663	5	3	3-18	156	188	3	9	2-17	269	273	8					
7	0-20	143	154	5	-2	6-20	802	834	9	1	5-19	127	126	4	4	3-18	153	99	4	-8	3-17	64	20	7					
8	0-20	658	650	8	-1	6-20	153	159	4	2	5-19	690	680	5	5	3-18	148	149	4	-7	3-17	58	67	6					
9	0-20	340	328	8	0	6-20	363	364	7	3	5-19	111	93	4	6	3-18	679	674	6	-6	3-17	52	58	11					
-9	1-20	401	368	6	1	6-20	144	126	4	4	5-19	392	386	7	7	3-18	183	191	5	-5	3-17	530	544	4					
-8	1-20	91	113	13	2	6-20	40	23	9	5	5-19	598	588	6	8	3-18	548	561	8	-4	3-17	215	219	3					
-7	1-20	521	527	5	3	6-20	603	608	6	6	5-19	182	183	5	-7	4-18	155	105	5	-3	3-17	42	26	8					
-6	1-20	151	143	3	4	6-20	55	32	10	-4	6-19	258	248	6	-6	4-18	540	546	5	-2	3-17	111	137	4					
-5	1-20	221	224	4	5	6-20	68	80	9	-3	6-19	95	115	8	-5	4-18	235	221	5	-1	3-17	185	167	2					
-4	1-20	136	147	3	-1	7-20	401	373	5	-2	6-19	246	251	9	-4	4-18	661	650	8	0	3-17	403	409	3					
-3	1-20	619	657	12	0	7-20	354	340	8	-1	6-19	233	222	4	-3	4-18	339	338	5	1	3-17	75	57	6					
-2	1-20	1383	1393	8	1	7-20	127	104	6	0	6-19	206	210	5	-2	4-18	636	613	4	2	3-17	533	557	12					
-1	1-20	477	491	3	-9	1-19	160	109	7	1	6-19	668	642	11	-1	4-18	196	187	3	3	3-17	113	124	3					
0	1-20	739	733	7	-8	1-19	253	272	5	2	6-19	162	157	4	0	4-18	1261	1256	8	4	3-17	180	164	4					
1	1-20	278	288	3	-7	1-19	166	146	11	3	6-19	126	99	6	1	4-18	368	369	9	5	3-17	217	239	3					
2	1-20	1321	1347	16	-6	1-19	673	672	5	4	6-19	175	199	13	2	4-18	201	204	9	6	3-17	165	142	5					
3	1-20	119	104	5	-5	1-19	254	265	6	5	6-19	30	39	21	3	4-18	373	370	3	7	3-17	212	224	8					
4	1-20	198	197	3	-4	1-19	118	136	2	-1	7-19	143	130	6	4	4-18	115	116	6	8	3-17	362	366	7					
5	1-20	216	238	3	-3	1-19	155	86	9	0	7-19	149	147	4	5	4-18	377	388	9	-7	4-17	488	504	6					
6	1-20	464	471	7	-2	1-19	377	298	3	1	7-19	212	203	4	6	4-18	584	584	6	-6	4-17	190	176	10					
7	1-20	239	252	4	-1	1-19	506	522	3	2	7-19	199	217	7	7	4-18	93	100	7	-5	4-17	471	491	5					

8	1-20	139	116	6	0	1-19	835	812	4	-9	0-18	205	215	9	8	4-18	93	87	10	-4	4-17	114	123	6
9	1-20	139	104	8	1	1-19	470	482	3	-8	0-18	114	77	12	-6	5-18	319	316	7	-3	4-17	489	481	6
-8	2-20	85	87	6	2	1-19	1059	1082	7	-7	0-18	570	589	7	-5	5-18	113	99	4	-2	4-17	247	234	8
-7	2-20	73	57	5	3	1-19	219	238	2	-6	0-18	1723	1706	17	-4	5-18	240	250	6	-1	4-17	135	112	7
-6	2-20	355	364	8	4	1-19	410	414	10	-5	0-18	334	356	5	-3	5-18	356	344	4	0	4-17	376	329	13
-5	2-20	358	353	3	5	1-19	535	540	5	-4	0-18	282	284	3	-2	5-18	364	366	3	1	4-17	97	78	3
-4	2-20	595	612	10	6	1-19	216	200	16	-3	0-18	295	293	3	-1	5-18	56	70	7	2	4-17	324	330	3
-3	2-20	398	406	5	7	1-19	174	146	4	-2	0-18	961	929	7	0	5-18	97	90	4	3	4-17	155	160	3
-2	2-20	730	737	18	8	1-19	80	73	8	-1	0-18	701	705	5	1	5-18	26	18	10	4	4-17	507	535	4
-1	2-20	596	597	8	9	1-19	192	176	6	0	0-18	1587	1593	15	2	5-18	298	302	6	5	4-17	225	224	4
0	2-20	1214	1213	7	-8	2-19	107	109	13	1	0-18	477	512	5	3	5-18	75	62	5	6	4-17	262	254	7
1	2-20	708	727	4	-7	2-19	236	220	4	2	0-18	133	145	4	4	5-18	207	212	4	7	4-17	188	151	6
2	2-20	320	333	17	-6	2-19	480	506	4	3	0-18	153	183	4	5	5-18	188	189	4	8	4-17	188	197	8
3	2-20	290	296	3	-5	2-19	166	146	5	4	0-18	1028	1026	8	6	5-18	326	343	11	-6	5-17	162	168	3
4	2-20	981	998	6	-4	2-19	184	163	4	5	0-18	195	202	4	-5	6-18	113	125	8	-5	5-17	476	475	4
5	2-20	67	51	6	-3	2-19	363	385	5	6	0-18	535	533	6	-4	6-18	236	232	7	-4	5-17	553	551	5
6	2-20	94	81	7	-2	2-19	2122	2049	14	7	0-18	273	282	5	-3	6-18	139	133	11	-3	5-17	392	392	4
7	2-20	209	199	13	-1	2-19	298	273	7	8	0-18	945	959	10	-2	6-18	151	158	6	-2	5-17	567	551	6
8	2-20	138	119	9	0	2-19	892	853	15	-9	1-18	127	133	7	-1	6-18	315	312	5	-1	5-17	47	57	6
9	2-20	196	214	6	1	2-19	396	396	5	-8	1-18	134	124	5	0	6-18	128	122	4	0	5-17	445	436	4
-8	3-20	436	458	4	2	2-19	559	578	3	-7	1-18	399	408	5	1	6-18	277	287	4	1	5-17	341	338	4
-7	3-20	279	291	7	3	2-19	439	432	9	-6	1-18	520	519	7	2	6-18	248	250	4	2	5-17	548	534	4
-6	3-20	647	642	5	4	2-19	1103	1098	18	-5	1-18	322	338	3	3	6-18	244	247	6	3	5-17	203	212	4
-5	3-20	376	379	3	5	2-19	199	211	4	-4	1-18	122	116	4	4	6-18	339	352	5	4	5-17	354	359	4
-4	3-20	415	396	4	6	2-19	181	210	7	-3	1-18	583	607	7	5	6-18	47	27	9	5	5-17	526	528	5
-3	3-20	278	301	4	7	2-19	398	389	6	-2	1-18	1025	1047	6	-2	7-18	353	360	6	6	5-17	86	52	6
-2	3-20	409	435	5	8	2-19	353	369	6	-1	1-18	341	345	7	-1	7-18	184	169	7	7	5-17	82	93	11
-1	3-20	368	358	5	9	2-19	240	215	9	0	1-18	651	643	12	0	7-18	183	187	6	-5	6-17	215	209	4
0	3-20	1011	993	10	-8	3-19	114	50	13	1	1-18	214	216	5	1	7-18	307	298	5	-4	6-17	152	137	4
1	3-20	489	471	4	-7	3-19	62	23	6	2	1-18	1110	1110	7	2	7-18	176	174	4	-3	6-17	599	612	8
2	3-20	325	356	3	-6	3-19	89	77	7	3	1-18	213	229	2	-9	1-17	93	103	18	-2	6-17	124	131	7
3	3-20	321	322	3	-5	3-19	84	55	4	4	1-18	228	214	3	-8	1-17	217	195	4	-1	6-17	213	202	4
4	3-20	195	182	8	-4	3-19	181	192	5	5	1-18	118	76	3	-7	1-17	142	105	5	0	6-17	173	187	4
5	3-20	312	311	4	-3	3-19	89	82	11	6	1-18	157	148	7	-6	1-17	97	67	7	1	6-17	109	71	11
6	3-20	527	524	7	-2	3-19	49	93	6	7	1-18	266	271	6	-5	1-17	428	432	6	2	6-17	98	82	5
7	3-20	137	132	6	-1	3-19	742	766	9	8	1-18	361	357	6	-4	1-17	279	278	2	3	6-17	50	67	11
8	3-20	308	302	7	0	3-19	369	395	5	9	1-18	307	307	8	-3	1-17	541	536	4	4	6-17	257	273	5
-7	4-20	393	405	5	1	3-19	173	187	9	-8	2-18	145	150	7	-2	1-17	747	751	14	5	6-17	133	124	6
-6	4-20	146	125	5	2	3-19	87	103	3	-7	2-18	455	459	10	-1	1-17	392	414	3	-2	7-17	104	108	16
-5	4-20	746	764	7	3	3-19	128	121	4	-6	2-18	123	83	4	0	1-17	280	280	8	-1	7-17	58	83	7
-4	4-20	255	202	6	4	3-19	517	528	6	-5	2-18	419	426	4	1	1-17	512	515	3	0	7-17	149	149	4
-3	4-20	255	250	5	5	3-19	91	87	5	-4	2-18	509	499	5	2	1-17	499	497	17	1	7-17	126	117	6
-2	4-20	959	933	8	6	3-19	338	330	4	-3	2-18	145	95	6	3	1-17	621	598	7	2	7-17	80	54	11



-3 2-16 619 627 15 2 1-15 442 439 5 0 7-15 138 129 4 3 4-14 641 623 8 4 3-13 70 78 11  
-2 2-16 917 909 7 3 1-15 785 766 5 1 7-15 180 184 4 4 4-14 385 402 3 5 3-13 176 160 3  
-1 2-16 516 515 6 4 1-15 1638 1627 11 2 7-15 145 145 4 5 4-14 154 157 6 6 3-13 88 78 4  
0 2-16 1293 1295 8 5 1-15 440 432 3 3 7-15 262 257 6 6 4-14 457 464 6 7 3-13 90 104 7  
1 2-16 107 111 2 6 1-15 132 124 4 -9 0-14 95 67 11 7 4-14 107 78 7 8 3-13 24 54 24  
2 2-16 252 251 2 7 1-15 211 199 21 -8 0-14 194 206 7 8 4-14 184 184 6 -8 4-13 248 235 12  
3 2-16 604 619 4 8 1-15 448 442 26 -7 0-14 915 895 11 -6 5-14 272 278 3 -7 4-13 105 87 4  
4 2-16 144 177 4 9 1-15 538 565 10 -6 0-14 233 249 4 -5 5-14 223 230 3 -6 4-13 346 358 5  
5 2-16 374 389 5 -9 2-15 80 39 10 -5 0-14 292 300 4 -4 5-14 204 214 4 -5 4-13 113 118 4  
6 2-16 48 40 9 -8 2-15 131 95 5 -4 0-14 369 405 4 -3 5-14 234 245 4 -4 4-13 740 745 6  
7 2-16 134 139 12 -7 2-15 757 763 5 -3 0-14 155 159 2 -2 5-14 400 409 3 -3 4-13 107 48 5  
8 2-16 334 342 12 -6 2-15 330 307 3 -2 0-14 108 112 2 -1 5-14 636 627 4 -2 4-13 219 211 3  
9 2-16 64 32 14 -5 2-15 87 79 3 -1 0-14 311 359 2 0 5-14 202 196 3 -1 4-13 440 449 3  
-8 3-16 110 112 5 -4 2-15 203 182 2 0 0-14 4536 4762 61 1 5-14 261 256 3 0 4-13 431 427 3  
-7 3-16 44 37 7 -3 2-15 465 466 5 1 0-14 216 248 3 2 5-14 429 437 4 1 4-13 470 478 7  
-6 3-16 61 50 5 -2 2-15 643 633 5 2 0-14 699 638 7 3 5-14 335 331 4 2 4-13 105 105 3  
-5 3-16 111 84 9 -1 2-15 205 192 2 3 0-14 69 75 4 4 5-14 70 61 8 3 4-13 130 102 3  
-4 3-16 94 102 4 0 2-15 1810 1799 11 4 0-14 511 508 5 5 5-14 403 412 3 4 4-13 349 353 3  
-3 3-16 120 116 4 1 2-15 214 200 2 5 0-14 111 109 5 6 5-14 105 80 4 5 4-13 70 64 5  
-2 3-16 475 478 6 2 2-15 509 473 5 6 0-14 316 344 5 7 5-14 290 291 4 6 4-13 286 278 4  
-1 3-16 310 316 4 3 2-15 707 714 5 7 0-14 337 345 5 -5 6-14 128 132 4 7 4-13 361 361 9  
0 3-16 334 348 3 4 2-15 1143 1117 14 8 0-14 114 135 7 -4 6-14 109 69 4 8 4-13 235 209 11  
1 3-16 397 404 3 5 2-15 339 329 7 -9 1-14 157 165 8 -3 6-14 156 161 4 -7 5-13 212 200 4  
2 3-16 1134 1112 6 6 2-15 197 190 4 -8 1-14 505 541 5 -2 6-14 204 197 6 -6 5-13 186 212 3  
3 3-16 483 491 3 7 2-15 343 356 7 -7 1-14 360 369 4 -1 6-14 159 157 7 -5 5-13 109 98 4  
4 3-16 1364 1334 10 8 2-15 518 537 12 -6 1-14 227 223 11 0 6-14 962 975 7 -4 5-13 494 500 5  
5 3-16 288 304 7 9 2-15 127 93 10 -5 1-14 445 460 3 1 6-14 134 140 6 -3 5-13 163 157 5  
6 3-16 750 747 8 -8 3-15 167 162 4 -4 1-14 61 53 6 2 6-14 297 285 4 -2 5-13 503 498 4  
7 3-16 178 183 11 -7 3-15 88 91 7 -3 1-14 81 79 3 3 6-14 212 199 8 -1 5-13 401 386 3  
8 3-16 636 644 15 -6 3-15 171 207 4 -2 1-14 817 790 8 4 6-14 263 263 6 0 5-13 447 425 4  
-7 4-16 187 172 3 -5 3-15 302 312 4 -1 1-14 269 242 2 5 6-14 174 172 8 1 5-13 257 253 6  
-6 4-16 641 630 4 -4 3-15 273 284 4 0 1-14 1098 1147 6 -2 7-14 40 43 15 2 5-13 589 585 11  
-5 4-16 228 217 6 -3 3-15 110 122 6 1 1-14 1026 1055 9 -1 7-14 160 192 4 3 5-13 575 592 5  
-4 4-16 655 679 6 -2 3-15 297 314 3 2 1-14 357 353 2 0 7-14 387 413 5 4 5-13 145 158 4  
-3 4-16 479 509 6 -1 3-15 203 181 3 3 1-14 1041 1055 7 1 7-14 269 282 4 5 5-13 420 418 3  
-2 4-16 355 365 4 0 3-15 176 165 3 4 1-14 581 552 7 2 7-14 435 401 5 6 5-13 407 403 4  
-1 4-16 458 469 3 1 3-15 349 361 2 5 1-14 426 415 18 3 7-14 335 344 7 7 5-13 154 147 5  
0 4-16 289 229 3 2 3-15 349 332 3 6 1-14 416 426 4 -9 1-13 222 230 5 -5 6-13 181 165 8  
1 4-16 592 582 4 3 3-15 412 438 3 7 1-14 92 94 19 -8 1-13 198 165 6 -4 6-13 87 103 10  
2 4-16 685 693 7 4 3-15 566 561 8 8 1-14 193 186 5 -7 1-13 309 314 7 -3 6-13 155 147 7  
3 4-16 208 221 8 5 3-15 341 361 4 9 1-14 103 64 9 -6 1-13 81 96 12 -2 6-13 200 202 6  
4 4-16 283 289 5 6 3-15 144 138 14 -9 2-14 219 229 4 -5 1-13 492 504 3 -1 6-13 186 169 4  
5 4-16 261 245 3 7 3-15 332 345 11 -8 2-14 202 209 4 -4 1-13 966 954 5 0 6-13 303 322 12

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	6-13	78	76	6	-7	4-12	394	415	3	-8	3-11	161	134	3	-7	1-10	388	393	4	-4	6-10	373	386	4					
2	6-13	514	511	5	-6	4-12	513	517	4	-7	3-11	360	378	3	-6	1-10	124	138	4	-3	6-10	280	285	4					
3	6-13	383	381	7	-5	4-12	165	184	6	-6	3-11	71	85	8	-5	1-10	375	360	3	-2	6-10	134	133	4					
4	6-13	127	112	7	-4	4-12	339	337	4	-5	3-11	358	361	2	-4	1-10	115	70	7	-1	6-10	125	108	4					
5	6-13	89	59	6	-3	4-12	266	269	3	-4	3-11	429	422	4	-3	1-10	88	82	3	0	6-10	74	91	5					
-3	7-13	194	213	6	-2	4-12	325	306	8	-3	3-11	388	402	7	-2	1-10	1063	1052	6	1	6-10	126	116	4					
-2	7-13	140	130	9	-1	4-12	350	331	3	-2	3-11	616	623	5	-1	1-10	500	522	12	2	6-10	180	162	5					
-1	7-13	333	339	4	0	4-12	310	312	5	-1	3-11	351	371	3	0	1-10	357	344	2	3	6-10	135	137	6					
0	7-13	191	191	4	1	4-12	54	36	4	0	3-11	317	309	4	1	1-10	405	408	9	4	6-10	202	208	4					
1	7-13	261	255	5	2	4-12	193	197	3	1	3-11	123	112	4	2	1-10	792	805	4	5	6-10	118	112	5					
2	7-13	96	68	13	3	4-12	268	281	4	2	3-11	462	457	7	3	1-10	220	208	4	-3	7-10	45	48	13					
3	7-13	182	176	6	4	4-12	375	370	13	3	3-11	78	70	5	4	1-10	239	245	3	-2	7-10	234	222	7					
-9	0-12	511	520	8	5	4-12	131	108	4	4	3-11	317	329	3	5	1-10	70	84	4	-1	7-10	183	194	5					
-8	0-12	301	323	7	6	4-12	206	205	3	5	3-11	39	34	6	6	1-10	1596	1568	17	0	7-10	190	150	4					
-7	0-12	500	491	7	7	4-12	89	64	7	6	3-11	287	262	3	7	1-10	47	66	41	1	7-10	82	61	5					
-6	0-12	32	38	21	8	4-12	607	608	15	7	3-11	135	89	20	8	1-10	0	18	1	2	7-10	336	335	8					
-5	0-12	304	310	4	-7	5-12	303	321	4	8	3-11	79	81	24	9	1-10	531	524	8	3	7-10	264	250	6					
-4	0-12	2337	2257	19	-6	5-12	175	170	3	9	3-11	342	326	6	-9	2-10	263	263	8	-9	1-9	162	160	4					
-3	0-12	937	899	6	-5	5-12	394	397	4	-8	4-11	216	213	5	-8	2-10	83	125	17	-8	1-9	676	678	7					
-2	0-12	787	751	5	-4	5-12	143	139	4	-7	4-11	107	65	5	-7	2-10	100	74	5	-7	1-9	202	207	4					
-1	0-12	62	39	2	-3	5-12	198	198	4	-6	4-11	293	287	3	-6	2-10	290	291	4	-6	1-9	153	161	4					
0	0-12	1481	1526	14	-2	5-12	429	446	7	-5	4-11	112	90	4	-5	2-10	110	60	7	-5	1-9	771	765	5					
1	0-12	213	239	3	-1	5-12	399	400	3	-4	4-11	77	72	8	-4	2-10	355	373	2	-4	1-9	270	279	2					
2	0-12	930	878	9	0	5-12	287	290	6	-3	4-11	340	351	4	-3	2-10	276	273	7	-3	1-9	425	382	5					
3	0-12	1209	1148	11	1	5-12	465	456	4	-2	4-11	230	233	3	-2	2-10	199	193	9	-2	1-9	234	263	7					
4	0-12	162	201	3	2	5-12	150	116	3	-1	4-11	74	61	3	-1	2-10	399	413	3	-1	1-9	322	402	2					
5	0-12	823	811	9	3	5-12	242	251	4	0	4-11	800	827	7	0	2-10	1137	1177	7	0	1-9	52	15	8					
6	0-12	377	387	5	4	5-12	171	169	3	1	4-11	59	57	4	1	2-10	473	461	4	1	1-9	916	897	5					
7	0-12	57	50	8	5	5-12	138	150	3	2	4-11	649	670	13	2	2-10	56	29	3	2	1-9	742	794	37					
8	0-12	85	72	9	6	5-12	381	384	3	3	4-11	305	300	3	3	2-10	67	77	11	3	1-9	968	993	6					
-9	1-12	126	105	5	7	5-12	101	83	6	4	4-11	303	290	3	4	2-10	806	813	5	4	1-9	194	181	3					
-8	1-12	225	223	4	-5	6-12	71	67	8	5	4-11	181	185	3	5	2-10	326	324	6	5	1-9	172	203	4					
-7	1-12	209	220	6	-4	6-12	637	658	5	6	4-11	177	168	3	6	2-10	428	439	5	6	1-9	1642	1613	14					
-6	1-12	501	521	5	-3	6-12	283	300	4	7	4-11	172	160	5	7	2-10	77	86	15	7	1-9	185	186	4					
-5	1-12	172	139	3	-2	6-12	191	185	5	8	4-11	91	68	13	8	2-10	384	403	7	8	1-9	0	28	1					
-4	1-12	1256	1237	6	-1	6-12	87	91	5	-7	5-11	160	144	5	9	2-10	129	132	7	9	1-9	411	424	7					
-3	1-12	943	957	5	0	6-12	265	258	4	-6	5-11	404	421	5	-8	3-10	492	507	5	-9	2-9	112	94	7					
-2	1-12	152	152	3	1	6-12	289	290	5	-5	5-11	481	471	4	-7	3-10	240	230	3	-8	2-9	186	204	4					
-1	1-12	797	807	6	2	6-12	91	77	5	-4	5-11	470	460	4	-6	3-10	692	680	4	-7	2-9	672	667	5					
0	1-12	339	344	7	3	6-12	343	352	5	-3	5-11	216	209	4	-5	3-10	193	187	3	-6	2-9	635	632	5					
1	1-12	336	304	7	4	6-12	70	74	11	-2	5-11	411	405	7	-4	3-10	598	604	5	-5	2-9	174	205	5					
2	1-12	1189	1182	6	5	6-12	221	188	4	-1	5-11	600	597	5	-3	3-10	236	244	3	-4	2-9	249	266	2					
3	1-12	535	530	6	-3	7-12	149	165	7	0	5-11	339	334	3	-2	3-10	850	841	9	-3	2-9	171	140	2					
4	1-12	95	101	4	-2	7-12	400	373	6	1	5-11	148	146	3	-1	3-10	879	861	5	-2	2-9	51	41	8					

5 1-12 116 82 3 -1 7-12 294 299 4 2 5-11 386 384 3 0 3-10 253 249 2 -1 2-9 207 175 6  
6 1-12 668 641 6 0 7-12 127 140 5 3 5-11 259 255 4 1 3-10 111 110 3 0 2-9 485 399 4  
7 1-12 203 204 9 1 7-12 148 165 4 4 5-11 42 44 12 2 3-10 499 478 4 1 2-9 393 400 2  
8 1-12 156 153 6 2 7-12 342 328 6 5 5-11 187 189 3 3 3-10 135 121 3 2 2-9 841 847 5  
9 1-12 163 157 7 3 7-12 129 138 8 6 5-11 293 297 5 4 3-10 66 33 10 3 2-9 75 73 3  
-9 2-12 55 39 14 -9 1-11 416 407 4 7 5-11 200 188 4 5 3-10 454 441 4 4 2-9 508 457 11  
-8 2-12 517 524 4 -8 1-11 324 330 4 -5 6-11 120 97 5 6 3-10 1039 1056 16 5 2-9 700 712 8  
-7 2-12 46 97 8 -7 1-11 81 71 6 -4 6-11 330 349 10 7 3-10 580 571 14 6 2-9 942 925 8  
-6 2-12 199 207 3 -6 1-11 353 350 4 -3 6-11 32 7 11 8 3-10 329 355 7 7 2-9 144 157 4  
-5 2-12 558 568 10 -5 1-11 722 731 5 -2 6-11 565 576 5 9 3-10 525 532 7 8 2-9 254 234 6  
-4 2-12 151 126 4 -4 1-11 1203 1193 13 -1 6-11 135 124 3 -8 4-10 83 78 8 9 2-9 120 101 10  
-3 2-12 448 452 3 -3 1-11 184 123 5 0 6-11 65 79 5 -7 4-10 143 148 6 -8 3-9 255 249 5  
-2 2-12 408 415 8 -2 1-11 137 101 4 1 6-11 152 143 5 -6 4-10 507 519 8 -7 3-9 156 159 3  
-1 2-12 53 15 3 -1 1-11 562 546 3 2 6-11 61 53 7 -5 4-10 284 280 3 -6 3-9 182 126 2  
0 2-12 1501 1509 16 0 1-11 81 124 3 3 6-11 145 163 5 -4 4-10 201 172 3 -5 3-9 129 127 4  
1 2-12 174 151 16 1 1-11 588 596 8 4 6-11 449 455 5 -3 4-10 237 250 7 -4 3-9 121 96 6  
2 2-12 104 102 6 2 1-11 538 571 4 5 6-11 86 72 6 -2 4-10 180 162 3 -3 3-9 107 59 8  
3 2-12 831 844 5 3 1-11 440 455 3 -3 7-11 210 203 6 -1 4-10 48 30 4 -2 3-9 209 161 4  
4 2-12 782 779 6 4 1-11 161 157 3 -2 7-11 134 119 6 0 4-10 427 397 10 -1 3-9 184 174 6  
5 2-12 325 331 4 5 1-11 407 405 3 -1 7-11 54 41 7 1 4-10 108 117 6 0 3-9 623 642 7  
6 2-12 100 86 6 6 1-11 625 595 6 0 7-11 410 403 6 2 4-10 251 271 3 1 3-9 251 256 2  
7 2-12 42 50 42 7 1-11 498 512 6 1 7-11 190 193 4 3 4-10 36 36 8 2 3-9 495 496 3  
8 2-12 369 383 10 8 1-11 279 299 6 2 7-11 272 278 4 4 4-10 1117 1100 10 3 3-9 649 664 4  
9 2-12 127 106 10 9 1-11 141 105 8 3 7-11 88 80 9 5 4-10 82 76 6 4 3-9 245 262 3  
-8 3-12 215 224 4 -9 2-11 68 95 10 -9 0-10 319 328 7 6 4-10 248 252 3 5 3-9 342 338 3  
-7 3-12 440 454 3 -8 2-11 821 814 6 -8 0-10 623 641 9 7 4-10 387 394 9 6 3-9 321 289 10  
-6 3-12 295 293 3 -7 2-11 181 183 4 -7 0-10 93 94 9 8 4-10 386 396 7 7 3-9 180 168 8  
-5 3-12 764 761 4 -6 2-11 146 149 3 -6 0-10 282 288 5 -7 5-10 169 153 6 8 3-9 166 154 14  
-4 3-12 1162 1139 11 -5 2-11 611 618 4 -5 0-10 42 51 9 -6 5-10 166 167 3 9 3-9 267 263 6  
-3 3-12 199 181 9 -4 2-11 529 535 3 -4 0-10 1695 1630 14 -5 5-10 212 206 8 -8 4-9 157 144 6  
-2 3-12 966 916 7 -3 2-11 929 898 5 -3 0-10 747 713 5 -4 5-10 222 214 9 -7 4-9 136 136 4  
-1 3-12 184 159 3 -2 2-11 997 962 15 -2 0-10 178 170 2 -3 5-10 350 355 4 -6 4-9 175 133 2  
0 3-12 872 839 7 -1 2-11 360 337 3 -1 0-10 1265 1258 9 -2 5-10 99 79 4 -5 4-9 61 49 4  
1 3-12 626 610 4 0 2-11 419 384 6 0 0-10 632 619 6 -1 5-10 63 69 6 -4 4-9 852 862 6  
2 3-12 1066 1045 7 1 2-11 967 896 7 1 0-10 1510 1502 14 0 5-10 266 264 3 -3 4-9 259 271 3  
3 3-12 519 512 4 2 2-11 61 56 6 2 0-10 491 489 5 1 5-10 246 247 9 -2 4-9 713 724 5  
4 3-12 149 160 9 3 2-11 923 869 9 3 0-10 320 296 3 2 5-10 674 682 6 -1 4-9 134 139 5  
5 3-12 283 291 3 4 2-11 723 692 6 4 0-10 22 32 11 3 5-10 325 337 3 0 4-9 173 125 8  
6 3-12 85 89 4 5 2-11 427 407 4 5 0-10 65 56 6 4 5-10 22 35 17 1 4-9 26 24 6  
7 3-12 210 204 5 6 2-11 165 182 4 6 0-10 479 493 5 5 5-10 141 134 3 2 4-9 271 272 5  
8 3-12 44 36 14 7 2-11 218 224 5 7 0-10 636 624 8 6 5-10 218 216 6 3 4-9 107 113 3  
9 3-12 309 317 11 8 2-11 196 172 7 -9 1-10 211 197 7 7 5-10 145 125 5 4 4-9 135 114 5  
-8 4-12 280 285 7 9 2-11 141 126 7 -8 1-10 730 749 6 -5 6-10 168 151 4 5 4-9 52 38 7



Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	4	-9	403	413	4	5	2	-8	226	197	9	4	1	-7	120	103	3	-3	7	-7	475	493	7	-3	4	-6	74	82	4
7	4	-9	94	74	6	6	2	-8	160	126	17	5	1	-7	521	522	4	-2	7	-7	218	267	7	-2	4	-6	330	320	5
8	4	-9	141	114	6	7	2	-8	177	151	16	6	1	-7	197	197	4	-1	7	-7	139	113	4	-1	4	-6	306	327	3
-7	5	-9	75	79	8	8	2	-8	417	429	7	7	1	-7	207	214	5	0	7	-7	97	100	5	0	4	-6	1871	1871	23
-6	5	-9	93	84	4	9	2	-8	53	59	13	8	1	-7	174	179	6	1	7	-7	124	83	5	1	4	-6	490	517	11
-5	5	-9	660	656	5	-8	3	-8	366	376	3	9	1	-7	395	399	7	2	7	-7	256	277	4	2	4	-6	114	126	4
-4	5	-9	60	56	7	-7	3	-8	154	158	3	-9	2	-7	75	54	8	3	7	-7	353	351	6	3	4	-6	463	481	6
-3	5	-9	138	123	4	-6	3	-8	513	513	2	-8	2	-7	52	45	8	-9	0	-6	398	384	12	4	4	-6	172	125	15
-2	5	-9	238	235	3	-5	3	-8	744	748	3	-7	2	-7	356	352	4	-8	0	-6	483	463	13	5	4	-6	128	138	7
-1	5	-9	245	239	4	-4	3	-8	520	505	6	-6	2	-7	84	56	3	-7	0	-6	448	457	11	6	4	-6	66	52	4
0	5	-9	181	177	4	-3	3	-8	571	555	3	-5	2	-7	244	264	5	-6	0	-6	658	663	13	7	4	-6	52	34	7
1	5	-9	115	105	3	-2	3	-8	1099	1068	9	-4	2	-7	584	551	9	-5	0	-6	712	737	9	8	4	-6	448	448	7
2	5	-9	472	473	9	-1	3	-8	523	468	4	-3	2	-7	708	724	6	-4	0	-6	134	140	5	-7	5	-6	338	341	5
3	5	-9	81	78	4	0	3	-8	121	91	3	-2	2	-7	627	623	7	-3	0	-6	174	232	3	-6	5	-6	118	118	3
4	5	-9	486	490	4	1	3	-8	658	635	3	-1	2	-7	83	66	4	-2	0	-6	2385	2324	17	-5	5	-6	186	212	3
5	5	-9	139	136	3	2	3	-8	1728	1705	9	0	2	-7	998	932	5	-1	0	-6	774	843	5	-4	5	-6	208	219	3
6	5	-9	457	490	7	3	3	-8	745	716	5	1	2	-7	71	106	3	0	0	-6	564	583	5	-3	5	-6	513	514	4
7	5	-9	79	69	13	4	3	-8	89	94	3	2	2	-7	2427	2318	14	1	0	-6	497	472	5	-2	5	-6	558	553	4
-5	6	-9	78	71	5	5	3	-8	754	746	5	3	2	-7	142	176	5	2	0	-6	1107	1061	8	-1	5	-6	174	162	3
-4	6	-9	91	83	5	6	3	-8	1138	1129	7	4	2	-7	661	627	13	3	0	-6	675	631	5	0	5	-6	74	75	5
-3	6	-9	59	57	14	7	3	-8	129	109	5	5	2	-7	811	829	17	4	0	-6	354	340	4	1	5	-6	283	292	4
-2	6	-9	83	67	17	8	3	-8	476	458	7	6	2	-7	494	515	14	5	0	-6	1178	1149	10	2	5	-6	259	273	11
-1	6	-9	112	97	8	9	3	-8	70	26	12	7	2	-7	782	773	7	6	0	-6	560	545	7	3	5	-6	411	415	6
0	6	-9	370	376	4	-8	4	-8	185	160	5	8	2	-7	433	429	7	7	0	-6	276	280	10	4	5	-6	79	87	5
1	6	-9	142	143	8	-7	4	-8	168	174	7	9	2	-7	138	144	7	8	0	-6	301	285	11	5	5	-6	158	131	4
2	6	-9	347	353	4	-6	4	-8	210	185	3	-8	3	-7	107	79	5	-9	1	-6	240	197	10	6	5	-6	94	92	4
3	6	-9	189	194	5	-5	4	-8	135	139	2	-7	3	-7	64	48	4	-8	1	-6	73	66	6	7	5	-6	94	92	5
4	6	-9	122	86	15	-4	4	-8	171	91	8	-6	3	-7	282	261	7	-7	1	-6	350	367	4	-5	6	-6	66	59	8
5	6	-9	144	129	5	-3	4	-8	204	207	3	-5	3	-7	322	317	4	-6	1	-6	149	102	4	-4	6	-6	49	56	25
-3	7	-9	39	73	26	-2	4	-8	323	346	4	-4	3	-7	207	213	3	-5	1	-6	697	709	4	-3	6	-6	544	557	8
-2	7	-9	244	261	7	-1	4	-8	445	437	5	-3	3	-7	630	646	4	-4	1	-6	179	177	9	-2	6	-6	460	475	5
-1	7	-9	240	239	4	0	4	-8	1236	1223	8	-2	3	-7	435	427	3	-3	1	-6	711	722	5	-1	6	-6	49	77	8
0	7	-9	66	47	7	1	4	-8	71	98	3	-1	3	-7	719	743	8	-2	1	-6	2577	2641	18	0	6	-6	87	71	6
1	7	-9	580	577	5	2	4	-8	584	595	3	0	3	-7	147	151	2	-1	1	-6	297	312	2	1	6	-6	28	34	15
2	7	-9	86	115	14	3	4	-8	184	178	3	1	3	-7	525	537	8	0	1	-6	506	562	6	2	6	-6	282	293	5
3	7	-9	212	224	6	4	4	-8	1111	1084	7	2	3	-7	421	405	3	1	1	-6	623	654	3	3	6	-6	537	540	6
-9	0	-8	98	111	9	5	4	-8	317	333	3	3	3	-7	397	397	3	2	1	-6	320	346	3	4	6	-6	214	201	6
-8	0	-8	624	612	14	6	4	-8	291	310	7	4	3	-7	185	201	4	3	1	-6	98	48	2	5	6	-6	312	313	4
-7	0	-8	191	219	10	7	4	-8	105	94	7	5	3	-7	283	289	9	4	1	-6	43	23	4	6	6	-6	156	161	4
-6	0	-8	512	504	7	8	4	-8	124	65	8	6	3	-7	153	153	5	5	1	-6	255	254	8	-3	7	-6	306	285	6
-5	0	-8	452	465	6	-7	5	-8	180	192	5	7	3	-7	93	94	9	6	1	-6	586	592	5	-2	7	-6	731	754	8
-4	0	-8	773	745	9	-6	5	-8	153	182	3	8	3	-7	276	256	6	7	1	-6	36	41	13	-1	7	-6	169	168	6
-3	0	-8	249	271	3	-5	5	-8	237	225	4	9	3	-7	64	53	12	8	1	-6	181	179	6	0	7	-6	83	81	6
-2	0	-8	921	877	6	-4	5	-8	34	53	8	-8	4	-7	413	415	7	9	1	-6	147	137	7	1	7	-6	325	314	4

-1 0-8 773 783 5 -3 5-8 415 418 5 -7 4-7 107 94 5 -9 2-6 85 72 7 2 7-6 293 266 4  
0 0-8 495 571 5 -2 5-8 450 467 5 -6 4-7 498 511 5 -8 2-6 191 193 8 3 7-6 72 72 11  
1 0-8 786 809 7 -1 5-8 309 312 4 -5 4-7 66 74 5 -7 2-6 121 92 4 -9 1-5 148 127 5  
2 0-8 2451 2368 23 0 5-8 216 235 4 -4 4-7 203 179 5 -6 2-6 146 142 2 -8 1-5 94 72 6  
3 0-8 77 129 3 1 5-8 296 293 9 -3 4-7 161 173 7 -5 2-6 309 316 2 -7 1-5 455 453 5  
4 0-8 400 364 4 2 5-8 440 435 3 -2 4-7 424 426 4 -4 2-6 674 669 5 -6 1-5 1540 1532 22  
5 0-8 650 648 6 3 5-8 324 323 6 -1 4-7 296 314 5 -3 2-6 237 241 2 -5 1-5 522 528 4  
6 0-8 1638 1582 14 4 5-8 16 40 15 0 4-7 218 239 2 -2 2-6 445 420 3 -4 1-5 436 429 3  
7 0-8 488 505 7 5 5-8 181 195 5 1 4-7 305 316 3 -1 2-6 51 67 5 -3 1-5 265 237 5  
8 0-8 25 75 24 6 5-8 87 122 4 2 4-7 158 162 2 0 2-6 854 897 4 -2 1-5 2002 2005 20  
-9 1-8 287 295 5 7 5-8 247 239 6 3 4-7 183 187 4 1 2-6 114 150 10 -1 1-5 1067 1070 6  
-8 1-8 135 54 18 -5 6-8 105 95 10 4 4-7 326 308 12 2 2-6 294 294 8 0 1-5 357 400 3  
-7 1-8 189 196 4 -4 6-8 235 232 4 5 4-7 127 130 5 3 2-6 87 75 3 1 1-5 420 400 9  
-6 1-8 270 274 3 -3 6-8 204 223 5 6 4-7 157 181 8 4 2-6 865 869 8 2 1-5 1286 1311 14  
-5 1-8 324 327 7 -2 6-8 280 277 5 7 4-7 163 185 4 5 2-6 224 226 2 3 1-5 444 418 5  
-4 1-8 167 170 2 -1 6-8 144 134 4 8 4-7 374 364 5 6 2-6 88 87 6 4 1-5 88 85 7  
-3 1-8 770 750 4 0 6-8 145 142 4 -7 5-7 181 165 6 7 2-6 113 131 12 5 1-5 344 343 3  
-2 1-8 628 635 4 1 6-8 170 177 6 -6 5-7 57 58 5 8 2-6 81 80 9 6 1-5 195 194 7  
-1 1-8 601 591 4 2 6-8 411 424 4 -5 5-7 388 368 4 9 2-6 131 133 7 7 1-5 51 56 9  
0 1-8 79 94 2 3 6-8 234 251 5 -4 5-7 48 38 6 -9 3-6 382 390 4 8 1-5 308 311 6  
1 1-8 444 478 13 4 6-8 95 79 6 -3 5-7 210 201 3 -8 3-6 552 551 4 9 1-5 253 242 6  
2 1-8 2617 2732 15 5 6-8 46 58 10 -2 5-7 699 690 5 -7 3-6 402 401 3 -9 2-5 139 108 4  
3 1-8 218 209 4 6 6-8 299 307 4 -1 5-7 175 184 4 -6 3-6 1185 1178 4 -8 2-5 456 463 4  
4 1-8 187 211 4 -3 7-8 79 61 13 0 5-7 347 348 4 -5 3-6 702 682 3 -7 2-5 292 283 4  
5 1-8 565 576 7 -2 7-8 283 277 10 1 5-7 94 83 4 -4 3-6 349 334 3 -6 2-5 217 227 3  
6 1-8 213 178 6 -1 7-8 507 476 5 2 5-7 1025 1005 6 -3 3-6 620 593 3 -5 2-5 93 101 3  
7 1-8 75 71 6 0 7-8 401 390 5 3 5-7 158 147 3 -2 3-6 1856 1813 12 -4 2-5 196 140 9  
8 1-8 80 67 8 1 7-8 182 157 4 4 5-7 188 181 3 -1 3-6 658 640 4 -3 2-5 818 819 4  
9 1-8 120 80 7 2 7-8 714 728 7 5 5-7 482 478 5 0 3-6 756 738 4 -2 2-5 2521 2424 20  
-9 2-8 138 148 5 3 7-8 138 118 8 6 5-7 110 93 4 1 3-6 820 782 4 -1 2-5 279 238 3  
-8 2-8 116 109 5 -9 1-7 632 640 6 7 5-7 269 255 5 2 3-6 1559 1493 8 0 2-5 638 623 11  
-7 2-8 125 128 6 -8 1-7 327 344 4 -5 6-7 128 113 6 3 3-6 158 135 3 1 2-5 572 562 9  
-6 2-8 248 242 3 -7 1-7 251 236 4 -4 6-7 413 422 4 4 3-6 258 239 3 2 2-5 105 89 4  
-5 2-8 91 61 3 -6 1-7 142 152 6 -3 6-7 147 105 5 5 3-6 65 68 3 3 2-5 818 797 4  
-4 2-8 782 786 5 -5 1-7 143 132 3 -2 6-7 261 281 5 6 3-6 460 467 4 4 2-5 1217 1204 6  
-3 2-8 56 55 6 -4 1-7 230 231 2 -1 6-7 151 165 4 7 3-6 350 359 5 5 2-5 347 347 2  
-2 2-8 81 92 5 -3 1-7 1427 1370 8 0 6-7 57 47 7 8 3-6 301 317 6 6 2-5 83 84 7  
-1 2-8 336 365 9 -2 1-7 1461 1548 7 1 6-7 71 91 5 9 3-6 178 194 5 7 2-5 419 404 5  
0 2-8 934 961 12 -1 1-7 202 172 2 2 6-7 45 37 9 -8 4-6 125 35 9 8 2-5 251 265 6  
1 2-8 335 333 5 0 1-7 636 687 4 3 6-7 158 150 9 -7 4-6 363 379 4 9 2-5 83 77 9  
2 2-8 654 667 9 1 1-7 96 95 3 4 6-7 466 477 5 -6 4-6 175 142 2 -9 3-5 266 255 3  
3 2-8 203 223 2 2 1-7 2650 2654 39 5 6-7 159 142 5 -5 4-6 674 688 3 -8 3-5 185 161 11  
4 2-8 700 713 5 3 1-7 584 582 7 6 6-7 319 313 9 -4 4-6 629 616 5 -7 3-5 295 297 2

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	3	-5	376	341	2	-8	1	-4	70	69	7	-6	6	-4	337	333	3	3	4	-3	451	453	4	1	2	-2	202	202	2
-5	3	-5	515	521	5	-7	1	-4	359	375	7	-5	6	-4	87	108	7	4	4	-3	610	634	4	2	2	-2	336	326	3
-4	3	-5	47	43	5	-6	1	-4	1394	1390	11	-4	6	-4	200	192	12	5	4	-3	287	291	6	3	2	-2	457	446	12
-3	3	-5	887	900	9	-5	1	-4	136	105	3	-3	6	-4	119	123	17	6	4	-3	328	323	4	4	2	-2	468	465	4
-2	3	-5	272	266	5	-4	1	-4	184	177	5	-2	6	-4	218	225	6	7	4	-3	256	238	8	5	2	-2	117	103	2
-1	3	-5	241	252	6	-3	1	-4	347	353	2	-1	6	-4	278	289	4	8	4	-3	338	338	5	6	2	-2	78	78	11
0	3	-5	223	238	2	-2	1	-4	517	536	5	0	6	-4	148	161	8	-7	5	-3	130	128	6	7	2	-2	287	315	6
1	3	-5	520	521	14	-1	1	-4	201	196	3	1	6	-4	60	82	6	-6	5	-3	432	449	3	8	2	-2	505	520	7
2	3	-5	164	150	12	0	1	-4	248	290	2	2	6	-4	187	201	8	-5	5	-3	658	656	4	9	2	-2	108	82	8
3	3	-5	300	304	2	1	1	-4	619	647	4	3	6	-4	177	171	5	-4	5	-3	476	473	4	-9	3	-2	189	210	3
4	3	-5	193	205	6	2	1	-4	883	865	16	4	6	-4	624	636	5	-3	5	-3	168	164	3	-8	3	-2	119	108	7
5	3	-5	87	78	3	3	1	-4	138	117	1	5	6	-4	267	255	4	-2	5	-3	673	684	5	-7	3	-2	345	345	3
6	3	-5	324	304	3	4	1	-4	348	373	7	6	6	-4	244	221	4	-1	5	-3	107	113	4	-6	3	-2	141	133	3
7	3	-5	129	111	11	5	1	-4	182	162	12	-3	7	-4	132	112	13	0	5	-3	323	309	4	-5	3	-2	110	103	2
8	3	-5	76	75	8	6	1	-4	213	225	4	-2	7	-4	276	265	11	1	5	-3	645	623	5	-4	3	-2	16	23	12
9	3	-5	142	91	18	7	1	-4	75	58	7	-1	7	-4	282	272	4	2	5	-3	801	779	6	-3	3	-2	212	201	2
-8	4	-5	149	137	6	8	1	-4	199	192	6	0	7	-4	51	69	8	3	5	-3	212	217	7	-2	3	-2	1301	1266	7
-7	4	-5	109	45	5	9	1	-4	356	357	6	1	7	-4	212	194	5	4	5	-3	68	84	8	-1	3	-2	889	858	5
-6	4	-5	145	135	5	-9	2	-4	215	217	4	2	7	-4	243	222	4	5	5	-3	455	458	4	0	3	-2	161	140	2
-5	4	-5	234	224	2	-8	2	-4	295	287	4	3	7	-4	185	164	6	6	5	-3	267	256	3	1	3	-2	453	447	3
-4	4	-5	274	261	3	-7	2	-4	351	358	4	-9	1	-3	262	232	9	7	5	-3	36	33	9	2	3	-2	2105	2008	12
-3	4	-5	497	506	3	-6	2	-4	95	61	3	-8	1	-3	284	281	4	-6	6	-3	267	261	4	3	3	-2	302	296	2
-2	4	-5	48	21	5	-5	2	-4	358	368	6	-7	1	-3	162	152	8	-5	6	-3	132	121	4	4	3	-2	113	101	2
-1	4	-5	520	523	6	-4	2	-4	577	570	7	-6	1	-3	621	604	10	-4	6	-3	359	376	4	5	3	-2	760	771	5
0	4	-5	589	603	10	-3	2	-4	310	284	8	-5	1	-3	774	766	5	-3	6	-3	385	408	5	6	3	-2	631	624	3
1	4	-5	221	229	2	-2	2	-4	520	517	9	-4	1	-3	69	42	3	-2	6	-3	71	44	13	7	3	-2	474	475	4
2	4	-5	294	324	5	-1	2	-4	27	43	4	-3	1	-3	481	475	3	-1	6	-3	20	22	20	8	3	-2	98	99	6
3	4	-5	202	210	2	0	2	-4	913	987	8	-2	1	-3	1619	1645	10	0	6	-3	152	160	8	9	3	-2	371	381	6
4	4	-5	827	821	5	1	2	-4	50	17	4	-1	1	-3	1130	1144	5	1	6	-3	413	395	5	-8	4	-2	573	582	6
5	4	-5	42	19	5	2	2	-4	381	391	2	0	1	-3	54	94	4	2	6	-3	139	143	5	-7	4	-2	167	182	3
6	4	-5	336	369	5	3	2	-4	119	125	2	1	1	-3	95	98	2	3	6	-3	147	151	5	-6	4	-2	367	369	2
7	4	-5	227	239	4	4	2	-4	254	234	2	2	1	-3	587	589	8	4	6	-3	413	430	4	-5	4	-2	234	229	4
8	4	-5	127	114	6	5	2	-4	80	79	8	3	1	-3	178	184	9	5	6	-3	63	47	7	-4	4	-2	231	208	6
-7	5	-5	178	182	5	6	2	-4	176	191	9	4	1	-3	214	231	2	6	6	-3	286	289	4	-3	4	-2	378	368	6
-6	5	-5	516	545	5	7	2	-4	204	189	6	5	1	-3	764	778	15	-3	7	-3	252	266	6	-2	4	-2	224	214	3
-5	5	-5	200	212	3	9	2	-4	272	274	6	6	1	-3	59	71	14	-2	7	-3	431	429	6	-1	4	-2	124	98	3
-4	5	-5	456	461	4	-9	3	-4	406	424	4	7	1	-3	153	151	5	-1	7	-3	49	37	9	0	4	-2	387	358	11
-3	5	-5	299	281	3	-8	3	-4	410	425	3	8	1	-3	219	209	6	0	7	-3	131	134	4	1	4	-2	650	632	4
-2	5	-5	947	926	7	-7	3	-4	235	245	2	9	1	-3	224	230	6	1	7	-3	109	115	5	2	4	-2	78	78	4
-1	5	-5	647	637	5	-6	3	-4	994	1012	4	-9	2	-3	170	172	4	2	7	-3	96	64	8	3	4	-2	177	157	3
0	5	-5	298	281	3	-5	3	-4	450	446	3	-8	2	-3	384	403	10	3	7	-3	87	75	8	4	4	-2	1032	1044	5
1	5	-5	215	204	4	-4	3	-4	327	335	2	-7	2	-3	440	446	5	-9	0	-2	316	329	12	5	4	-2	121	122	3
2	5	-5	544	549	5	-3	3	-4	459	419	4	-6	2	-3	937	935	5	-8	0	-2	84	81	10	6	4	-2	471	471	5
3	5	-5	337	334	3	-2	3	-4	916	867	8	-5	2	-3	129	105	2	-7	0	-2	234	230	6	7	4	-2	626	646	5

4 5 -5 75 89 5 -1 3 -4 61 88 4 -4 2 -3 655 617 8 -6 0 -2 71 73 9 8 4 -2 455 458 10  
5 5 -5 711 682 5 0 3 -4 341 335 2 -3 2 -3 1734 1664 8 -5 0 -2 587 556 8 -7 5 -2 170 166 5  
6 5 -5 181 199 5 1 3 -4 130 154 2 -2 2 -3 676 702 6 -4 0 -2 643 619 11 -6 5 -2 451 443 3  
7 5 -5 245 219 4 2 3 -4 1336 1314 7 -1 2 -3 86 102 2 -3 0 -2 1568 1545 23 -5 5 -2 103 84 7  
-6 6 -5 143 130 5 3 3 -4 504 492 3 0 2 -3 1101 1139 10 -2 0 -2 312 347 3 -4 5 -2 80 55 8  
-5 6 -5 134 126 5 4 3 -4 112 115 3 1 2 -3 140 134 6 -1 0 -2 1054 1015 6 -3 5 -2 42 39 18  
-4 6 -5 236 235 9 5 3 -4 47 31 3 2 2 -3 53 36 4 1 0 -2 87 174 1 -2 5 -2 60 57 20  
-3 6 -5 281 301 5 6 3 -4 800 781 4 3 2 -3 972 927 5 2 0 -2 749 763 6 -1 5 -2 73 67 5  
-2 6 -5 211 229 7 7 3 -4 352 359 5 4 2 -3 1334 1322 8 3 0 -2 25 42 7 0 5 -2 199 203 4  
-1 6 -5 142 126 10 8 3 -4 134 106 5 5 2 -3 337 362 6 4 0 -2 5231 5304 56 1 5 -2 163 157 3  
0 6 -5 438 450 5 9 3 -4 466 468 5 6 2 -3 85 86 4 5 0 -2 173 176 4 2 5 -2 421 435 5  
1 6 -5 299 290 4 -8 4 -4 132 119 7 7 2 -3 573 571 8 6 0 -2 424 453 10 3 5 -2 104 109 4  
2 6 -5 228 226 8 -7 4 -4 143 104 4 8 2 -3 974 991 11 7 0 -2 735 720 14 4 5 -2 98 104 5  
3 6 -5 88 123 9 -6 4 -4 294 318 5 9 2 -3 114 113 8 8 0 -2 681 657 14 5 5 -2 47 33 6  
4 6 -5 135 119 6 -5 4 -4 170 165 2 -9 3 -3 325 328 4 -9 1 -2 142 111 10 6 5 -2 224 243 3  
5 6 -5 139 143 4 -4 4 -4 1420 1396 7 -8 3 -3 84 23 9 -8 1 -2 175 169 4 7 5 -2 28 15 28  
6 6 -5 148 115 5 -3 4 -4 278 300 5 -7 3 -3 318 326 7 -7 1 -2 85 68 9 -6 6 -2 119 92 4  
-3 7 -5 186 174 7 -2 4 -4 65 50 4 -6 3 -3 203 172 10 -6 1 -2 331 320 11 -5 6 -2 35 36 10  
-2 7 -5 43 74 42 -1 4 -4 384 386 8 -5 3 -3 167 165 3 -5 1 -2 126 107 3 -4 6 -2 136 138 11  
-1 7 -5 448 442 5 0 4 -4 445 404 8 -4 3 -3 69 55 2 -4 1 -2 576 592 3 -3 6 -2 278 301 6  
0 7 -5 233 222 5 1 4 -4 402 393 7 -3 3 -3 318 310 10 -3 1 -2 68 67 10 -2 6 -2 215 223 6  
1 7 -5 313 315 4 2 4 -4 38 38 5 -2 3 -3 210 213 2 -2 1 -2 938 934 8 -1 6 -2 288 281 4  
2 7 -5 404 412 5 3 4 -4 169 164 2 -1 3 -3 501 507 3 -1 1 -2 1021 1056 17 0 6 -2 567 556 6  
3 7 -5 189 207 6 4 4 -4 486 465 8 0 3 -3 399 387 9 0 1 -2 63 57 6 1 6 -2 64 64 7  
-9 0 -4 141 136 12 5 4 -4 191 190 3 1 3 -3 118 121 8 1 1 -2 208 207 6 2 6 -2 291 287 5  
-8 0 -4 190 195 10 6 4 -4 193 187 2 2 3 -3 707 685 12 2 1 -2 375 377 5 3 6 -2 358 372 5  
-7 0 -4 442 452 7 7 4 -4 114 88 4 3 3 -3 272 288 4 3 1 -2 409 431 3 4 6 -2 1050 1070 7  
-6 0 -4 1406 1373 16 8 4 -4 209 219 7 4 3 -3 242 245 6 4 1 -2 336 344 6 5 6 -2 112 111 5  
-5 0 -4 351 348 4 -7 5 -4 224 208 5 5 3 -3 202 192 5 5 1 -2 732 745 8 6 6 -2 108 123 5  
-4 0 -4 165 175 3 -6 5 -4 288 286 3 6 3 -3 161 122 13 6 1 -2 314 315 4 -3 7 -2 159 142 17  
-3 0 -4 610 597 5 -5 5 -4 158 149 4 7 3 -3 75 62 13 7 1 -2 72 49 7 -2 7 -2 308 297 5  
-2 0 -4 267 263 3 -4 5 -4 148 136 4 8 3 -3 64 61 7 8 1 -2 307 317 6 -1 7 -2 132 152 7  
-1 0 -4 1127 1112 7 -3 5 -4 412 415 6 9 3 -3 166 149 8 9 1 -2 216 220 6 0 7 -2 117 104 5  
0 0 -4 562 540 5 -2 5 -4 530 535 5 -8 4 -3 218 200 14 -9 2 -2 223 217 3 1 7 -2 278 270 6  
1 0 -4 372 397 4 -1 5 -4 220 227 7 -7 4 -3 416 416 4 -8 2 -2 239 235 3 2 7 -2 528 505 11  
2 0 -4 190 233 2 0 5 -4 221 236 4 -6 4 -3 195 203 5 -7 2 -2 147 96 4 3 7 -2 239 255 7  
3 0 -4 136 138 3 1 5 -4 224 237 6 -5 4 -3 404 415 4 -6 2 -2 272 253 3 -9 1 -1 337 357 5  
4 0 -4 1132 1090 10 2 5 -4 103 51 20 -3 4 -3 583 584 7 -5 2 -2 154 146 2 -8 1 -1 137 124 4  
5 0 -4 260 263 4 3 5 -4 101 95 4 -2 4 -3 197 215 3 -4 2 -2 1128 1140 12 -7 1 -1 65 53 6  
6 0 -4 182 204 9 4 5 -4 53 56 5 -1 4 -3 327 333 4 -3 2 -2 654 663 3 -6 1 -1 521 521 5  
7 0 -4 134 138 9 5 5 -4 111 90 9 0 4 -3 1139 1135 6 -2 2 -2 425 427 8 -5 1 -1 957 948 7  
8 0 -4 1345 1294 23 6 5 -4 216 239 3 1 4 -3 275 300 4 -1 2 -2 286 318 4 -4 1 -1 87 73 4  
-9 1 -4 471 499 5 7 5 -4 44 34 13 2 4 -3 217 225 6 0 2 -2 1040 1078 5 -3 1 -1 240 283 2

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-2	1	-1	828	821	8	0	6	-1	272	291	16	9	3	0	62	53	8	6	2	1	205	196	2	6	0	2	59	72	14
-1	1	-1	264	239	2	1	6	-1	241	221	4	-8	4	0	78	70	8	7	2	1	699	673	6	7	0	2	241	231	9
0	1	-1	184	199	3	2	6	-1	454	464	6	-7	4	0	182	147	4	8	2	1	170	163	6	8	0	2	82	98	13
1	1	-1	917	1001	6	3	6	-1	464	463	9	-6	4	0	442	443	2	9	2	1	101	79	11	-9	1	2	227	221	4
2	1	-1	87	117	2	4	6	-1	160	168	5	-5	4	0	73	54	3	-9	3	1	79	46	5	-8	1	2	307	323	4
3	1	-1	215	233	6	5	6	-1	340	321	5	-4	4	0	673	680	3	-8	3	1	104	111	7	-7	1	2	84	57	11
4	1	-1	162	170	5	6	6	-1	142	120	7	-3	4	0	968	930	5	-7	3	1	84	68	6	-6	1	2	316	320	4
5	1	-1	158	153	2	-3	7	-1	58	101	9	-2	4	0	305	310	7	-6	3	1	113	83	6	-5	1	2	737	742	5
6	1	-1	98	59	7	-2	7	-1	63	32	10	-1	4	0	178	203	2	-5	3	1	200	159	4	-4	1	2	336	349	9
7	1	-1	488	479	7	-1	7	-1	24	38	24	0	4	0	2069	2043	12	-4	3	1	27	41	8	-3	1	2	405	432	2
8	1	-1	90	90	7	0	7	-1	247	261	4	1	4	0	178	187	3	-3	3	1	239	266	6	-2	1	2	372	388	5
9	1	-1	459	471	7	1	7	-1	78	71	6	2	4	0	311	308	3	-1	3	1	12	32	11	-1	1	2	212	211	1
-9	2	-1	118	74	4	2	7	-1	33	79	33	3	4	0	968	934	6	0	3	1	454	468	3	0	1	2	61	54	6
-8	2	-1	179	157	4	3	7	-1	18	39	18	4	4	0	674	680	5	1	3	1	230	241	4	1	1	2	1016	1054	9
-7	2	-1	686	678	6	-9	0	0	199	212	11	5	4	0	73	61	4	2	3	1	513	504	6	2	1	2	941	944	9
-6	2	-1	210	196	3	-8	0	0	469	481	8	6	4	0	446	445	3	3	3	1	118	100	3	3	1	2	74	72	9
-5	2	-1	454	453	2	-7	0	0	565	569	8	7	4	0	177	143	13	4	3	1	28	15	7	4	1	2	577	592	3
-4	2	-1	556	544	4	-6	0	0	889	882	11	8	4	0	83	57	8	5	3	1	333	339	10	5	1	2	119	95	3
-3	2	-1	583	555	4	-5	0	0	1288	1251	20	-7	5	0	152	146	4	6	3	1	217	226	2	6	1	2	324	326	4
-2	2	-1	299	303	3	-4	0	0	769	783	8	-6	5	0	130	115	3	7	3	1	63	57	4	7	1	2	85	70	7
-1	2	-1	151	179	4	-3	0	0	181	170	5	-5	5	0	111	120	7	8	3	1	169	175	8	8	1	2	171	167	6
0	2	-1	3342	3213	18	-2	0	0	868	870	9	-4	5	0	32	9	7	9	3	1	58	87	8	9	1	2	138	114	6
1	2	-1	55	92	5	-1	0	0	227	260	2	-3	5	0	233	241	3	-8	4	1	148	144	5	-9	2	2	121	80	5
2	2	-1	1424	1288	9	1	0	0	227	269	2	-2	5	0	401	422	4	-7	4	1	133	136	4	-8	2	2	505	517	8
3	2	-1	996	992	6	2	0	0	868	870	6	-1	5	0	67	79	6	-6	4	1	330	338	2	-7	2	2	302	316	4
4	2	-1	2321	2280	12	3	0	0	175	158	4	0	5	0	24	23	14	-5	4	1	438	446	2	-6	2	2	74	67	4
5	2	-1	394	413	2	4	0	0	787	778	10	1	5	0	74	75	5	-4	4	1	1054	1039	9	-5	2	2	119	115	4
6	2	-1	108	94	8	5	0	0	1302	1255	23	2	5	0	402	418	3	-3	4	1	494	494	7	-4	2	2	472	463	11
7	2	-1	509	515	7	6	0	0	843	885	17	3	5	0	241	242	6	-2	4	1	354	368	3	-3	2	2	454	449	8
8	2	-1	107	111	7	7	0	0	570	561	12	4	5	0	29	21	16	-1	4	1	316	309	3	-2	2	2	333	329	2
9	2	-1	332	325	7	8	0	0	486	477	12	5	5	0	109	113	4	0	4	1	1543	1525	9	-1	2	2	201	200	2
-9	3	-1	57	78	11	-9	1	0	109	79	12	6	5	0	127	118	9	1	4	1	577	589	4	0	2	2	1037	1075	5
-8	3	-1	165	178	3	-8	1	0	484	493	5	7	5	0	147	138	4	2	4	1	197	194	3	1	2	2	287	318	8
-7	3	-1	66	55	3	-7	1	0	309	312	4	-6	6	0	117	111	5	3	4	1	346	355	3	2	2	2	422	426	5
-6	3	-1	216	226	2	-6	1	0	496	486	10	-5	6	0	237	244	4	4	4	1	491	488	4	3	2	2	651	662	5
-5	3	-1	337	339	7	-5	1	0	661	656	4	-4	6	0	177	174	4	5	4	1	331	346	3	4	2	2	1130	1144	6
-4	3	-1	25	11	6	-4	1	0	239	257	5	-3	6	0	436	436	7	6	4	1	151	130	6	5	2	2	157	142	2
-3	3	-1	118	98	6	-3	1	0	244	250	11	-2	6	0	202	212	5	7	4	1	542	538	4	6	2	2	256	256	7
-2	3	-1	507	501	6	-2	1	0	235	261	2	-1	6	0	128	107	4	8	4	1	241	231	11	7	2	2	133	93	5
-1	3	-1	226	243	6	-1	1	0	891	962	8	0	6	0	1368	1388	10	-7	5	1	146	131	4	8	2	2	239	232	5
0	3	-1	458	464	3	0	1	0	0	34	1	1	6	0	126	104	4	-6	5	1	279	319	3	9	2	2	222	215	7
1	3	-1	13	30	12	1	1	0	882	964	5	2	6	0	202	214	5	-5	5	1	59	55	5	-9	3	2	367	383	4
3	3	-1	241	269	9	2	1	0	233	275	3	3	6	0	439	438	5	-4	5	1	30	15	7	-8	3	2	104	107	4
4	3	-1	39	29	4	3	1	0	249	251	8	4	6	0	174	172	10	-3	5	1	213	220	3	-7	3	2	467	478	3

5 3 -1 187 165 3 4 1 0 239 255 5 5 6 0 239 247 4 -2 5 1 250 251 4 -6 3 2 628 614 3  
6 3 -1 117 86 8 5 1 0 654 655 5 6 6 0 117 109 5 -1 5 1 403 391 4 -5 3 2 760 764 3  
7 3 -1 82 70 9 6 1 0 497 494 5 -3 7 0 147 130 6 0 5 1 180 185 4 -4 3 2 111 101 2  
8 3 -1 98 111 9 7 1 0 307 308 6 -2 7 0 395 379 6 1 5 1 61 56 5 -3 3 2 299 292 2  
9 3 -1 75 40 7 8 1 0 487 494 7 -1 7 0 423 432 6 2 5 1 887 872 7 -2 3 2 2096 2020 11  
-8 4 -1 248 227 5 9 1 0 86 82 7 0 7 0 42 50 16 3 5 1 273 276 3 -1 3 2 452 441 3  
-7 4 -1 545 539 4 -9 2 0 215 216 3 1 7 0 426 433 5 4 5 1 277 280 3 0 3 2 159 136 2  
-6 4 -1 153 129 2 -8 2 0 479 507 4 2 7 0 383 385 7 5 5 1 276 287 3 1 3 2 887 855 6  
-5 4 -1 332 348 3 -7 2 0 264 248 5 3 7 0 144 133 9 6 5 1 288 292 4 2 3 2 1303 1253 8  
-4 4 -1 484 484 3 -6 2 0 356 368 3 -9 1 1 461 473 4 7 5 1 173 159 7 3 3 2 215 195 2  
-3 4 -1 348 367 6 -5 2 0 138 142 3 -8 1 1 111 100 9 -6 6 1 153 121 5 4 3 2 13 36 13  
-2 4 -1 198 204 2 -4 2 0 821 820 8 -7 1 1 481 487 5 -5 6 1 344 327 7 5 3 2 112 104 5  
-1 4 -1 577 589 4 -3 2 0 368 369 6 -6 1 1 94 69 5 -4 6 1 161 166 6 6 3 2 137 141 2  
0 4 -1 1537 1528 11 -2 2 0 524 532 15 -5 1 1 170 141 8 -3 6 1 466 457 8 7 3 2 343 336 3  
1 4 -1 316 311 3 -1 2 0 246 203 7 -4 1 1 168 176 6 -2 6 1 445 464 6 8 3 2 117 111 5  
2 4 -1 356 367 4 0 2 0 1140 1157 6 -3 1 1 211 240 5 -1 6 1 239 225 4 9 3 2 187 204 4  
3 4 -1 484 495 4 1 2 0 246 200 2 -2 1 1 81 123 3 0 6 1 265 290 7 -8 4 2 444 459 5  
4 4 -1 1053 1040 11 2 2 0 522 532 11 -1 1 1 924 995 5 1 6 1 311 308 4 -7 4 2 625 643 4  
5 4 -1 438 448 3 3 2 0 363 367 7 0 1 1 183 192 3 2 6 1 72 70 7 -6 4 2 469 474 5  
6 4 -1 329 336 3 4 2 0 828 820 11 1 1 1 262 232 4 3 6 1 696 665 6 -5 4 2 130 146 6  
7 4 -1 138 120 5 5 2 0 134 137 4 2 1 1 828 834 8 4 6 1 53 48 7 -4 4 2 1023 1045 5  
8 4 -1 146 139 9 6 2 0 356 368 3 3 1 1 242 273 1 5 6 1 29 52 28 -3 4 2 177 143 3  
-7 5 -1 170 152 4 7 2 0 256 250 6 4 1 1 93 72 9 6 6 1 109 90 5 -2 4 2 75 72 4  
-6 5 -1 291 292 3 8 2 0 475 508 7 5 1 1 960 947 9 -3 7 1 35 44 15 -1 4 2 645 638 5  
-5 5 -1 277 290 3 9 2 0 210 216 5 6 1 1 518 514 4 -2 7 1 0 80 1 0 4 2 397 364 7  
-4 5 -1 275 278 4 -9 3 0 65 49 16 7 1 1 48 44 10 -1 7 1 80 70 6 1 4 2 123 92 3  
-3 5 -1 270 276 3 -8 3 0 61 61 5 8 1 1 134 138 6 0 7 1 251 260 4 2 4 2 222 218 2  
-2 5 -1 884 863 12 -7 3 0 57 72 4 9 1 1 346 351 6 1 7 1 39 29 11 3 4 2 378 364 10  
-1 5 -1 56 56 6 -6 3 0 461 476 2 -9 2 1 327 321 4 2 7 1 50 41 19 4 4 2 230 207 3  
0 5 -1 174 187 4 -5 3 0 890 898 3 -8 2 1 144 125 7 3 7 1 66 92 9 5 4 2 235 232 5  
1 5 -1 396 396 7 -4 3 0 30 42 5 -7 2 1 503 511 4 -9 0 2 514 543 9 6 4 2 369 365 4  
2 5 -1 254 240 4 -3 3 0 640 640 3 -6 2 1 115 89 3 -8 0 2 664 661 9 7 4 2 173 183 4  
3 5 -1 214 220 3 -2 3 0 1971 1870 11 -5 2 1 386 426 2 -7 0 2 722 717 10 8 4 2 571 582 7  
4 5 -1 18 28 17 -1 3 0 488 505 3 -4 2 1 2321 2279 11 -6 0 2 463 451 9 -7 5 2 40 6 9  
5 5 -1 57 56 5 0 3 0 25 10 8 -3 2 1 986 985 7 -5 0 2 175 181 4 -6 5 2 226 245 3  
6 5 -1 280 310 3 1 3 0 487 513 3 -2 2 1 1405 1289 6 -4 0 2 5397 5300 59 -5 5 2 46 43 6  
7 5 -1 143 122 4 2 3 0 1966 1886 12 -1 2 1 53 83 6 -3 0 2 38 26 5 -4 5 2 102 107 11  
-6 6 -1 109 90 5 3 3 0 646 634 3 0 2 1 3326 3210 46 -2 0 2 746 760 10 -3 5 2 106 111 4  
-5 6 -1 53 51 8 4 3 0 33 30 4 1 2 1 152 150 5 -1 0 2 83 159 1 -2 5 2 422 432 4  
-4 6 -1 55 44 7 5 3 0 889 895 4 2 2 1 299 302 8 1 0 2 1054 1016 6 -1 5 2 158 154 6  
-3 6 -1 686 660 8 6 3 0 465 468 2 3 2 1 590 564 7 2 0 2 315 348 3 0 5 2 197 208 9  
-2 6 -1 77 76 23 7 3 0 62 39 9 4 2 1 556 546 7 3 0 2 1558 1531 19 1 5 2 80 67 5  
-1 6 -1 311 316 4 8 3 0 58 65 6 5 2 1 461 459 2 4 0 2 643 614 9 2 5 2 91 44 19

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	5	2	32	45	13	-3	4	3	446	452	3	-5	2	4	79	93	6	-8	1	5	308	311	3	7	5	5	169	177	7
4	5	2	75	60	5	-2	4	3	213	219	6	-4	2	4	259	222	3	-7	1	5	55	53	6	-6	6	5	148	122	5
5	5	2	97	86	7	-1	4	3	272	287	3	-3	2	4	123	131	6	-6	1	5	205	196	3	-5	6	5	146	146	4
6	5	2	453	443	4	0	4	3	1137	1140	7	-2	2	4	378	388	2	-5	1	5	343	349	3	-4	6	5	139	113	6
7	5	2	172	165	4	1	4	3	326	331	4	-1	2	4	45	48	4	-4	1	5	85	88	5	-3	6	5	102	121	16
-6	6	2	111	113	7	2	4	3	194	215	3	0	2	4	912	996	6	-3	1	5	440	416	9	-2	6	5	231	224	4
-5	6	2	117	116	5	3	4	3	585	584	6	1	2	4	32	34	3	-2	1	5	1283	1304	12	-1	6	5	300	294	4
-4	6	2	1050	1069	8	4	4	3	170	130	5	2	2	4	515	520	3	-1	1	5	421	395	6	0	6	5	437	452	4
-3	6	2	360	372	4	5	4	3	410	418	3	3	2	4	308	283	10	0	1	5	354	398	2	1	6	5	145	136	6
-2	6	2	286	288	5	6	4	3	196	206	3	4	2	4	580	566	6	1	1	5	1057	1068	7	2	6	5	207	224	4
-1	6	2	62	52	5	7	4	3	415	420	5	5	2	4	357	369	3	2	1	5	2003	2010	23	3	6	5	283	297	4
0	6	2	560	558	8	8	4	3	218	196	13	6	2	4	99	54	4	3	1	5	278	241	9	4	6	5	239	235	14
1	6	2	291	281	4	-7	5	3	37	24	10	7	2	4	354	362	9	4	1	5	432	430	2	5	6	5	132	117	8
2	6	2	215	220	5	-6	5	3	264	263	3	8	2	4	289	294	5	5	1	5	527	534	4	6	6	5	143	124	4
3	6	2	276	300	4	-5	5	3	454	452	4	9	2	4	206	212	6	6	1	5	1568	1533	12	-3	7	5	186	210	5
4	6	2	132	145	5	-4	5	3	72	73	8	-9	3	4	467	467	4	7	1	5	455	456	6	-2	7	5	399	411	5
5	6	2	32	8	12	-3	5	3	215	217	5	-8	3	4	132	104	9	8	1	5	92	73	7	-1	7	5	309	313	4
6	6	2	118	94	4	-2	5	3	801	788	6	-7	3	4	358	357	3	9	1	5	150	122	7	0	7	5	232	220	4
-3	7	2	241	256	5	-1	5	3	646	624	6	-6	3	4	796	786	6	-9	2	5	90	72	5	1	7	5	448	446	5
-2	7	2	528	511	10	0	5	3	325	312	4	-5	3	4	48	37	6	-8	2	5	258	264	4	2	7	5	31	71	31
-1	7	2	283	272	9	1	5	3	105	110	6	-4	3	4	115	105	3	-7	2	5	413	404	4	3	7	5	183	175	8
0	7	2	113	116	5	2	5	3	674	678	8	-3	3	4	501	494	2	-6	2	5	84	94	5	-9	0	6	200	213	7
1	7	2	131	154	6	3	5	3	165	174	4	-2	3	4	1330	1304	7	-5	2	5	340	359	2	-8	0	6	306	293	9
2	7	2	315	299	11	4	5	3	480	469	4	-1	3	4	127	133	3	-4	2	5	1210	1212	8	-7	0	6	272	280	8
3	7	2	149	143	8	5	5	3	656	656	5	0	3	4	341	334	2	-3	2	5	813	793	4	-6	0	6	555	545	7
-9	1	3	233	223	4	6	5	3	434	452	3	1	3	4	60	87	3	-2	2	5	107	85	2	-5	0	6	1168	1164	12
-8	1	3	215	205	4	7	5	3	126	136	7	2	3	4	912	875	11	-1	2	5	572	582	9	-4	0	6	352	332	6
-7	1	3	148	153	4	-6	6	3	284	286	4	3	3	4	457	417	3	0	2	5	632	617	15	-3	0	6	673	636	6
-6	1	3	86	59	6	-5	6	3	72	40	13	4	3	4	328	334	4	1	2	5	277	238	2	-2	0	6	1090	1064	8
-5	1	3	769	774	6	-4	6	3	418	431	4	5	3	4	449	450	2	2	2	5	2545	2422	14	-1	0	6	493	463	5
-4	1	3	215	224	2	-3	6	3	152	143	5	6	3	4	995	1016	11	3	2	5	811	825	5	0	0	6	551	568	5
-3	1	3	179	189	10	-2	6	3	139	148	15	7	3	4	235	241	3	4	2	5	181	155	8	1	0	6	770	840	4
-2	1	3	578	594	6	-1	6	3	410	399	6	8	3	4	421	432	5	5	2	5	100	80	3	2	0	6	2337	2325	14
-1	1	3	91	87	2	0	6	3	150	157	7	9	3	4	410	425	5	6	2	5	215	228	7	3	0	6	172	230	2
0	1	3	54	102	4	1	6	3	20	19	19	-8	4	4	213	221	4	7	2	5	297	290	4	4	0	6	134	156	5
1	1	3	1125	1143	6	2	6	3	57	35	9	-7	4	4	110	89	4	8	2	5	459	471	7	5	0	6	697	735	10
2	1	3	1625	1635	15	3	6	3	386	410	4	-6	4	4	192	187	3	9	2	5	140	106	4	7	0	6	458	452	11
3	1	3	482	484	4	4	6	3	361	373	4	-5	4	4	191	193	3	-9	3	5	146	92	4	8	0	6	493	478	12
4	1	3	66	62	5	5	6	3	129	130	5	-4	4	4	487	462	10	-8	3	5	85	71	5	-9	1	6	157	136	4
5	1	3	787	763	5	6	6	3	269	255	3	-3	4	4	167	161	4	-7	3	5	136	109	3	-8	1	6	186	178	3
6	1	3	615	611	8	-3	7	3	81	67	7	-2	4	4	40	22	10	-6	3	5	331	309	7	-7	1	6	34	69	10
7	1	3	154	154	5	-2	7	3	92	73	7	-1	4	4	397	385	4	-5	3	5	90	73	4	-6	1	6	586	593	5
8	1	3	284	283	6	-1	7	3	109	116	8	0	4	4	448	406	3	-4	3	5	189	204	9	-5	1	6	253	254	6
9	1	3	252	236	6	0	7	3	129	137	4	1	4	4	380	391	7	-3	3	5	295	307	4	-4	1	6	33	22	6

-9 2 3 119 138 5 1 7 3 45 47 9 2 4 4 66 69 6 -2 3 5 152 150 13 -3 1 6 95 80 3  
-8 2 3 966 991 7 2 7 3 427 427 7 3 4 4 278 291 4 -1 3 5 518 521 11 -2 1 6 330 351 3  
-7 2 3 568 566 5 3 7 3 249 267 8 4 4 4 1435 1391 8 0 3 5 225 242 2 -1 1 6 623 650 3  
-6 2 3 83 69 9 -9 0 4 173 195 7 5 4 4 166 168 2 1 3 5 239 254 6 0 1 6 502 558 10  
-5 2 3 334 348 2 -8 0 4 1295 1289 16 6 4 4 293 314 11 2 3 5 267 267 2 1 1 6 292 318 3  
-4 2 3 1331 1319 7 -7 0 4 136 131 11 7 4 4 146 109 4 3 3 5 891 894 7 2 1 6 2566 2643 14  
-3 2 3 962 930 5 -6 0 4 189 195 8 8 4 4 131 119 18 4 3 5 36 43 6 3 1 6 714 718 4  
-2 2 3 60 28 3 -5 0 4 250 249 4 -7 5 4 43 47 43 5 3 5 510 524 3 4 1 6 179 181 9  
-1 2 3 139 139 8 -4 0 4 1135 1097 11 -6 5 4 214 237 4 6 3 5 366 344 8 5 1 6 699 715 5  
0 2 3 1090 1145 8 -3 0 4 137 123 4 -5 5 4 112 86 4 7 3 5 292 295 3 6 1 6 148 100 5  
1 2 3 80 105 2 -2 0 4 185 225 2 -4 5 4 58 52 5 8 3 5 180 161 4 7 1 6 359 357 5  
2 2 3 680 701 9 -1 0 4 370 412 3 -3 5 4 97 101 4 9 3 5 267 254 5 8 1 6 73 65 8  
3 2 3 1732 1652 22 0 0 4 561 535 5 -2 5 4 103 38 25 -8 4 5 126 112 4 9 1 6 219 191 15  
4 2 3 661 610 7 1 0 4 1134 1113 6 -1 5 4 221 239 3 -7 4 5 227 237 3 -9 2 6 140 140 4  
5 2 3 125 108 2 2 0 4 264 270 2 0 5 4 227 239 3 -6 4 5 337 367 2 -8 2 6 90 70 5  
6 2 3 943 935 5 3 0 4 610 587 6 1 5 4 218 230 6 -5 4 5 44 20 5 -7 2 6 120 136 9  
7 2 3 441 451 5 4 0 4 168 165 3 2 5 4 532 534 6 -4 4 5 822 825 5 -6 2 6 86 80 4  
8 2 3 391 396 8 5 0 4 357 342 4 3 5 4 405 413 7 -3 4 5 201 208 2 -5 2 6 214 237 2  
9 2 3 172 168 5 7 0 4 447 454 11 4 5 4 152 132 4 -2 4 5 297 324 8 -4 2 6 866 875 10  
-9 3 3 174 146 3 8 0 4 189 186 10 5 5 4 158 153 5 -1 4 5 222 229 3 -3 2 6 88 76 7  
-8 3 3 71 56 4 -9 1 4 341 357 5 6 5 4 284 286 3 0 4 5 587 596 8 -2 2 6 291 295 7  
-7 3 3 87 51 4 -8 1 4 194 198 3 7 5 4 217 203 5 1 4 5 514 525 3 -1 2 6 113 154 8  
-6 3 3 164 117 8 -7 1 4 86 78 5 -6 6 4 248 223 7 2 4 5 40 33 6 0 2 6 849 895 4  
-5 3 3 208 193 2 -6 1 4 215 217 4 -5 6 4 265 252 4 3 4 5 496 518 4 1 2 6 46 46 3  
-4 3 3 237 249 6 -5 1 4 188 171 3 -4 6 4 622 639 5 4 4 5 269 251 6 2 2 6 451 424 3  
-3 3 3 269 285 7 -4 1 4 348 369 12 -3 6 4 177 174 4 5 4 5 228 214 6 3 2 6 235 246 2  
-2 3 3 714 689 13 -3 1 4 135 123 3 -2 6 4 188 195 5 6 4 5 148 136 2 4 2 6 672 676 3  
-1 3 3 120 118 12 -2 1 4 866 872 10 -1 6 4 66 95 5 7 4 5 105 50 13 5 2 6 309 312 2  
0 3 3 398 389 11 -1 1 4 621 643 3 0 6 4 150 158 4 8 4 5 145 139 6 6 2 6 141 141 3  
1 3 3 500 509 3 0 1 4 246 289 1 1 6 4 281 289 4 -7 5 5 240 218 3 7 2 6 123 89 6  
2 3 3 213 215 2 1 1 4 203 191 7 2 6 4 220 227 5 -6 5 5 179 201 4 8 2 6 191 192 3  
3 3 3 313 309 10 2 1 4 532 539 4 3 6 4 121 119 12 -5 5 5 710 681 5 9 2 6 81 82 6  
4 3 3 70 52 7 3 1 4 354 344 2 4 6 4 196 183 8 -4 5 5 73 92 5 -9 3 6 179 194 3  
5 3 3 164 166 4 4 1 4 184 182 6 5 6 4 87 89 7 -3 5 5 332 335 4 -8 3 6 300 316 3  
6 3 3 198 174 2 5 1 4 139 117 3 6 6 4 338 334 3 -2 5 5 539 545 4 -7 3 6 351 360 4  
7 3 3 321 321 3 6 1 4 1415 1393 11 -3 7 4 182 165 5 -1 5 5 212 202 3 -6 3 6 460 466 4  
8 3 3 71 24 6 7 1 4 363 378 6 -2 7 4 239 224 5 0 5 5 297 279 3 -5 3 6 64 46 3  
9 3 3 329 330 5 8 1 4 71 71 8 -1 7 4 208 196 4 1 5 5 646 637 4 -4 3 6 261 240 3  
-8 4 3 353 334 7 9 1 4 480 502 7 0 7 4 52 74 8 2 5 5 941 930 6 -3 3 6 159 140 2  
-7 4 3 264 235 3 -9 2 4 268 277 4 1 7 4 281 274 7 3 5 5 300 281 4 -2 3 6 1548 1499 9  
-6 4 3 331 324 2 -8 2 4 157 71 13 2 7 4 260 265 7 4 5 5 458 467 6 -1 3 6 818 781 4  
-5 4 3 287 289 6 -7 2 4 213 190 4 3 7 4 126 116 17 5 5 5 204 223 3 0 3 6 753 732 4  
-4 4 3 609 629 3 -6 2 4 176 189 3 -9 1 5 268 242 4 6 5 5 512 547 8 1 3 6 663 639 4



Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	3	6	1850	1815	10	0	2	7	990	949	11	-1	0	8	782	811	7	-3	5	8	325	325	6	-7	4	9	92	80	5
3	3	6	618	591	3	1	2	7	81	41	4	0	0	8	490	586	5	-2	5	8	442	432	3	-6	4	9	400	413	3
4	3	6	347	340	3	2	2	7	633	620	6	1	0	8	772	782	4	-1	5	8	295	288	5	-5	4	9	47	62	5
5	3	6	697	686	6	3	2	7	705	732	12	2	0	8	914	873	5	0	5	8	218	232	3	-4	4	9	143	120	4
6	3	6	1184	1178	5	4	2	7	579	560	9	3	0	8	249	272	2	1	5	8	309	314	5	-3	4	9	111	100	3
7	3	6	402	406	3	5	2	7	243	260	2	4	0	8	776	758	7	2	5	8	443	473	4	-2	4	9	270	273	2
8	3	6	558	553	4	6	2	7	87	62	5	5	0	8	455	461	5	3	5	8	409	420	4	-1	4	9	28	26	6
9	3	6	386	386	5	7	2	7	350	350	6	6	0	8	520	504	6	4	5	8	43	50	8	0	4	9	174	100	7
-8	4	6	459	443	4	8	2	7	56	43	6	8	0	8	626	606	13	5	5	8	236	222	4	1	4	9	138	146	5
-7	4	6	51	41	7	9	2	7	81	49	6	9	0	8	98	106	12	6	5	8	153	182	3	2	4	9	708	726	5
-6	4	6	71	49	4	-9	3	7	84	50	5	-9	1	8	128	81	5	7	5	8	185	192	6	3	4	9	256	272	3
-5	4	6	135	151	3	-8	3	7	276	258	3	-8	1	8	94	59	6	-6	6	8	309	305	6	4	4	9	851	858	10
-4	4	6	159	108	5	-7	3	7	103	93	6	-7	1	8	87	64	6	-5	6	8	56	63	7	5	4	9	54	49	5
-3	4	6	458	485	4	-6	3	7	154	156	3	-6	1	8	209	198	14	-4	6	8	99	71	5	6	4	9	169	131	2
-2	4	6	114	134	3	-5	3	7	285	290	9	-5	1	8	559	575	5	-3	6	8	230	248	5	7	4	9	137	136	10
-1	4	6	490	505	9	-4	3	7	181	204	2	-4	1	8	184	205	6	-2	6	8	408	426	4	8	4	9	155	141	6
0	4	6	1877	1865	27	-3	3	7	399	400	3	-3	1	8	218	214	5	-1	6	8	170	174	3	-7	5	9	85	99	6
1	4	6	303	329	3	-2	3	7	416	408	4	-2	1	8	2640	2732	16	0	6	8	141	147	7	-6	5	9	453	493	8
2	4	6	331	314	3	-1	3	7	524	531	7	-1	1	8	443	476	17	1	6	8	140	136	4	-5	5	9	141	138	5
3	4	6	73	61	9	0	3	7	150	148	2	0	1	8	73	87	2	2	6	8	278	278	5	-4	5	9	485	493	4
4	4	6	624	624	5	1	3	7	722	749	11	1	1	8	593	600	6	3	6	8	207	225	7	-3	5	9	78	75	4
5	4	6	676	686	4	2	3	7	430	430	3	2	1	8	619	636	4	4	6	8	236	234	5	-2	5	9	471	476	6
6	4	6	167	147	2	3	3	7	635	643	4	3	1	8	771	743	3	5	6	8	96	96	7	-1	5	9	118	99	3
7	4	6	371	377	4	4	3	7	210	215	3	4	1	8	169	173	2	-3	7	8	145	131	6	0	5	9	181	186	5
8	4	6	112	39	20	5	3	7	321	317	2	5	1	8	326	318	19	-2	7	8	705	730	6	1	5	9	243	242	3
-7	5	6	87	100	5	6	3	7	287	258	2	6	1	8	265	273	4	-1	7	8	178	153	4	2	5	9	237	236	6
-6	5	6	89	91	9	7	3	7	65	49	5	7	1	8	192	180	4	0	7	8	401	392	4	3	5	9	139	124	4
-5	5	6	155	132	3	8	3	7	108	85	8	8	1	8	132	44	9	1	7	8	498	481	5	4	5	9	49	60	7
-4	5	6	76	86	5	-8	4	7	375	367	4	9	1	8	294	292	4	2	7	8	277	276	8	5	5	9	662	649	5
-3	5	6	405	415	4	-7	4	7	159	188	3	-9	2	8	80	82	5	3	7	8	67	35	12	6	5	9	88	84	8
-2	5	6	260	269	6	-6	4	7	157	177	3	-8	2	8	418	430	5	-9	1	9	416	425	5	7	5	9	74	88	6
-1	5	6	280	287	4	-5	4	7	129	143	3	-7	2	8	180	152	4	-8	1	9	41	16	9	-5	6	9	141	118	5
0	5	6	68	72	4	-4	4	7	328	303	8	-6	2	8	155	125	9	-7	1	9	189	188	4	-4	6	9	125	90	16
1	5	6	179	165	3	-3	4	7	188	196	8	-5	2	8	223	198	3	-6	1	9	1643	1614	27	-3	6	9	188	192	4
2	5	6	554	552	4	-2	4	7	160	169	2	-4	2	8	701	710	4	-5	1	9	179	213	3	-2	6	9	340	347	4
3	5	6	512	509	5	-1	4	7	302	330	2	-3	2	8	201	221	7	-4	1	9	193	193	5	-1	6	9	143	145	8
4	5	6	210	216	3	0	4	7	217	233	3	-2	2	8	651	669	3	-3	1	9	970	983	7	0	6	9	372	375	4
5	5	6	190	216	3	1	4	7	291	302	3	-1	2	8	334	329	4	-2	1	9	735	788	22	1	6	9	103	101	10
6	5	6	109	125	6	2	4	7	426	428	4	0	2	8	936	967	7	-1	1	9	916	895	4	2	6	9	75	69	15
7	5	6	333	347	5	3	4	7	159	166	7	1	2	8	342	363	8	0	1	9	52	14	3	3	6	9	64	53	19
-6	6	6	156	156	4	4	4	7	201	172	9	2	2	8	84	93	5	1	1	9	319	387	3	4	6	9	83	91	6
-5	6	6	311	324	4	5	4	7	58	83	4	3	2	8	59	50	8	2	1	9	229	264	8	5	6	9	79	72	6
-4	6	6	213	196	4	6	4	7	495	511	3	4	2	8	775	782	9	3	1	9	428	385	8	-3	7	9	215	221	6
-3	6	6	532	540	5	7	4	7	108	88	5	5	2	8	93	82	2	4	1	9	272	275	3	-2	7	9	74	108	5

-2 6 6 279 294 4 8 4 7 410 411 6 6 2 8 242 240 3 5 1 9 773 753 11 -1 7 9 572 573 5  
-1 6 6 38 46 9 -7 5 7 264 255 3 7 2 8 124 124 4 6 1 9 155 160 6 0 7 9 55 53 6  
0 6 6 87 66 5 -6 5 7 101 101 4 8 2 8 128 110 5 7 1 9 207 202 5 1 7 9 239 237 5  
1 6 6 50 52 10 -5 5 7 480 478 4 9 2 8 146 147 5 8 1 9 676 684 8 2 7 9 248 261 7  
2 6 6 457 477 6 -4 5 7 188 185 3 -9 3 8 71 25 6 9 1 9 168 164 4 3 7 9 46 70 18  
3 6 6 544 558 5 -3 5 7 155 160 3 -8 3 8 475 455 4 -9 2 9 109 117 4 -9 0 10 442 419 11  
4 6 6 33 53 33 -2 5 7 1021 1009 6 -7 3 8 132 115 4 -8 2 9 249 231 4 -8 0 10 188 225 9  
5 6 6 61 60 10 -1 5 7 90 93 4 -6 3 8 1141 1133 6 -7 2 9 146 156 5 -7 0 10 637 625 6  
-3 7 6 84 86 7 0 5 7 348 353 4 -5 3 8 757 750 4 -6 2 9 940 920 7 -6 0 10 476 489 5  
-2 7 6 285 264 5 1 5 7 179 194 3 -4 3 8 84 81 5 -5 2 9 701 704 9 -5 0 10 78 38 5  
-1 7 6 320 313 4 2 5 7 697 692 9 -3 3 8 740 713 4 -4 2 9 509 470 10 -4 0 10 22 19 13  
0 7 6 81 78 5 3 5 7 205 198 4 -2 3 8 1718 1705 11 -3 2 9 76 79 3 -3 0 10 318 293 3  
1 7 6 168 171 4 4 5 7 43 50 13 -1 3 8 658 632 3 -2 2 9 831 844 7 -2 0 10 490 486 5  
2 7 6 739 757 10 5 5 7 386 371 4 0 3 8 119 93 2 -1 2 9 392 404 2 -1 0 10 1510 1497 12  
3 7 6 303 281 8 6 5 7 48 48 5 1 3 8 525 475 3 0 2 9 485 378 6 0 0 10 629 627 6  
-9 1 7 397 400 4 7 5 7 179 167 4 2 3 8 1101 1066 7 1 2 9 203 179 6 1 0 10 1259 1257 10  
-8 1 7 176 179 4 -6 6 7 318 315 6 3 3 8 575 558 3 2 2 9 42 51 7 2 0 10 178 205 1  
-7 1 7 211 212 6 -5 6 7 164 147 4 4 3 8 517 505 7 3 2 9 170 145 2 3 0 10 744 713 4  
-6 1 7 201 214 4 -4 6 7 465 477 4 5 3 8 745 738 3 4 2 9 258 262 2 4 0 10 1669 1621 11  
-5 1 7 514 522 4 -3 6 7 166 161 7 6 3 8 514 517 3 5 2 9 175 203 6 5 0 10 39 54 8  
-4 1 7 117 112 3 -2 6 7 55 38 9 7 3 8 161 161 4 6 2 9 638 631 9 6 0 10 279 283 4  
-3 1 7 582 583 5 -1 6 7 69 86 8 8 3 8 366 380 4 7 2 9 674 668 5 7 0 10 103 126 11  
-2 1 7 2662 2656 22 0 6 7 54 40 7 -8 4 8 125 66 9 8 2 9 194 201 4 8 0 10 627 642 8  
-1 1 7 100 112 5 1 6 7 152 156 3 -7 4 8 98 91 4 9 2 9 118 103 5 9 0 10 315 326 9  
0 1 7 635 680 4 2 6 7 259 276 5 -6 4 8 290 305 3 -9 3 9 265 265 5 -9 1 10 523 526 5  
1 1 7 191 181 2 3 6 7 140 105 5 -5 4 8 318 318 4 -8 3 9 175 157 4 -8 1 10 47 21 8  
2 1 7 1448 1546 8 4 6 7 414 422 5 -4 4 8 1109 1078 15 -7 3 9 181 171 3 -7 1 10 56 54 6  
3 1 7 1426 1372 10 5 6 7 126 116 6 -3 4 8 185 182 5 -6 3 9 322 291 6 -6 1 10 1587 1567 13  
4 1 7 235 237 2 -3 7 7 350 351 5 -2 4 8 579 590 5 -5 3 9 346 333 3 -5 1 10 61 88 5  
5 1 7 138 118 3 -2 7 7 255 273 6 -1 4 8 71 82 3 -4 3 9 250 259 2 -4 1 10 241 251 3  
6 1 7 139 144 5 -1 7 7 119 88 5 0 4 8 1230 1228 16 -3 3 9 646 670 5 -3 1 10 216 198 11  
7 1 7 254 240 5 0 7 7 103 98 9 1 4 8 447 435 8 -2 3 9 494 498 3 -2 1 10 791 806 4  
8 1 7 334 349 5 1 7 7 143 114 4 2 4 8 313 340 4 -1 3 9 252 253 2 -1 1 10 404 404 13  
9 1 7 629 633 7 2 7 7 230 262 6 3 4 8 201 206 3 0 3 9 623 641 10 0 1 10 350 350 2  
-9 2 7 151 150 4 3 7 7 466 490 9 4 4 8 160 100 4 1 3 9 180 175 3 1 1 10 491 512 16  
-8 2 7 435 435 5 -9 0 8 594 596 9 5 4 8 137 128 3 2 3 9 204 158 3 2 1 10 1060 1050 5  
-7 2 7 772 774 6 -8 0 8 81 64 15 6 4 8 212 183 2 3 3 9 101 63 4 3 1 10 85 39 2  
-6 2 7 504 517 4 -7 0 8 492 511 5 7 4 8 170 175 7 4 3 9 112 106 10 4 1 10 120 69 9  
-5 2 7 815 846 17 -6 0 8 1603 1582 13 8 4 8 184 169 6 5 3 9 130 122 3 5 1 10 375 351 3  
-4 2 7 658 619 11 -5 0 8 651 638 7 -7 5 8 245 235 4 6 3 9 178 127 12 6 1 10 132 144 8  
-3 2 7 141 175 2 -4 0 8 399 378 4 -6 5 8 92 113 6 7 3 9 159 166 4 7 1 10 399 391 4  
-2 2 7 2406 2318 21 -3 0 8 75 122 3 -5 5 8 182 189 3 8 3 9 252 246 4 8 1 10 730 750 10  
-1 2 7 74 75 2 -2 0 8 2439 2367 19 -4 5 8 37 34 34 -8 4 9 140 118 4 9 1 10 206 199 6

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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
-9	2	10	141	134	4	-9	1	11	165	111	6	7	5	11	161	133	5	2	3	12	959	908	7	2	2	13	358	342	4
-8	2	10	389	399	4	-8	1	11	284	299	4	-5	6	11	91	71	6	3	3	12	201	185	4	3	2	13	312	322	2
-7	2	10	80	84	7	-7	1	11	499	505	5	-4	6	11	452	460	5	4	3	12	1171	1143	6	4	2	13	1415	1417	6
-6	2	10	428	441	4	-6	1	11	628	592	7	-3	6	11	149	154	4	5	3	12	767	770	4	5	2	13	203	204	2
-5	2	10	321	322	3	-5	1	11	406	400	3	-2	6	11	61	46	6	6	3	12	296	299	3	6	2	13	160	131	9
-4	2	10	806	819	4	-4	1	11	157	168	7	-1	6	11	151	146	8	7	3	12	444	441	3	7	2	13	85	85	4
-3	2	10	67	63	13	-3	1	11	431	441	4	0	6	11	68	88	5	8	3	12	221	221	10	8	2	13	201	201	3
-2	2	10	51	23	5	-2	1	11	536	577	3	1	6	11	137	121	3	-8	4	12	605	613	5	9	2	13	341	347	4
-1	2	10	470	464	2	-1	1	11	586	596	7	2	6	11	565	570	5	-7	4	12	93	68	7	-8	3	13	45	58	8
0	2	10	1128	1169	5	0	1	11	80	114	9	3	6	11	26	11	17	-6	4	12	206	208	4	-7	3	13	93	104	6
1	2	10	398	415	5	1	1	11	556	536	2	4	6	11	324	355	5	-5	4	12	130	111	4	-6	3	13	82	78	5
2	2	10	197	194	7	2	1	11	129	122	6	5	6	11	125	92	9	-4	4	12	369	370	9	-5	3	13	175	153	10
3	2	10	277	269	4	3	1	11	177	125	2	-3	7	11	84	79	8	-3	4	12	267	284	6	-4	3	13	67	83	9
4	2	10	353	377	2	4	1	11	1189	1198	15	-2	7	11	267	280	4	-2	4	12	203	205	4	-3	3	13	452	485	5
5	2	10	106	47	4	5	1	11	722	742	4	-1	7	11	183	192	6	-1	4	12	53	31	4	-2	3	13	506	518	5
6	2	10	298	289	2	6	1	11	351	346	3	0	7	11	408	404	7	0	4	12	309	317	8	-1	3	13	400	414	2
7	2	10	103	70	5	7	1	11	87	47	6	1	7	11	50	44	8	1	4	12	345	326	3	0	3	13	770	769	11
8	2	10	117	130	7	8	1	11	331	330	3	2	7	11	140	115	20	2	4	12	320	299	5	1	3	13	781	800	6
9	2	10	267	262	4	9	1	11	420	412	4	3	7	11	211	210	11	3	4	12	261	267	3	2	3	13	130	133	9
-9	3	10	531	535	4	-9	2	11	156	118	4	-9	0	12	54	46	20	4	4	12	333	343	8	3	3	13	196	208	3
-8	3	10	342	358	4	-8	2	11	199	178	4	-8	0	12	89	65	8	5	4	12	163	176	3	4	3	13	278	261	2
-7	3	10	573	566	5	-7	2	11	214	222	3	-7	0	12	59	54	9	6	4	12	516	519	3	5	3	13	277	264	2
-6	3	10	1032	1055	12	-6	2	11	169	170	3	-6	0	12	381	393	4	7	4	12	395	419	5	6	3	13	54	39	5
-5	3	10	455	436	5	-5	2	11	419	412	7	-5	0	12	834	812	8	8	4	12	274	293	4	7	3	13	248	257	4
-4	3	10	61	30	4	-4	2	11	719	699	5	-4	0	12	169	188	3	-7	5	12	99	87	10	8	3	13	153	152	3
-3	3	10	144	100	6	-3	2	11	913	867	5	-3	0	12	1210	1151	9	-6	5	12	375	386	4	-8	4	13	243	207	4
-2	3	10	495	474	3	-2	2	11	68	74	12	-2	0	12	926	895	9	-5	5	12	138	152	4	-7	4	13	351	353	5
-1	3	10	114	112	3	-1	2	11	967	895	9	-1	0	12	213	249	2	-4	5	12	172	165	3	-6	4	13	284	282	8
0	3	10	250	248	2	0	2	11	413	413	6	0	0	12	1476	1521	14	-3	5	12	237	251	7	-5	4	13	69	61	7
1	3	10	876	849	5	1	2	11	358	336	2	1	0	12	54	44	4	-2	5	12	156	128	3	-4	4	13	355	352	3
2	3	10	858	845	6	2	2	11	997	953	7	2	0	12	786	762	4	-1	5	12	462	460	3	-3	4	13	126	112	3
3	3	10	234	244	3	3	2	11	928	897	5	3	0	12	931	908	4	0	5	12	281	288	5	-2	4	13	99	137	3
4	3	10	599	611	3	4	2	11	520	542	5	4	0	12	2312	2263	12	1	5	12	395	399	3	-1	4	13	463	475	6
5	3	10	193	179	4	5	2	11	605	623	3	5	0	12	304	302	3	2	5	12	428	447	4	0	4	13	430	428	3
6	3	10	687	676	8	6	2	11	149	149	2	6	0	12	23	32	22	3	5	12	199	203	4	1	4	13	433	445	6
7	3	10	240	228	7	7	2	11	181	187	3	7	0	12	496	495	6	4	5	12	142	142	5	2	4	13	214	219	3
8	3	10	500	511	4	8	2	11	820	817	5	8	0	12	294	325	8	5	5	12	399	399	4	3	4	13	101	64	4
-8	4	10	390	392	6	9	2	11	64	86	6	9	0	12	515	513	7	6	5	12	172	170	3	4	4	13	744	744	5
-7	4	10	382	397	4	-9	3	11	354	324	7	-9	1	12	160	158	6	7	5	12	303	321	5	5	4	13	117	110	4
-6	4	10	242	250	3	-8	3	11	96	76	5	-8	1	12	168	161	4	-5	6	12	222	195	4	6	4	13	349	352	3
-5	4	10	79	76	4	-7	3	11	141	90	5	-7	1	12	213	196	3	-4	6	12	60	67	7	7	4	13	107	64	15
-4	4	10	1111	1107	7	-6	3	11	285	265	3	-6	1	12	666	641	6	-3	6	12	345	348	4	8	4	13	248	233	6
-3	4	10	42	20	6	-5	3	11	33	20	12	-5	1	12	118	84	12	-2	6	12	77	90	5	-7	5	13	156	152	6
-2	4	10	248	263	2	-4	3	11	318	329	3	-4	1	12	90	99	4	-1	6	12	286	290	6	-6	5	13	409	403	4

-1 4 10 113 115 2 -3 3 11 84 70 3 -3 1 12 518 518 6 0 6 12 260 262 4 -5 5 13 416 417 5  
 0 4 10 427 393 11 -2 3 11 460 455 7 -2 1 12 1188 1179 6 1 6 12 86 96 5 -4 5 13 146 159 4  
 1 4 10 44 46 5 -1 3 11 119 116 5 -1 1 12 336 310 9 2 6 12 186 182 8 -3 5 13 576 589 4  
 2 4 10 175 168 9 0 3 11 313 313 8 0 1 12 334 346 9 3 6 12 285 294 4 -2 5 13 588 581 4  
 3 4 10 228 250 3 1 3 11 348 366 2 1 1 12 797 799 4 4 6 12 639 658 10 -1 5 13 258 256 4  
 4 4 10 194 180 3 2 3 11 608 625 5 2 1 12 150 160 1 5 6 12 75 78 7 0 5 13 445 424 4  
 5 4 10 283 268 3 3 3 11 391 408 4 3 1 12 939 960 4 -3 7 12 125 139 7 1 5 13 395 390 8  
 6 4 10 511 514 7 4 3 11 424 416 5 4 1 12 1249 1238 5 -2 7 12 349 329 5 2 5 13 503 492 4  
 7 4 10 138 134 9 5 3 11 356 358 2 5 1 12 168 130 2 -1 7 12 149 165 4 3 5 13 161 142 4  
 8 4 10 78 77 12 6 3 11 80 86 4 6 1 12 501 518 4 0 7 12 125 133 5 4 5 13 488 497 6  
 -7 5 10 146 129 5 7 3 11 363 382 3 7 1 12 208 223 4 1 7 12 296 296 6 5 5 13 102 87 5  
 -6 5 10 221 212 4 8 3 11 164 132 3 8 1 12 230 221 6 2 7 12 405 370 6 6 5 13 187 197 3  
 -5 5 10 134 128 4 -8 4 11 103 78 6 9 1 12 131 104 5 3 7 12 161 159 7 7 5 13 214 202 4  
 -4 5 10 28 34 12 -7 4 11 175 163 4 -9 2 12 139 107 5 -9 1 13 378 367 11 -5 6 13 93 62 11  
 -3 5 10 327 339 3 -6 4 11 171 168 3 -8 2 12 366 385 4 -8 1 13 149 124 4 -4 6 13 118 108 6  
 -2 5 10 676 686 4 -5 4 11 183 188 3 -7 2 12 58 55 7 -7 1 13 270 280 4 -3 6 13 379 376 6  
 -1 5 10 247 247 8 -4 4 11 306 282 4 -6 2 12 102 79 4 -6 1 13 705 703 6 -2 6 13 513 507 5  
 0 5 10 264 260 3 -3 4 11 302 295 3 -5 2 12 323 331 3 -5 1 13 830 845 13 -1 6 13 79 81 5  
 1 5 10 62 61 4 -2 4 11 645 674 6 -4 2 12 772 775 5 -4 1 13 273 287 6 0 6 13 304 330 5  
 2 5 10 99 94 5 -1 4 11 63 57 3 -3 2 12 822 842 5 -3 1 13 857 807 10 1 6 13 179 166 3  
 3 5 10 346 359 5 0 4 11 804 824 8 -2 2 12 99 106 2 -2 1 13 162 135 3 2 6 13 202 203 4  
 4 5 10 221 213 9 1 4 11 78 65 8 -1 2 12 172 150 17 -1 1 13 656 632 10 3 6 13 152 154 4  
 5 5 10 208 202 4 2 4 11 225 246 3 0 2 12 1498 1510 20 0 1 13 1430 1469 9 4 6 13 86 108 6  
 6 5 10 159 165 3 3 4 11 340 349 4 1 2 12 49 41 4 1 1 13 1044 1066 5 5 6 13 179 160 9  
 7 5 10 169 162 4 4 4 11 68 69 5 2 2 12 396 412 3 2 1 13 615 562 12 -3 7 13 188 181 6  
 -5 6 10 125 116 5 5 4 11 111 85 4 3 2 12 444 449 3 3 1 13 239 229 2 -2 7 13 90 64 12  
 -4 6 10 209 213 4 6 4 11 297 294 2 4 2 12 124 134 3 4 1 13 961 956 4 -1 7 13 260 262 4  
 -3 6 10 138 136 4 7 4 11 95 73 4 5 2 12 557 563 13 5 1 13 493 507 3 0 7 13 188 196 4  
 -2 6 10 178 164 3 8 4 11 218 215 4 6 2 12 203 219 6 6 1 13 80 70 4 1 7 13 337 340 6  
 -1 6 10 135 125 4 -7 5 11 199 180 5 7 2 12 54 95 6 7 1 13 305 315 3 2 7 13 139 128 9  
 0 6 10 82 80 4 -6 5 11 290 297 4 8 2 12 524 524 4 8 1 13 185 160 5 3 7 13 199 210 6  
 1 6 10 127 112 3 -5 5 11 194 187 3 9 2 12 47 46 8 9 1 13 218 223 4 -9 0 14 149 114 12  
 2 6 10 136 142 8 -4 5 11 37 67 9 -9 3 12 318 315 5 -9 2 13 245 247 9 -8 0 14 125 128 7  
 3 6 10 282 286 4 -3 5 11 258 260 3 -8 3 12 57 30 7 -8 2 13 538 539 5 -7 0 14 343 350 5  
 4 6 10 377 385 5 -2 5 11 390 386 3 -7 3 12 210 217 4 -7 2 13 315 298 4 -6 0 14 326 335 4  
 5 6 10 165 151 5 -1 5 11 149 148 3 -6 3 12 73 82 5 -6 2 13 124 131 3 -5 0 14 108 136 4  
 -3 7 10 260 252 6 0 5 11 332 338 3 -5 3 12 280 290 3 -5 2 13 179 181 3 -4 0 14 510 508 4  
 -2 7 10 332 334 6 1 5 11 603 591 4 -4 3 12 150 175 6 -4 2 13 527 551 4 -3 0 14 64 67 5  
 -1 7 10 84 41 13 2 5 11 406 402 10 -3 3 12 513 504 4 -3 2 13 160 109 4 -2 0 14 698 653 7  
 0 7 10 185 158 4 3 5 11 212 213 4 -2 3 12 1056 1050 10 -2 2 13 314 312 2 -1 0 14 213 245 3  
 1 7 10 176 191 4 4 5 11 470 462 5 -1 3 12 623 611 3 -1 2 13 430 450 7 0 0 14 4569 4764 43  
 2 7 10 232 223 10 5 5 11 485 480 4 0 3 12 868 845 6 0 2 13 1761 1698 9 1 0 14 310 357 3  
 3 7 10 53 63 11 6 5 11 409 422 5 1 3 12 184 170 3 1 2 13 422 403 6 2 0 14 107 93 2

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	0	14	159	151	2	2	5	14	399	408	4	2	4	15	448	440	3	3	2	16	614	622	11	8	1	17	217	202	3
4	0	14	364	405	2	3	5	14	236	246	4	3	4	15	349	353	4	4	2	16	649	659	4	9	1	17	92	93	6
5	0	14	294	272	3	4	5	14	206	215	5	4	4	15	101	43	5	5	2	16	223	226	3	-9	2	17	273	272	13
6	0	14	231	242	3	5	5	14	229	229	4	5	4	15	137	138	5	6	2	16	235	201	3	-8	2	17	552	561	6
7	0	14	918	885	8	6	5	14	267	280	4	6	4	15	419	408	3	7	2	16	195	159	4	-7	2	17	226	228	4
8	0	14	203	204	5	-5	6	14	175	171	4	7	4	15	415	403	5	8	2	16	195	199	4	-6	2	17	59	35	5
9	0	14	99	74	8	-4	6	14	260	268	5	-7	5	15	356	361	5	9	2	16	176	167	7	-5	2	17	125	116	7
-9	1	14	125	67	14	-3	6	14	208	205	4	-6	5	15	459	470	4	-8	3	16	649	645	6	-4	2	17	1157	1175	17
-8	1	14	188	183	6	-2	6	14	298	279	6	-5	5	15	230	228	4	-7	3	16	171	164	4	-3	2	17	872	852	12
-7	1	14	96	86	5	-1	6	14	130	137	4	-4	5	15	506	517	4	-6	3	16	746	742	12	-2	2	17	378	389	5
-6	1	14	413	427	5	0	6	14	959	973	8	-3	5	15	207	218	7	-5	3	16	284	304	10	-1	2	17	845	859	8
-5	1	14	427	415	9	1	6	14	157	158	3	-2	5	15	228	229	7	-4	3	16	1366	1333	16	0	2	17	833	842	6
-4	1	14	560	557	19	2	6	14	205	205	6	-1	5	15	378	364	7	-3	3	16	480	495	4	1	2	17	498	474	3
-3	1	14	1039	1049	6	3	6	14	155	159	4	0	5	15	686	671	5	-2	3	16	1132	1117	6	2	2	17	1050	1043	5
-2	1	14	353	357	2	4	6	14	99	68	8	1	5	15	83	75	5	-1	3	16	396	402	2	3	2	17	1328	1299	8
-1	1	14	1020	1057	6	5	6	14	127	135	5	2	5	15	508	501	5	0	3	16	335	348	2	4	2	17	352	327	5
0	1	14	1100	1149	6	-3	7	14	343	341	8	3	5	15	43	39	12	1	3	16	306	310	4	5	2	17	129	125	2
1	1	14	271	212	3	-2	7	14	430	398	5	4	5	15	226	213	4	2	3	16	472	471	5	6	2	17	1043	1048	11
2	1	14	821	784	8	-1	7	14	265	278	4	5	5	15	108	98	5	3	3	16	124	86	5	7	2	17	183	183	3
3	1	14	83	90	2	0	7	14	381	412	4	6	5	15	234	211	4	4	3	16	94	113	3	8	2	17	233	245	7
4	1	14	62	76	3	1	7	14	159	180	4	-5	6	15	65	43	8	5	3	16	111	78	3	-8	3	17	375	364	13
5	1	14	444	456	2	2	7	14	48	44	12	-4	6	15	205	225	5	6	3	16	56	58	10	-7	3	17	214	221	5
6	1	14	225	237	6	-9	1	15	552	559	6	-3	6	15	320	324	4	7	3	16	31	8	9	-6	3	17	178	149	4
7	1	14	366	370	3	-8	1	15	438	446	5	-2	6	15	329	338	4	8	3	16	108	105	4	-5	3	17	219	244	3
8	1	14	513	546	4	-7	1	15	201	194	4	-1	6	15	37	28	9	-8	4	16	148	150	6	-4	3	17	186	164	12
9	1	14	162	164	4	-6	1	15	132	133	4	0	6	15	104	108	6	-7	4	16	587	599	10	-3	3	17	107	123	3
-9	2	14	203	214	4	-5	1	15	428	430	3	1	6	15	147	149	6	-6	4	16	153	128	5	-2	3	17	542	559	5
-8	2	14	379	379	4	-4	1	15	1635	1630	19	2	6	15	244	252	6	-5	4	16	260	241	4	-1	3	17	71	58	7
-7	2	14	241	238	4	-3	1	15	784	773	5	3	6	15	288	273	11	-4	4	16	287	294	5	0	3	17	399	405	2
-6	2	14	161	172	3	-2	1	15	435	432	8	4	6	15	68	48	7	-3	4	16	213	216	6	1	3	17	179	165	2
-5	2	14	68	70	10	-1	1	15	149	91	3	5	6	15	130	112	10	-2	4	16	683	698	4	2	3	17	118	140	3
-4	2	14	820	839	5	0	1	15	1025	1071	5	-3	7	15	264	254	6	-1	4	16	588	588	5	3	3	17	34	31	30
-3	2	14	156	141	8	1	1	15	746	762	7	-2	7	15	149	143	5	0	4	16	286	243	16	4	3	17	213	213	3
-2	2	14	136	142	4	2	1	15	340	323	3	-1	7	15	178	183	4	1	4	16	455	467	3	5	3	17	529	547	3
-1	2	14	361	387	2	3	1	15	75	77	4	0	7	15	133	135	5	2	4	16	351	384	7	6	3	17	50	65	9
0	2	14	374	390	13	4	1	15	132	113	4	1	7	15	354	352	4	3	4	16	486	505	12	7	3	17	50	74	5
1	2	14	682	693	10	5	1	15	365	382	2	2	7	15	33	18	19	4	4	16	655	678	5	8	3	17	55	20	6
2	2	14	460	477	4	6	1	15	229	227	10	-9	0	16	76	78	10	5	4	16	220	221	4	-8	4	17	192	194	6
3	2	14	262	281	3	7	1	15	244	235	6	-8	0	16	275	277	6	6	4	16	639	635	5	-7	4	17	193	149	12
4	2	14	914	917	4	8	1	15	276	273	3	-7	0	16	627	640	8	7	4	16	173	181	3	-6	4	17	268	259	4
5	2	14	309	314	8	9	1	15	144	153	4	-6	0	16	230	232	4	-7	5	16	187	163	5	-5	4	17	229	220	6
6	2	14	779	798	4	-9	2	15	130	94	7	-5	0	16	415	424	5	-6	5	16	252	267	8	-4	4	17	507	529	4
7	2	14	245	238	3	-8	2	15	524	535	5	-4	0	16	2425	2375	23	-5	5	16	210	221	7	-3	4	17	158	155	3
8	2	14	203	209	3	-7	2	15	342	357	4	-3	0	16	81	73	5	-4	5	16	50	35	7	-2	4	17	320	320	3

9 2 14 223 227 5 -6 2 15 195 183 3 -2 0 16 750 747 6 -3 5 16 373 380 4 -1 4 17 102 82 3  
-8 3 14 76 69 7 -5 2 15 326 329 4 -1 0 16 438 386 4 -2 5 16 502 516 4 0 4 17 373 330 15  
-7 3 14 128 141 5 -4 2 15 1134 1119 10 0 0 16 213 135 3 -1 5 16 268 279 7 1 4 17 136 116 3  
-6 3 14 702 683 5 -3 2 15 704 714 5 1 0 16 1054 1007 8 0 5 16 173 168 3 2 4 17 248 231 9  
-5 3 14 792 795 9 -2 2 15 506 485 7 2 0 16 461 472 3 1 5 16 108 86 4 3 4 17 483 475 5  
-4 3 14 800 795 9 -1 2 15 213 209 4 3 0 16 1857 1842 9 2 5 16 331 337 4 4 4 17 116 123 18  
-3 3 14 152 131 3 0 2 15 1812 1802 9 4 0 16 458 496 3 3 5 16 41 22 9 5 4 17 474 493 5  
-2 3 14 964 932 5 1 2 15 206 187 2 5 0 16 254 247 3 4 5 16 120 95 5 6 4 17 190 176 4  
-1 3 14 149 122 2 2 2 15 640 644 4 6 0 16 280 302 3 5 5 16 114 114 5 7 4 17 493 507 4  
0 3 14 1745 1694 8 3 2 15 462 455 4 7 0 16 137 124 4 6 5 16 326 315 4 -7 5 17 76 69 8  
1 3 14 723 733 4 4 2 15 198 162 6 8 0 16 336 338 6 -5 6 16 151 145 5 -6 5 17 89 52 6  
2 3 14 930 921 7 5 2 15 87 70 3 9 0 16 139 131 7 -4 6 16 962 959 8 -5 5 17 531 524 5  
3 3 14 232 234 6 6 2 15 336 302 2 -9 1 16 293 274 9 -3 6 16 175 192 5 -4 5 17 354 356 4  
4 3 14 639 651 4 7 2 15 768 753 4 -8 1 16 601 610 17 -2 6 16 228 225 4 -3 5 17 201 214 5  
5 3 14 289 282 8 8 2 15 126 97 4 -7 1 16 548 561 5 -1 6 16 91 66 5 -2 5 17 544 535 4  
6 3 14 135 149 2 9 2 15 73 20 6 -6 1 16 179 179 4 0 6 16 201 189 6 -1 5 17 343 334 3  
7 3 14 137 114 4 -8 3 15 61 18 8 -5 1 16 666 667 5 1 6 16 273 280 7 0 5 17 443 441 4  
8 3 14 247 264 3 -7 3 15 327 344 4 -4 1 16 974 980 7 2 6 16 324 328 8 1 5 17 52 47 5  
-8 4 14 187 188 5 -6 3 15 153 136 4 -3 1 16 468 469 3 3 6 16 361 361 5 2 5 17 564 545 4  
-7 4 14 104 94 7 -5 3 15 342 359 3 -2 1 16 467 437 5 4 6 16 117 101 5 3 5 17 394 390 4  
-6 4 14 451 459 9 -4 3 15 565 559 10 -1 1 16 157 139 17 5 6 16 51 25 7 4 5 17 560 548 5  
-5 4 14 159 155 8 -3 3 15 408 435 5 0 1 16 151 140 6 -2 7 16 196 176 4 5 5 17 475 477 5  
-4 4 14 383 407 5 -2 3 15 340 338 3 1 1 16 441 454 3 -1 7 16 116 102 18 6 5 17 151 175 4  
-3 4 14 645 622 4 -1 3 15 347 366 2 2 1 16 909 899 13 0 7 16 117 111 5 -5 6 17 136 122 6  
-2 4 14 202 183 9 0 3 15 178 164 2 3 1 16 319 340 2 1 7 16 173 186 4 -4 6 17 265 277 5  
-1 4 14 162 138 2 1 3 15 201 176 4 4 1 16 487 513 2 2 7 16 176 182 6 -3 6 17 56 70 9  
0 4 14 577 595 13 2 3 15 295 314 3 5 1 16 103 66 3 -9 1 17 133 130 10 -2 6 17 96 90 5  
1 4 14 107 117 8 3 3 15 114 125 4 6 1 16 322 325 5 -8 1 17 813 833 8 -1 6 17 102 74 13  
2 4 14 488 493 4 4 3 15 274 281 3 7 1 16 342 357 3 -7 1 17 180 166 5 0 6 17 164 182 4  
3 4 14 564 564 5 5 3 15 301 310 7 8 1 16 193 184 3 -6 1 17 192 188 3 1 6 17 217 203 4  
4 4 14 451 460 4 6 3 15 167 206 6 9 1 16 170 179 4 -5 1 17 386 393 3 2 6 17 119 129 7  
5 4 14 151 141 3 7 3 15 94 87 8 -9 2 16 58 40 10 -4 1 17 640 653 5 3 6 17 593 609 6  
6 4 14 125 120 3 8 3 15 170 156 3 -8 2 16 332 339 7 -3 1 17 619 604 5 4 6 17 152 139 5  
7 4 14 331 331 7 -8 4 15 129 111 5 -7 2 16 129 154 5 -2 1 17 492 495 21 5 6 17 212 224 4  
-7 5 14 294 293 5 -7 4 15 165 151 6 -6 2 16 46 35 10 -1 1 17 503 512 8 -2 7 17 74 53 7  
-6 5 14 99 81 5 -6 4 15 272 282 4 -5 2 16 363 381 3 0 1 17 276 286 6 -1 7 17 119 120 10  
-5 5 14 403 413 4 -5 4 15 354 357 3 -4 2 16 149 181 4 1 1 17 391 410 2 0 7 17 150 152 6  
-4 5 14 77 62 12 -4 4 15 428 439 4 -3 2 16 603 616 4 2 1 17 751 747 12 1 7 17 56 66 7  
-3 5 14 335 330 4 -3 4 15 538 544 4 -2 2 16 255 257 4 3 1 17 542 533 3 2 7 17 103 106 13  
-2 5 14 425 439 3 -2 4 15 274 282 2 -1 2 16 106 109 2 4 1 17 281 273 3 -9 0 18 219 207 10  
-1 5 14 260 262 4 -1 4 15 225 219 3 0 2 16 1291 1293 7 5 1 17 430 433 9 -8 0 18 936 953 10  
0 5 14 200 200 3 0 4 15 1235 1252 7 1 2 16 517 516 8 6 1 17 100 83 3 -7 0 18 277 280 5  
1 5 14 633 628 4 1 4 15 59 63 4 2 2 16 917 903 7 7 1 17 135 120 3 -6 0 18 536 544 9

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	0	18	193	212	6	-4	5	18	218	211	6	-1	4	19	176	149	2	4	2	20	595	612	9	-3	2	21	274	279	7
-4	0	18	1033	1026	10	-3	5	18	71	68	5	0	4	19	210	207	9	5	2	20	355	350	4	-2	2	21	2194	2156	25
-3	0	18	156	181	4	-2	5	18	295	299	3	1	4	19	769	788	5	6	2	20	352	363	5	-1	2	21	155	121	15
-2	0	18	129	136	3	-1	5	18	23	24	12	2	4	19	438	422	4	7	2	20	74	56	4	0	2	21	699	638	18
-1	0	18	474	498	4	0	5	18	104	92	4	3	4	19	916	920	8	8	2	20	97	90	5	1	2	21	538	535	5
0	0	18	1575	1597	15	1	5	18	55	77	6	4	4	19	463	465	9	-8	3	20	311	308	7	2	2	21	1504	1515	9
1	0	18	700	698	6	2	5	18	366	369	3	5	4	19	217	206	5	-7	3	20	138	127	7	3	2	21	241	239	2
2	0	18	960	940	6	3	5	18	349	343	4	6	4	19	320	324	5	-6	3	20	528	526	12	4	2	21	208	200	7
3	0	18	290	282	2	4	5	18	239	248	4	7	4	19	281	279	3	-5	3	20	314	303	6	5	2	21	398	393	11
4	0	18	275	290	2	5	5	18	116	99	7	-6	5	19	185	181	5	-4	3	20	196	200	4	6	2	21	72	50	4
5	0	18	338	353	3	6	5	18	315	313	4	-5	5	19	596	581	10	-3	3	20	318	323	4	7	2	21	332	345	6
6	0	18	1740	1709	11	-5	6	18	62	27	8	-4	5	19	396	389	6	-2	3	20	328	354	3	8	2	21	208	218	6
7	0	18	575	595	5	-4	6	18	346	353	5	-3	5	19	112	92	4	-1	3	20	479	478	3	-8	3	21	329	324	9
8	0	18	100	75	7	-3	6	18	243	243	5	-2	5	19	692	677	7	0	3	20	1006	983	21	-7	3	21	79	69	8
9	0	18	201	215	9	-2	6	18	247	248	4	-1	5	19	127	122	4	1	3	20	371	349	3	-6	3	21	112	119	8
-9	1	18	303	304	13	-1	6	18	275	279	4	0	5	19	679	658	6	2	3	20	408	436	4	-5	3	21	216	226	8
-8	1	18	360	354	5	0	6	18	130	119	4	1	5	19	454	445	3	3	3	20	280	304	4	-4	3	21	149	144	3
-7	1	18	271	269	4	1	6	18	313	310	4	2	5	19	166	179	3	4	3	20	416	406	4	-3	3	21	191	194	3
-6	1	18	159	147	6	2	6	18	151	153	6	3	5	19	302	300	4	5	3	20	374	383	6	-2	3	21	50	77	5
-5	1	18	110	81	4	3	6	18	145	133	7	4	5	19	135	113	4	6	3	20	647	646	7	-1	3	21	67	59	3
-4	1	18	226	211	5	4	6	18	237	227	7	5	5	19	100	92	6	7	3	20	284	290	3	0	3	21	195	174	9
-3	1	18	209	217	2	5	6	18	114	120	5	6	5	19	130	136	5	8	3	20	435	457	4	1	3	21	140	127	8
-2	1	18	1108	1114	6	-2	7	18	184	178	6	-5	6	19	44	28	21	-7	4	20	195	158	8	2	3	21	66	73	12
-1	1	18	218	205	10	-1	7	18	310	295	5	-4	6	19	183	194	6	-6	4	20	118	105	6	3	3	21	56	25	6
0	1	18	650	639	7	0	7	18	184	191	4	-3	6	19	145	100	6	-5	4	20	334	332	9	4	3	21	278	273	8
1	1	18	342	347	6	1	7	18	179	175	4	-2	6	19	160	158	4	-4	4	20	554	540	5	5	3	21	119	107	13
2	1	18	1029	1045	5	2	7	18	342	358	6	-1	6	19	654	642	9	-3	4	20	91	90	5	6	3	21	286	274	3
3	1	18	585	600	5	-9	1	19	198	182	5	0	6	19	207	215	5	-2	4	20	533	514	9	7	3	21	205	207	5
4	1	18	122	110	3	-8	1	19	82	85	7	1	6	19	233	237	4	-1	4	20	825	810	4	8	3	21	118	82	5
5	1	18	323	341	2	-7	1	19	167	149	5	2	6	19	242	251	6	0	4	20	1307	1281	7	-7	4	21	531	549	7
6	1	18	525	523	3	-6	1	19	213	195	12	3	6	19	95	105	6	1	4	20	199	143	3	-6	4	21	92	104	8
7	1	18	393	405	4	-5	1	19	530	532	4	4	6	19	256	252	6	2	4	20	952	935	7	-5	4	21	272	282	9
8	1	18	137	119	4	-4	1	19	418	422	3	-2	7	19	202	215	9	3	4	20	258	246	6	-4	4	21	232	206	19
9	1	18	127	137	5	-3	1	19	220	235	7	-1	7	19	209	199	6	4	4	20	254	206	10	-3	4	21	541	546	4
-9	2	18	365	368	5	-2	1	19	1057	1082	8	0	7	19	153	146	5	5	4	20	753	765	7	-2	4	21	842	845	9
-8	2	18	85	64	18	-1	1	19	469	474	3	1	7	19	148	135	6	6	4	20	139	126	5	-1	4	21	985	999	5
-7	2	18	235	230	4	0	1	19	837	803	4	-9	0	20	343	325	6	7	4	20	393	399	7	0	4	21	453	451	3
-6	2	18	249	256	4	1	1	19	510	522	3	-8	0	20	656	653	8	-6	5	20	202	204	16	1	4	21	339	348	3
-5	2	18	165	172	3	2	1	19	381	302	12	-7	0	20	141	161	6	-5	5	20	65	43	10	2	4	21	764	770	5
-4	2	18	453	423	6	3	1	19	148	115	11	-6	0	20	375	368	8	-4	5	20	189	181	6	3	4	21	287	287	4
-3	2	18	50	67	18	4	1	19	121	124	2	-5	0	20	68	85	11	-3	5	20	225	241	4	4	4	21	695	699	5
-2	2	18	392	398	4	5	1	19	254	265	8	-4	0	20	243	267	4	-2	5	20	203	201	3	5	4	21	133	125	12
-1	2	18	343	347	19	6	1	19	680	678	5	-3	0	20	467	484	4	-1	5	20	192	190	3	6	4	21	83	58	8
0	2	18	928	935	6	7	1	19	158	139	3	-2	0	20	1553	1521	12	0	5	20	88	102	5	7	4	21	74	51	8

1 2 18 146 123 3 8 1 19 261 263 6 -1 0 20 660 649 7 1 5 20 210 207 3 -6 5 21 348 333 12  
2 2 18 305 308 3 9 1 19 153 109 4 0 0 20 1126 1096 11 2 5 20 588 586 4 -5 5 21 165 166 5  
3 2 18 141 96 3 -9 2 19 245 211 5 1 0 20 39 23 6 3 5 20 55 40 7 -4 5 21 602 587 5  
4 2 18 509 501 3 -8 2 19 342 369 10 2 0 20 3355 3393 22 4 5 20 408 406 4 -3 5 21 152 146 8  
5 2 18 420 430 3 -7 2 19 396 384 8 3 0 20 1131 1136 6 5 5 20 37 30 11 -2 5 21 288 295 7  
6 2 18 104 86 8 -6 2 19 187 218 4 4 0 20 117 132 3 6 5 20 167 162 5 -1 5 21 218 215 3  
7 2 18 454 461 3 -5 2 19 198 203 6 5 0 20 705 713 4 -5 6 20 82 77 8 0 5 21 136 111 4  
8 2 18 148 150 4 -4 2 19 1099 1094 15 6 0 20 191 181 3 -4 6 20 61 32 18 1 5 21 35 31 7  
-8 3 18 562 560 7 -3 2 19 435 434 7 7 0 20 255 273 3 -3 6 20 602 605 6 2 5 21 322 343 4  
-7 3 18 183 191 4 -2 2 19 557 567 4 8 0 20 715 725 7 -2 6 20 43 17 8 3 5 21 166 150 9  
-6 3 18 677 674 7 -1 2 19 392 384 6 9 0 20 107 108 14 -1 6 20 142 144 4 4 5 21 112 144 19  
-5 3 18 149 157 3 0 2 19 891 853 6 -9 1 20 135 100 16 0 6 20 357 361 4 5 5 21 266 268 4  
-4 3 18 153 106 4 1 2 19 294 279 9 -8 1 20 141 115 5 1 6 20 153 152 4 6 5 21 83 58 6  
-3 3 18 155 183 3 2 2 19 2119 2055 11 -7 1 20 235 242 6 2 6 20 794 837 9 -5 6 21 510 502 11  
-2 3 18 630 629 3 3 2 19 359 396 3 -6 1 20 467 471 9 3 6 20 427 458 7 -4 6 21 263 274 13  
-1 3 18 490 460 3 4 2 19 179 176 3 -5 1 20 216 231 3 4 6 20 143 142 7 -3 6 21 151 153 4  
0 3 18 226 252 3 5 2 19 167 140 2 -4 1 20 194 194 3 -1 7 20 130 100 6 -2 6 21 154 161 4  
1 3 18 232 211 2 6 2 19 481 508 4 -3 1 20 118 105 2 0 7 20 349 334 7 -1 6 21 271 240 16  
2 3 18 260 286 3 7 2 19 240 218 4 -2 1 20 1311 1347 13 1 7 20 399 372 5 0 6 21 218 221 4  
3 3 18 54 63 7 8 2 19 115 120 8 -1 1 20 276 281 2 -9 1 21 332 324 5 1 6 21 338 346 4  
4 3 18 458 447 6 -8 3 19 206 161 6 0 1 20 741 724 4 -8 1 21 225 235 5 2 6 21 386 416 7  
5 3 18 261 250 3 -7 3 19 102 114 6 1 1 20 478 489 4 -7 1 21 170 166 4 3 6 21 282 261 6  
6 3 18 58 64 4 -6 3 19 346 331 5 2 1 20 1387 1396 7 -6 1 21 308 300 14 4 6 21 58 43 9  
7 3 18 228 230 6 -5 3 19 95 86 5 3 1 20 624 654 15 -5 1 21 138 141 3 -1 7 21 250 256 9  
8 3 18 285 286 3 -4 3 19 517 527 5 4 1 20 134 139 2 -4 1 21 312 303 5 0 7 21 186 172 6  
-8 4 18 87 88 12 -3 3 19 126 120 3 5 1 20 223 224 2 -3 1 21 346 361 2 1 7 21 225 227 5  
-7 4 18 99 87 11 -2 3 19 83 104 3 6 1 20 154 139 8 -2 1 21 602 546 37 -9 0 22 123 124 8  
-6 4 18 580 590 7 -1 3 19 175 182 14 7 1 20 529 521 4 -1 1 21 334 355 3 -8 0 22 31 51 30  
-5 4 18 381 392 12 0 3 19 368 391 4 8 1 20 99 108 7 0 1 21 834 821 4 -7 0 22 827 852 12  
-4 4 18 125 126 10 1 3 19 735 770 4 9 1 20 397 365 4 1 1 21 174 188 2 -6 0 22 1241 1212 18  
-3 4 18 371 370 5 2 3 19 50 100 5 -9 2 20 193 209 8 2 1 21 1174 1167 6 -5 0 22 406 403 8  
-2 4 18 207 220 14 3 3 19 94 88 14 -8 2 20 137 109 6 3 1 21 198 144 9 -4 0 22 46 30 9  
-1 4 18 365 358 9 4 3 19 179 189 3 -7 2 20 209 201 5 4 1 21 166 184 3 -3 0 22 398 424 4  
0 4 18 1255 1252 6 5 3 19 83 60 4 -6 2 20 97 77 12 5 1 21 217 202 7 -2 0 22 3834 3847 30  
1 4 18 197 193 3 6 3 19 88 88 6 -5 2 20 68 71 6 6 1 21 178 174 2 -1 0 22 1159 1179 11  
2 4 18 636 620 4 7 3 19 61 23 7 -4 2 20 982 1000 6 7 1 21 504 500 4 0 0 22 264 267 4  
3 4 18 339 336 7 8 3 19 111 52 20 -3 2 20 293 296 11 8 1 21 136 134 4 1 0 22 135 139 3  
4 4 18 667 653 5 -7 4 19 161 158 6 -2 2 20 308 336 4 -9 2 21 108 85 7 2 0 22 780 786 5  
5 4 18 232 218 5 -6 4 19 311 301 10 -1 2 20 707 731 4 -8 2 21 495 471 13 3 0 22 745 767 5  
6 4 18 546 547 6 -5 4 19 290 296 5 0 2 20 1206 1211 12 -7 2 21 605 602 12 4 0 22 1170 1149 6  
7 4 18 149 94 5 -4 4 19 493 501 8 1 2 20 594 595 6 -6 2 21 160 179 13 5 0 22 372 362 3  
-6 5 18 322 344 7 -3 4 19 439 442 6 2 2 20 732 740 16 -5 2 21 231 202 3 6 0 22 669 649 5  
-5 5 18 192 189 4 -2 4 19 146 150 7 3 2 20 405 410 6 -4 2 21 729 704 5 7 0 22 327 350 4



Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	0	22	727	712	8	1	6	22	183	178	4	-1	6	23	212	217	4	5	4	24	229	234	3	5	4	25	349	367	4
-9	1	22	97	65	7	2	6	22	240	235	9	0	6	23	95	83	8	6	4	24	525	548	10	6	4	25	163	132	4
-8	1	22	89	88	6	3	6	22	146	130	10	1	6	23	84	69	9	7	4	24	267	268	11	7	4	25	119	99	6
-7	1	22	115	110	5	4	6	22	315	336	5	2	6	23	343	347	5	-6	5	24	418	425	5	-6	5	25	108	82	7
-6	1	22	467	487	5	0	7	22	485	468	5	3	6	23	55	58	12	-5	5	24	51	76	21	-5	5	25	96	75	11
-5	1	22	196	200	5	-9	1	23	306	309	5	4	6	23	247	244	4	-4	5	24	208	233	11	-4	5	25	171	179	5
-4	1	22	282	284	2	-8	1	23	52	41	8	-9	0	24	266	248	6	-3	5	24	195	202	10	-3	5	25	208	205	3
-3	1	22	140	138	4	-7	1	23	125	116	5	-8	0	24	329	322	6	-2	5	24	340	356	9	-2	5	25	459	459	4
-2	1	22	1547	1579	27	-6	1	23	567	554	9	-7	0	24	426	410	9	-1	5	24	224	233	6	-1	5	25	133	115	4
-1	1	22	370	393	3	-5	1	23	346	351	4	-6	0	24	1620	1612	22	0	5	24	328	330	3	0	5	25	115	132	4
0	1	22	219	164	12	-4	1	23	221	224	3	-5	0	24	78	49	11	1	5	24	72	62	5	1	5	25	684	663	5
1	1	22	325	327	7	-3	1	23	389	407	3	-4	0	24	495	512	5	2	5	24	166	162	7	2	5	25	113	100	4
2	1	22	850	843	5	-2	1	23	812	755	8	-3	0	24	934	928	8	3	5	24	236	222	7	3	5	25	712	715	7
3	1	22	944	951	5	-1	1	23	118	82	4	-2	0	24	101	102	4	4	5	24	241	239	7	4	5	25	447	472	6
4	1	22	276	280	8	0	1	23	187	100	11	-1	0	24	800	819	8	5	5	24	148	142	5	5	5	25	380	354	5
5	1	22	588	589	7	1	1	23	114	105	3	0	0	24	958	949	9	-4	6	24	224	226	7	-4	6	25	156	159	11
6	1	22	73	34	7	2	1	23	561	549	3	1	0	24	431	471	4	-3	6	24	40	41	10	-3	6	25	233	225	5
7	1	22	204	193	6	3	1	23	945	954	16	2	0	24	383	397	3	-2	6	24	235	232	4	-2	6	25	223	226	4
8	1	22	79	84	5	4	1	23	285	286	4	3	0	24	177	199	3	-1	6	24	149	144	4	-1	6	25	62	57	11
-9	2	22	65	84	16	5	1	23	915	911	4	4	0	24	1713	1682	10	0	6	24	152	155	4	0	6	25	302	304	6
-8	2	22	461	470	7	6	1	23	156	149	6	5	0	24	771	756	5	1	6	24	417	412	4	1	6	25	252	265	5
-7	2	22	313	317	5	7	1	23	373	380	3	6	0	24	65	80	6	2	6	24	88	105	5	2	6	25	632	638	8
-6	2	22	204	207	8	8	1	23	412	420	4	7	0	24	275	284	4	3	6	24	90	88	10	3	6	25	239	259	6
-5	2	22	541	572	4	-8	2	23	237	203	7	8	0	24	444	434	7	4	6	24	409	415	5	4	6	25	116	104	13
-4	2	22	887	909	15	-7	2	23	157	171	5	-9	1	24	260	263	12	-9	1	25	74	59	12	-9	0	26	88	50	10
-3	2	22	235	231	5	-6	2	23	1001	988	7	-8	1	24	62	38	11	-8	1	25	44	18	13	-8	0	26	72	60	11
-2	2	22	956	978	28	-5	2	23	428	444	4	-7	1	24	35	45	11	-7	1	25	360	355	4	-7	0	26	486	464	9
-1	2	22	126	138	2	-4	2	23	522	490	13	-6	1	24	714	724	7	-6	1	25	291	211	4	-6	0	26	448	449	9
0	2	22	1042	1060	7	-3	2	23	457	474	7	-5	1	24	125	101	4	-5	1	25	130	126	4	-5	0	26	310	338	5
1	2	22	541	541	4	-2	2	23	1159	1185	11	-4	1	24	386	408	3	-4	1	25	178	145	8	-4	0	26	48	57	8
2	2	22	452	438	3	-1	2	23	499	516	5	-3	1	24	250	246	2	-3	1	25	511	552	8	-3	0	26	181	190	4
3	2	22	125	137	6	0	2	23	362	308	17	-2	1	24	1375	1381	19	-2	1	25	1039	1033	7	-2	0	26	386	413	4
4	2	22	221	200	6	1	2	23	323	287	6	-1	1	24	248	247	3	-1	1	25	210	170	3	-1	0	26	415	403	5
5	2	22	363	368	6	2	2	23	886	905	5	0	1	24	702	696	4	0	1	25	527	558	10	0	0	26	1669	1678	13
6	2	22	211	219	3	3	2	23	764	741	4	1	1	24	417	444	14	1	1	25	774	766	5	1	0	26	669	701	6
7	2	22	70	74	6	4	2	23	497	497	3	2	1	24	139	110	4	2	1	25	194	149	11	2	0	26	109	135	4
8	2	22	166	63	9	5	2	23	595	585	8	3	1	24	377	341	7	3	1	25	669	676	7	3	0	26	249	257	3
-8	3	22	111	106	8	6	2	23	437	450	3	4	1	24	204	217	3	4	1	25	1116	1105	23	4	0	26	208	220	3
-7	3	22	252	253	5	7	2	23	367	384	7	5	1	24	203	161	7	5	1	25	477	500	4	5	0	26	837	831	5
-6	3	22	196	204	12	8	2	23	967	931	6	6	1	24	295	299	3	6	1	25	337	331	3	6	0	26	40	28	9
-5	3	22	680	689	7	-8	3	23	89	51	14	7	1	24	140	140	3	7	1	25	229	234	5	7	0	26	228	226	4
-4	3	22	413	418	4	-7	3	23	93	81	7	8	1	24	674	678	5	8	1	25	434	432	4	8	0	26	233	232	6
-3	3	22	372	363	4	-6	3	23	114	93	8	-8	2	24	422	438	6	-8	2	25	180	126	5	-9	1	26	88	78	12
-2	3	22	630	672	4	-5	3	23	98	57	6	-7	2	24	91	66	10	-7	2	25	78	81	8	-8	1	26	245	269	4

-1 3 22 74 83 5 -4 3 23 93 78 10 -6 2 24 464 477 4 -6 2 25 238 246 4 -7 1 26 247 238 4  
 0 3 22 506 509 4 -3 3 23 58 70 10 -5 2 24 154 148 5 -5 2 25 189 198 3 -6 1 26 984 996 9  
 1 3 22 393 394 3 -2 3 23 105 115 3 -4 2 24 836 856 6 -4 2 25 645 639 4 -5 1 26 262 260 10  
 2 3 22 311 312 9 -1 3 23 159 157 2 -3 2 24 296 296 2 -3 2 25 362 336 5 -4 1 26 452 466 3  
 3 3 22 606 612 6 0 3 23 897 921 9 -2 2 24 183 144 5 -2 2 25 838 863 5 -3 1 26 139 106 4  
 4 3 22 428 432 9 1 3 23 76 93 4 -1 2 24 97 93 13 -1 2 25 394 396 3 -2 1 26 238 183 22  
 5 3 22 706 706 13 2 3 23 191 194 4 0 2 24 629 638 15 0 2 25 1123 1121 7 -1 1 26 690 705 13  
 6 3 22 546 545 7 3 3 23 223 231 4 1 2 24 665 674 4 1 2 25 1128 1120 7 0 1 26 513 494 9  
 7 3 22 168 156 4 4 3 23 128 112 5 2 2 24 430 431 3 2 2 25 731 722 13 1 1 26 274 224 3  
 8 3 22 459 456 9 5 3 23 194 191 10 3 2 24 136 124 9 3 2 25 494 496 4 2 1 26 652 664 5  
 -7 4 22 185 150 6 6 3 23 155 119 4 4 2 24 153 160 12 4 2 25 819 800 5 3 1 26 160 146 4  
 -6 4 22 445 454 15 7 3 23 64 46 11 5 2 24 176 155 7 5 2 25 383 381 6 4 1 26 1413 1412 7  
 -5 4 22 571 563 6 -7 4 23 366 369 6 6 2 24 320 322 3 6 2 25 132 111 3 5 1 26 245 285 12  
 -4 4 22 859 862 8 -6 4 23 649 678 7 7 2 24 47 44 6 7 2 25 55 53 6 6 1 26 306 321 3  
 -3 4 22 254 249 8 -5 4 23 478 491 13 8 2 24 309 286 4 8 2 25 220 193 4 7 1 26 144 129 3  
 -2 4 22 1150 1147 11 -4 4 23 135 84 6 -8 3 24 55 41 13 -8 3 25 88 78 10 8 1 26 70 57 6  
 -1 4 22 184 165 3 -3 4 23 181 187 3 -7 3 24 427 414 9 -7 3 25 141 114 7 -8 2 26 327 335 11  
 0 4 22 727 698 5 -2 4 23 733 757 4 -6 3 24 299 320 9 -6 3 25 157 158 4 -7 2 26 49 18 11  
 1 4 22 437 439 10 -1 4 23 358 375 4 -5 3 24 336 331 4 -5 3 25 135 128 4 -6 2 26 220 218 4  
 2 4 22 262 252 3 0 4 23 807 803 4 -4 3 24 253 242 5 -4 3 25 509 537 5 -5 2 26 70 54 6  
 3 4 22 413 410 4 1 4 23 226 220 3 -3 3 24 240 246 3 -3 3 25 96 91 4 -4 2 26 524 536 19  
 4 4 22 99 75 6 2 4 23 134 135 3 -2 3 24 138 180 3 -2 3 25 127 136 3 -3 2 26 429 435 6  
 5 4 22 496 479 5 3 4 23 70 42 6 -1 3 24 242 254 3 -1 3 25 82 69 7 -2 2 26 404 419 3  
 6 4 22 170 157 4 4 4 23 159 156 5 0 3 24 381 362 3 0 3 25 63 72 5 -1 2 26 172 157 2  
 7 4 22 345 349 5 5 4 23 569 571 5 1 3 24 892 904 5 1 3 25 533 549 7 0 2 26 463 482 4  
 -6 5 22 122 104 6 6 4 23 181 180 4 2 3 24 765 746 6 2 3 25 204 209 4 1 2 26 345 321 3  
 -5 5 22 45 35 10 7 4 23 175 163 5 3 3 24 178 186 4 3 3 25 43 19 9 2 2 26 514 519 4  
 -4 5 22 168 148 5 -6 5 23 190 198 11 4 3 24 535 542 5 4 3 25 452 468 16 3 2 26 105 72 5  
 -3 5 22 108 103 4 -5 5 23 144 135 5 5 3 24 357 367 4 5 3 25 371 371 6 4 2 26 304 306 5  
 -2 5 22 565 563 6 -4 5 23 270 271 6 6 3 24 327 323 10 6 3 25 130 118 4 5 2 26 122 106 4  
 -1 5 22 140 142 4 -3 5 23 142 123 3 7 3 24 345 351 4 7 3 25 299 299 4 6 2 26 250 257 3  
 0 5 22 470 480 4 -2 5 23 275 290 3 -7 4 24 315 323 6 -7 4 25 71 73 10 7 2 26 53 54 6  
 1 5 22 175 167 5 -1 5 23 56 27 5 -6 4 24 586 592 7 -6 4 25 242 239 5 8 2 26 339 340 4  
 2 5 22 121 139 8 0 5 23 323 324 11 -5 4 24 196 188 5 -5 4 25 153 148 5 -8 3 26 80 75 10  
 3 5 22 237 242 4 1 5 23 307 311 3 -4 4 24 768 781 8 -4 4 25 282 265 4 -7 3 26 149 115 7  
 4 5 22 54 70 6 2 5 23 272 273 3 -3 4 24 204 192 8 -3 4 25 457 452 8 -6 3 26 148 125 4  
 5 5 22 133 104 15 3 5 23 358 355 8 -2 4 24 162 127 4 -2 4 25 545 556 4 -5 3 26 328 337 4  
 6 5 22 220 228 9 4 5 23 175 187 4 -1 4 24 221 213 3 -1 4 25 169 165 3 -4 3 26 133 124 4  
 -4 6 22 348 352 5 5 5 23 564 558 5 0 4 24 385 362 3 0 4 25 396 416 6 -3 3 26 609 631 4  
 -3 6 22 99 81 5 6 5 23 246 245 5 1 4 24 593 572 5 1 4 25 372 370 4 -2 3 26 675 660 5  
 -2 6 22 804 815 6 -4 6 23 141 136 9 2 4 24 118 108 4 2 4 25 238 246 5 -1 3 26 248 245 3  
 -1 6 22 258 272 4 -3 6 23 262 262 4 3 4 24 365 377 4 3 4 25 171 156 6 0 3 26 531 514 3  
 0 6 22 232 232 5 -2 6 23 379 373 4 4 4 24 237 251 4 4 4 25 184 183 4 1 3 26 197 203 7

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	3	26	533	526	4	5	3	27	165	148	3	-7	3	28	142	134	7	0	3	29	110	78	5	5	2	30	63	4	6
3	3	26	453	449	5	6	3	27	187	196	5	-6	3	28	423	424	8	1	3	29	252	248	9	6	2	30	67	65	6
4	3	26	1011	1004	8	7	3	27	181	125	13	-5	3	28	341	347	4	2	3	29	262	264	3	7	2	30	61	30	8
5	3	26	590	607	4	-7	4	27	320	312	8	-4	3	28	607	621	5	3	3	29	95	93	11	-7	3	30	302	287	6
6	3	26	58	35	6	-6	4	27	572	562	9	-3	3	28	178	186	6	4	3	29	77	74	7	-6	3	30	418	443	4
7	3	26	534	539	6	-5	4	27	189	177	10	-2	3	28	446	438	4	5	3	29	133	147	5	-5	3	30	71	32	7
-7	4	26	210	169	9	-4	4	27	402	406	4	-1	3	28	293	285	4	6	3	29	126	98	6	-4	3	30	1204	1215	15
-6	4	26	164	141	5	-3	4	27	186	195	5	0	3	28	1450	1456	8	7	3	29	195	172	9	-3	3	30	378	395	6
-5	4	26	162	153	7	-2	4	27	406	409	5	1	3	28	661	665	4	-7	4	29	331	337	8	-2	3	30	1119	1115	7
-4	4	26	573	572	6	-1	4	27	207	205	12	2	3	28	806	805	5	-6	4	29	454	461	6	-1	3	30	174	162	3
-3	4	26	260	248	3	0	4	27	161	159	3	3	3	28	580	564	5	-5	4	29	348	330	14	0	3	30	224	217	7
-2	4	26	110	103	14	1	4	27	360	377	3	4	3	28	541	545	6	-4	4	29	252	257	4	1	3	30	265	266	6
-1	4	26	148	158	3	2	4	27	63	34	5	5	3	28	134	130	4	-3	4	29	134	122	6	2	3	30	428	432	8
0	4	26	118	106	3	3	4	27	113	111	5	6	3	28	215	226	4	-2	4	29	197	173	4	3	3	30	1246	1210	9
1	4	26	261	286	5	4	4	27	287	277	4	7	3	28	784	779	10	-1	4	29	136	108	4	4	3	30	176	187	4
2	4	26	684	681	10	5	4	27	85	82	6	-7	4	28	274	298	8	0	4	29	136	123	3	5	3	30	165	164	4
3	4	26	308	300	4	6	4	27	153	134	5	-6	4	28	266	240	5	1	4	29	46	29	7	6	3	30	437	439	10
4	4	26	429	429	4	-6	5	27	385	397	5	-5	4	28	88	48	11	2	4	29	157	150	4	7	3	30	152	122	5
5	4	26	159	144	4	-5	5	27	390	398	8	-4	4	28	117	99	5	3	4	29	97	65	14	-6	4	30	343	327	8
6	4	26	305	316	4	-4	5	27	116	127	7	-3	4	28	71	68	7	4	4	29	185	151	4	-5	4	30	447	450	5
-6	5	26	161	158	5	-3	5	27	464	486	5	-2	4	28	754	758	5	5	4	29	78	62	5	-4	4	30	219	201	4
-5	5	26	121	112	12	-2	5	27	512	508	4	-1	4	28	537	538	5	6	4	29	308	305	8	-3	4	30	363	368	8
-4	5	26	312	307	4	-1	5	27	422	427	6	0	4	28	325	322	3	-5	5	29	182	177	8	-2	4	30	580	593	5
-3	5	26	147	153	7	0	5	27	484	509	5	1	4	28	178	187	3	-4	5	29	384	418	5	-1	4	30	213	216	7
-2	5	26	226	220	3	1	5	27	381	369	8	2	4	28	454	466	5	-3	5	29	156	160	5	0	4	30	80	98	4
-1	5	26	362	360	4	2	5	27	362	351	4	3	4	28	124	140	5	-2	5	29	98	76	5	1	4	30	67	52	5
0	5	26	182	198	8	3	5	27	312	331	4	4	4	28	455	469	5	-1	5	29	299	313	3	2	4	30	230	245	5
1	5	26	349	332	4	4	5	27	376	392	5	5	4	28	264	275	4	0	5	29	454	463	4	3	4	30	430	429	8
2	5	26	164	173	3	5	5	27	171	142	11	6	4	28	164	149	5	1	5	29	274	248	4	4	4	30	636	644	6
3	5	26	141	150	5	-4	6	27	333	340	23	-5	5	28	356	353	5	2	5	29	205	216	4	5	4	30	59	27	6
4	5	26	164	161	8	-3	6	27	79	85	7	-4	5	28	128	108	5	3	5	29	41	41	10	6	4	30	310	322	4
5	5	26	387	385	5	-2	6	27	459	467	5	-3	5	28	278	268	5	4	5	29	219	217	4	-5	5	30	73	70	7
-4	6	26	63	78	12	-1	6	27	278	270	5	-2	5	28	285	293	5	5	5	29	142	111	7	-4	5	30	191	181	4
-3	6	26	283	270	5	0	6	27	112	94	9	-1	5	28	96	89	7	-3	6	29	109	96	7	-3	5	30	172	161	5
-2	6	26	75	100	6	1	6	27	72	69	6	0	5	28	247	249	3	-2	6	29	251	240	5	-2	5	30	113	133	17
-1	6	26	112	98	5	2	6	27	211	203	5	1	5	28	433	440	4	-1	6	29	136	117	5	-1	5	30	128	120	4
0	6	26	507	523	5	3	6	27	43	11	10	2	5	28	48	56	7	0	6	29	380	353	13	0	5	30	121	123	8
1	6	26	70	40	7	-8	0	28	48	56	11	3	5	28	146	151	4	1	6	29	149	118	5	1	5	30	64	35	14
2	6	26	378	367	11	-7	0	28	58	92	11	4	5	28	52	62	8	2	6	29	175	188	6	2	5	30	243	260	3
3	6	26	115	95	6	-6	0	28	49	37	12	5	5	28	99	80	7	3	6	29	206	190	5	3	5	30	68	67	6
-8	1	27	97	88	6	-5	0	28	282	283	5	-3	6	28	200	197	5	-8	0	30	811	823	9	4	5	30	58	65	7
-7	1	27	76	94	6	-4	0	28	935	944	9	-2	6	28	304	272	5	-7	0	30	109	96	8	5	5	30	184	207	6
-6	1	27	523	504	12	-3	0	28	230	232	4	-1	6	28	145	131	4	-6	0	30	586	583	7	-3	6	30	240	245	7
-5	1	27	691	701	14	-2	0	28	417	441	4	0	6	28	408	427	5	-5	0	30	390	396	6	-2	6	30	249	256	5

-4 1 27 137 110 3 -1 0 28 702 711 7 1 6 28 378 395 5 -4 0 30 598 605 6 -1 6 30 194 203 4  
-3 1 27 423 422 8 0 0 28 704 692 6 2 6 28 215 216 4 -3 0 30 627 650 6 0 6 30 377 386 11  
-2 1 27 419 421 9 1 0 28 365 381 4 3 6 28 231 241 7 -2 0 30 588 609 7 1 6 30 287 318 5  
-1 1 27 615 608 4 2 0 28 132 171 3 -8 1 29 237 229 4 -1 0 30 539 563 6 2 6 30 80 80 6  
0 1 27 1452 1440 12 3 0 28 274 285 3 -7 1 29 122 87 8 0 0 30 763 770 6 -8 1 31 844 847 7  
1 1 27 764 791 4 4 0 28 134 147 4 -6 1 29 276 288 5 1 0 30 697 685 6 -7 1 31 181 147 5  
2 1 27 315 305 2 5 0 28 1034 1001 8 -5 1 29 168 136 6 2 0 30 97 103 4 -6 1 31 200 187 5  
3 1 27 424 448 6 6 0 28 164 179 3 -4 1 29 1437 1431 10 3 0 30 1672 1695 11 -5 1 31 80 50 8  
4 1 27 1049 1036 11 7 0 28 870 842 7 -3 1 29 272 284 6 4 0 30 353 367 4 -4 1 31 553 561 4  
5 1 27 342 366 3 8 0 28 351 340 7 -2 1 29 805 838 6 5 0 30 321 326 4 -3 1 31 205 174 3  
6 1 27 204 202 3 -8 1 28 102 93 6 -1 1 29 164 159 3 6 0 30 467 450 4 -2 1 31 208 228 3  
7 1 27 150 143 5 -7 1 28 125 112 5 0 1 29 1013 994 6 7 0 30 176 185 5 -1 1 31 708 710 5  
8 1 27 177 172 4 -6 1 28 204 187 8 1 1 29 262 274 4 8 0 30 60 67 10 0 1 31 455 477 4  
-8 2 27 288 280 5 -5 1 28 415 418 9 2 1 29 163 160 3 -8 1 30 478 478 19 1 1 31 314 315 3  
-7 2 27 321 336 5 -4 1 28 502 476 6 3 1 29 469 470 7 -7 1 30 488 505 6 2 1 31 560 556 9  
-6 2 27 215 208 4 -3 1 28 411 436 3 4 1 29 59 77 5 -6 1 30 240 237 5 3 1 31 765 752 12  
-5 2 27 206 215 6 -2 1 28 745 761 5 5 1 29 137 144 5 -5 1 30 346 353 4 4 1 31 160 178 4  
-4 2 27 1063 1065 11 -1 1 28 210 182 7 6 1 29 158 141 3 -4 1 30 982 981 21 5 1 31 172 211 5  
-3 2 27 268 246 10 0 1 28 1481 1494 19 7 1 29 688 688 11 -3 1 30 307 315 8 6 1 31 723 727 4  
-2 2 27 283 299 8 1 1 28 342 350 3 8 1 29 188 185 4 -2 1 30 180 133 16 7 1 31 235 217 4  
-1 2 27 450 464 4 2 1 28 224 213 8 -8 2 29 645 661 7 -1 1 30 244 239 3 -8 2 31 214 204 7  
0 2 27 144 109 2 3 1 28 135 96 4 -7 2 29 247 256 4 0 1 30 313 251 9 -7 2 31 219 203 4  
1 2 27 612 630 11 4 1 28 133 55 7 -6 2 29 182 188 4 1 1 30 290 295 6 -6 2 31 29 33 29  
2 2 27 183 147 3 5 1 28 78 61 4 -5 2 29 110 90 5 2 1 30 310 302 3 -5 2 31 148 164 4  
3 2 27 330 357 3 6 1 28 357 370 3 -4 2 29 138 126 5 3 1 30 520 527 11 -4 2 31 158 145 6  
4 2 27 150 144 7 7 1 28 314 304 8 -3 2 29 201 188 3 4 1 30 300 304 3 -3 2 31 320 318 3  
5 2 27 148 143 3 8 1 28 309 319 4 -2 2 29 129 89 13 5 1 30 187 189 3 -2 2 31 521 524 4  
6 2 27 318 319 10 -8 2 28 330 332 5 -1 2 29 482 509 9 6 1 30 586 590 5 -1 2 31 695 728 12  
7 2 27 107 97 4 -7 2 28 65 51 9 0 2 29 324 342 4 7 1 30 469 470 4 0 2 31 441 428 7  
8 2 27 115 97 9 -6 2 28 84 93 6 1 2 29 87 71 3 8 1 30 130 109 7 1 2 31 62 63 4  
-8 3 27 167 155 7 -5 2 28 370 393 4 2 2 29 747 759 5 -8 2 30 172 107 16 2 2 31 664 661 5  
-7 3 27 142 132 6 -4 2 28 327 322 5 3 2 29 686 698 4 -7 2 30 221 230 4 3 2 31 476 495 6  
-6 3 27 214 209 19 -3 2 28 278 288 6 4 2 29 314 307 5 -6 2 30 105 112 9 4 2 31 210 179 3  
-5 3 27 104 95 12 -2 2 28 215 213 3 5 2 29 64 56 6 -5 2 30 124 111 5 5 2 31 374 368 5  
-4 3 27 76 81 8 -1 2 28 71 69 8 6 2 29 295 282 6 -4 2 30 330 351 3 6 2 31 239 266 4  
-3 3 27 454 466 10 0 2 28 230 228 3 7 2 29 323 328 4 -3 2 30 164 176 7 7 2 31 88 104 6  
-2 3 27 258 271 3 1 2 28 54 45 5 -7 3 29 324 326 11 -2 2 30 359 374 3 -7 3 31 290 289 6  
-1 3 27 219 216 7 2 2 28 450 463 4 -6 3 29 114 127 8 -1 2 30 86 80 5 -6 3 31 168 119 13  
0 3 27 513 509 15 3 2 28 183 180 6 -5 3 29 342 346 5 0 2 30 293 299 15 -5 3 31 68 94 6  
1 3 27 528 539 13 4 2 28 311 315 7 -4 3 29 250 186 10 1 2 30 147 152 2 -4 3 31 142 86 6  
2 3 27 89 91 4 5 2 28 63 72 6 -3 3 29 255 263 10 2 2 30 279 244 5 -3 3 31 118 111 4  
3 3 27 102 75 6 6 2 28 358 371 5 -2 3 29 196 117 14 3 2 30 406 405 10 -2 3 31 335 316 16  
4 3 27 120 89 8 7 2 28 156 142 4 -1 3 29 59 45 5 4 2 30 431 443 3 -1 3 31 194 167 10

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	3	31	76	85	4	-5	3	32	237	232	4	-4	4	33	98	94	10	-4	4	34	285	288	4	4	5	35	107	115	9
1	3	31	72	55	5	-4	3	32	191	190	3	-3	4	33	250	250	11	-3	4	34	85	94	5	0	6	35	223	218	5
2	3	31	164	176	7	-3	3	32	190	193	3	-2	4	33	270	275	7	-2	4	34	95	96	10	-8	0	36	50	35	17
3	3	31	223	184	4	-2	3	32	876	877	11	-1	4	33	135	120	6	-1	4	34	264	270	4	-7	0	36	415	428	7
4	3	31	51	40	8	-1	3	32	1199	1169	11	0	4	33	104	99	8	0	4	34	362	357	9	-6	0	36	69	81	10
5	3	31	305	324	4	0	3	32	276	285	4	1	4	33	312	334	3	1	4	34	96	75	4	-5	0	36	375	379	6
6	3	31	342	337	10	1	3	32	185	187	5	2	4	33	252	279	7	2	4	34	202	218	3	-4	0	36	509	489	5
7	3	31	118	112	8	2	3	32	447	448	6	3	4	33	580	591	4	3	4	34	120	87	6	-3	0	36	196	197	5
-6	4	31	170	160	6	3	3	32	109	83	5	4	4	33	254	254	4	4	4	34	157	127	4	-2	0	36	2043	2049	20
-5	4	31	235	220	4	4	3	32	429	428	4	5	4	33	104	63	6	5	4	34	395	413	6	-1	0	36	625	607	7
-4	4	31	132	121	5	5	3	32	113	94	5	-5	5	33	452	434	5	-4	5	34	166	154	5	0	0	36	696	713	6
-3	4	31	122	121	4	6	3	32	461	462	10	-4	5	33	502	484	17	-3	5	34	211	203	8	1	0	36	952	969	8
-2	4	31	93	50	4	-6	4	32	584	592	10	-3	5	33	246	243	5	-2	5	34	179	171	9	2	0	36	220	222	3
-1	4	31	140	143	4	-5	4	32	216	224	4	-2	5	33	445	454	5	-1	5	34	260	253	3	3	0	36	168	179	4
0	4	31	209	206	4	-4	4	32	196	199	9	-1	5	33	398	397	4	0	5	34	77	73	7	4	0	36	546	558	5
1	4	31	264	275	6	-3	4	32	209	197	5	0	5	33	704	698	6	1	5	34	174	169	4	5	0	36	638	644	6
2	4	31	265	258	3	-2	4	32	169	175	8	1	5	33	192	187	4	2	5	34	257	250	4	6	0	36	512	517	5
3	4	31	355	351	4	-1	4	32	334	333	9	2	5	33	227	232	4	3	5	34	300	298	4	7	0	36	122	117	8
4	4	31	273	260	4	0	4	32	607	606	7	3	5	33	322	333	4	4	5	34	55	55	9	-7	1	36	171	87	7
5	4	31	291	307	4	1	4	32	82	82	9	4	5	33	99	73	6	-1	6	34	167	150	5	-6	1	36	677	691	14
6	4	31	54	58	9	2	4	32	383	386	9	-2	6	33	66	45	9	0	6	34	62	46	9	-5	1	36	296	311	4
-5	5	31	200	195	5	3	4	32	140	124	4	-1	6	33	364	377	5	1	6	34	118	99	6	-4	1	36	174	181	4
-4	5	31	363	356	4	4	4	32	186	162	7	0	6	33	154	155	8	-8	1	35	465	447	5	-3	1	36	266	275	4
-3	5	31	38	33	11	5	4	32	229	211	4	1	6	33	145	126	5	-7	1	35	677	675	7	-2	1	36	148	100	10
-2	5	31	95	106	6	6	4	32	87	81	7	-8	0	34	586	583	8	-6	1	35	563	560	19	-1	1	36	255	240	4
-1	5	31	338	336	3	-5	5	32	53	23	10	-7	0	34	245	238	6	-5	1	35	200	186	4	0	1	36	69	77	5
0	5	31	359	362	4	-4	5	32	215	224	4	-6	0	34	289	289	6	-4	1	35	191	208	4	1	1	36	124	102	5
1	5	31	88	60	8	-3	5	32	59	45	8	-5	0	34	90	81	8	-3	1	35	95	56	12	2	1	36	419	430	6
2	5	31	378	373	4	-2	5	32	266	295	7	-4	0	34	619	627	6	-2	1	35	787	783	14	3	1	36	608	621	3
3	5	31	596	592	7	-1	5	32	95	94	6	-3	0	34	325	330	4	-1	1	35	536	531	4	4	1	36	134	143	3
4	5	31	471	473	10	0	5	32	222	226	9	-2	0	34	94	101	10	0	1	35	74	86	11	5	1	36	204	207	3
-3	6	31	165	140	5	1	5	32	309	318	5	-1	0	34	143	168	5	1	1	35	380	392	3	6	1	36	131	123	9
-2	6	31	149	147	5	2	5	32	216	216	9	0	0	34	304	310	4	2	1	35	168	158	4	7	1	36	172	164	4
-1	6	31	134	127	5	3	5	32	141	89	7	1	0	34	592	616	5	3	1	35	163	121	7	-7	2	36	98	57	13
0	6	31	209	207	5	4	5	32	149	140	5	2	0	34	1334	1357	9	4	1	35	48	58	6	-6	2	36	243	224	14
1	6	31	160	155	7	-2	6	32	41	30	13	3	0	34	520	529	5	5	1	35	78	81	5	-5	2	36	235	253	4
2	6	31	100	94	5	-1	6	32	175	163	4	4	0	34	415	410	5	6	1	35	152	132	3	-4	2	36	312	321	4
-8	0	32	408	417	7	0	6	32	98	75	7	5	0	34	152	160	4	7	1	35	198	192	4	-3	2	36	267	272	4
-7	0	32	456	444	7	1	6	32	462	481	5	6	0	34	226	230	4	-7	2	35	371	386	6	-2	2	36	448	462	24
-6	0	32	581	591	7	2	6	32	251	245	12	7	0	34	120	85	7	-6	2	35	243	251	5	-1	2	36	340	359	6
-5	0	32	319	327	6	-8	1	33	141	107	4	-8	1	34	252	235	12	-5	2	35	315	326	4	0	2	36	413	424	4
-4	0	32	1210	1205	10	-7	1	33	274	248	5	-7	1	34	314	293	6	-4	2	35	167	129	4	1	2	36	93	54	6
-3	0	32	576	571	5	-6	1	33	101	118	5	-6	1	34	84	89	13	-3	2	35	518	510	4	2	2	36	355	347	4
-2	0	32	164	179	5	-5	1	33	453	446	6	-5	1	34	272	274	9	-2	2	35	1200	1205	15	3	2	36	127	96	5

-1 0 32 812 829 8 -4 1 33 686 706 5 -4 1 34 117 114 7 -1 2 35 710 701 19 4 2 36 69 52 5  
 0 0 32 360 398 4 -3 1 33 740 757 5 -3 1 34 125 89 13 0 2 35 141 91 6 5 2 36 454 454 9  
 1 0 32 610 621 5 -2 1 33 860 843 22 -2 1 34 1083 1079 13 1 2 35 120 93 3 6 2 36 142 120 5  
 2 0 32 213 214 3 -1 1 33 586 567 10 -1 1 34 465 452 8 2 2 35 844 849 13 -6 3 36 231 228 5  
 3 0 32 66 123 6 0 1 33 233 263 3 0 1 34 42 75 6 3 2 35 101 103 5 -5 3 36 270 271 4  
 4 0 32 370 370 4 1 1 33 135 120 4 1 1 34 160 140 3 4 2 35 228 236 3 -4 3 36 418 415 4  
 5 0 32 174 188 4 2 1 33 897 885 6 2 1 34 173 135 3 5 2 35 431 418 7 -3 3 36 367 369 4  
 6 0 32 580 599 6 3 1 33 458 451 5 3 1 34 332 333 3 6 2 35 67 68 7 -2 3 36 810 810 6  
 7 0 32 304 340 6 4 1 33 113 90 4 4 1 34 177 183 3 7 2 35 41 97 13 -1 3 36 132 157 3  
 -8 1 32 362 322 9 5 1 33 193 190 3 5 1 34 120 93 10 -7 3 35 160 138 8 0 3 36 582 590 4  
 -7 1 32 233 225 5 6 1 33 91 88 6 6 1 34 244 255 3 -6 3 35 264 255 6 1 3 36 188 209 4  
 -6 1 32 168 170 4 7 1 33 239 236 4 7 1 34 356 366 7 -5 3 35 395 398 5 2 3 36 196 195 11  
 -5 1 32 359 349 8 -7 2 33 199 182 5 -7 2 34 164 151 5 -4 3 35 116 100 7 3 3 36 227 239 3  
 -4 1 32 302 278 4 -6 2 33 325 332 5 -6 2 34 149 138 5 -3 3 35 231 227 5 4 3 36 442 438 4  
 -3 1 32 391 375 3 -5 2 33 160 178 4 -5 2 34 57 39 8 -2 3 35 310 280 7 5 3 36 68 65 8  
 -2 1 32 84 129 7 -4 2 33 451 434 5 -4 2 34 511 536 4 -1 3 35 92 89 4 6 3 36 391 410 8  
 -1 1 32 505 499 6 -3 2 33 78 94 4 -3 2 34 60 48 15 0 3 35 158 112 10 -6 4 36 142 125 7  
 0 1 32 299 305 3 -2 2 33 413 412 5 -2 2 34 362 343 27 1 3 35 121 98 14 -5 4 36 396 400 5  
 1 1 32 355 373 4 -1 2 33 264 251 5 -1 2 34 498 506 3 2 3 35 252 247 4 -4 4 36 376 386 5  
 2 1 32 1027 1041 18 0 2 33 146 74 3 0 2 34 378 398 3 3 3 35 169 175 3 -3 4 36 125 102 5  
 3 1 32 514 495 6 1 2 33 553 534 11 1 2 34 443 453 5 4 3 35 175 154 3 -2 4 36 525 545 5  
 4 1 32 152 157 5 2 2 33 739 746 9 2 2 34 374 370 10 5 3 35 27 51 26 -1 4 36 132 145 7  
 5 1 32 269 271 3 3 2 33 559 552 7 3 2 34 379 376 7 6 3 35 366 368 5 0 4 36 79 73 7  
 6 1 32 154 89 10 4 2 33 129 103 8 4 2 34 444 468 12 -6 4 35 227 210 6 1 4 36 270 272 6  
 7 1 32 328 340 4 5 2 33 238 242 3 5 2 34 119 102 8 -5 4 35 102 73 6 2 4 36 91 57 5  
 -8 2 32 253 263 7 6 2 33 316 322 4 6 2 34 301 303 6 -4 4 35 125 100 5 3 4 36 296 277 4  
 -7 2 32 202 198 5 7 2 33 275 265 4 7 2 34 127 102 6 -3 4 35 190 207 4 4 4 36 216 221 5  
 -6 2 32 48 53 8 -7 3 33 43 41 17 -7 3 34 114 96 9 -2 4 35 397 428 5 5 4 36 506 518 5  
 -5 2 32 106 97 5 -6 3 33 159 76 12 -6 3 34 607 602 6 -1 4 35 452 469 9 -4 5 36 87 49 7  
 -4 2 32 240 237 3 -5 3 33 94 57 6 -5 3 34 599 602 5 0 4 35 151 151 3 -3 5 36 116 140 6  
 -3 2 32 60 56 5 -4 3 33 39 45 11 -4 3 34 256 257 4 1 4 35 88 52 4 -2 5 36 192 190 4  
 -2 2 32 139 69 12 -3 3 33 166 163 11 -3 3 34 375 367 4 2 4 35 434 439 4 -1 5 36 292 297 3  
 -1 2 32 254 248 21 -2 3 33 370 369 5 -2 3 34 322 312 4 3 4 35 73 86 6 0 5 36 161 165 4  
 0 2 32 459 469 3 -1 3 33 372 356 5 -1 3 34 203 190 3 4 4 35 464 485 5 1 5 36 35 49 12  
 1 2 32 227 215 5 0 3 33 158 153 4 0 3 34 618 623 4 5 4 35 121 135 9 2 5 36 45 7 8  
 2 2 32 190 176 8 1 3 33 372 395 7 1 3 34 82 77 5 -4 5 35 717 700 7 3 5 36 51 57 9  
 3 2 32 275 241 3 2 3 33 438 424 15 2 3 34 705 703 5 -3 5 35 81 97 9 -7 1 37 159 125 5  
 4 2 32 159 160 3 3 3 33 85 82 5 3 3 34 98 118 7 -2 5 35 101 103 5 -6 1 37 406 406 5  
 5 2 32 289 291 4 4 3 33 72 75 6 4 3 34 397 401 4 -1 5 35 236 247 4 -5 1 37 436 433 5  
 6 2 32 71 72 6 5 3 33 109 108 6 5 3 34 50 48 9 0 5 35 42 24 11 -4 1 37 70 75 7  
 7 2 32 356 364 4 6 3 33 153 160 5 6 3 34 240 230 5 1 5 35 40 26 13 -3 1 37 101 101 5  
 -7 3 32 251 250 6 -6 4 33 181 147 7 -6 4 34 108 61 15 2 5 35 84 109 6 -2 1 37 251 231 9  
 -6 3 32 666 678 6 -5 4 33 262 261 5 -5 4 34 239 232 9 3 5 35 103 92 5 -1 1 37 160 166 8

Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	1	37	219	215	3	-3	2	38	122	87	4	3	4	39	299	306	9	3	1	41	28	40	10	1	3	42	300	306	4
1	1	37	180	180	3	-2	2	38	177	134	3	4	4	39	291	298	11	4	1	41	366	360	5	2	3	42	332	336	8
2	1	37	235	248	4	-1	2	38	250	251	11	-3	5	39	380	392	5	5	1	41	220	229	5	3	3	42	498	485	4
3	1	37	335	330	3	0	2	38	225	250	3	-2	5	39	151	136	5	6	1	41	194	191	4	4	3	42	330	334	6
4	1	37	332	343	3	1	2	38	480	461	19	-1	5	39	135	101	6	-6	2	41	442	425	6	5	3	42	43	43	16
5	1	37	102	74	9	2	2	38	367	378	5	0	5	39	263	245	4	-5	2	41	431	425	9	-4	4	42	196	207	14
6	1	37	150	141	4	3	2	38	149	149	4	1	5	39	174	163	4	-4	2	41	280	297	4	-3	4	42	156	108	17
7	1	37	264	268	4	4	2	38	103	72	6	2	5	39	395	379	4	-3	2	41	580	568	8	-2	4	42	625	649	7
-7	2	37	132	115	7	5	2	38	274	253	5	-7	0	40	463	432	10	-2	2	41	307	299	3	-1	4	42	278	266	9
-6	2	37	718	724	9	6	2	38	201	208	4	-6	0	40	699	697	12	-1	2	41	316	324	4	0	4	42	548	564	6
-5	2	37	182	192	4	-6	3	38	468	464	6	-5	0	40	346	371	9	0	2	41	856	870	7	1	4	42	147	156	10
-4	2	37	178	168	7	-5	3	38	54	89	8	-4	0	40	194	207	6	1	2	41	393	378	4	2	4	42	355	365	5
-3	2	37	175	185	3	-4	3	38	526	531	4	-3	0	40	655	645	8	2	2	41	309	303	4	3	4	42	63	42	6
-2	2	37	556	571	4	-3	3	38	134	132	4	-2	0	40	514	513	7	3	2	41	139	117	4	-2	5	42	243	250	5
-1	2	37	170	155	3	-2	3	38	259	282	5	-1	0	40	332	335	6	4	2	41	98	74	5	-1	5	42	62	40	20
0	2	37	177	167	3	-1	3	38	206	211	3	0	0	40	1386	1378	14	5	2	41	94	88	9	0	5	42	378	390	6
1	2	37	598	600	17	0	3	38	439	429	6	1	0	40	427	423	5	6	2	41	87	84	7	1	5	42	166	163	5
2	2	37	351	361	4	1	3	38	75	59	7	2	0	40	113	108	4	-6	3	41	194	177	8	-6	1	43	116	84	13
3	2	37	257	261	4	2	3	38	556	535	5	3	0	40	204	206	4	-5	3	41	61	70	8	-5	1	43	284	275	6
4	2	37	272	301	4	3	3	38	215	215	3	4	0	40	640	653	8	-4	3	41	246	237	4	-4	1	43	487	492	5
5	2	37	720	725	5	4	3	38	128	126	4	5	0	40	795	810	7	-3	3	41	29	38	19	-3	1	43	164	186	8
6	2	37	269	273	4	5	3	38	134	138	7	6	0	40	82	77	8	-2	3	41	83	61	5	-2	1	43	255	248	4
-6	3	37	205	174	10	-5	4	38	81	66	7	-7	1	40	81	58	17	-1	3	41	182	185	4	-1	1	43	88	73	13
-5	3	37	70	60	8	-4	4	38	191	188	12	-6	1	40	404	410	5	0	3	41	56	37	6	0	1	43	496	473	4
-4	3	37	189	177	4	-3	4	38	141	144	5	-5	1	40	317	328	5	1	3	41	241	271	6	1	1	43	235	257	3
-3	3	37	142	144	4	-2	4	38	338	334	4	-4	1	40	164	121	5	2	3	41	60	50	7	2	1	43	309	304	3
-2	3	37	199	177	9	-1	4	38	154	139	6	-3	1	40	89	112	12	3	3	41	105	59	7	3	1	43	62	73	5
-1	3	37	134	139	4	0	4	38	297	307	4	-2	1	40	118	103	6	4	3	41	212	224	5	4	1	43	149	143	4
0	3	37	528	542	4	1	4	38	734	742	12	-1	1	40	341	330	4	5	3	41	56	74	11	5	1	43	86	99	7
1	3	37	75	70	6	2	4	38	246	253	4	0	1	40	518	508	4	-4	4	41	248	243	9	6	1	43	207	218	4
2	3	37	429	445	7	3	4	38	137	153	4	1	1	40	84	49	4	-3	4	41	207	171	5	-6	2	43	267	273	6
3	3	37	49	48	7	4	4	38	335	343	7	2	1	40	273	273	4	-2	4	41	392	389	5	-5	2	43	93	94	6
4	3	37	88	59	7	-3	5	38	48	54	13	3	1	40	166	163	3	-1	4	41	446	451	6	-4	2	43	775	787	6
5	3	37	114	130	7	-2	5	38	140	153	5	4	1	40	412	428	7	0	4	41	254	263	5	-3	2	43	291	269	4
6	3	37	182	168	5	-1	5	38	35	35	11	5	1	40	93	93	9	1	4	41	585	599	5	-2	2	43	157	147	3
-5	4	37	271	274	4	0	5	38	63	70	16	6	1	40	253	235	7	2	4	41	149	136	5	-1	2	43	283	294	10
-4	4	37	89	66	6	1	5	38	86	67	6	-6	2	40	225	210	10	3	4	41	95	70	5	0	2	43	134	112	7
-3	4	37	107	98	5	2	5	38	180	200	4	-5	2	40	203	191	7	4	4	41	127	113	5	1	2	43	233	247	5
-2	4	37	545	565	5	3	5	38	83	45	6	-4	2	40	213	224	4	-2	5	41	237	227	4	2	2	43	396	406	4
-1	4	37	43	46	8	-7	1	39	232	203	6	-3	2	40	267	244	21	-1	5	41	496	485	6	3	2	43	39	25	10
0	4	37	306	312	3	-6	1	39	128	101	6	-2	2	40	390	400	3	0	5	41	166	180	6	4	2	43	218	198	7
1	4	37	298	293	6	-5	1	39	74	95	8	-1	2	40	241	234	4	1	5	41	161	140	5	5	2	43	448	458	4
2	4	37	148	139	4	-4	1	39	203	204	5	0	2	40	162	136	6	-7	0	42	278	295	9	-5	3	43	55	33	10
3	4	37	196	207	4	-3	1	39	117	114	4	1	2	40	377	340	7	-6	0	42	339	333	9	-4	3	43	90	35	5

4 4 37 107 97 5 -2 1 39 230 219 4 2 2 40 280 275 4 -5 0 42 183 188 9 -3 3 43 95 115 5  
5 4 37 262 257 6 -1 1 39 223 202 7 3 2 40 211 214 6 -4 0 42 1286 1299 13 -2 3 43 120 85 5  
-4 5 37 135 121 8 0 1 39 755 763 5 4 2 40 306 309 8 -3 0 42 68 82 9 -1 3 43 87 80 6  
-3 5 37 150 130 6 1 1 39 132 115 3 5 2 40 221 225 4 -2 0 42 386 395 6 0 3 43 170 173 4  
-2 5 37 88 103 6 2 1 39 180 163 3 6 2 40 241 266 4 -1 0 42 62 65 9 1 3 43 129 109 6  
-1 5 37 101 90 4 3 1 39 349 345 3 -6 3 40 180 208 6 0 0 42 460 461 6 2 3 43 329 332 7  
0 5 37 144 156 10 4 1 39 313 310 8 -5 3 40 78 67 8 1 0 42 975 957 7 3 3 43 145 104 8  
1 5 37 238 249 4 5 1 39 144 154 4 -4 3 40 399 388 4 2 0 42 232 246 4 4 3 43 338 346 5  
2 5 37 76 86 12 6 1 39 131 122 4 -3 3 40 65 55 19 3 0 42 183 197 4 -4 4 43 129 129 6  
3 5 37 268 256 4 -7 2 39 270 245 9 -2 3 40 620 603 5 4 0 42 44 7 14 -3 4 43 483 493 13  
-7 0 38 139 104 8 -6 2 39 90 82 7 -1 3 40 81 89 6 5 0 42 567 588 6 -2 4 43 155 89 7  
-6 0 38 1105 1090 12 -5 2 39 213 200 4 0 3 40 232 226 3 6 0 42 140 179 7 -1 4 43 50 41 9  
-5 0 38 593 596 11 -4 2 39 188 175 6 1 3 40 64 43 6 -7 1 42 112 127 8 0 4 43 84 104 7  
-4 0 38 199 201 5 -3 2 39 502 491 4 2 3 40 229 244 4 -6 1 42 236 259 5 1 4 43 171 154 4  
-3 0 38 868 858 9 -2 2 39 625 624 5 3 3 40 585 576 5 -5 1 42 238 250 9 2 4 43 147 132 4  
-2 0 38 626 625 7 -1 2 39 355 356 6 4 3 40 138 139 6 -4 1 42 350 344 5 3 4 43 209 217 4  
-1 0 38 138 125 6 0 2 39 237 252 4 5 3 40 262 265 5 -3 1 42 147 154 4 0 5 43 319 318 5  
0 0 38 630 611 7 1 2 39 1090 1079 7 -5 4 40 114 83 9 -2 1 42 301 309 4 -6 0 44 281 284 9  
1 0 38 1060 1076 9 2 2 39 263 274 4 -4 4 40 452 462 6 -1 1 42 73 57 8 -5 0 44 224 237 9  
2 0 38 239 237 3 3 2 39 306 314 5 -3 4 40 608 606 13 0 1 42 461 465 4 -4 0 44 70 106 9  
3 0 38 109 98 6 4 2 39 710 721 6 -2 4 40 366 354 7 1 1 42 139 87 9 -3 0 44 351 364 6  
4 0 38 969 994 8 5 2 39 231 228 4 -1 4 40 142 125 9 2 1 42 366 355 8 -2 0 44 548 553 7  
5 0 38 694 690 6 6 2 39 124 109 8 0 4 40 300 302 14 3 1 42 85 61 4 -1 0 44 198 200 6  
6 0 38 225 223 5 -6 3 39 244 208 5 1 4 40 192 167 9 4 1 42 366 380 3 0 0 44 534 526 7  
7 0 38 352 359 6 -5 3 39 100 88 6 2 4 40 436 449 4 5 1 42 54 52 7 1 0 44 737 721 7  
-7 1 38 344 348 5 -4 3 39 376 370 4 3 4 40 216 200 4 6 1 42 205 215 3 2 0 44 116 119 5  
-6 1 38 196 206 5 -3 3 39 45 57 8 4 4 40 578 572 5 -6 2 42 179 170 7 3 0 44 28 45 17  
-5 1 38 161 132 4 -2 3 39 263 265 4 -3 5 40 59 39 18 -5 2 42 314 325 4 4 0 44 375 358 6  
-4 1 38 213 215 8 -1 3 39 38 38 9 -2 5 40 183 204 4 -3 2 42 388 390 4 5 0 44 259 260 5  
-3 1 38 161 173 5 0 3 39 105 66 6 -1 5 40 112 116 7 -2 2 42 241 233 6 -6 1 44 149 136 7  
-2 1 38 413 406 4 1 3 39 53 72 10 0 5 40 91 70 6 -1 2 42 120 121 5 -5 1 44 154 133 7  
-1 1 38 569 578 4 2 3 39 83 63 6 1 5 40 242 238 4 0 2 42 333 335 12 -4 1 44 363 371 9  
0 1 38 200 170 7 3 3 39 313 312 4 2 5 40 172 164 5 1 2 42 312 325 7 -3 1 44 147 136 5  
1 1 38 111 126 3 4 3 39 113 115 4 -7 1 41 221 217 5 2 2 42 290 302 4 -2 1 44 338 323 13  
2 1 38 65 43 6 5 3 39 97 105 16 -6 1 41 105 29 6 3 2 42 35 19 12 -1 1 44 106 91 5  
3 1 38 215 211 2 -5 4 39 54 33 9 -5 1 41 83 77 9 4 2 42 167 173 5 0 1 44 533 530 4  
4 1 38 284 267 3 -4 4 39 214 202 4 -4 1 41 659 647 6 5 2 42 80 56 13 1 1 44 63 44 5  
5 1 38 103 78 5 -3 4 39 318 307 4 -3 1 41 55 37 6 -5 3 42 118 112 6 2 1 44 153 187 3  
6 1 38 129 101 4 -2 4 39 532 549 9 -2 1 41 198 190 4 -4 3 42 156 136 4 3 1 44 259 210 7  
-7 2 38 163 147 6 -1 4 39 299 313 5 -1 1 41 412 412 4 -3 3 42 47 54 10 4 1 44 68 43 5  
-6 2 38 228 219 4 0 4 39 111 108 13 0 1 41 281 249 9 -2 3 42 261 267 6 5 1 44 103 70 5  
-5 2 38 172 184 5 1 4 39 139 59 6 1 1 41 251 266 3 -1 3 42 525 529 5 -6 2 44 199 212 6  
-4 2 38 324 329 4 2 4 39 285 300 5 2 1 41 137 114 3 0 3 42 412 430 4 -5 2 44 62 77 8



Table 1. Observed and calculated structure factors for sobolevite

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	44	308	301	12	-6	0	46	480	494	11	2	2	47	205	199	4	-3	2	49	307	317	4	1	3	51	65	19	12
-3	2	44	70	82	6	-5	0	46	356	362	9	3	2	47	284	298	5	-2	2	49	303	308	9	-4	0	52	61	63	20
-2	2	44	292	297	5	-4	0	46	684	674	12	4	2	47	122	94	6	-1	2	49	365	362	5	-3	0	52	193	189	6
-1	2	44	80	36	18	-3	0	46	684	680	8	-4	3	47	112	82	6	0	2	49	113	58	6	-2	0	52	631	605	8
0	2	44	329	362	5	-2	0	46	132	113	7	-3	3	47	89	68	6	1	2	49	193	168	5	-1	0	52	54	54	11
1	2	44	111	45	12	-1	0	46	328	320	6	-2	3	47	141	99	11	2	2	49	209	205	4	0	0	52	154	187	5
2	2	44	216	214	4	0	0	46	134	137	6	-1	3	47	433	422	11	3	2	49	101	91	6	1	0	52	1088	1055	11
3	2	44	127	105	5	1	0	46	522	523	5	0	3	47	169	156	7	-3	3	49	352	342	6	2	0	52	116	91	8
4	2	44	294	291	4	2	0	46	770	757	8	1	3	47	263	266	5	-2	3	49	108	83	15	3	0	52	90	96	10
5	2	44	274	240	8	3	0	46	292	293	5	2	3	47	221	210	11	-1	3	49	272	277	5	-4	1	52	163	133	7
-5	3	44	207	180	5	4	0	46	587	582	8	3	3	47	189	174	4	0	3	49	208	160	6	-3	1	52	182	168	12
-4	3	44	487	495	8	5	0	46	237	228	5	-2	4	47	266	264	5	1	3	49	89	80	12	-2	1	52	265	244	8
-3	3	44	160	158	4	-6	1	46	189	201	8	-1	4	47	130	113	6	2	3	49	229	231	7	-1	1	52	591	580	8
-2	3	44	532	531	13	-5	1	46	343	339	7	0	4	47	137	112	6	-5	0	50	71	118	19	0	1	52	211	178	5
-1	3	44	315	322	5	-4	1	46	458	450	13	1	4	47	244	253	9	-4	0	50	199	184	9	1	1	52	185	169	10
0	3	44	98	82	5	-3	1	46	199	183	15	-5	0	48	203	212	9	-3	0	50	136	121	7	2	1	52	78	78	7
1	3	44	52	17	16	-2	1	46	110	126	6	-4	0	48	395	412	10	-2	0	50	747	745	9	3	1	52	368	361	4
2	3	44	75	106	12	-1	1	46	314	297	11	-3	0	48	402	417	6	-1	0	50	201	188	6	-3	2	52	115	118	7
3	3	44	871	859	8	0	1	46	86	32	5	-2	0	48	738	719	9	0	0	50	257	259	5	-2	2	52	206	185	9
4	3	44	264	254	5	1	1	46	47	29	7	-1	0	48	235	254	6	1	0	50	182	149	6	-1	2	52	57	53	10
-4	4	44	336	332	5	2	1	46	628	639	11	0	0	48	295	292	6	2	0	50	348	372	6	0	2	52	157	146	6
-3	4	44	278	275	4	3	1	46	486	450	4	1	0	48	112	85	6	3	0	50	209	222	6	1	2	52	547	546	14
-2	4	44	412	429	7	4	1	46	283	288	4	2	0	48	436	444	6	4	0	50	402	403	5	2	2	52	308	323	4
-1	4	44	157	157	6	5	1	46	88	106	7	3	0	48	158	155	6	-5	1	50	173	172	8	-1	3	52	412	410	6
0	4	44	99	91	6	-5	2	46	127	87	16	4	0	48	392	398	5	-4	1	50	81	48	7	0	3	52	414	402	5
1	4	44	256	247	4	-4	2	46	348	375	5	-5	1	48	194	172	9	-3	1	50	72	80	8	-3	1	53	279	272	5
2	4	44	289	283	5	-3	2	46	142	137	4	-4	1	48	104	55	6	-2	1	50	135	101	7	-2	1	53	98	73	6
3	4	44	189	199	4	-2	2	46	279	267	10	-3	1	48	145	126	5	-1	1	50	403	385	5	-1	1	53	403	367	5
-6	1	45	154	118	10	-1	2	46	148	150	6	-2	1	48	619	648	13	0	1	50	87	69	6	0	1	53	705	681	13
-5	1	45	157	148	6	0	2	46	250	248	5	-1	1	48	363	336	4	1	1	50	246	252	11	1	1	53	287	261	5
-4	1	45	281	263	5	1	2	46	308	281	5	0	1	48	175	164	4	2	1	50	103	84	7	2	1	53	70	98	7
-3	1	45	71	45	6	2	2	46	78	77	6	1	1	48	70	105	6	3	1	50	569	570	10	-3	2	53	240	233	10
-2	1	45	281	283	4	3	2	46	152	150	5	2	1	48	244	207	9	4	1	50	115	140	5	-2	2	53	519	508	6
-1	1	45	250	249	8	4	2	46	131	99	6	3	1	48	520	504	7	-4	2	50	131	122	7	-1	2	53	260	250	5
0	1	45	320	290	5	-4	3	46	303	295	5	4	1	48	197	204	5	-3	2	50	170	163	4	0	2	53	136	97	7
1	1	45	156	165	3	-3	3	46	159	147	4	-5	2	48	47	42	13	-2	2	50	179	161	4	1	2	53	528	522	8
2	1	45	187	179	3	-2	3	46	387	408	5	-4	2	48	213	223	5	-1	2	50	145	161	16	2	2	53	209	162	5
3	1	45	849	850	6	-1	3	46	865	870	8	-3	2	48	274	289	4	0	2	50	285	291	6	-3	0	54	477	467	7
4	1	45	84	48	6	0	3	46	348	345	4	-2	2	48	167	132	6	1	2	50	210	191	5	-2	0	54	283	268	6
5	1	45	43	35	9	1	3	46	84	52	6	-1	2	48	65	70	7	2	2	50	363	370	9	-1	0	54	70	53	10
-5	2	45	206	188	5	2	3	46	353	366	7	0	2	48	228	245	5	3	2	50	107	85	6	0	0	54	442	456	7
-4	2	45	113	124	7	3	3	46	133	124	5	1	2	48	317	303	4	-3	3	50	85	77	13	1	0	54	309	309	6
-3	2	45	229	238	4	-3	4	46	82	76	7	2	2	48	116	95	5	-2	3	50	502	499	12	2	0	54	247	225	6
-2	2	45	345	345	4	-2	4	46	219	221	5	3	2	48	143	121	5	-1	3	50	311	313	5	-3	1	54	319	297	10

-1 2 45 223 219 4 -1 4 46 232 234 5 4 2 48 184 177 4 0 3 50 624 632 6 -2 1 54 213 208 8  
0 2 45 239 230 5 0 4 46 351 371 5 -4 3 48 223 204 5 1 3 50 293 287 5 -1 1 54 461 454 5  
1 2 45 649 652 6 1 4 46 169 148 6 -3 3 48 328 310 4 2 3 50 99 85 8 0 1 54 521 510 9  
2 2 45 527 521 5 2 4 46 149 118 8 -2 3 48 254 264 5 -4 1 51 229 229 5 1 1 54 290 276 12  
3 2 45 80 68 7 -5 1 47 404 409 14 -1 3 48 218 230 9 -3 1 51 109 101 7 2 1 54 143 119 6  
4 2 45 442 424 5 -4 1 47 407 402 5 0 3 48 281 298 7 -2 1 51 299 295 4 -2 2 54 249 252 5  
5 2 45 590 582 5 -3 1 47 401 419 5 1 3 48 149 151 5 -1 1 51 308 297 12 -1 2 54 68 50 9  
-5 3 45 72 64 8 -2 1 47 467 459 19 2 3 48 565 566 5 0 1 51 205 220 5 0 2 54 124 85 7  
-4 3 45 243 234 5 -1 1 47 657 663 5 3 3 48 444 436 4 1 1 51 221 224 5 1 2 54 337 303 5  
-3 3 45 174 188 4 0 1 47 137 140 7 -1 4 48 162 137 5 2 1 51 143 112 4 -2 1 55 135 108 5  
-2 3 45 352 366 5 1 1 47 40 63 9 0 4 48 78 81 8 3 1 51 420 383 4 -1 1 55 300 289 6  
0 3 45 237 248 4 2 1 47 607 608 4 -5 1 49 158 156 7 -4 2 51 177 125 6 0 1 55 248 211 5  
1 3 45 66 71 7 3 1 47 579 552 4 -4 1 49 230 241 5 -3 2 51 140 126 11 1 1 55 86 31 7  
2 3 45 86 89 7 4 1 47 68 36 6 -3 1 49 69 67 8 -2 2 51 153 140 5 -1 2 55 31 36 30  
3 3 45 311 291 4 5 1 47 110 105 6 -2 1 49 282 290 5 -1 2 51 48 71 12 0 2 55 501 516 7  
4 3 45 69 25 7 -5 2 47 347 343 5 -1 1 49 614 594 6 0 2 51 155 142 6 -2 0 56 49 62 15  
-3 4 45 119 95 13 -4 2 47 138 90 6 0 1 49 172 186 5 1 2 51 344 341 10 -1 0 56 285 287 7  
-2 4 45 218 206 10 -3 2 47 221 206 4 1 1 49 274 272 6 2 2 51 270 274 8 0 0 56 271 269 6  
-1 4 45 153 154 5 -2 2 47 654 642 6 2 1 49 153 164 5 3 2 51 136 106 6 1 0 56 705 683 8  
0 4 45 69 47 8 -1 2 47 42 24 10 3 1 49 204 162 4 -2 3 51 205 198 6 -2 1 56 348 345 5  
1 4 45 275 271 4 0 2 47 138 142 6 4 1 49 171 197 5 -1 3 51 127 87 6 -1 1 56 94 61 7  
2 4 45 168 160 5 1 2 47 647 638 8 -4 2 49 85 107 12 0 3 51 156 152 5 0 1 56 217 207 9

E