

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	0	0	71	1	3	6	0	64	53	3	-2	-4	1	647	647	3	-4	2	1	124	123	6	-1	9	1	274	288	6
2	0	0	2117	2121	8	4	6	0	107	92	3	-1	-4	1	259	263	2	-3	2	1	1247	1236	5	0	9	1	322	305	6
3	0	0	245	243	2	5	6	0	28	19	21	0	-4	1	3283	3352	14	-2	2	1	81	92	2	1	9	1	130	119	9
4	0	0	352	355	3	-5	7	0	52	47	10	1	-4	1	51	45	4	-1	2	1	217	235	2	2	9	1	150	134	5
5	0	0	251	247	5	-4	7	0	46	24	12	2	-4	1	1717	1733	7	0	2	1	11	17	9	3	9	1	94	95	10
6	0	0	182	176	4	-3	7	0	100	102	6	3	-4	1	82	87	3	1	2	1	82	81	1	-3	-9	2	36	32	14
7	0	0	44	19	5	-2	7	0	218	217	4	4	-4	1	210	222	3	2	2	1	195	183	2	-2	-9	2	90	91	5
-7	1	0	35	10	7	-1	7	0	19	24	16	5	-4	1	88	82	9	3	2	1	528	506	3	-1	-9	2	294	296	4
-6	1	0	72	68	8	0	7	0	202	207	3	6	-4	1	105	95	7	4	2	1	274	285	4	0	-9	2	31	11	13
-5	1	0	28	38	8	1	7	0	158	145	5	-7	-3	1	240	218	3	5	2	1	333	346	7	1	-9	2	200	186	7
-4	1	0	437	448	3	2	7	0	448	454	5	-6	-3	1	70	45	8	6	2	1	339	341	3	2	-9	2	145	132	5
-3	1	0	221	216	2	3	7	0	115	121	5	-5	-3	1	133	140	3	7	2	1	36	8	8	3	-9	2	170	173	8
-2	1	0	229	205	1	4	7	0	32	21	9	-4	-3	1	324	315	2	-7	3	1	71	62	9	-4	-8	2	139	150	5
-1	1	0	14	39	10	5	7	0	221	208	6	-3	-3	1	271	278	2	-6	3	1	570	579	4	-3	-8	2	152	150	4
0	1	0	157	164	1	-4	8	0	53	11	9	-2	-3	1	257	257	2	-5	3	1	161	160	3	-2	-8	2	96	90	4
1	1	0	740	738	2	-3	8	0	131	119	5	-1	-3	1	84	84	1	-4	3	1	243	240	3	-1	-8	2	237	238	4
2	1	0	179	171	1	-2	8	0	227	222	9	0	-3	1	129	107	2	-3	3	1	26	12	4	0	-8	2	776	782	8
3	1	0	245	232	1	-1	8	0	43	8	8	1	-3	1	153	153	1	-2	3	1	467	452	2	1	-8	2	28	12	22
4	1	0	57	49	3	0	8	0	71	66	5	2	-3	1	280	282	2	-1	3	1	155	146	2	2	-8	2	802	822	6
5	1	0	471	485	3	1	8	0	80	84	11	3	-3	1	274	263	2	0	3	1	247	237	2	3	-8	2	94	75	6
6	1	0	271	266	3	2	8	0	392	404	4	4	-3	1	77	61	4	1	3	1	393	380	1	4	-8	2	364	366	7
7	1	0	233	222	3	3	8	0	386	388	4	5	-3	1	234	241	3	2	3	1	472	486	2	-5	-7	2	156	141	5
-7	2	0	98	100	7	4	8	0	35	33	12	6	-3	1	164	153	4	3	3	1	251	245	2	-4	-7	2	129	127	7
-6	2	0	40	38	4	-3	9	0	74	83	6	7	-3	1	268	266	4	4	3	1	133	141	2	-3	-7	2	199	215	3
-5	2	0	538	543	3	-2	9	0	97	83	8	-7	-2	1	54	60	4	5	3	1	188	186	4	-2	-7	2	233	236	3
-4	2	0	7	17	6	-1	9	0	137	127	16	-6	-2	1	158	157	3	6	3	1	303	311	3	-1	-7	2	97	95	4
-3	2	0	894	882	3	0	9	0	227	230	6	-5	-2	1	501	510	3	7	3	1	312	323	3	0	-7	2	278	285	3
-2	2	0	1000	939	4	1	9	0	326	321	4	-4	-2	1	213	212	3	-6	4	1	710	734	4	1	-7	2	171	175	3
-1	2	0	185	194	1	2	9	0	35	16	8	-3	-2	1	984	961	3	-5	4	1	35	46	7	2	-7	2	118	114	5
0	2	0	525	519	2	3	9	0	347	366	6	-2	-2	1	835	774	2	-4	4	1	274	281	3	3	-7	2	204	198	4
1	2	0	405	403	1	-3	-9	1	163	147	7	-1	-2	1	76	90	3	-3	4	1	83	95	3	4	-7	2	152	150	5
2	2	0	221	200	1	-2	-9	1	42	31	6	0	-2	1	683	664	3	-2	4	1	632	626	5	5	-7	2	119	106	6
3	2	0	436	428	2	-1	-9	1	201	191	4	1	-2	1	399	402	2	-1	4	1	149	139	2	-6	-6	2	173	164	5
4	2	0	109	109	2	0	-9	1	135	124	7	2	-2	1	41	26	2	0	4	1	222	219	2	-5	-6	2	136	144	3
5	2	0	264	267	3	1	-9	1	121	89	12	3	-2	1	479	474	2	1	4	1	35	31	3	-4	-6	2	273	279	3
6	2	0	198	191	4	2	-9	1	116	101	5	4	-2	1	53	50	3	2	4	1	984	960	5	-3	-6	2	293	290	3
7	2	0	136	120	5	3	-9	1	229	239	5	5	-2	1	288	290	3	3	4	1	263	263	3	-2	-6	2	25	19	6
-7	3	0	43	18	6	-4	-8	1	95	94	6	6	-2	1	189	176	3	4	4	1	20	17	7	-1	-6	2	108	109	3
-6	3	0	106	91	4	-3	-8	1	319	317	4	7	-2	1	164	160	7	5	4	1	156	139	3	0	-6	2	462	476	3
-5	3	0	266	261	3	-2	-8	1	199	199	4	-7	-1	1	175	179	4	6	4	1	212	211	4	1	-6	2	167	160	4
-4	3	0	824	825	5	-1	-8	1	256	256	4	-6	-1	1	158	157	6	-6	5	1	130	125	4	2	-6	2	172	172	4
-3	3	0	109	115	2	0	-8	1	374	377	6	-5	-1	1	327	323	3	-5	5	1	316	308	4	3	-6	2	225	236	4
-2	3	0	900	884	4	1	-8	1	103	103	6	-4	-1	1	594	586	4	-4	5	1	112	108	4	4	-6	2	125	132	4
-1	3	0	261	271	3	2	-8	1	43	13	5	-3	-1	1	120	125	1	-3	5	1	101	98	4	5	-6	2	176	194	7

0 3 0 144 134 2 3 -8 1 35 7 8 -2 -1 1 225 165 1 -2 5 1 135 137 3 6 -6 2 182 166 6
1 3 0 252 256 2 4 -8 1 321 298 7 -1 -1 1 803 794 2 -1 5 1 57 56 4 -6 -5 2 133 141 7
2 3 0 456 437 2 -5 -7 1 226 213 5 0 -1 1 29 69 1 0 5 1 573 583 3 -5 -5 2 218 217 3
3 3 0 465 472 2 -4 -7 1 123 123 4 1 -1 1 441 440 2 1 5 1 479 474 2 -4 -5 2 299 300 3
4 3 0 62 57 3 -3 -7 1 239 248 3 2 -1 1 279 277 2 2 5 1 283 289 2 -3 -5 2 259 265 3
5 3 0 352 359 2 -2 -7 1 77 70 4 3 -1 1 263 246 2 3 5 1 499 499 2 -2 -5 2 104 125 4
6 3 0 328 338 3 -1 -7 1 23 8 23 4 -1 1 99 109 2 4 5 1 248 251 3 -1 -5 2 414 419 2
7 3 0 41 47 5 0 -7 1 29 26 6 5 -1 1 236 235 3 5 5 1 88 78 4 0 -5 2 347 339 5
-6 4 0 43 35 6 1 -7 1 28 15 7 6 -1 1 249 242 3 6 5 1 69 48 7 1 -5 2 501 502 4
-5 4 0 51 52 5 2 -7 1 532 528 4 7 -1 1 314 316 5 -6 6 1 54 56 7 2 -5 2 280 301 4
-4 4 0 1117 1130 7 3 -7 1 256 256 4 -7 0 1 111 91 4 -5 6 1 111 117 9 3 -5 2 281 295 3
-3 4 0 38 29 4 4 -7 1 506 506 7 -6 0 1 221 219 3 -4 6 1 165 184 6 4 -5 2 180 190 3
-2 4 0 713 734 4 5 -7 1 64 34 9 -5 0 1 159 167 7 -3 6 1 488 476 4 5 -5 2 97 81 6
-1 4 0 28 22 5 -6 -6 1 189 193 7 -4 0 1 1691 1703 33 -2 6 1 98 93 4 6 -5 2 66 54 4
0 4 0 940 922 5 -5 -6 1 132 125 3 -3 0 1 331 345 2 -1 6 1 445 442 3 -6 -4 2 167 168 3
1 4 0 294 302 2 -4 -6 1 199 193 3 -2 0 1 2327 2365 6 0 6 1 349 349 3 -5 -4 2 16 13 9
2 4 0 724 717 4 -3 -6 1 221 224 4 -1 0 1 168 200 1 1 6 1 430 445 3 -4 -4 2 757 766 3
3 4 0 150 151 2 -2 -6 1 117 123 3 0 0 1 0 391 1 2 6 1 396 404 3 -3 -4 2 149 159 2
4 4 0 377 389 3 -1 -6 1 60 62 3 1 0 1 46 28 2 3 6 1 690 699 3 -2 -4 2 1533 1540 5
5 4 0 29 12 6 0 -6 1 187 192 5 2 0 1 1243 1227 7 4 6 1 355 372 3 -1 -4 2 288 305 2
6 4 0 112 115 4 1 -6 1 187 177 2 3 0 1 153 139 3 5 6 1 369 391 4 0 -4 2 882 897 4
-6 5 0 165 151 4 2 -6 1 50 31 5 4 0 1 463 468 3 -5 7 1 179 167 7 1 -4 2 73 86 2
-5 5 0 146 134 4 3 -6 1 329 332 4 5 0 1 30 27 6 -4 7 1 165 161 8 2 -4 2 596 583 3
-4 5 0 109 109 3 4 -6 1 26 10 10 6 0 1 220 225 4 -3 7 1 159 151 10 3 -4 2 42 36 4
-3 5 0 362 363 3 5 -6 1 195 203 4 7 0 1 128 101 4 -2 7 1 419 432 4 4 -4 2 251 255 3
-2 5 0 128 134 3 6 -6 1 45 32 7 -7 1 1 207 204 5 -1 7 1 152 148 4 5 -4 2 215 215 5
-1 5 0 363 370 5 -6 -5 1 234 241 3 -6 1 1 222 207 4 0 7 1 179 178 3 6 -4 2 279 293 4
0 5 0 220 237 2 -5 -5 1 370 364 3 -5 1 1 54 52 4 1 7 1 28 16 9 -7 -3 2 73 70 6
1 5 0 141 137 2 -4 -5 1 81 78 3 -4 1 1 112 132 3 2 7 1 248 255 3 -6 -3 2 204 191 5
2 5 0 284 298 10 -3 -5 1 76 80 3 -3 1 1 101 88 2 3 7 1 35 23 8 -5 -3 2 21 20 6
3 5 0 151 153 4 -2 -5 1 161 164 2 -2 1 1 37 21 2 4 7 1 255 264 5 -4 -3 2 310 333 3
4 5 0 56 60 3 -1 -5 1 692 692 3 -1 1 1 312 315 1 5 7 1 100 99 7 -3 -3 2 379 385 2
5 5 0 375 378 3 0 -5 1 32 12 5 0 1 1 143 162 1 -4 8 1 493 502 7 -2 -3 2 219 234 1
6 5 0 176 181 4 1 -5 1 169 164 6 1 1 1 11 20 9 -3 8 1 62 42 5 -1 -3 2 88 101 2
-6 6 0 148 142 8 2 -5 1 193 219 3 2 1 1 143 133 2 -2 8 1 47 20 6 0 -3 2 60 80 2
-5 6 0 270 288 6 3 -5 1 355 361 3 3 1 1 21 5 14 -1 8 1 99 96 5 1 -3 2 26 27 3
-4 6 0 60 44 6 4 -5 1 256 258 3 4 1 1 264 268 4 0 8 1 48 45 5 2 -3 2 76 76 6
-3 6 0 495 500 4 5 -5 1 30 21 7 5 1 1 157 150 3 1 8 1 66 54 7 3 -3 2 224 231 2
-2 6 0 180 175 4 6 -5 1 106 91 5 6 1 1 158 144 4 2 8 1 266 275 4 4 -3 2 416 408 3
-1 6 0 219 219 2 -6 -4 1 267 279 3 7 1 1 338 336 4 3 8 1 226 234 3 5 -3 2 231 232 3
0 6 0 104 98 3 -5 -4 1 45 26 3 -7 2 1 194 176 7 4 8 1 219 214 5 6 -3 2 129 127 4
1 6 0 174 165 2 -4 -4 1 50 39 5 -6 2 1 285 294 5 -3 9 1 46 17 15 7 -3 2 149 140 5
2 6 0 122 125 3 -3 -4 1 194 187 3 -5 2 1 409 408 3 -2 9 1 51 7 7 -7 -2 2 257 247 3

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	-2	2	381	381	3	6	3	2	57	31	5	0	-7	3	399	407	3	6	-1	3	118	120	8	6	5	3	110	107	4
-5	-2	2	102	96	3	7	3	2	243	235	3	1	-7	3	139	133	3	7	-1	3	350	354	5	-6	6	3	87	83	6
-4	-2	2	337	344	1	-6	4	2	515	544	4	2	-7	3	200	210	6	-7	0	3	252	249	5	-5	6	3	93	81	6
-3	-2	2	1178	1159	3	-5	4	2	102	103	4	3	-7	3	34	24	8	-6	0	3	380	385	4	-4	6	3	162	161	4
-2	-2	2	426	428	3	-4	4	2	826	823	5	4	-7	3	325	327	6	-5	0	3	60	58	3	-3	6	3	926	926	6
-1	-2	2	569	579	2	-3	4	2	46	49	4	5	-7	3	228	222	5	-4	0	3	821	791	4	-2	6	3	645	647	4
0	-2	2	156	162	3	-2	4	2	110	120	3	-6	-6	3	290	283	4	-3	0	3	457	432	2	-1	6	3	1618	1598	7
1	-2	2	10	17	9	-1	4	2	68	67	3	-5	-6	3	29	8	6	-2	0	3	0	9	1	0	6	3	259	265	2
2	-2	2	10	31	10	0	4	2	187	190	2	-4	-6	3	377	391	4	-1	0	3	68	60	2	1	6	3	851	841	4
3	-2	2	685	673	3	1	4	2	121	108	2	-3	-6	3	373	375	3	0	0	3	222	220	2	2	6	3	130	131	3
4	-2	2	95	109	3	2	4	2	638	629	2	-2	-6	3	20	26	10	1	0	3	200	200	1	3	6	3	125	126	4
5	-2	2	651	661	3	3	4	2	33	18	4	-1	-6	3	277	277	2	2	0	3	775	781	3	4	6	3	32	13	6
6	-2	2	116	110	3	4	4	2	625	621	3	0	-6	3	531	534	4	3	0	3	474	455	3	5	6	3	28	31	10
7	-2	2	188	181	5	5	4	2	274	276	4	1	-6	3	149	144	4	4	0	3	1045	1014	5	-5	7	3	79	101	9
-7	-1	2	206	193	4	6	4	2	126	114	4	2	-6	3	144	147	4	5	0	3	141	135	3	-4	7	3	68	44	8
-6	-1	2	277	267	3	-6	5	2	95	81	4	3	-6	3	298	309	4	6	0	3	29	18	9	-3	7	3	307	307	4
-5	-1	2	172	164	5	-5	5	2	394	390	4	4	-6	3	286	296	3	7	0	3	288	287	7	-2	7	3	39	33	7
-4	-1	2	252	250	1	-4	5	2	131	142	4	5	-6	3	465	479	4	-7	1	3	104	89	5	-1	7	3	60	48	6
-3	-1	2	498	493	1	-3	5	2	43	43	5	6	-6	3	76	69	5	-6	1	3	225	227	4	0	7	3	303	307	4
-2	-1	2	19	29	5	-2	5	2	353	377	4	-6	-5	3	42	14	5	-5	1	3	225	229	3	1	7	3	322	325	6
-1	-1	2	497	488	1	-1	5	2	341	349	5	-5	-5	3	145	137	3	-4	1	3	476	483	3	2	7	3	68	65	4
0	-1	2	672	647	2	0	5	2	454	472	3	-4	-5	3	301	315	3	-3	1	3	133	127	2	3	7	3	111	108	5
1	-1	2	1023	1009	4	1	5	2	168	176	2	-3	-5	3	508	525	3	-2	1	3	324	294	1	4	7	3	181	160	4
2	-1	2	91	110	1	2	5	2	504	517	3	-2	-5	3	125	122	2	-1	1	3	273	263	1	5	7	3	106	114	7
3	-1	2	219	209	1	3	5	2	144	137	2	-1	-5	3	138	141	2	0	1	3	205	187	1	-4	8	3	236	219	7
4	-1	2	0	12	1	4	5	2	57	54	3	0	-5	3	696	682	3	1	1	3	356	348	1	-3	8	3	121	113	5
5	-1	2	252	266	3	5	5	2	32	9	6	1	-5	3	747	754	7	2	1	3	123	128	2	-2	8	3	121	101	10
6	-1	2	172	158	4	6	5	2	86	73	5	2	-5	3	232	239	3	3	1	3	0	22	1	-1	8	3	194	187	6
7	-1	2	221	219	5	-6	6	2	70	59	6	3	-5	3	234	237	3	4	1	3	162	179	4	0	8	3	23	10	15
-7	0	2	123	115	5	-5	6	2	106	99	5	4	-5	3	58	63	4	5	1	3	212	219	4	1	8	3	108	103	4
-6	0	2	854	870	4	-4	6	2	134	141	4	5	-5	3	359	356	7	6	1	3	214	217	7	2	8	3	27	6	9
-5	0	2	18	8	12	-3	6	2	228	225	3	6	-5	3	43	25	8	7	1	3	319	301	4	3	8	3	34	1	7
-4	0	2	921	911	4	-2	6	2	301	315	4	-6	-4	3	543	563	5	-7	2	3	156	145	7	4	8	3	71	42	6
-3	0	2	93	87	2	-1	6	2	242	255	3	-5	-4	3	107	102	3	-6	2	3	60	51	11	-3	9	3	514	507	16
-2	0	2	172	196	2	0	6	2	986	985	4	-4	-4	3	960	966	3	-5	2	3	447	456	3	-2	9	3	53	13	7
-1	0	2	34	9	1	1	6	2	953	965	7	-3	-4	3	12	13	11	-4	2	3	175	178	3	-1	9	3	79	54	6
0	0	2	344	313	2	2	6	2	850	849	4	-2	-4	3	166	178	2	-3	2	3	558	534	2	0	9	3	55	21	9
1	0	2	231	223	1	3	6	2	649	659	4	-1	-4	3	163	169	2	-2	2	3	37	34	3	1	9	3	215	213	6
2	0	2	874	882	4	4	6	2	65	50	5	0	-4	3	340	350	3	-1	2	3	742	723	2	2	9	3	222	220	4
3	0	2	342	328	4	5	6	2	34	17	8	1	-4	3	385	400	2	0	2	3	776	778	3	-3	-9	4	293	308	9
4	0	2	243	242	3	-5	7	2	111	102	8	2	-4	3	976	980	6	1	2	3	1179	1168	3	-2	-9	4	173	158	4
5	0	2	182	178	3	-4	7	2	85	72	7	3	-4	3	48	45	4	2	2	3	1825	1810	7	-1	-9	4	109	100	8
6	0	2	151	143	4	-3	7	2	53	19	5	4	-4	3	546	555	3	3	2	3	1242	1252	6	0	-9	4	219	217	6
7	0	2	76	69	9	-2	7	2	169	171	6	5	-4	3	268	256	7	4	2	3	503	510	9	1	-9	4	295	295	6

-7 1 2 166 165 4 -1 7 2 68 66 5 6-4 3 73 70 4 5 2 3 46 35 5 2-9 4 279 264 4
-6 1 2 176 174 4 0 7 2 327 327 3 -7-3 3 117 107 10 6 2 3 180 174 4 3-9 4 76 78 7
-5 1 2 184 181 3 1 7 2 147 143 4 -6-3 3 118 101 5 7 2 3 219 220 5 -4-8 4 468 463 6
-4 1 2 293 301 2 2 7 2 39 32 6 -5-3 3 37 37 3 -7 3 3 70 58 15 -3-8 4 46 32 6
-3 1 2 425 415 2 3 7 2 413 415 3 -4-3 3 714 709 2 -6 3 3 131 119 3 -2-8 4 361 359 5
-2 1 2 188 189 1 4 7 2 232 239 4 -3-3 3 288 282 1 -5 3 3 139 143 4 -1-8 4 196 203 4
-1 1 2 557 560 2 5 7 2 187 170 9 -2-3 3 768 741 3 -4 3 3 410 425 5 0-8 4 292 291 4
0 1 2 143 173 1 -4 8 2 139 135 7 -1-3 3 214 237 2 -3 3 3 108 106 2 1-8 4 313 316 6
1 1 2 607 601 2 -3 8 2 190 174 5 0-3 3 1033 994 4 -2 3 3 263 276 2 2-8 4 371 387 4
2 1 2 343 344 3 -2 8 2 172 154 4 1-3 3 355 346 2 -1 3 3 436 428 2 3-8 4 102 96 5
3 1 2 712 685 5 -1 8 2 39 13 6 2-3 3 754 715 3 0 3 3 103 67 1 4-8 4 428 424 4
4 1 2 159 156 4 0 8 2 72 59 6 3-3 3 270 269 2 1 3 3 400 401 3 -5-7 4 40 14 26
5 1 2 175 169 4 1 8 2 90 82 11 4-3 3 142 132 7 2 3 3 121 126 1 -4-7 4 337 343 10
6 1 2 56 56 5 2 8 2 326 337 4 5-3 3 310 313 3 3 3 3 812 808 3 -3-7 4 136 129 5
7 1 2 134 107 4 3 8 2 125 126 5 6-3 3 298 313 5 4 3 3 107 99 3 -2-7 4 514 520 4
-7 2 2 323 307 7 4 8 2 326 342 8 7-3 3 237 229 4 5 3 3 257 257 4 -1-7 4 356 358 5
-6 2 2 39 23 5 -3 9 2 45 6 8 -7-2 3 231 210 3 6 3 3 61 57 5 0-7 4 200 197 5
-5 2 2 117 116 3 -2 9 2 63 28 6 -6-2 3 42 38 4 7 3 3 101 94 4 1-7 4 152 148 4
-4 2 2 128 120 3 -1 9 2 411 389 5 -5-2 3 273 275 2 -6 4 3 137 134 4 2-7 4 252 248 7
-3 2 2 1128 1111 4 0 9 2 187 182 7 -4-2 3 295 282 1 -5 4 3 109 104 4 3-7 4 98 88 4
-2 2 2 315 311 2 1 9 2 227 223 4 -3-2 3 898 878 4 -4 4 3 171 168 4 4-7 4 198 198 9
-1 2 2 1179 1140 5 2 9 2 161 144 5 -2-2 3 423 403 1 -3 4 3 25 9 5 5-7 4 37 40 11
0 2 2 192 195 1 -3-9 3 222 237 4 -1-2 3 1340 1296 6 -2 4 3 158 155 2 -6-6 4 80 82 5
1 2 2 404 391 1 -2-9 3 199 204 4 0-2 3 135 145 2 -1 4 3 50 63 2 -5-6 4 77 64 4
2 2 2 119 132 5 -1-9 3 103 90 7 1-2 3 686 667 3 0 4 3 148 131 2 -4-6 4 424 443 4
3 2 2 849 826 3 0-9 3 251 262 13 2-2 3 307 297 2 1 4 3 37 45 2 -3-6 4 186 198 5
4 2 2 115 117 3 1-9 3 294 298 9 3-2 3 343 334 3 2 4 3 696 683 2 -2-6 4 247 251 3
5 2 2 837 842 5 2-9 3 67 48 6 4-2 3 68 67 3 3 4 3 168 183 2 -1-6 4 437 437 6
6 2 2 253 246 6 3-9 3 137 113 5 5-2 3 815 828 4 4 4 3 521 521 3 0-6 4 172 177 3
7 2 2 364 359 4 -4-8 3 153 147 5 6-2 3 350 360 3 5 4 3 93 69 4 1-6 4 190 194 3
-7 3 2 182 180 14 -3-8 3 113 96 4 7-2 3 509 512 5 6 4 3 167 173 4 2-6 4 187 190 4
-6 3 2 87 71 8 -2-8 3 511 533 4 -7-1 3 225 228 3 -6 5 3 98 86 4 3-6 4 121 110 3
-5 3 2 154 164 4 -1-8 3 281 286 4 -6-1 3 244 247 3 -5 5 3 179 178 4 4-6 4 154 150 3
-4 3 2 170 166 3 0-8 3 636 629 4 -5-1 3 76 79 3 -4 5 3 33 24 11 5-6 4 368 368 4
-3 3 2 123 124 2 1-8 3 150 140 4 -4-1 3 156 161 1 -3 5 3 111 115 4 6-6 4 310 297 9
-2 3 2 305 313 2 2-8 3 140 137 4 -3-1 3 731 705 2 -2 5 3 352 376 3 -6-5 4 308 314 9
-1 3 2 322 327 2 3-8 3 126 109 5 -1-1 3 485 479 1 -1 5 3 393 397 2 -5-5 4 98 93 3
0 3 2 446 398 2 4-8 3 42 25 9 0-1 3 471 459 1 0 5 3 193 192 2 -4-5 4 30 43 5
1 3 2 69 74 3 -5-7 3 43 23 8 1-1 3 607 582 2 1 5 3 216 223 3 -3-5 4 585 589 4
2 3 2 195 195 2 -4-7 3 43 15 11 2-1 3 127 108 1 2 5 3 416 423 3 -2-5 4 189 202 4
3 3 2 165 164 2 -3-7 3 237 245 3 3-1 3 276 275 1 3 5 3 149 146 3 -1-5 4 522 537 3
4 3 2 204 200 3 -2-7 3 38 41 6 4-1 3 500 506 3 4 5 3 21 6 9 0-5 4 147 130 2
5 3 2 353 357 6 -1-7 3 227 238 3 5-1 3 343 354 3 5 5 3 80 68 10 1-5 4 328 337 3

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	-5	4	195	198	2	3	1	4	366	370	3	0	8	4	29	27	12	5	-3	5	263	268	3	2	3	5	889	870	3
3	-5	4	191	198	3	4	1	4	13	13	13	1	8	4	102	100	16	6	-3	5	67	68	4	3	3	5	245	252	2
4	-5	4	366	376	3	5	1	4	103	92	5	2	8	4	127	119	5	7	-3	5	100	66	5	4	3	5	256	252	6
5	-5	4	273	269	6	6	1	4	23	25	23	3	8	4	141	122	4	-7	-2	5	490	482	3	5	3	5	399	395	14
6	-5	4	169	144	4	7	1	4	222	196	4	4	8	4	143	128	6	-6	-2	5	61	62	3	6	3	5	431	428	7
-6	-4	4	39	30	5	-7	2	4	432	417	7	-2	9	4	109	87	10	-5	-2	5	29	25	3	7	3	5	246	227	4
-5	-4	4	138	132	2	-6	2	4	41	25	10	-1	9	4	180	173	5	-4	-2	5	67	63	2	-6	4	5	103	99	4
-4	-4	4	378	383	3	-5	2	4	51	51	4	0	9	4	93	81	7	-3	-2	5	459	454	3	-5	4	5	296	297	3
-3	-4	4	0	6	1	-4	2	4	40	32	6	1	9	4	271	275	6	-2	-2	5	1598	1560	4	-4	4	5	517	520	3
-2	-4	4	320	311	7	-3	2	4	1079	1066	4	2	9	4	160	144	21	-1	-2	5	2248	2276	8	-3	4	5	136	128	3
-1	-4	4	346	338	2	-2	2	4	1574	1547	5	-3	-9	5	164	159	4	0	-2	5	1699	1660	6	-2	4	5	550	546	3
0	-4	4	184	188	2	-1	2	4	2664	2703	9	-2	-9	5	155	125	4	1	-2	5	2139	2185	8	-1	4	5	24	24	4
1	-4	4	169	172	2	0	2	4	1687	1641	7	-1	-9	5	281	276	4	2	-2	5	597	611	2	0	4	5	32	30	5
2	-4	4	429	439	2	1	2	4	1628	1664	5	0	-9	5	218	206	6	3	-2	5	769	766	3	1	4	5	216	230	2
3	-4	4	233	239	4	2	2	4	474	476	2	1	-9	5	139	136	13	4	-2	5	45	32	5	2	4	5	9	26	9
4	-4	4	765	774	4	3	2	4	329	332	3	2	-9	5	37	36	9	5	-2	5	163	154	4	3	4	5	191	210	2
5	-4	4	134	127	4	4	2	4	34	22	16	3	-9	5	71	94	6	6	-2	5	187	178	5	4	4	5	388	395	3
6	-4	4	134	127	4	5	2	4	209	210	4	-4	-8	5	54	39	7	7	-2	5	290	291	4	5	4	5	197	198	3
-7	-3	4	97	70	7	6	2	4	86	82	5	-3	-8	5	49	21	5	-7	-1	5	134	134	3	6	4	5	138	141	4
-6	-3	4	633	638	3	7	2	4	336	350	4	-2	-8	5	184	184	4	-6	-1	5	106	98	3	-6	5	5	89	93	5
-5	-3	4	71	72	2	-7	3	4	109	120	6	-1	-8	5	200	203	4	-5	-1	5	414	415	2	-5	5	5	225	219	4
-4	-3	4	229	234	3	-6	3	4	210	206	3	0	-8	5	96	90	4	-4	-1	5	266	261	1	-4	5	5	130	122	4
-3	-3	4	123	125	1	-5	3	4	255	258	4	1	-8	5	192	191	4	-3	-1	5	177	186	1	-3	5	5	156	149	3
-2	-3	4	1018	971	3	-4	3	4	176	186	3	2	-8	5	39	22	7	-2	-1	5	145	126	1	-2	5	5	99	99	3
-1	-3	4	198	207	2	-3	3	4	617	633	3	3	-8	5	123	126	5	-1	-1	5	25	11	2	-1	5	5	148	147	2
0	-3	4	377	363	2	-2	3	4	150	147	2	4	-8	5	325	317	4	0	-1	5	60	55	1	0	5	5	486	482	6
1	-3	4	343	325	2	-1	3	4	364	365	2	-5	-7	5	32	9	8	1	-1	5	226	225	1	1	5	5	459	481	2
2	-3	4	760	736	3	0	3	4	121	149	1	-4	-7	5	183	170	5	2	-1	5	152	155	2	2	5	5	37	34	3
3	-3	4	331	348	3	1	3	4	728	707	3	-3	-7	5	46	50	7	3	-1	5	241	233	2	3	5	5	369	384	3
4	-3	4	259	281	3	2	3	4	20	23	4	-2	-7	5	301	296	3	4	-1	5	80	67	2	4	5	5	26	7	6
5	-3	4	267	277	3	3	3	4	42	46	3	-1	-7	5	0	4	1	5	-1	5	155	151	2	5	5	5	274	288	4
6	-3	4	388	404	4	4	3	4	177	178	6	0	-7	5	126	121	4	6	-1	5	127	124	4	6	5	5	103	76	6
7	-3	4	270	250	5	5	3	4	260	263	5	1	-7	5	23	14	11	7	-1	5	24	10	24	-5	6	5	251	238	4
-7	-2	4	41	9	4	6	3	4	218	221	4	2	-7	5	397	404	4	-7	0	5	151	142	8	-4	6	5	274	283	11
-6	-2	4	111	111	4	7	3	4	35	4	7	3	-7	5	34	13	7	-6	0	5	237	246	3	-3	6	5	322	321	4
-5	-2	4	423	431	2	-6	4	4	289	290	4	4	-7	5	137	135	4	-5	0	5	173	167	3	-2	6	5	175	173	8
-4	-2	4	219	224	1	-5	4	4	140	131	7	5	-7	5	106	60	6	-4	0	5	1140	1117	5	-1	6	5	176	181	3
-3	-2	4	393	372	2	-4	4	4	676	667	4	-6	-6	5	65	59	5	-3	0	5	577	561	2	0	6	5	127	128	5
-2	-2	4	699	675	2	-3	4	4	249	264	3	-5	-6	5	70	60	13	-2	0	5	94	71	4	1	6	5	540	541	3
-1	-2	4	1015	1002	5	-2	4	4	67	67	3	-4	-6	5	160	150	4	-1	0	5	416	410	1	2	6	5	184	192	3
0	-2	4	132	148	2	-1	4	4	275	274	2	-3	-6	5	9	24	8	0	0	5	299	321	1	3	6	5	392	399	3
1	-2	4	539	524	3	0	4	4	15	29	8	-2	-6	5	314	308	3	1	0	5	0	14	1	4	6	5	325	340	3
2	-2	4	1614	1599	5	1	4	4	91	91	2	-1	-6	5	453	453	4	2	0	5	748	685	3	5	6	5	168	158	5
3	-2	4	1333	1345	4	2	4	4	143	145	1	0	-6	5	117	120	3	3	0	5	393	393	2	-5	7	5	161	132	7

4 -2 4 453 456 3 3 4 4 241 254 2 1 -6 5 113 96 4 4 0 5 314 307 3 -4 7 5 90 95 10
5 -2 4 235 237 3 4 4 4 97 88 4 2 -6 5 504 508 4 5 0 5 264 263 2 -3 7 5 36 15 8
6 -2 4 125 115 3 5 4 4 100 84 7 3 -6 5 701 712 4 6 0 5 96 94 4 -2 7 5 186 179 4
7 -2 4 225 231 4 6 4 4 136 128 4 4 -6 5 266 267 5 7 0 5 231 240 7 -1 7 5 145 146 4
-7 -1 4 52 35 11 -6 5 4 101 82 10 5 -6 5 305 319 4 -7 1 5 126 121 7 0 7 5 224 235 3
-6 -1 4 198 197 3 -5 5 4 264 273 5 -6 -5 5 134 135 4 -6 1 5 169 167 5 1 7 5 176 175 7
-5 -1 4 49 50 5 -4 5 4 181 182 4 -5 -5 5 201 202 3 -5 1 5 281 289 4 2 7 5 342 354 5
-4 -1 4 524 530 2 -3 5 4 613 614 3 -4 -5 5 429 433 3 -4 1 5 412 412 3 3 7 5 265 264 3
-3 -1 4 224 228 1 -2 5 4 135 137 3 -3 -5 5 38 40 5 -3 1 5 811 803 3 4 7 5 250 263 3
-1 -1 4 506 467 1 -1 5 4 243 260 3 -2 -5 5 27 11 6 -2 1 5 166 163 3 5 7 5 99 59 13
0 -1 4 565 574 2 0 5 4 62 73 3 -1 -5 5 331 340 2 -1 1 5 663 660 2 -4 8 5 413 417 7
1 -1 4 686 680 2 1 5 4 160 162 2 0 -5 5 275 278 2 0 1 5 389 372 1 -3 8 5 86 58 5
2 -1 4 27 34 2 2 5 4 412 411 3 1 -5 5 420 424 3 1 1 5 291 269 1 -2 8 5 546 551 5
3 -1 4 861 856 3 3 5 4 233 244 2 2 -5 5 235 233 2 2 1 5 505 485 2 -1 8 5 158 150 4
4 -1 4 41 39 3 4 5 4 3 1 3 3 -5 5 643 644 3 3 1 5 79 73 3 0 8 5 121 109 7
5 -1 4 244 246 2 5 5 4 353 369 6 4 -5 5 268 274 3 4 1 5 56 59 6 1 8 5 201 199 6
6 -1 4 137 136 3 6 5 4 71 60 8 5 -5 5 210 216 3 5 1 5 282 280 5 2 8 5 37 3 6
7 -1 4 35 34 10 -5 6 4 273 278 4 6 -5 5 103 95 5 6 1 5 186 189 3 3 8 5 439 440 6
-7 0 4 88 85 4 -4 6 4 281 287 4 -6 -4 5 46 23 3 7 1 5 63 77 5 4 8 5 173 164 6
-6 0 4 180 169 4 -3 6 4 662 671 5 -5 -4 5 251 250 3 -7 2 5 256 261 5 -2 9 5 122 94 5
-5 0 4 330 328 5 -2 6 4 134 138 4 -4 -4 5 184 178 2 -6 2 5 70 78 6 -1 9 5 392 382 6
-4 0 4 549 537 3 -1 6 4 400 395 3 -3 -4 5 64 69 2 -5 2 5 461 473 5 0 9 5 52 42 9
-3 0 4 150 156 1 0 6 4 260 263 4 -2 -4 5 102 109 3 -4 2 5 368 368 3 1 9 5 122 101 8
-2 0 4 249 242 1 1 6 4 762 753 6 -1 -4 5 22 14 4 -3 2 5 1291 1310 5 2 9 5 58 51 12
-1 0 4 440 442 2 2 6 4 0 9 1 0 -4 5 115 128 2 -2 2 5 697 696 5 -3 -9 6 81 70 5
0 0 4 395 407 1 3 6 4 158 157 3 1 -4 5 276 275 2 -1 2 5 458 402 3 -2 -9 6 207 189 4
1 0 4 712 705 3 4 6 4 379 395 5 2 -4 5 362 363 3 0 2 5 5 12 5 -1 -9 6 177 172 6
2 0 4 1008 959 4 5 6 4 170 170 4 3 -4 5 73 62 3 1 2 5 625 644 2 0 -9 6 258 243 5
3 0 4 174 178 2 -5 7 4 146 124 10 4 -4 5 325 317 3 2 2 5 67 56 2 1 -9 6 168 152 7
4 0 4 567 535 3 -4 7 4 162 162 7 5 -4 5 37 26 6 3 2 5 114 107 3 2 -9 6 239 236 11
5 0 4 188 193 3 -3 7 4 277 271 4 6 -4 5 305 314 4 4 2 5 529 537 9 3 -9 6 398 413 4
6 0 4 176 186 5 -2 7 4 123 121 4 -7 -3 5 41 18 5 5 2 5 321 327 4 -4 -8 6 39 23 10
7 0 4 40 32 17 -1 7 4 431 437 4 -6 -3 5 309 317 2 6 2 5 179 175 4 -3 -8 6 100 84 6
-7 1 4 108 99 12 0 7 4 73 76 3 -5 -3 5 49 43 2 7 2 5 104 105 5 -2 -8 6 132 117 4
-6 1 4 209 203 5 1 7 4 23 16 10 -4 -3 5 487 486 1 -7 3 5 247 248 5 -1 -8 6 61 45 5
-5 1 4 12 9 11 2 7 4 200 196 3 -3 -3 5 167 157 1 -6 3 5 93 100 6 0 -8 6 24 16 11
-4 1 4 244 255 2 3 7 4 157 141 3 -2 -3 5 415 412 2 -5 3 5 262 265 3 1 -8 6 186 187 4
-3 1 4 129 125 2 4 7 4 249 243 6 -1 -3 5 112 109 2 -4 3 5 111 108 4 2 -8 6 38 1 11
-2 1 4 92 62 1 5 7 4 352 362 6 0 -3 5 199 219 2 -3 3 5 165 183 2 3 -8 6 182 180 4
-1 1 4 444 436 2 -4 8 4 271 261 9 1 -3 5 101 117 2 -2 3 5 0 15 1 4 -8 6 132 111 4
0 1 4 369 375 1 -3 8 4 47 30 6 2 -3 5 32 25 4 -1 3 5 598 594 2 -5 -7 6 32 3 9
1 1 4 87 80 1 -2 8 4 282 280 4 3 -3 5 565 592 2 0 3 5 131 124 1 -4 -7 6 359 355 5
2 1 4 275 263 2 -1 8 4 200 195 4 4 -3 5 44 35 4 1 3 5 453 460 2 -3 -7 6 282 274 4

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	-7	6	247	249	3	4	-1	6	36	39	3	5	5	6	403	408	5	5	-5	7	205	200	4	5	1	7	467	464	4
-1	-7	6	120	126	4	5	-1	6	199	197	2	6	5	6	122	101	6	6	-5	7	87	76	9	6	1	7	144	138	3
0	-7	6	244	248	3	6	-1	6	100	91	4	-5	6	6	432	428	5	-6	-4	7	184	172	2	7	1	7	169	159	5
1	-7	6	28	23	9	7	-1	6	102	107	10	-4	6	6	89	83	5	-5	-4	7	394	387	2	-7	2	7	157	167	5
2	-7	6	115	106	4	-7	0	6	196	187	3	-3	6	6	206	209	3	-4	-4	7	217	217	1	-6	2	7	309	312	6
3	-7	6	153	154	4	-6	0	6	29	8	11	-2	6	6	62	58	5	-3	-4	7	219	209	2	-5	2	7	614	611	3
4	-7	6	235	226	4	-5	0	6	323	325	3	-1	6	6	27	16	7	-2	-4	7	710	702	8	-4	2	7	558	582	4
5	-7	6	235	233	6	-4	0	6	510	492	3	0	6	6	176	189	2	-1	-4	7	169	172	2	-3	2	7	826	816	3
-6	-6	6	29	8	12	-3	0	6	29	42	3	1	6	6	303	307	2	0	-4	7	272	257	2	-2	2	7	79	76	3
-5	-6	6	83	76	4	-2	0	6	237	277	2	2	6	6	205	207	3	1	-4	7	62	56	3	-1	2	7	670	636	3
-4	-6	6	109	118	4	-1	0	6	60	71	1	3	6	6	453	459	3	2	-4	7	297	286	2	0	2	7	454	426	2
-3	-6	6	34	23	6	0	0	6	65	63	4	4	6	6	180	175	3	3	-4	7	333	332	2	1	2	7	424	423	2
-2	-6	6	688	687	5	1	0	6	166	168	2	5	6	6	171	163	4	4	-4	7	625	631	3	2	2	7	304	310	4
-1	-6	6	897	903	5	2	0	6	785	727	3	-5	7	6	60	38	10	5	-4	7	215	203	3	3	2	7	734	726	4
0	-6	6	862	861	4	3	0	6	391	377	2	-4	7	6	200	201	10	6	-4	7	324	346	8	4	2	7	24	16	8
1	-6	6	1599	1631	8	4	0	6	699	691	4	-3	7	6	99	74	4	-7	-3	7	181	157	3	5	2	7	361	383	5
2	-6	6	310	330	4	5	0	6	63	63	3	-2	7	6	8	8	8	-6	-3	7	155	157	2	6	2	7	256	260	5
3	-6	6	936	938	4	6	0	6	214	217	3	-1	7	6	150	146	4	-5	-3	7	559	561	2	7	2	7	187	168	4
4	-6	6	191	189	3	7	0	6	197	209	12	0	7	6	120	116	4	-4	-3	7	87	79	1	-7	3	7	131	123	6
5	-6	6	118	93	4	-7	1	6	247	243	5	1	7	6	203	222	4	-3	-3	7	364	367	3	-6	3	7	123	124	3
-6	-5	6	66	58	4	-6	1	6	85	78	12	2	7	6	55	47	4	-2	-3	7	550	554	4	-5	3	7	73	63	3
-5	-5	6	330	331	3	-5	1	6	285	283	3	3	7	6	27	7	10	-1	-3	7	973	932	3	-4	3	7	101	94	3
-4	-5	6	135	140	3	-4	1	6	79	76	4	4	7	6	79	77	8	0	-3	7	164	185	3	-3	3	7	440	445	3
-3	-5	6	91	84	8	-3	1	6	69	65	2	-4	8	6	46	30	12	1	-3	7	708	691	3	-2	3	7	480	482	2
-2	-5	6	180	178	3	-2	1	6	129	134	1	-3	8	6	62	36	6	2	-3	7	397	394	2	-1	3	7	481	479	3
-1	-5	6	365	372	5	-1	1	6	679	663	2	-2	8	6	337	343	4	3	-3	7	132	130	2	0	3	7	124	117	2
0	-5	6	164	167	2	0	1	6	933	929	3	-1	8	6	606	599	5	4	-3	7	113	107	3	1	3	7	150	166	2
1	-5	6	138	140	3	1	1	6	132	144	2	0	8	6	116	109	5	5	-3	7	18	19	18	2	3	7	430	436	2
2	-5	6	67	60	3	2	1	6	641	590	3	1	8	6	733	755	7	6	-3	7	55	39	4	3	3	7	116	128	5
3	-5	6	230	236	2	3	1	6	286	294	3	2	8	6	239	232	7	7	-3	7	181	177	7	4	3	7	311	324	3
4	-5	6	198	200	3	4	1	6	108	111	3	3	8	6	460	461	5	-7	-2	7	379	375	3	5	3	7	296	298	6
5	-5	6	143	134	4	5	1	6	170	163	5	4	8	6	44	13	7	-6	-2	7	338	344	2	6	3	7	77	63	6
6	-5	6	46	12	8	6	1	6	106	108	4	-2	9	6	139	124	5	-5	-2	7	730	729	2	-6	4	7	301	305	5
-6	-4	6	117	128	7	7	1	6	294	317	4	-1	9	6	229	211	5	-4	-2	7	254	265	1	-5	4	7	145	146	4
-5	-4	6	315	311	5	-7	2	6	487	491	5	0	9	6	60	23	9	-3	-2	7	498	492	2	-4	4	7	48	43	5
-4	-4	6	745	741	2	-6	2	6	394	397	5	1	9	6	291	287	5	-2	-2	7	96	95	2	-3	4	7	36	39	4
-3	-4	6	173	183	2	-5	2	6	501	499	4	2	9	6	316	317	8	-1	-2	7	175	154	2	-2	4	7	522	513	3
-2	-4	6	219	215	3	-4	2	6	51	55	3	-3	-9	7	51	3	15	0	-2	7	212	196	1	-1	4	7	440	455	2
-1	-4	6	320	318	2	-3	2	6	116	113	2	-2	-9	7	75	46	5	1	-2	7	659	656	2	0	4	7	187	174	2
0	-4	6	157	164	2	-2	2	6	308	304	2	-1	-9	7	261	266	4	2	-2	7	413	405	2	1	4	7	1278	1294	5
1	-4	6	163	155	2	-1	2	6	43	68	2	0	-9	7	66	49	6	3	-2	7	779	772	3	2	4	7	590	624	3
2	-4	6	24	18	5	0	2	6	434	414	2	1	-9	7	221	219	7	4	-2	7	255	271	3	3	4	7	1144	1146	5
3	-4	6	123	119	5	1	2	6	828	821	3	2	-9	7	60	57	5	5	-2	7	74	70	5	4	4	7	231	233	2
4	-4	6	222	214	2	2	2	6	84	85	2	3	-9	7	76	59	5	6	-2	7	329	342	5	5	4	7	169	166	4

5-4 6 51 40 5 3 2 6 714 704 5 -4-8 7 230 233 5 7-2 7 267 251 4 6 4 7 242 238 4
6-4 6 138 121 5 4 2 6 49 54 10 -3-8 7 68 75 4 -7-1 7 32 12 6 -6 5 7 188 168 5
-7-3 6 111 107 3 5 2 6 141 143 4 -2-8 7 297 311 4 -6-1 7 196 193 2 -5 5 7 153 142 4
-6-3 6 157 148 6 6 2 6 464 450 5 -1-8 7 159 162 3 -5-1 7 206 207 1 -4 5 7 26 25 26
-5-3 6 156 165 2 7 2 6 287 269 4 0-8 7 65 46 6 -4-1 7 482 483 1 -3 5 7 284 294 3
-4-3 6 389 376 1 -7 3 6 166 168 5 1-8 7 53 34 7 -3-1 7 291 284 1 -2 5 7 122 121 3
-3-3 6 935 923 3 -6 3 6 185 191 3 2-8 7 157 146 4 -2-1 7 28 12 2 -1 5 7 89 86 5
-2-3 6 0 13 1 -5 3 6 87 86 4 3-8 7 225 223 3 -1-1 7 397 398 6 0 5 7 191 203 2
-1-3 6 1137 1103 4 -4 3 6 164 165 3 4-8 7 133 124 4 0-1 7 932 915 9 1 5 7 708 710 3
0-3 6 53 79 3 -3 3 6 263 271 2 -5-7 7 82 62 5 1-1 7 359 354 2 2 5 7 352 350 3
1-3 6 540 524 3 -2 3 6 414 403 3 -4-7 7 298 301 7 2-1 7 264 257 2 3 5 7 52 40 6
2-3 6 375 376 2 -1 3 6 659 652 3 -3-7 7 341 340 4 3-1 7 56 44 3 4 5 7 320 317 5
3-3 6 272 282 6 0 3 6 673 638 3 -2-7 7 167 168 3 4-1 7 136 131 3 5 5 7 182 171 5
4-3 6 33 37 5 1 3 6 692 669 2 -1-7 7 467 471 4 5-1 7 25 16 8 6 5 7 97 88 6
5-3 6 124 131 4 2 3 6 328 319 3 0-7 7 206 214 5 6-1 7 147 142 6 -5 6 7 270 274 4
6-3 6 193 194 3 3 3 6 211 217 2 1-7 7 60 61 5 7-1 7 164 147 5 -4 6 7 93 87 13
7-3 6 68 83 5 4 3 6 415 410 5 2-7 7 139 138 4 -7 0 7 147 141 4 -3 6 7 353 362 3
-7-2 6 164 167 8 5 3 6 85 73 8 3-7 7 251 237 3 -6 0 7 237 228 3 -2 6 7 275 275 4
-6-2 6 133 127 4 6 3 6 107 111 11 4-7 7 90 84 5 -5 0 7 78 70 3 -1 6 7 64 67 4
-5-2 6 270 278 1 -6 4 6 150 152 6 5-7 7 27 6 20 -4 0 7 508 512 2 0 6 7 189 203 3
-4-2 6 124 116 2 -5 4 6 132 118 5 -6-6 7 117 109 5 -3 0 7 511 504 2 1 6 7 36 34 5
-3-2 6 1436 1444 3 -4 4 6 619 633 4 -5-6 7 89 55 4 -2 0 7 342 386 2 2 6 7 47 52 4
-2-2 6 660 641 2 -3 4 6 158 157 3 -4-6 7 188 203 5 -1 0 7 305 302 1 3 6 7 425 434 4
-1-2 6 393 447 2 -2 4 6 822 811 4 -3-6 7 771 779 5 0 0 7 636 595 4 4 6 7 199 200 3
0-2 6 577 519 2 -1 4 6 29 25 9 -2-6 7 195 201 3 1 0 7 39 46 7 5 6 7 215 220 5
1-2 6 457 463 1 0 4 6 201 210 2 -1-6 7 944 943 6 2 0 7 960 884 4 -5 7 7 51 34 12
2-2 6 151 154 2 1 4 6 194 201 2 0-6 7 201 206 3 3 0 7 429 434 2 -4 7 7 104 104 11
3-2 6 294 297 2 2 4 6 292 295 3 1-6 7 116 131 3 4 0 7 393 392 3 -3 7 7 221 201 4
4-2 6 498 513 3 3 4 6 528 540 4 2-6 7 68 54 4 5 0 7 562 555 4 -2 7 7 70 55 14
5-2 6 252 267 3 4 4 6 409 427 3 3-6 7 457 453 3 6 0 7 674 678 6 -1 7 7 434 441 13
6-2 6 219 217 3 5 4 6 442 444 4 4-6 7 407 417 3 7 0 7 220 214 15 0 7 7 379 381 4
7-2 6 63 44 5 6 4 6 526 545 4 5-6 7 42 30 14 -7 1 7 377 375 5 1 7 7 132 131 13
-7-1 6 329 308 3 -6 5 6 94 90 5 -6-5 7 69 55 4 -6 1 7 36 10 7 2 7 7 46 37 5
-6-1 6 56 38 4 -5 5 6 83 64 5 -5-5 7 67 52 3 -5 1 7 14 4 14 3 7 7 27 8 8
-5-1 6 20 8 5 -4 5 6 153 140 4 -4-5 7 128 131 3 -4 1 7 93 86 4 4 7 7 61 54 5
-4-1 6 24 19 3 -3 5 6 249 264 3 -3-5 7 11 14 11 -3 1 7 231 232 1 -4 8 7 42 41 13
-3-1 6 154 172 1 -2 5 6 249 255 3 -2-5 7 223 238 3 -2 1 7 793 738 3 -3 8 7 602 592 5
-2-1 6 258 250 1 -1 5 6 624 650 11 -1-5 7 598 605 4 -1 1 7 479 457 2 -2 8 7 524 528 5
-1-1 6 487 457 3 0 5 6 54 56 3 0-5 7 328 332 3 0 1 7 132 130 1 -1 8 7 538 538 5
0-1 6 522 509 2 1 5 6 19 13 6 1-5 7 260 271 2 1 1 7 126 125 2 0 8 7 508 521 5
1-1 6 66 39 1 2 5 6 192 191 2 2-5 7 28 31 5 2 1 7 203 211 2 1 8 7 39 22 8
2-1 6 435 424 3 3 5 6 600 605 3 3-5 7 260 265 2 3 1 7 467 461 3 2 8 7 123 115 5
3-1 6 333 331 2 4 5 6 102 102 3 4-5 7 39 32 4 4 1 7 195 204 3 3 8 7 135 132 4

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	9	7	50	13	7	-2	-2	8	83	69	1	-3	4	8	815	820	4	-1	-6	9	50	41	5	3	0	9	251	262	2
-1	9	7	70	59	8	-1	-2	8	619	590	4	-2	4	8	1115	1116	4	0	-6	9	80	76	3	4	0	9	542	553	4
0	9	7	167	152	7	0	-2	8	0	10	1	-1	4	8	1469	1460	6	1	-6	9	160	158	3	5	0	9	136	135	3
1	9	7	194	193	7	1	-2	8	260	268	1	0	4	8	1316	1326	5	2	-6	9	428	431	3	6	0	9	48	54	5
2	9	7	68	45	6	2	-2	8	691	676	3	1	4	8	638	639	3	3	-6	9	372	368	3	7	0	9	229	226	7
-3	-9	8	46	7	15	3	-2	8	619	624	3	2	4	8	470	477	2	4	-6	9	114	108	4	-7	1	9	86	97	5
-2	-9	8	130	107	4	4	-2	8	53	49	7	3	4	8	121	110	3	5	-6	9	299	314	4	-6	1	9	148	148	4
-1	-9	8	293	298	5	5	-2	8	509	517	4	4	4	8	327	333	2	-6	-5	9	94	64	3	-5	1	9	336	346	3
0	-9	8	53	30	7	6	-2	8	112	109	4	5	4	8	75	69	4	-5	-5	9	356	351	3	-4	1	9	363	372	4
1	-9	8	224	217	6	7	-2	8	62	37	6	6	4	8	42	22	6	-4	-5	9	51	42	9	-3	1	9	234	253	2
2	-9	8	47	6	17	-7	-1	8	360	353	3	-6	5	8	114	94	5	-3	-5	9	386	392	3	-2	1	9	42	54	2
-4	-8	8	73	50	10	-6	-1	8	21	10	15	-5	5	8	262	259	5	-2	-5	9	11	24	11	-1	1	9	619	591	2
-3	-8	8	301	305	3	-5	-1	8	97	91	2	-4	5	8	358	360	4	-1	-5	9	402	402	3	0	1	9	62	61	3
-2	-8	8	424	434	4	-4	-1	8	26	30	3	-3	5	8	47	45	4	0	-5	9	73	59	3	1	1	9	97	85	2
-1	-8	8	96	88	5	-3	-1	8	594	584	2	-2	5	8	24	14	6	1	-5	9	234	240	8	2	1	9	70	52	2
0	-8	8	292	294	5	-2	-1	8	498	481	2	-1	5	8	134	131	3	2	-5	9	422	438	2	3	1	9	213	201	2
1	-8	8	91	76	5	-1	-1	8	290	280	2	0	5	8	173	169	2	3	-5	9	63	60	5	4	1	9	309	301	4
2	-8	8	104	87	4	0	-1	8	40	32	2	1	5	8	314	315	2	4	-5	9	119	117	3	5	1	9	173	167	4
3	-8	8	277	276	3	1	-1	8	88	79	2	2	5	8	15	5	15	5	-5	9	434	436	4	6	1	9	63	48	8
4	-8	8	311	319	4	2	-1	8	216	210	2	3	5	8	116	115	3	6	-5	9	107	98	4	7	1	9	239	222	4
-5	-7	8	253	267	4	3	-1	8	341	354	2	4	5	8	312	312	3	-6	-4	9	80	71	8	-7	2	9	108	110	6
-4	-7	8	61	72	5	4	-1	8	298	306	2	5	5	8	273	270	4	-5	-4	9	53	33	2	-6	2	9	276	281	4
-3	-7	8	288	295	5	5	-1	8	575	581	4	6	5	8	66	49	8	-4	-4	9	502	515	2	-5	2	9	408	412	3
-2	-7	8	252	256	6	6	-1	8	139	123	4	-5	6	8	309	310	4	-3	-4	9	229	223	3	-4	2	9	48	37	3
-1	-7	8	278	274	4	7	-1	8	325	330	7	-4	6	8	68	56	5	-2	-4	9	293	291	3	-3	2	9	237	240	2
0	-7	8	229	235	3	-7	0	8	71	72	8	-3	6	8	340	345	3	-1	-4	9	277	279	2	-2	2	9	136	111	1
1	-7	8	365	357	3	-6	0	8	211	207	3	-2	6	8	103	110	9	0	-4	9	921	895	3	-1	2	9	449	429	2
2	-7	8	96	98	4	-5	0	8	195	199	2	-1	6	8	199	201	4	1	-4	9	606	614	3	0	2	9	324	329	1
3	-7	8	110	93	4	-4	0	8	263	286	4	0	6	8	150	148	3	2	-4	9	302	326	3	1	2	9	54	42	5
4	-7	8	76	68	4	-3	0	8	102	104	2	1	6	8	23	4	7	3	-4	9	992	1005	5	2	2	9	59	50	2
5	-7	8	46	24	22	-2	0	8	626	613	2	2	6	8	238	243	3	4	-4	9	558	566	4	3	2	9	129	127	3
-5	-6	8	453	476	4	-1	0	8	97	98	1	3	6	8	152	152	3	5	-4	9	323	338	4	4	2	9	184	180	3
-4	-6	8	22	17	13	0	0	8	696	684	3	4	6	8	114	102	7	6	-4	9	36	4	7	5	2	9	461	463	4
-3	-6	8	646	663	4	1	0	8	1091	1110	7	5	6	8	200	209	4	-7	-3	9	111	116	4	6	2	9	201	198	6
-2	-6	8	147	153	4	2	0	8	1201	1177	6	-5	7	8	277	288	7	-6	-3	9	55	55	3	7	2	9	37	4	12
-1	-6	8	238	252	4	3	0	8	1617	1612	6	-4	7	8	466	469	13	-5	-3	9	341	342	1	-7	3	9	82	76	10
0	-6	8	396	393	3	4	0	8	731	729	4	-3	7	8	272	273	4	-4	-3	9	223	230	2	-6	3	9	123	106	4
1	-6	8	169	173	3	5	0	8	391	391	3	-2	7	8	269	277	4	-3	-3	9	354	372	2	-5	3	9	476	479	4
2	-6	8	433	436	3	6	0	8	215	214	7	-1	7	8	134	128	4	-2	-3	9	656	644	3	-4	3	9	699	705	4
3	-6	8	390	386	3	7	0	8	72	63	9	0	7	8	64	54	5	-1	-3	9	348	348	3	-3	3	9	478	492	3
4	-6	8	121	99	3	-7	1	8	240	255	5	1	7	8	170	159	6	0	-3	9	503	476	2	-2	3	9	706	690	3
5	-6	8	137	143	4	-6	1	8	168	172	5	2	7	8	69	65	5	1	-3	9	589	586	2	-1	3	9	248	250	6
-6	-5	8	127	124	3	-5	1	8	136	142	3	3	7	8	82	72	4	2	-3	9	526	523	3	0	3	9	0	11	1
-5	-5	8	142	134	3	-4	1	8	99	110	3	4	7	8	319	326	4	3	-3	9	279	277	2	1	3	9	550	534	5

-4 -5 8 471 477 3 -3 1 8 321 314 3 -4 8 8 167 141 10 4 -3 9 277 277 3 2 3 9 384 386 2
-3 -5 8 584 580 4 -2 1 8 239 248 2 -3 8 8 127 111 5 5 -3 9 172 185 4 3 3 9 63 68 4
-2 -5 8 215 221 4 -1 1 8 200 177 1 -2 8 8 38 7 8 6 -3 9 79 68 4 4 3 9 414 414 4
-1 -5 8 26 18 6 0 1 8 149 152 4 -1 8 8 226 230 4 -7 -2 9 33 19 5 5 3 9 34 13 7
0 -5 8 419 437 6 1 1 8 1033 1008 4 0 8 8 408 412 5 -6 -2 9 75 68 2 6 3 9 198 194 6
1 -5 8 353 352 5 2 1 8 406 408 2 1 8 8 80 73 6 -5 -2 9 40 38 2 -6 4 9 52 20 6
2 -5 8 18 19 6 3 1 8 401 390 3 2 8 8 271 271 4 -4 -2 9 62 66 1 -5 4 9 345 346 4
3 -5 8 35 33 6 4 1 8 386 381 3 3 8 8 255 262 4 -3 -2 9 20 16 3 -4 4 9 367 377 4
4 -5 8 138 139 6 5 1 8 41 37 5 -2 9 8 340 336 5 -2 -2 9 293 284 2 -3 4 9 660 667 3
5 -5 8 227 226 4 6 1 8 140 132 4 -1 9 8 45 15 9 -1 -2 9 69 46 5 -2 4 9 456 486 3
6 -5 8 120 101 8 7 1 8 23 31 16 0 9 8 216 198 7 0 -2 9 596 541 3 -1 4 9 51 43 7
-6 -4 8 224 220 5 -7 2 8 38 22 10 1 9 8 194 187 7 1 -2 9 199 198 1 0 4 9 768 765 3
-5 -4 8 120 119 2 -6 2 8 28 8 9 2 9 8 173 163 5 2 -2 9 338 308 2 1 4 9 279 284 3
-4 -4 8 106 105 2 -5 2 8 81 83 3 -3 -9 9 425 426 4 3 -2 9 507 505 2 2 4 9 890 899 3
-3 -4 8 332 328 9 -4 2 8 29 25 4 -2 -9 9 124 121 4 4 -2 9 88 80 3 3 4 9 251 254 3
-2 -4 8 604 597 5 -3 2 8 303 308 2 -1 -9 9 124 117 5 5 -2 9 414 407 3 4 4 9 41 41 4
-1 -4 8 219 212 3 -2 2 8 130 134 2 0 -9 9 240 241 8 6 -2 9 52 29 5 5 4 9 302 316 9
0 -4 8 620 615 3 -1 2 8 266 246 2 1 -9 9 333 341 7 7 -2 9 93 107 5 6 4 9 81 74 4
1 -4 8 182 183 2 0 2 8 518 463 2 2 -9 9 78 76 5 -7 -1 9 203 190 3 -6 5 9 78 71 9
2 -4 8 11 5 10 1 2 8 143 141 2 -4 -8 9 93 82 6 -6 -1 9 99 91 3 -5 5 9 78 57 7
3 -4 8 162 169 3 2 2 8 320 291 2 -3 -8 9 339 336 3 -5 -1 9 323 329 2 -4 5 9 85 92 5
4 -4 8 21 5 9 3 2 8 721 706 4 -2 -8 9 156 150 4 -4 -1 9 22 27 4 -3 5 9 168 174 4
5 -4 8 422 417 4 4 2 8 215 216 7 -1 -8 9 183 175 5 -3 -1 9 265 256 1 -2 5 9 256 263 3
6 -4 8 524 548 4 5 2 8 435 443 5 0 -8 9 299 301 4 -2 -1 9 185 186 5 -1 5 9 107 111 3
-7 -3 8 433 441 4 6 2 8 85 76 6 1 -8 9 241 248 5 -1 -1 9 1120 1083 5 0 5 9 111 113 3
-6 -3 8 134 143 2 7 2 8 52 32 7 2 -8 9 86 73 4 0 -1 9 77 88 2 1 5 9 282 289 4
-5 -3 8 112 105 1 -7 3 8 153 154 6 3 -8 9 39 17 11 1 -1 9 601 571 3 2 5 9 192 190 4
-4 -3 8 237 236 1 -6 3 8 124 113 3 4 -8 9 170 145 4 2 -1 9 570 566 3 3 5 9 146 141 3
-3 -3 8 490 490 2 -5 3 8 166 177 3 -5 -7 9 176 161 4 3 -1 9 428 436 3 4 5 9 261 266 7
-2 -3 8 258 244 3 -4 3 8 67 80 4 -4 -7 9 218 225 4 4 -1 9 34 33 6 5 5 9 163 149 5
-1 -3 8 416 410 2 -3 3 8 243 240 2 -3 -7 9 255 250 5 5 -1 9 31 26 6 6 5 9 352 357 12
0 -3 8 326 315 2 -2 3 8 37 19 3 -2 -7 9 171 174 4 6 -1 9 88 85 4 -5 6 9 163 161 5
1 -3 8 166 168 4 -1 3 8 1158 1112 5 -1 -7 9 163 156 4 7 -1 9 106 106 7 -4 6 9 209 211 4
2 -3 8 531 532 2 0 3 8 99 105 2 0 -7 9 62 59 5 -7 0 9 363 353 5 -3 6 9 305 314 3
3 -3 8 186 193 2 1 3 8 83 83 2 1 -7 9 118 126 4 -6 0 9 155 155 4 -2 6 9 189 188 4
4 -3 8 340 354 3 2 3 8 41 38 3 2 -7 9 394 389 3 -5 0 9 373 374 2 -1 6 9 185 185 4
5 -3 8 309 318 3 3 3 8 157 161 2 3 -7 9 54 25 5 -4 0 9 78 69 2 0 6 9 313 322 3
6 -3 8 266 274 4 4 3 8 24 12 8 4 -7 9 37 14 6 -3 0 9 887 885 3 1 6 9 89 90 5
-7 -2 8 34 6 5 5 3 8 45 31 10 5 -7 9 209 212 6 -2 0 9 1639 1616 5 2 6 9 52 49 4
-6 -2 8 252 258 2 6 3 8 63 43 7 -5 -6 9 24 16 11 -1 0 9 1440 1475 5 3 6 9 163 161 3
-5 -2 8 371 375 2 -6 4 8 136 120 5 -4 -6 9 227 225 5 0 0 9 2884 2906 12 4 6 9 99 77 6
-4 -2 8 588 595 1 -5 4 8 87 81 7 -3 -6 9 134 138 8 1 0 9 1174 1188 6 5 6 9 252 258 5
-3 -2 8 636 615 2 -4 4 8 85 83 4 -2 -6 9 92 87 4 2 0 9 1263 1234 6 -4 7 9 46 4 9

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-3	7	9	138	134	4	-1	-3	10	602	585	2	-2	3	10	709	693	3	4	-7	11	178	174	4	-1	0	11	279	281	2
-2	7	9	328	319	4	0	-3	10	365	351	2	-1	3	10	276	270	3	-5	-6	11	96	83	4	0	0	11	608	569	3
-1	7	9	33	28	11	1	-3	10	192	200	2	0	3	10	56	60	2	-4	-6	11	373	384	5	1	0	11	394	385	2
0	7	9	173	172	5	2	-3	10	118	114	2	1	3	10	234	242	2	-3	-6	11	325	329	8	2	0	11	721	701	3
1	7	9	228	227	7	3	-3	10	29	12	4	2	3	10	331	341	3	-2	-6	11	234	241	3	3	0	11	177	182	5
2	7	9	301	308	4	4	-3	10	76	70	3	3	3	10	184	187	5	-1	-6	11	428	436	7	4	0	11	532	522	4
3	7	9	82	81	4	5	-3	10	22	21	21	4	3	10	14	15	14	0	-6	11	23	7	6	5	0	11	396	393	4
4	7	9	187	176	8	6	-3	10	27	18	10	5	3	10	75	61	7	1	-6	11	267	284	2	6	0	11	216	213	7
-3	8	9	407	409	5	-7	-2	10	37	9	7	6	3	10	335	343	6	2	-6	11	300	313	4	7	0	11	310	294	17
-2	8	9	200	194	5	-6	-2	10	320	323	2	-6	4	10	593	598	5	3	-6	11	82	98	4	-7	1	11	237	241	5
-1	8	9	253	257	9	-5	-2	10	376	377	1	-5	4	10	118	124	4	4	-6	11	137	127	3	-6	1	11	71	72	9
0	8	9	265	275	5	-4	-2	10	112	103	2	-4	4	10	250	255	7	5	-6	11	246	253	8	-5	1	11	348	355	3
1	8	9	54	50	6	-3	-2	10	390	383	1	-3	4	10	359	355	3	-6	-5	11	106	112	3	-4	1	11	223	227	2
2	8	9	402	411	8	-2	-2	10	40	51	3	-2	4	10	482	500	3	-5	-5	11	421	420	3	-3	1	11	262	257	2
3	8	9	199	184	4	-1	-2	10	716	681	3	-1	4	10	520	514	3	-4	-5	11	174	166	3	-2	1	11	488	498	3
-2	9	9	31	30	13	0	-2	10	128	131	2	0	4	10	241	234	2	-3	-5	11	637	645	5	-1	1	11	456	448	2
-1	9	9	168	154	6	1	-2	10	297	289	1	1	4	10	184	183	2	-2	-5	11	139	122	3	0	1	11	204	228	2
0	9	9	54	44	10	2	-2	10	86	83	2	2	4	10	928	927	3	-1	-5	11	142	139	3	1	1	11	220	228	2
1	9	9	213	221	7	3	-2	10	148	154	3	3	4	10	30	23	5	0	-5	11	191	177	3	2	1	11	95	78	2
-2	-9	10	57	23	5	4	-2	10	354	370	3	4	4	10	233	239	3	1	-5	11	570	572	3	3	1	11	145	136	2
-1	-9	10	400	403	4	5	-2	10	443	452	4	5	4	10	471	472	3	2	-5	11	159	162	2	4	1	11	267	270	3
0	-9	10	105	82	7	6	-2	10	221	229	4	6	4	10	248	246	4	3	-5	11	9	13	9	5	1	11	199	204	5
1	-9	10	50	16	8	7	-2	10	54	46	7	-6	5	10	161	146	5	4	-5	11	74	61	3	6	1	11	178	166	8
2	-9	10	93	75	4	-7	-1	10	43	43	5	-5	5	10	337	331	5	5	-5	11	93	79	4	7	1	11	141	126	5
-4	-8	10	278	263	5	-6	-1	10	144	152	5	-4	5	10	46	42	6	6	-5	11	51	35	10	-7	2	11	63	61	12
-3	-8	10	251	246	3	-5	-1	10	538	539	2	-3	5	10	18	19	10	-6	-4	11	44	12	4	-6	2	11	30	31	13
-2	-8	10	106	95	5	-4	-1	10	450	454	2	-2	5	10	61	66	4	-5	-4	11	214	206	1	-5	2	11	19	9	13
-1	-8	10	323	331	4	-3	-1	10	830	824	2	-1	5	10	404	418	3	-4	-4	11	171	173	3	-4	2	11	511	516	3
0	-8	10	378	388	6	-2	-1	10	164	174	2	0	5	10	13	15	13	-3	-4	11	840	847	4	-3	2	11	724	749	5
1	-8	10	183	186	3	-1	-1	10	291	277	2	1	5	10	66	52	3	-2	-4	11	824	846	5	-2	2	11	620	615	3
2	-8	10	193	193	3	0	-1	10	159	175	2	2	5	10	111	104	3	-1	-4	11	529	538	3	-1	2	11	1089	1068	4
3	-8	10	430	434	4	1	-1	10	653	632	3	3	5	10	112	107	3	0	-4	11	136	151	2	0	2	11	126	130	1
4	-8	10	159	142	6	2	-1	10	261	252	2	4	5	10	413	421	3	1	-4	11	40	57	4	1	2	11	39	25	3
-5	-7	10	272	271	4	3	-1	10	145	136	3	5	5	10	50	25	4	2	-4	11	504	536	11	2	2	11	25	14	9
-4	-7	10	86	96	5	4	-1	10	297	292	4	-5	6	10	101	89	5	3	-4	11	139	137	3	3	2	11	220	229	3
-3	-7	10	245	255	4	5	-1	10	33	21	8	-4	6	10	543	550	5	4	-4	11	375	388	5	4	2	11	857	860	5
-2	-7	10	438	435	4	6	-1	10	61	50	5	-3	6	10	517	509	4	5	-4	11	207	200	7	5	2	11	312	309	6
-1	-7	10	128	114	4	7	-1	10	173	170	4	-2	6	10	214	215	5	6	-4	11	44	38	6	6	2	11	497	502	6
0	-7	10	88	86	7	-7	0	10	69	67	5	-1	6	10	436	434	4	-7	-3	11	105	82	9	-6	3	11	42	29	6
1	-7	10	336	346	3	-6	0	10	37	27	5	0	6	10	39	30	5	-6	-3	11	197	188	3	-5	3	11	234	247	3
2	-7	10	195	193	3	-5	0	10	205	204	2	1	6	10	142	145	4	-5	-3	11	85	83	1	-4	3	11	41	35	8
3	-7	10	485	488	4	-4	0	10	442	453	2	2	6	10	271	275	3	-4	-3	11	167	186	1	-3	3	11	147	159	9
4	-7	10	201	186	4	-3	0	10	1026	1017	4	3	6	10	113	105	3	-3	-3	11	87	96	2	-2	3	11	169	163	2
5	-7	10	270	260	6	-2	0	10	1197	1214	4	4	6	10	652	661	4	-2	-3	11	306	320	3	-1	3	11	89	89	3

-5 -6 10 110 105 4 -1 0 10 500 498 2 5 6 10 138 140 4 -1 -3 11 83 72 2 0 3 11 150 166 2
-4 -6 10 63 54 4 0 0 10 340 333 3 -4 7 10 40 7 11 0 -3 11 118 136 3 1 3 11 194 198 2
-3 -6 10 263 257 5 1 0 10 180 190 4 -3 7 10 163 147 4 1 -3 11 69 65 2 2 3 11 96 86 2
-2 -6 10 168 161 5 2 0 10 1387 1372 7 -2 7 10 417 421 4 2 -3 11 524 539 2 3 3 11 289 291 3
-1 -6 10 56 54 5 3 0 10 138 136 3 -1 7 10 40 27 6 3 -3 11 35 27 4 4 3 11 512 516 4
0 -6 10 170 179 2 4 0 10 458 459 4 0 7 10 309 314 4 4 -3 11 334 331 4 5 3 11 40 11 6
1 -6 10 70 67 3 5 0 10 298 307 3 1 7 10 123 119 4 5 -3 11 284 277 3 6 3 11 186 156 7
2 -6 10 50 53 4 6 0 10 78 70 4 2 7 10 360 371 4 6 -3 11 305 311 4 -6 4 11 316 334 4
3 -6 10 195 200 3 7 0 10 69 60 10 3 7 10 236 237 4 -7 -2 11 271 250 3 -5 4 11 389 392 4
4 -6 10 47 46 5 -7 1 10 86 79 6 4 7 10 468 461 4 -6 -2 11 54 41 2 -4 4 11 374 371 8
5 -6 10 182 183 5 -6 1 10 137 137 4 -3 8 10 128 108 5 -5 -2 11 89 82 1 -3 4 11 472 481 3
-6 -5 10 55 45 8 -5 1 10 53 63 6 -2 8 10 75 58 7 -4 -2 11 467 467 1 -2 4 11 31 24 6
-5 -5 10 407 405 3 -4 1 10 46 51 6 -1 8 10 101 86 5 -3 -2 11 550 537 2 -1 4 11 65 65 3
-4 -5 10 146 141 3 -3 1 10 158 161 2 0 8 10 93 71 6 -2 -2 11 399 402 4 0 4 11 221 233 2
-3 -5 10 60 51 7 -2 1 10 60 47 2 1 8 10 61 51 5 -1 -2 11 598 567 2 1 4 11 302 317 2
-2 -5 10 248 279 2 -1 1 10 157 147 3 2 8 10 287 297 4 0 -2 11 205 195 2 2 4 11 819 820 3
-1 -5 10 692 684 4 0 1 10 368 330 3 3 8 10 75 53 8 1 -2 11 250 226 2 3 4 11 370 386 3
0 -5 10 84 82 5 1 1 10 233 238 3 -1 9 10 202 207 6 2 -2 11 12 4 12 4 4 11 348 342 4
1 -5 10 143 151 2 2 1 10 535 540 4 0 9 10 90 87 8 3 -2 11 215 200 2 5 4 11 226 225 3
2 -5 10 475 490 3 3 1 10 205 208 2 1 9 10 27 14 27 4 -2 11 300 302 3 6 4 11 85 62 5
3 -5 10 496 508 3 4 1 10 235 238 3 -2 -9 11 108 107 7 5 -2 11 424 439 4 -6 5 11 40 18 12
4 -5 10 56 40 3 5 1 10 65 55 8 -1 -9 11 234 231 4 6 -2 11 95 95 8 -5 5 11 459 453 5
5 -5 10 152 145 4 6 1 10 367 367 4 0 -9 11 114 103 7 -7 -1 11 392 406 3 -4 5 11 23 13 14
6 -5 10 18 20 17 7 1 10 196 203 5 1 -9 11 180 165 6 -6 -1 11 212 204 2 -3 5 11 134 123 3
-6 -4 10 223 220 2 -7 2 10 241 226 5 2 -9 11 108 95 8 -5 -1 11 283 291 2 -2 5 11 20 22 10
-5 -4 10 86 91 2 -6 2 10 39 41 8 -4 -8 11 114 114 5 -4 -1 11 65 60 3 -1 5 11 195 197 3
-4 -4 10 51 41 3 -5 2 10 163 156 3 -3 -8 11 204 199 5 -3 -1 11 240 248 2 0 5 11 129 137 3
-3 -4 10 452 450 3 -4 2 10 449 451 4 -2 -8 11 92 82 13 -2 -1 11 310 323 3 1 5 11 109 108 3
-2 -4 10 456 466 11 -3 2 10 555 556 3 -1 -8 11 693 704 6 -1 -1 11 279 264 2 2 5 11 386 404 4
-1 -4 10 1306 1299 5 -2 2 10 76 76 4 0 -8 11 324 334 4 0 -1 11 743 674 3 3 5 11 340 349 3
0 -4 10 1306 1318 4 -1 2 10 517 506 2 1 -8 11 636 634 5 1 -1 11 383 393 2 4 5 11 250 256 3
1 -4 10 1302 1288 5 0 2 10 373 371 2 2 -8 11 717 721 4 2 -1 11 198 189 2 5 5 11 102 95 4
2 -4 10 1202 1267 35 1 2 10 241 218 2 3 -8 11 310 311 9 3 -1 11 208 213 3 -5 6 11 37 4 9
3 -4 10 619 640 4 2 2 10 124 135 2 4 -8 11 258 240 4 4 -1 11 112 101 4 -4 6 11 168 161 5
4 -4 10 65 56 3 3 2 10 174 163 5 -5 -7 11 19 36 18 5 -1 11 195 200 3 -3 6 11 246 256 4
5 -4 10 89 74 5 4 2 10 66 53 11 -4 -7 11 119 116 7 6 -1 11 261 255 4 -2 6 11 144 146 4
6 -4 10 47 26 11 5 2 10 420 435 3 -3 -7 11 113 117 6 7 -1 11 95 82 5 -1 6 11 331 324 4
-7 -3 10 86 46 9 6 2 10 113 105 6 -2 -7 11 144 142 5 -7 0 11 271 276 4 0 6 11 936 950 5
-6 -3 10 185 191 3 -7 3 10 375 373 8 -1 -7 11 125 121 4 -6 0 11 585 597 4 1 6 11 33 27 6
-5 -3 10 247 235 2 -6 3 10 331 333 4 0 -7 11 127 125 4 -5 0 11 428 436 3 2 6 11 815 813 7
-4 -3 10 161 155 3 -5 3 10 167 163 3 1 -7 11 237 238 3 -4 0 11 735 737 3 3 6 11 54 42 6
-3 -3 10 294 311 1 -4 3 10 138 146 5 2 -7 11 60 54 10 -3 0 11 8 19 7 4 6 11 239 236 7
-2 -3 10 74 84 3 -3 3 10 318 325 2 3 -7 11 88 65 4 -2 0 11 128 126 2 5 6 11 316 319 4

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	7	11	306	315	6	2	-3	12	518	517	2	4	3	12	154	150	4	2	-6	13	294	301	3	-4	1	13	34	30	4
-3	7	11	50	50	6	3	-3	12	25	16	5	5	3	12	202	196	4	3	-6	13	16	6	16	-3	1	13	399	396	3
-2	7	11	37	11	6	4	-3	12	218	221	3	6	3	12	97	75	6	4	-6	13	188	195	4	-2	1	13	710	701	3
-1	7	11	41	41	7	5	-3	12	387	391	4	-6	4	12	142	131	5	5	-6	13	241	235	6	-1	1	13	334	333	2
0	7	11	384	393	4	6	-3	12	31	60	10	-5	4	12	145	140	4	-6	-5	13	142	128	3	0	1	13	598	591	3
1	7	11	70	65	5	-7	-2	12	53	49	5	-4	4	12	474	484	4	-5	-5	13	95	87	4	1	1	13	31	22	3
2	7	11	62	60	5	-6	-2	12	64	61	2	-3	4	12	74	75	3	-4	-5	13	104	98	4	2	1	13	110	119	2
3	7	11	222	220	4	-5	-2	12	38	40	2	-2	4	12	104	87	3	-3	-5	13	158	171	3	3	1	13	173	180	4
4	7	11	75	73	10	-4	-2	12	351	339	1	-1	4	12	351	361	2	-2	-5	13	63	55	3	4	1	13	293	304	3
-3	8	11	75	65	9	-3	-2	12	459	459	2	0	4	12	117	116	3	-1	-5	13	21	20	9	5	1	13	62	55	4
-2	8	11	190	176	5	-2	-2	12	1019	1005	8	1	4	12	275	303	2	0	-5	13	136	127	3	6	1	13	178	168	4
-1	8	11	96	72	5	-1	-2	12	797	780	3	2	4	12	223	234	3	1	-5	13	254	266	3	-7	2	13	235	243	8
0	8	11	238	226	5	0	-2	12	166	166	3	3	4	12	90	76	3	2	-5	13	87	84	6	-6	2	13	116	108	6
1	8	11	83	64	10	1	-2	12	29	39	4	4	4	12	389	398	7	3	-5	13	413	419	4	-5	2	13	217	227	3
2	8	11	211	209	4	2	-2	12	382	381	2	5	4	12	141	131	10	4	-5	13	167	168	3	-4	2	13	338	350	3
3	8	11	46	24	7	3	-2	12	190	202	2	6	4	12	31	13	31	5	-5	13	59	33	9	-3	2	13	218	236	3
-1	9	11	216	203	6	4	-2	12	549	555	4	-6	5	12	89	77	6	-6	-4	13	186	162	4	-2	2	13	1476	1470	5
0	9	11	189	179	14	5	-2	12	297	316	4	-5	5	12	119	118	6	-5	-4	13	268	278	3	-1	2	13	1047	1036	4
1	9	11	88	97	9	6	-2	12	533	545	5	-4	5	12	244	249	4	-4	-4	13	187	194	3	0	2	13	2538	2534	10
-2	-9	12	238	249	3	-7	-1	12	121	104	4	-3	5	12	440	441	3	-3	-4	13	308	317	4	1	2	13	917	897	5
-1	-9	12	136	139	4	-6	-1	12	50	49	4	-2	5	12	382	380	3	-2	-4	13	362	363	2	2	2	13	268	275	2
0	-9	12	243	247	4	-5	-1	12	82	88	5	-1	5	12	19	12	12	-1	-4	13	246	238	2	3	2	13	138	137	3
1	-9	12	339	326	5	-4	-1	12	214	222	4	0	5	12	197	187	3	0	-4	13	141	135	3	4	2	13	389	389	5
2	-9	12	9	20	8	-3	-1	12	101	99	3	1	5	12	216	233	3	1	-4	13	256	255	4	5	2	13	77	68	4
-4	-8	12	29	29	14	-2	-1	12	382	355	3	2	5	12	336	337	5	2	-4	13	405	416	7	6	2	13	66	18	5
-3	-8	12	378	378	7	-1	-1	12	177	182	2	3	5	12	119	111	4	3	-4	13	245	247	3	-6	3	13	370	369	4
-2	-8	12	368	373	4	0	-1	12	369	361	2	4	5	12	95	81	4	4	-4	13	447	463	3	-5	3	13	220	230	3
-1	-8	12	137	125	6	1	-1	12	474	479	2	5	5	12	62	41	5	5	-4	13	159	165	5	-4	3	13	284	291	10
0	-8	12	236	238	8	2	-1	12	70	55	4	-5	6	12	100	85	5	6	-4	13	179	174	7	-3	3	13	105	110	3
1	-8	12	66	67	5	3	-1	12	665	666	4	-4	6	12	256	271	4	-6	-3	13	231	225	2	-2	3	13	74	64	7
2	-8	12	89	91	6	4	-1	12	519	517	5	-3	6	12	133	126	4	-5	-3	13	22	8	4	-1	3	13	68	69	5
3	-8	12	282	266	4	5	-1	12	20	9	11	-2	6	12	695	701	5	-4	-3	13	274	284	2	0	3	13	232	240	3
-5	-7	12	64	45	6	6	-1	12	347	350	6	-1	6	12	656	663	4	-3	-3	13	14	20	13	1	3	13	327	341	2
-4	-7	12	99	109	5	7	-1	12	95	73	5	0	6	12	821	830	6	-2	-3	13	956	941	6	2	3	13	346	342	2
-3	-7	12	56	51	8	-7	0	12	199	210	4	1	6	12	238	231	3	-1	-3	13	646	632	4	3	3	13	223	230	3
-2	-7	12	97	90	4	-6	0	12	85	79	4	2	6	12	217	225	4	0	-3	13	17	23	17	4	3	13	332	338	7
-1	-7	12	67	70	4	-5	0	12	402	414	2	3	6	12	247	244	3	1	-3	13	145	147	2	5	3	13	220	217	4
0	-7	12	356	369	4	-4	0	12	386	379	2	4	6	12	281	291	5	2	-3	13	415	416	2	6	3	13	256	241	6
1	-7	12	92	90	3	-3	0	12	524	526	4	5	6	12	97	73	4	3	-3	13	135	137	2	-6	4	13	168	141	6
2	-7	12	57	55	5	-2	0	12	210	202	2	-4	7	12	118	91	7	4	-3	13	354	367	3	-5	4	13	245	243	4
3	-7	12	39	31	6	-1	0	12	292	283	2	-3	7	12	162	149	5	5	-3	13	64	50	5	-4	4	13	485	473	10
4	-7	12	307	313	5	0	0	12	829	783	3	-2	7	12	56	46	13	6	-3	13	376	383	4	-3	4	13	203	215	3
-5	-6	12	154	156	5	1	0	12	656	644	5	-1	7	12	37	17	6	-7	-2	13	41	33	7	-2	4	13	544	533	3
-4	-6	12	458	469	5	2	0	12	1095	1082	5	0	7	12	151	153	4	-6	-2	13	309	317	2	-1	4	13	44	49	3

-3 -6 12 134 134 5 3 0 12 710 732 4 1 7 12 202 200 4 -5 -2 13 103 109 3 0 4 13 304 317 3
-2 -6 12 78 75 4 4 0 12 708 701 5 2 7 12 34 21 20 -4 -2 13 340 348 2 1 4 13 323 323 2
-1 -6 12 117 111 3 5 0 12 51 46 6 3 7 12 135 127 4 -3 -2 13 21 26 7 2 4 13 148 154 2
0 -6 12 103 105 3 6 0 12 40 11 5 4 7 12 253 231 4 -2 -2 13 745 715 6 3 4 13 147 159 5
1 -6 12 66 65 4 7 0 12 328 335 4 -3 8 12 55 32 10 -1 -2 13 839 817 3 4 4 13 490 500 4
2 -6 12 333 338 5 -7 1 12 45 63 44 -2 8 12 185 179 5 0 -2 13 828 805 4 5 4 13 89 86 5
3 -6 12 140 154 3 -6 1 12 28 9 27 -1 8 12 52 13 6 1 -2 13 487 483 3 6 4 13 154 165 9
4 -6 12 578 596 4 -5 1 12 263 271 6 0 8 12 44 14 8 2 -2 13 1617 1608 7 -6 5 13 389 383 5
5 -6 12 283 293 5 -4 1 12 144 160 7 1 8 12 98 101 10 3 -2 13 207 212 2 -5 5 13 25 12 25
-6 -5 12 101 92 3 -3 1 12 261 263 2 2 8 12 64 53 5 4 -2 13 1083 1093 5 -4 5 13 573 573 5
-5 -5 12 145 155 2 -2 1 12 223 243 2 3 8 12 27 16 14 5 -2 13 134 122 4 -3 5 13 317 327 4
-4 -5 12 168 175 4 -1 1 12 326 334 2 -1 9 12 41 6 12 6 -2 13 124 95 6 -2 5 13 169 174 3
-3 -5 12 89 90 3 0 1 12 94 87 3 0 9 12 77 52 9 -7 -1 13 117 98 4 -1 5 13 258 266 3
-2 -5 12 137 134 2 1 1 12 117 118 2 -2 -9 13 63 52 6 -6 -1 13 316 320 3 0 5 13 65 81 3
-1 -5 12 21 5 8 2 1 12 295 300 2 -1 -9 13 140 133 4 -5 -1 13 155 150 2 1 5 13 27 26 5
0 -5 12 82 69 2 3 1 12 228 230 2 0 -9 13 269 261 6 -4 -1 13 37 44 4 2 5 13 172 170 3
1 -5 12 285 297 4 4 1 12 479 486 3 1 -9 13 66 51 7 -3 -1 13 115 118 3 3 5 13 110 111 3
2 -5 12 149 159 3 5 1 12 159 160 4 2 -9 13 352 335 6 -2 -1 13 128 120 3 4 5 13 46 28 6
3 -5 12 191 202 3 6 1 12 192 181 4 -4 -8 13 256 253 8 -1 -1 13 338 343 4 5 5 13 308 305 4
4 -5 12 70 70 3 -7 2 12 0 11 1 -3 -8 13 212 209 5 0 -1 13 134 135 2 -5 6 13 67 56 7
5 -5 12 283 273 10 -6 2 12 231 238 5 -2 -8 13 340 334 4 1 -1 13 71 59 3 -4 6 13 525 541 7
6 -5 12 153 145 9 -5 2 12 129 138 3 -1 -8 13 348 361 4 2 -1 13 668 646 3 -3 6 13 225 224 5
-6 -4 12 358 369 3 -4 2 12 260 270 3 0 -8 13 54 45 5 3 -1 13 124 122 3 -2 6 13 165 171 4
-5 -4 12 395 403 2 -3 2 12 124 115 2 1 -8 13 352 357 5 4 -1 13 475 481 4 -1 6 13 277 286 3
-4 -4 12 594 604 4 -2 2 12 322 318 2 2 -8 13 56 50 4 5 -1 13 164 156 6 0 6 13 576 586 4
-3 -4 12 391 402 7 -1 2 12 1106 1101 5 3 -8 13 58 43 5 6 -1 13 144 137 10 1 6 13 705 714 3
-2 -4 12 350 357 3 0 2 12 1361 1350 5 -5 -7 13 230 239 5 -7 0 13 55 56 8 2 6 13 90 88 4
-1 -4 12 190 197 2 1 2 12 434 432 3 -4 -7 13 271 277 5 -6 0 13 159 157 6 3 6 13 112 100 13
0 -4 12 243 249 2 2 2 12 1782 1788 7 -3 -7 13 388 380 6 -5 0 13 203 203 5 4 6 13 335 347 3
1 -4 12 284 284 2 3 2 12 309 309 7 -2 -7 13 159 158 4 -4 0 13 783 792 3 5 6 13 106 84 7
2 -4 12 391 396 3 4 2 12 915 914 5 -1 -7 13 398 404 4 -3 0 13 84 84 3 -4 7 13 56 37 11
3 -4 12 145 146 8 5 2 12 268 273 3 0 -7 13 377 388 8 -2 0 13 52 52 3 -3 7 13 275 267 5
4 -4 12 348 367 3 6 2 12 55 13 10 1 -7 13 112 99 3 -1 0 13 852 847 3 -2 7 13 47 6 7
5 -4 12 202 194 5 -6 3 12 208 205 4 2 -7 13 394 394 4 0 0 13 575 547 3 -1 7 13 344 338 4
6 -4 12 104 96 6 -5 3 12 0 6 1 3 -7 13 52 43 6 1 0 13 906 873 5 0 7 13 325 314 4
-6 -3 12 44 20 4 -4 3 12 195 196 3 4 -7 13 189 189 4 2 0 13 107 108 5 1 7 13 155 132 7
-5 -3 12 237 236 3 -3 3 12 72 66 3 -5 -6 13 45 26 6 3 0 13 116 102 3 2 7 13 172 166 4
-4 -3 12 497 502 3 -2 3 12 139 143 3 -4 -6 13 312 320 5 4 0 13 698 691 5 3 7 13 162 162 4
-3 -3 12 203 195 2 -1 3 12 225 235 4 -3 -6 13 36 37 6 5 0 13 385 394 5 4 7 13 43 27 23
-2 -3 12 217 219 3 0 3 12 226 235 2 -2 -6 13 587 588 3 6 0 13 50 7 5 -3 8 13 0 18 1
-1 -3 12 199 200 1 1 3 12 125 127 3 -1 -6 13 199 209 3 -7 1 13 195 201 7 -2 8 13 332 339 5
0 -3 12 1041 1026 5 2 3 12 338 332 3 0 -6 13 115 119 3 -6 1 13 373 373 5 -1 8 13 214 219 5
1 -3 12 88 91 2 3 3 12 229 224 3 1 -6 13 36 36 4 -5 1 13 48 51 6 0 8 13 45 14 8

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	8	13	94	93	6	-6	-1	14	182	177	3	3	5	14	53	49	4	-2	-3	15	264	255	3	4	3	15	63	62	8
2	8	13	71	45	5	-5	-1	14	248	251	2	4	5	14	76	63	4	-1	-3	15	363	362	2	5	3	15	43	9	6
-2	-9	14	202	184	4	-4	-1	14	593	598	3	5	5	14	241	242	4	0	-3	15	567	573	3	6	3	15	157	133	4
-1	-9	14	114	113	7	-3	-1	14	240	248	5	-5	6	14	294	299	5	1	-3	15	321	320	6	-6	4	15	236	233	4
0	-9	14	120	104	5	-2	-1	14	156	166	2	-4	6	14	189	187	6	2	-3	15	103	100	4	-5	4	15	186	179	4
1	-9	14	38	7	11	-1	-1	14	400	408	3	-3	6	14	52	35	11	3	-3	15	339	353	3	-4	4	15	166	164	4
2	-9	14	18	36	17	0	-1	14	97	80	2	-2	6	14	369	374	4	4	-3	15	151	141	3	-3	4	15	450	447	4
-3	-8	14	71	42	15	1	-1	14	97	90	2	-1	6	14	343	354	3	5	-3	15	26	26	11	-2	4	15	500	501	3
-2	-8	14	153	158	10	2	-1	14	451	444	3	0	6	14	10	6	10	6	-3	15	58	32	6	-1	4	15	515	526	3
-1	-8	14	140	143	5	3	-1	14	162	158	3	1	6	14	517	527	5	-6	-2	15	32	9	5	0	4	15	54	45	4
0	-8	14	116	119	4	4	-1	14	27	8	9	2	6	14	93	86	4	-5	-2	15	202	210	4	1	4	15	233	251	4
1	-8	14	281	289	4	5	-1	14	224	227	3	3	6	14	350	352	3	-4	-2	15	749	744	3	2	4	15	417	427	3
2	-8	14	52	38	5	6	-1	14	215	209	4	4	6	14	362	368	4	-3	-2	15	234	245	3	3	4	15	525	532	4
3	-8	14	94	86	4	-7	0	14	123	137	7	-4	7	14	150	117	7	-2	-2	15	1082	1091	5	4	4	15	70	63	8
-4	-7	14	40	38	8	-6	0	14	101	100	6	-3	7	14	129	116	7	-1	-2	15	131	129	3	5	4	15	341	353	5
-3	-7	14	55	38	11	-5	0	14	367	370	6	-2	7	14	195	180	6	0	-2	15	435	439	2	-5	5	15	37	32	9
-2	-7	14	451	446	4	-4	0	14	591	595	3	-1	7	14	46	36	6	1	-2	15	991	974	4	-4	5	15	246	231	14
-1	-7	14	281	292	4	-3	0	14	566	575	3	0	7	14	83	78	4	2	-2	15	726	730	4	-3	5	15	284	293	3
0	-7	14	38	15	8	-2	0	14	1029	1005	4	1	7	14	44	47	12	3	-2	15	344	348	2	-2	5	15	57	58	3
1	-7	14	107	107	3	-1	0	14	516	506	2	2	7	14	146	141	4	4	-2	15	87	78	7	-1	5	15	383	396	4
2	-7	14	281	281	3	0	0	14	308	301	2	3	7	14	278	270	6	5	-2	15	25	2	11	0	5	15	67	71	7
3	-7	14	83	67	4	1	0	14	231	231	3	-3	8	14	212	200	8	6	-2	15	338	337	4	1	5	15	35	18	6
4	-7	14	196	192	4	2	0	14	465	460	3	-2	8	14	259	268	13	-7	-1	15	177	157	7	2	5	15	328	334	3
-5	-6	14	46	38	5	3	0	14	290	296	3	-1	8	14	140	121	5	-6	-1	15	182	174	3	3	5	15	393	407	5
-4	-6	14	213	214	4	4	0	14	657	671	7	0	8	14	29	8	14	-5	-1	15	212	222	4	4	5	15	381	381	6
-3	-6	14	117	107	4	5	0	14	157	154	6	1	8	14	256	231	5	-4	-1	15	191	206	2	5	5	15	219	199	7
-2	-6	14	327	322	3	6	0	14	239	253	4	2	8	14	307	314	7	-3	-1	15	315	316	4	-5	6	15	142	137	7
-1	-6	14	221	218	3	-7	1	14	33	39	32	-2	-9	15	182	166	5	-2	-1	15	56	56	3	-4	6	15	351	349	7
0	-6	14	98	99	5	-6	1	14	393	409	5	-1	-9	15	177	176	7	-1	-1	15	190	196	6	-3	6	15	103	113	7
1	-6	14	211	215	4	-5	1	14	32	35	6	0	-9	15	139	126	5	0	-1	15	91	80	3	-2	6	15	83	75	5
2	-6	14	563	568	4	-4	1	14	1072	1068	5	1	-9	15	57	49	8	1	-1	15	134	119	2	-1	6	15	156	148	4
3	-6	14	34	17	13	-3	1	14	53	54	3	-3	-8	15	181	167	9	2	-1	15	122	128	5	0	6	15	87	86	7
4	-6	14	591	591	4	-2	1	14	102	94	2	-2	-8	15	134	132	5	3	-1	15	462	468	3	1	6	15	158	157	3
5	-6	14	22	13	22	-1	1	14	322	321	2	-1	-8	15	60	53	5	4	-1	15	457	456	6	2	6	15	198	191	4
-6	-5	14	211	194	3	0	1	14	566	563	3	0	-8	15	206	197	4	5	-1	15	269	279	3	3	6	15	196	191	3
-5	-5	14	112	106	3	1	1	14	173	161	5	1	-8	15	205	196	9	6	-1	15	46	36	6	4	6	15	45	7	6
-4	-5	14	196	202	4	2	1	14	310	319	2	2	-8	15	38	2	6	-7	0	15	62	63	7	-4	7	15	230	240	7
-3	-5	14	211	213	3	3	1	14	205	218	2	3	-8	15	144	135	4	-6	0	15	290	289	3	-3	7	15	52	16	9
-2	-5	14	149	152	3	4	1	14	185	194	3	-4	-7	15	228	223	5	-5	0	15	166	164	3	-2	7	15	175	165	5
-1	-5	14	341	356	3	5	1	14	251	258	3	-3	-7	15	75	57	9	-4	0	15	212	211	3	-1	7	15	107	107	5
0	-5	14	87	109	4	6	1	14	68	46	5	-2	-7	15	123	112	4	-3	0	15	414	423	6	0	7	15	56	53	6
1	-5	14	35	30	6	-6	2	14	14	30	14	-1	-7	15	233	239	6	-2	0	15	744	735	3	1	7	15	191	194	6
2	-5	14	356	354	3	-5	2	14	27	10	11	0	-7	15	308	313	5	-1	0	15	106	100	2	2	7	15	221	218	7
3	-5	14	91	90	6	-4	2	14	1002	993	5	1	-7	15	169	170	4	0	0	15	308	298	2	3	7	15	109	97	4

4 -5 14 542 549 4 -3 2 14 387 402 2 2 -7 15 194 189 5 1 0 15 368 339 3 -2 8 15 538 538 5
5 -5 14 44 30 6 -2 2 14 893 915 3 3 -7 15 175 164 4 2 0 15 59 69 3 -1 8 15 400 390 5
-6 -4 14 52 41 7 -1 2 14 372 378 2 4 -7 15 369 360 5 3 0 15 91 71 3 0 8 15 538 533 6
-5 -4 14 234 218 6 0 2 14 488 479 2 -5 -6 15 52 50 4 4 0 15 258 261 4 1 8 15 716 706 6
-4 -4 14 327 328 3 1 2 14 1283 1254 6 -4 -6 15 351 344 4 5 0 15 67 59 7 2 8 15 227 235 7
-3 -4 14 109 105 4 2 2 14 662 671 3 -3 -6 15 43 33 5 6 0 15 388 389 3 -1 -9 16 91 97 5
-2 -4 14 25 16 7 3 2 14 81 71 3 -2 -6 15 726 737 4 -7 1 15 115 126 6 0 -9 16 62 49 7
-1 -4 14 249 260 2 4 2 14 232 235 4 -1 -6 15 233 240 3 -6 1 15 346 350 7 1 -9 16 7 12 6
0 -4 14 228 241 2 5 2 14 114 112 4 0 -6 15 1210 1221 6 -5 1 15 38 33 5 -3 -8 16 53 74 12
1 -4 14 128 146 2 6 2 14 215 206 4 1 -6 15 617 625 4 -4 1 15 84 92 3 -2 -8 16 217 226 8
2 -4 14 191 199 3 -6 3 14 37 28 27 2 -6 15 580 597 4 -3 1 15 0 9 1 -1 -8 16 40 41 13
3 -4 14 64 50 4 -5 3 14 35 37 6 3 -6 15 339 340 3 -2 1 15 245 239 3 0 -8 16 27 10 27
4 -4 14 455 461 3 -4 3 14 122 117 4 4 -6 15 190 170 4 -1 1 15 124 134 2 1 -8 16 197 192 10
5 -4 14 200 196 4 -3 3 14 125 113 3 5 -6 15 121 123 7 0 1 15 395 390 3 2 -8 16 38 32 13
6 -4 14 110 118 7 -2 3 14 95 90 3 -6 -5 15 80 59 3 1 1 15 31 25 6 3 -8 16 186 173 4
-6 -3 14 457 461 3 -1 3 14 348 350 2 -5 -5 15 213 207 3 2 1 15 254 254 2 -4 -7 16 407 413 9
-5 -3 14 156 144 2 0 3 14 533 548 3 -4 -5 15 426 443 4 3 1 15 66 60 5 -3 -7 16 105 105 8
-4 -3 14 236 240 2 1 3 14 459 468 3 -3 -5 15 155 155 4 4 1 15 139 141 3 -2 -7 16 334 349 4
-3 -3 14 0 21 1 2 3 14 383 394 3 -2 -5 15 257 265 3 5 1 15 50 32 5 -1 -7 16 199 201 5
-2 -3 14 430 406 5 3 3 14 349 351 5 -1 -5 15 285 296 3 6 1 15 148 135 4 0 -7 16 204 214 4
-1 -3 14 329 327 2 4 3 14 24 7 10 0 -5 15 269 279 2 -6 2 15 569 572 5 1 -7 16 325 328 3
0 -3 14 530 520 2 5 3 14 269 271 4 1 -5 15 93 92 3 -5 2 15 462 460 4 2 -7 16 141 141 4
1 -3 14 321 323 3 6 3 14 160 155 10 2 -5 15 145 147 3 -4 2 15 157 169 5 3 -7 16 109 85 4
2 -3 14 178 187 4 -6 4 14 174 162 5 3 -5 15 284 297 3 -3 2 15 168 181 2 4 -7 16 108 112 4
3 -3 14 184 188 2 -5 4 14 104 100 4 4 -5 15 268 281 4 -2 2 15 594 596 3 -5 -6 16 109 122 7
4 -3 14 425 435 3 -4 4 14 463 477 4 5 -5 15 143 141 8 -1 2 15 223 221 2 -4 -6 16 413 412 5
5 -3 14 35 10 7 -3 4 14 144 136 4 -6 -4 15 72 70 4 0 2 15 337 343 5 -3 -6 16 27 23 14
6 -3 14 148 140 5 -2 4 14 859 846 5 -5 -4 15 401 401 3 1 2 15 745 734 4 -2 -6 16 310 316 3
-7 -2 14 205 195 4 -1 4 14 167 161 2 -4 -4 15 221 216 4 2 2 15 492 491 3 -1 -6 16 322 330 3
-6 -2 14 146 130 2 0 4 14 73 75 3 -3 -4 15 331 330 3 3 2 15 537 531 4 0 -6 16 288 300 6
-5 -2 14 83 83 3 1 4 14 38 23 8 -2 -4 15 397 389 3 4 2 15 195 188 4 1 -6 16 135 138 3
-4 -2 14 368 378 2 2 4 14 85 83 4 -1 -4 15 167 182 2 5 2 15 74 56 15 2 -6 16 61 69 11
-3 -2 14 224 230 6 3 4 14 171 175 4 0 -4 15 183 198 2 6 2 15 399 374 4 3 -6 16 544 536 4
-2 -2 14 1310 1283 9 4 4 14 425 427 4 1 -4 15 138 150 2 -6 3 15 159 156 4 4 -6 16 137 126 4
-1 -2 14 764 756 3 5 4 14 144 135 4 2 -4 15 233 235 3 -5 3 15 28 14 7 5 -6 16 252 250 6
0 -2 14 2546 2548 10 -5 5 14 99 84 12 3 -4 15 84 83 4 -4 3 15 152 153 3 -6 -5 16 159 137 10
1 -2 14 1145 1131 5 -4 5 14 36 24 7 4 -4 15 356 355 3 -3 3 15 248 263 9 -5 -5 16 181 176 3
2 -2 14 913 930 4 -3 5 14 183 187 7 5 -4 15 29 3 10 -2 3 15 65 60 3 -4 -5 16 33 14 10
3 -2 14 62 52 3 -2 5 14 166 166 3 6 -4 15 318 317 7 -1 3 15 405 423 3 -3 -5 16 206 212 4
4 -2 14 49 38 4 -1 5 14 43 40 7 -6 -3 15 211 202 2 0 3 15 86 74 3 -2 -5 16 67 68 3
5 -2 14 165 172 4 0 5 14 184 183 2 -5 -3 15 39 36 3 1 3 15 82 75 3 -1 -5 16 259 266 3
6 -2 14 54 40 6 1 5 14 435 452 3 -4 -3 15 811 815 3 2 3 15 143 135 3 0 -5 16 379 387 3
-7 -1 14 129 125 4 2 5 14 165 161 3 -3 -3 15 57 70 7 3 3 15 190 186 7 1 -5 16 112 117 3

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	-5	16	95	95	4	-3	2	16	87	72	3	4	-7	17	262	253	4	-6	1	17	38	26	9	1	-8	18	136	130	6
3	-5	16	400	411	3	-2	2	16	114	106	2	-5	-6	17	171	173	5	-5	1	17	85	83	10	2	-8	18	275	264	4
4	-5	16	500	506	9	-1	2	16	432	442	2	-4	-6	17	260	255	4	-4	1	17	106	113	6	3	-8	18	135	105	4
5	-5	16	213	208	7	0	2	16	116	105	3	-3	-6	17	348	340	7	-3	1	17	174	173	3	-4	-7	18	100	100	12
-6	-4	16	265	254	3	1	2	16	276	278	3	-2	-6	17	243	253	3	-2	1	17	162	170	6	-3	-7	18	265	252	5
-5	-4	16	224	225	3	2	2	16	259	257	3	-1	-6	17	176	173	3	-1	1	17	34	24	5	-2	-7	18	138	128	4
-4	-4	16	97	92	4	3	2	16	248	242	3	0	-6	17	275	266	3	0	1	17	354	348	3	-1	-7	18	197	181	4
-3	-4	16	318	320	3	4	2	16	312	314	4	1	-6	17	195	196	3	1	1	17	440	426	4	0	-7	18	254	246	4
-2	-4	16	370	360	3	5	2	16	78	71	4	2	-6	17	263	265	3	2	1	17	172	182	2	1	-7	18	260	266	4
-1	-4	16	84	83	5	6	2	16	256	257	4	3	-6	17	233	231	3	3	1	17	260	254	3	2	-7	18	238	246	3
0	-4	16	460	448	4	-6	3	16	140	127	5	4	-6	17	48	19	8	4	1	17	258	253	3	3	-7	18	85	82	5
1	-4	16	154	154	6	-5	3	16	47	28	4	5	-6	17	212	219	7	5	1	17	37	13	5	4	-7	18	154	134	5
2	-4	16	164	173	3	-4	3	16	411	401	5	-5	-5	17	31	31	6	6	1	17	120	110	10	-5	-6	18	168	142	3
3	-4	16	167	159	8	-3	3	16	402	415	4	-4	-5	17	415	430	5	-6	2	17	122	112	5	-4	-6	18	61	46	5
4	-4	16	67	63	4	-2	3	16	257	268	7	-3	-5	17	168	172	3	-5	2	17	304	316	3	-3	-6	18	154	139	8
5	-4	16	277	275	5	-1	3	16	227	230	4	-2	-5	17	550	549	3	-4	2	17	121	121	3	-2	-6	18	39	25	5
6	-4	16	265	278	7	0	3	16	79	88	6	-1	-5	17	269	275	3	-3	2	17	297	298	3	-1	-6	18	35	22	6
-6	-3	16	298	316	2	1	3	16	97	93	3	0	-5	17	174	161	3	-2	2	17	48	50	3	0	-6	18	281	284	3
-5	-3	16	113	107	3	2	3	16	26	6	5	1	-5	17	630	630	6	-1	2	17	228	236	2	1	-6	18	57	51	5
-4	-3	16	100	87	4	3	3	16	46	44	8	2	-5	17	188	190	4	0	2	17	277	290	4	2	-6	18	362	367	3
-3	-3	16	155	162	5	4	3	16	142	138	9	3	-5	17	151	146	4	1	2	17	920	931	5	3	-6	18	83	74	5
-2	-3	16	243	251	4	5	3	16	139	123	4	4	-5	17	100	104	4	2	2	17	41	31	5	4	-6	18	376	375	9
-1	-3	16	507	505	2	6	3	16	80	72	6	5	-5	17	219	214	7	3	2	17	532	537	4	-5	-5	18	206	190	3
0	-3	16	282	293	3	-6	4	16	78	44	15	-6	-4	17	42	6	5	4	2	17	216	218	4	-4	-5	18	126	121	4
1	-3	16	995	997	7	-5	4	16	286	286	4	-5	-4	17	237	229	8	5	2	17	67	40	8	-3	-5	18	389	399	4
2	-3	16	401	407	4	-4	4	16	125	129	3	-4	-4	17	361	368	4	6	2	17	63	26	8	-2	-5	18	416	407	3
3	-3	16	187	196	3	-3	4	16	24	15	20	-3	-4	17	402	408	3	-6	3	17	70	65	6	-1	-5	18	369	358	3
4	-3	16	268	272	5	-2	4	16	884	885	4	-2	-4	17	189	189	2	-5	3	17	123	121	3	0	-5	18	328	330	3
5	-3	16	305	308	4	-1	4	16	299	311	3	-1	-4	17	321	323	6	-4	3	17	201	201	4	1	-5	18	356	366	3
6	-3	16	136	140	5	0	4	16	622	627	6	0	-4	17	731	729	5	-3	3	17	315	308	3	2	-5	18	174	175	4
-6	-2	16	547	562	4	1	4	16	1180	1186	5	1	-4	17	230	236	2	-2	3	17	321	314	5	3	-5	18	33	21	16
-5	-2	16	455	466	5	2	4	16	395	404	3	2	-4	17	29	11	7	-1	3	17	462	461	3	4	-5	18	116	113	5
-4	-2	16	442	456	3	3	4	16	742	745	5	3	-4	17	168	175	4	0	3	17	114	112	3	5	-5	18	404	390	8
-3	-2	16	83	74	3	4	4	16	325	326	4	4	-4	17	135	129	7	1	3	17	124	120	3	-6	-4	18	187	182	7
-2	-2	16	249	246	3	5	4	16	56	38	7	5	-4	17	430	430	5	2	3	17	50	50	5	-5	-4	18	151	135	6
-1	-2	16	55	42	3	-5	5	16	145	139	10	-6	-3	17	38	7	4	3	3	17	143	152	6	-4	-4	18	115	103	4
0	-2	16	145	137	2	-4	5	16	114	108	9	-5	-3	17	219	215	2	4	3	17	230	234	4	-3	-4	18	214	215	3
1	-2	16	216	218	2	-3	5	16	95	100	4	-4	-3	17	22	4	14	5	3	17	89	64	5	-2	-4	18	330	330	3
2	-2	16	614	610	3	-2	5	16	105	114	5	-3	-3	17	456	457	6	-6	4	17	129	105	5	-1	-4	18	41	29	4
3	-2	16	565	571	4	-1	5	16	267	271	4	-2	-3	17	334	338	7	-5	4	17	88	80	6	0	-4	18	887	879	4
4	-2	16	86	78	9	0	5	16	196	198	3	-1	-3	17	312	328	2	-4	4	17	176	170	4	1	-4	18	599	608	3
5	-2	16	131	128	4	1	5	16	371	371	3	0	-3	17	202	216	3	-3	4	17	559	574	4	2	-4	18	757	758	5
6	-2	16	447	445	5	2	5	16	41	27	6	1	-3	17	563	559	3	-2	4	17	42	42	4	3	-4	18	952	968	6
-7	-1	16	353	349	7	3	5	16	68	54	8	2	-3	17	311	316	3	-1	4	17	1203	1202	6	4	-4	18	177	175	4

-6 -1 16 206 203 3 4 5 16 336 333 4 3 -3 17 101 100 3 0 4 17 145 148 3 5 -4 18 267 281 6
-5 -1 16 35 34 5 5 5 16 75 54 5 4 -3 17 113 106 5 1 4 17 543 556 3 -6 -3 18 60 37 4
-4 -1 16 219 217 2 -5 6 16 315 324 5 5 -3 17 252 258 4 2 4 17 58 45 3 -5 -3 18 329 339 3
-3 -1 16 210 208 3 -4 6 16 143 122 7 6 -3 17 40 36 8 3 4 17 419 416 4 -4 -3 18 281 289 4
-2 -1 16 490 475 3 -3 6 16 217 217 6 -6 -2 17 318 328 3 4 4 17 78 51 11 -3 -3 18 75 81 7
-1 -1 16 181 206 3 -2 6 16 96 89 8 -5 -2 17 126 130 3 5 4 17 167 152 4 -2 -3 18 258 274 5
0 -1 16 317 345 3 -1 6 16 26 9 10 -4 -2 17 239 235 10 -5 5 17 206 205 5 -1 -3 18 264 278 3
1 -1 16 455 450 3 0 6 16 331 331 6 -3 -2 17 208 194 3 -4 5 17 127 122 11 0 -3 18 84 76 3
2 -1 16 293 305 3 1 6 16 313 321 3 -2 -2 17 184 186 3 -3 5 17 142 136 4 1 -3 18 246 241 2
3 -1 16 237 242 3 2 6 16 56 51 5 -1 -2 17 236 233 4 -2 5 17 84 81 4 2 -3 18 212 229 3
4 -1 16 39 26 12 3 6 16 248 250 7 0 -2 17 313 310 2 -1 5 17 82 70 5 3 -3 18 308 311 3
5 -1 16 81 69 4 4 6 16 243 248 4 1 -2 17 219 225 2 0 5 17 223 220 6 4 -3 18 65 55 4
6 -1 16 26 10 25 -4 7 16 345 358 17 2 -2 17 530 557 15 1 5 17 20 16 10 5 -3 18 30 14 10
-7 0 16 142 147 5 -3 7 16 202 187 7 3 -2 17 235 238 3 2 5 17 64 57 5 6 -3 18 79 75 9
-6 0 16 257 248 5 -2 7 16 54 36 9 4 -2 17 403 411 3 3 5 17 205 197 5 -6 -2 18 212 209 3
-5 0 16 232 229 3 -1 7 16 304 312 4 5 -2 17 225 233 9 4 5 17 224 213 4 -5 -2 18 160 169 3
-4 0 16 199 203 3 0 7 16 34 18 7 6 -2 17 206 210 4 5 5 17 287 276 4 -4 -2 18 21 15 11
-3 0 16 824 833 4 1 7 16 276 282 9 -6 -1 17 129 121 3 -4 6 17 330 338 10 -3 -2 18 278 288 5
-2 0 16 465 463 2 2 7 16 213 202 4 -5 -1 17 89 96 3 -3 6 17 159 158 7 -2 -2 18 88 82 3
-1 0 16 797 796 3 3 7 16 50 24 16 -4 -1 17 429 439 3 -2 6 17 54 47 5 -1 -2 18 354 351 6
0 0 16 595 579 3 -2 8 16 57 21 6 -3 -1 17 643 655 5 -1 6 17 27 27 9 0 -2 18 44 45 3
1 0 16 256 261 3 -1 8 16 491 486 5 -2 -1 17 835 837 8 0 6 17 299 303 4 1 -2 18 569 586 3
2 0 16 303 323 2 0 8 16 238 242 7 -1 -1 17 243 231 2 1 6 17 112 119 4 2 -2 18 171 173 3
3 0 16 320 325 3 1 8 16 70 82 10 0 -1 17 243 252 3 2 6 17 137 124 5 3 -2 18 432 431 3
4 0 16 48 40 6 2 8 16 224 228 7 1 -1 17 434 435 6 3 6 17 333 337 4 4 -2 18 179 181 3
5 0 16 548 555 5 -1 -9 17 127 120 10 2 -1 17 279 286 3 4 6 17 58 42 5 5 -2 18 116 119 5
6 0 16 111 110 5 0 -9 17 108 108 9 3 -1 17 140 142 6 -3 7 17 387 377 7 6 -2 18 52 38 6
-6 1 16 37 30 8 1 -9 17 96 92 9 4 -1 17 209 212 6 -2 7 17 47 18 6 -6 -1 18 304 297 3
-5 1 16 115 115 3 -3 -8 17 187 206 9 5 -1 17 447 442 4 -1 7 17 43 11 7 -5 -1 18 330 335 3
-4 1 16 134 141 3 -2 -8 17 126 122 7 6 -1 17 184 183 4 0 7 17 305 311 4 -4 -1 18 177 184 5
-3 1 16 111 130 3 -1 -8 17 108 99 11 -6 0 17 38 36 6 1 7 17 252 252 8 -3 -1 18 296 295 8
-2 1 16 152 149 2 0 -8 17 388 398 4 -5 0 17 384 397 3 2 7 17 64 44 8 -2 -1 18 670 670 4
-1 1 16 378 380 3 1 -8 17 90 100 5 -4 0 17 58 58 4 3 7 17 126 112 11 -1 -1 18 660 636 3
0 1 16 62 43 4 2 -8 17 27 11 11 -3 0 17 31 11 4 -2 8 17 50 28 7 0 -1 18 418 411 3
1 1 16 566 564 4 3 -8 17 287 276 4 -2 0 17 1000 1005 5 -1 8 17 341 344 5 1 -1 18 149 166 3
2 1 16 335 328 2 -4 -7 17 113 115 13 -1 0 17 136 125 5 0 8 17 199 191 11 2 -1 18 205 210 3
3 1 16 225 223 3 -3 -7 17 126 118 12 0 0 17 956 939 4 1 8 17 199 193 9 3 -1 18 361 374 3
4 1 16 377 371 3 -2 -7 17 143 146 4 1 0 17 1120 1115 6 -1 -9 18 162 154 5 4 -1 18 38 28 8
5 1 16 250 249 4 -1 -7 17 199 187 4 2 0 17 369 380 3 0 -9 18 17 16 16 5 -1 18 202 184 5
6 1 16 46 10 6 0 -7 17 59 50 7 3 0 17 1229 1235 6 -3 -8 18 242 238 9 6 -1 18 77 59 5
-6 2 16 377 387 5 1 -7 17 504 498 5 4 0 17 339 341 3 -2 -8 18 110 116 4 -6 0 18 67 53 5
-5 2 16 316 321 3 2 -7 17 132 141 7 5 0 17 204 201 4 -1 -8 18 103 94 13 -5 0 18 89 80 6
-4 2 16 517 526 3 3 -7 17 188 184 4 6 0 17 513 508 5 0 -8 18 409 400 5 -4 0 18 221 222 4

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	18	615	618	3	1	8	18	287	291	7	-5	0	19	212	202	4	0	-8	20	363	364	4	-1	0	20	343	345	2
-2	0	18	57	45	3	-3	-8	19	208	207	9	-4	0	19	73	67	8	1	-8	20	699	685	6	0	0	20	263	263	3
-1	0	18	1477	1481	6	-2	-8	19	221	206	10	-3	0	19	829	835	3	2	-8	20	197	198	6	1	0	20	286	283	5
0	0	18	224	203	2	-1	-8	19	72	76	10	-2	0	19	327	334	3	-4	-7	20	121	114	13	2	0	20	427	429	4
1	0	18	1298	1289	7	0	-8	19	320	323	4	-1	0	19	71	65	3	-3	-7	20	132	142	5	3	0	20	177	178	3
2	0	18	218	229	3	1	-8	19	129	117	6	0	0	19	467	474	5	-2	-7	20	117	113	3	4	0	20	309	316	3
3	0	18	124	116	3	2	-8	19	678	668	6	1	0	19	538	532	4	-1	-7	20	102	102	4	5	0	20	416	415	4
4	0	18	186	183	3	-4	-7	19	257	255	5	2	0	19	321	312	6	0	-7	20	148	143	4	6	0	20	220	208	6
5	0	18	158	148	4	-3	-7	19	94	95	6	3	0	19	153	157	3	1	-7	20	86	76	5	-6	1	20	47	39	11
6	0	18	43	14	6	-2	-7	19	249	242	3	4	0	19	384	385	4	2	-7	20	56	34	5	-5	1	20	222	210	4
-6	1	18	66	65	6	-1	-7	19	109	113	9	5	0	19	349	353	4	3	-7	20	276	270	5	-4	1	20	21	15	10
-5	1	18	377	381	3	0	-7	19	134	118	4	6	0	19	50	19	5	-5	-6	20	104	107	5	-3	1	20	117	99	3
-4	1	18	92	91	4	1	-7	19	236	246	4	-6	1	19	176	182	5	-4	-6	20	349	361	4	-2	1	20	338	354	3
-3	1	18	271	278	6	2	-7	19	63	53	5	-5	1	19	203	197	3	-3	-6	20	211	212	7	-1	1	20	557	580	4
-2	1	18	205	215	2	3	-7	19	446	453	4	-4	1	19	253	261	3	-2	-6	20	211	216	3	0	1	20	443	443	4
-1	1	18	97	102	3	-5	-6	19	107	99	12	-3	1	19	91	88	3	-1	-6	20	352	359	4	1	1	20	456	463	4
0	1	18	313	312	3	-4	-6	19	37	9	6	-2	1	19	291	307	2	0	-6	20	47	40	5	2	1	20	167	173	3
1	1	18	37	10	6	-3	-6	19	343	348	4	-1	1	19	35	44	5	1	-6	20	32	5	7	3	1	20	122	111	3
2	1	18	229	233	4	-2	-6	19	100	90	4	0	1	19	425	438	3	2	-6	20	24	6	11	4	1	20	63	44	5
3	1	18	82	94	3	-1	-6	19	291	294	3	1	1	19	571	601	14	3	-6	20	36	30	17	5	1	20	65	33	5
4	1	18	169	162	4	0	-6	19	116	118	4	2	1	19	395	409	3	4	-6	20	55	32	7	6	1	20	116	91	5
5	1	18	207	201	5	1	-6	19	33	26	7	3	1	19	531	534	4	-5	-5	20	344	333	4	-6	2	20	59	72	10
6	1	18	58	32	5	2	-6	19	89	71	4	4	1	19	288	293	3	-4	-5	20	342	356	4	-5	2	20	40	16	5
-6	2	18	170	181	5	3	-6	19	41	10	7	5	1	19	221	209	5	-3	-5	20	593	612	5	-4	2	20	308	310	5
-5	2	18	393	398	3	4	-6	19	144	135	5	6	1	19	178	170	4	-2	-5	20	208	200	4	-3	2	20	204	194	3
-4	2	18	560	559	3	-5	-5	19	334	326	6	-6	2	19	37	40	10	-1	-5	20	54	41	5	-2	2	20	404	408	2
-3	2	18	16	16	16	-4	-5	19	256	269	10	-5	2	19	193	191	3	0	-5	20	386	385	3	-1	2	20	33	25	4
-2	2	18	144	146	3	-3	-5	19	116	106	4	-4	2	19	403	410	3	1	-5	20	307	305	4	0	2	20	75	75	5
-1	2	18	207	230	2	-2	-5	19	351	347	3	-3	2	19	576	575	4	2	-5	20	33	16	8	1	2	20	393	403	3
0	2	18	269	274	2	-1	-5	19	497	497	4	-2	2	19	384	391	4	3	-5	20	62	35	5	2	2	20	59	61	4
1	2	18	295	304	2	0	-5	19	444	436	3	-1	2	19	103	117	3	4	-5	20	128	129	5	3	2	20	465	469	7
2	2	18	47	49	5	1	-5	19	59	48	3	0	2	19	269	279	3	5	-5	20	98	92	8	4	2	20	294	302	4
3	2	18	681	685	5	2	-5	19	111	106	4	1	2	19	112	111	3	-6	-4	20	269	273	4	5	2	20	74	61	11
4	2	18	152	151	4	3	-5	19	323	330	4	2	2	19	357	371	4	-5	-4	20	196	181	4	-6	3	20	259	252	11
5	2	18	228	233	5	4	-5	19	182	172	5	3	2	19	365	354	3	-4	-4	20	299	301	6	-5	3	20	93	88	4
6	2	18	74	48	10	5	-5	19	32	17	19	4	2	19	183	176	4	-3	-4	20	618	634	4	-4	3	20	65	64	5
-6	3	18	119	115	4	-6	-4	19	45	29	9	5	2	19	400	408	4	-2	-4	20	153	151	5	-3	3	20	26	21	9
-5	3	18	384	389	3	-5	-4	19	64	59	4	-6	3	19	48	54	9	-1	-4	20	427	451	3	-2	3	20	87	75	3
-4	3	18	88	93	4	-4	-4	19	177	172	4	-5	3	19	36	20	12	0	-4	20	49	36	3	-1	3	20	326	332	4
-3	3	18	392	400	6	-3	-4	19	527	538	6	-4	3	19	165	154	4	1	-4	20	134	118	5	0	3	20	161	149	3
-2	3	18	161	165	3	-2	-4	19	511	520	3	-3	3	19	193	197	4	2	-4	20	372	372	4	1	3	20	268	271	3
-1	3	18	140	143	3	-1	-4	19	1386	1380	6	-2	3	19	249	255	2	3	-4	20	172	172	4	2	3	20	216	214	3
0	3	18	487	503	3	0	-4	19	253	267	3	-1	3	19	67	69	3	4	-4	20	483	490	5	3	3	20	334	333	4
1	3	18	277	272	3	1	-4	19	1424	1412	6	0	3	19	425	426	3	5	-4	20	203	199	7	4	3	20	149	140	7

2 3 18 177 187 3 2-4 19 127 117 8 1 3 19 460 463 3 -6-3 20 67 51 3 5 3 20 137 129 5
3 3 18 173 174 4 3-4 19 240 249 10 2 3 19 63 59 3 -5-3 20 285 303 3 -5 4 20 413 417 4
4 3 18 172 153 4 4-4 19 80 79 5 3 3 19 229 231 4 -4-3 20 285 279 4 -4 4 20 176 169 4
5 3 18 152 149 5 5-4 19 114 104 7 4 3 19 37 23 11 -3-3 20 178 176 6 -3 4 20 94 93 5
-5 4 18 252 249 4 -6-3 19 125 115 4 5 3 19 222 225 5 -2-3 20 258 265 4 -2 4 20 47 38 4
-4 4 18 59 18 4 -5-3 19 455 467 3 -5 4 19 236 226 4 -1-3 20 262 275 4 -1 4 20 289 293 4
-3 4 18 686 695 5 -4-3 19 79 61 7 -4 4 19 55 37 5 0-3 20 279 287 3 0 4 20 220 221 3
-2 4 18 251 261 3 -3-3 19 206 218 6 -3 4 19 235 230 4 1-3 20 196 204 9 1 4 20 100 91 4
-1 4 18 236 230 4 -2-3 19 159 160 3 -2 4 19 142 142 5 2-3 20 521 541 4 2 4 20 57 50 3
0 4 18 492 504 3 -1-3 19 320 335 3 -1 4 19 334 346 4 3-3 20 642 655 7 3 4 20 241 242 6
1 4 18 591 601 4 0-3 19 119 124 3 0 4 19 577 591 4 4-3 20 326 328 5 4 4 20 139 141 4
2 4 18 182 178 3 1-3 19 167 177 3 1 4 19 321 339 10 5-3 20 305 308 6 5 4 20 55 56 7
3 4 18 43 29 6 2-3 19 98 100 4 2 4 19 524 532 3 -6-2 20 49 29 5 -5 5 20 294 284 5
4 4 18 85 78 9 3-3 19 245 245 4 3 4 19 163 169 4 -5-2 20 192 186 3 -4 5 20 122 111 4
5 4 18 327 338 4 4-3 19 31 11 8 4 4 19 201 191 4 -4-2 20 242 242 3 -3 5 20 342 344 6
-5 5 18 135 119 5 5-3 19 27 15 11 5 4 19 462 452 9 -3-2 20 448 448 7 -2 5 20 47 40 6
-4 5 18 107 108 6 -6-2 19 279 288 4 -5 5 19 77 77 5 -2-2 20 526 527 4 -1 5 20 86 88 4
-3 5 18 49 39 6 -5-2 19 156 159 5 -4 5 19 25 3 11 -1-2 20 212 209 3 0 5 20 83 80 6
-2 5 18 115 116 4 -4-2 19 492 488 4 -3 5 19 269 262 7 0-2 20 89 105 3 1 5 20 61 45 4
-1 5 18 251 250 4 -3-2 19 197 196 4 -2 5 19 168 166 4 1-2 20 108 112 3 2 5 20 45 30 6
0 5 18 211 212 3 -2-2 19 226 246 7 -1 5 19 295 296 4 2-2 20 353 372 3 3 5 20 67 62 4
1 5 18 474 472 4 -1-2 19 49 28 4 0 5 19 34 27 6 3-2 20 89 95 5 4 5 20 78 54 5
2 5 18 81 71 5 0-2 19 44 42 7 1 5 19 153 144 5 4-2 20 306 315 3 -4 6 20 76 62 10
3 5 18 261 260 4 1-2 19 35 35 9 2 5 19 203 205 5 5-2 20 304 318 11 -3 6 20 403 418 7
4 5 18 289 291 4 2-2 19 65 51 7 3 5 19 42 31 5 6-2 20 59 57 7 -2 6 20 164 163 4
-4 6 18 299 298 6 3-2 19 446 467 7 4 5 19 187 171 4 -6-1 20 158 166 4 -1 6 20 694 687 15
-3 6 18 413 434 8 4-2 19 89 81 3 -4 6 19 407 415 7 -5-1 20 113 116 5 0 6 20 106 108 5
-2 6 18 58 45 5 5-2 19 285 296 4 -3 6 19 218 219 6 -4-1 20 102 105 6 1 6 20 616 619 8
-1 6 18 93 94 5 6-2 19 28 6 13 -2 6 19 320 313 4 -3-1 20 209 211 3 2 6 20 441 434 11
0 6 18 262 265 4 -6-1 19 167 161 3 -1 6 19 45 18 6 -2-1 20 43 42 5 3 6 20 415 402 4
1 6 18 142 140 4 -5-1 19 527 545 4 0 6 19 81 74 5 -1-1 20 93 98 3 -3 7 20 123 113 10
2 6 18 183 164 5 -4-1 19 405 415 3 1 6 19 306 300 4 0-1 20 437 434 3 -2 7 20 59 42 6
3 6 18 312 308 6 -3-1 19 687 688 7 2 6 19 58 27 7 1-1 20 183 167 4 -1 7 20 259 253 4
4 6 18 71 56 15 -2-1 19 242 249 3 3 6 19 366 355 4 2-1 20 75 72 5 0 7 20 159 168 5
-3 7 18 230 210 7 -1-1 19 252 260 3 -3 7 19 81 73 9 3-1 20 73 73 4 1 7 20 145 140 7
-2 7 18 198 183 5 0-1 19 80 66 2 -2 7 19 290 280 4 4-1 20 48 25 7 2 7 20 218 205 8
-1 7 18 39 5 6 1-1 19 377 386 5 -1 7 19 268 276 4 5-1 20 253 270 5 -2-8 21 142 128 7
0 7 18 111 101 5 2-1 19 83 71 3 0 7 19 213 211 5 6-1 20 113 103 4 -1-8 21 294 280 10
1 7 18 416 420 7 3-1 19 172 160 8 1 7 19 287 300 6 -6 0 20 141 144 5 0-8 21 88 71 5
2 7 18 148 136 5 4-1 19 57 49 6 2 7 19 141 112 7 -5 0 20 347 352 4 1-8 21 132 121 13
3 7 18 248 239 5 5-1 19 93 82 5 0 8 19 95 75 7 -4 0 20 205 209 4 2-8 21 260 269 6
-1 8 18 47 25 7 6-1 19 179 170 10 -2-8 20 509 517 4 -3 0 20 49 54 3 -4-7 21 191 208 6
0 8 18 308 310 11 -6 0 19 309 317 4 -1-8 20 616 609 5 -2 0 20 168 168 6 -3-7 21 53 42 7

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	-7	21	47	14	4	-3	1	21	838	837	4	-2	-5	22	45	36	6	3	2	22	73	77	5	-2	-3	23	473	483	5
-1	-7	21	185	187	4	-2	1	21	30	24	7	-1	-5	22	116	113	10	4	2	22	589	587	5	-1	-3	23	671	675	5
0	-7	21	97	88	10	-1	1	21	142	153	3	0	-5	22	168	155	4	5	2	22	61	40	10	0	-3	23	229	226	4
1	-7	21	30	38	15	0	1	21	155	162	11	1	-5	22	276	270	3	-5	3	22	99	80	9	1	-3	23	50	45	5
2	-7	21	152	128	4	1	1	21	124	114	4	2	-5	22	235	226	4	-4	3	22	117	101	4	2	-3	23	363	370	4
3	-7	21	391	379	5	2	1	21	27	9	9	3	-5	22	225	224	4	-3	3	22	102	97	5	3	-3	23	89	75	5
-4	-6	21	91	94	6	3	1	21	26	12	6	4	-5	22	83	69	5	-2	3	22	147	146	3	4	-3	23	101	93	6
-3	-6	21	45	25	11	4	1	21	287	278	4	-5	-4	22	141	138	4	-1	3	22	167	167	3	5	-3	23	40	24	23
-2	-6	21	262	266	3	5	1	21	253	255	4	-4	-4	22	179	179	3	0	3	22	83	67	4	-6	-2	23	217	200	4
-1	-6	21	294	293	3	-6	2	21	150	154	9	-3	-4	22	188	188	3	1	3	22	78	75	4	-5	-2	23	126	113	5
0	-6	21	80	68	9	-5	2	21	131	124	4	-2	-4	22	158	157	3	2	3	22	138	143	3	-4	-2	23	130	125	5
1	-6	21	144	149	4	-4	2	21	80	73	3	-1	-4	22	175	179	3	3	3	22	125	120	6	-3	-2	23	558	565	4
2	-6	21	40	16	8	-3	2	21	586	599	6	0	-4	22	121	121	3	4	3	22	126	115	7	-2	-2	23	542	541	4
3	-6	21	139	122	5	-2	2	21	223	217	3	1	-4	22	247	247	3	5	3	22	215	211	7	-1	-2	23	673	683	4
4	-6	21	353	375	5	-1	2	21	1074	1081	4	2	-4	22	91	79	7	-5	4	22	372	358	4	0	-2	23	911	912	5
-5	-5	21	137	143	3	0	2	21	172	166	2	3	-4	22	214	213	4	-4	4	22	232	238	4	1	-2	23	216	233	3
-4	-5	21	56	46	6	1	2	21	1117	1114	5	4	-4	22	164	170	6	-3	4	22	204	198	4	2	-2	23	470	484	3
-3	-5	21	121	117	4	2	2	21	859	874	5	5	-4	22	140	133	8	-2	4	22	169	169	3	3	-2	23	150	145	4
-2	-5	21	71	65	4	3	2	21	715	737	6	-6	-3	22	231	220	3	-1	4	22	119	124	4	4	-2	23	228	243	5
-1	-5	21	199	200	4	4	2	21	367	365	8	-5	-3	22	40	31	6	0	4	22	76	63	4	5	-2	23	48	44	8
0	-5	21	537	546	4	5	2	21	188	174	4	-4	-3	22	225	236	4	1	4	22	143	143	4	-6	-1	23	358	368	5
1	-5	21	32	14	6	-5	3	21	73	69	5	-3	-3	22	745	742	5	2	4	22	58	42	11	-5	-1	23	116	106	4
2	-5	21	30	19	12	-4	3	21	144	145	4	-2	-3	22	348	354	6	3	4	22	52	43	5	-4	-1	23	234	242	3
3	-5	21	67	47	14	-3	3	21	27	21	9	-1	-3	22	346	356	11	4	4	22	281	285	5	-3	-1	23	217	222	3
4	-5	21	97	97	5	-2	3	21	164	168	3	0	-3	22	195	203	3	-4	5	22	411	407	5	-2	-1	23	27	7	8
-5	-4	21	315	310	4	-1	3	21	141	152	3	1	-3	22	89	82	4	-3	5	22	37	13	13	-1	-1	23	248	247	3
-4	-4	21	391	401	8	0	3	21	124	117	3	2	-3	22	237	244	7	-2	5	22	60	66	11	0	-1	23	299	307	2
-3	-4	21	401	401	4	1	3	21	187	182	4	3	-3	22	29	22	9	-1	5	22	253	265	4	1	-1	23	232	233	4
-2	-4	21	35	21	5	2	3	21	355	359	3	4	-3	22	264	277	5	0	5	22	329	336	6	2	-1	23	47	40	5
-1	-4	21	33	18	5	3	3	21	271	272	4	5	-3	22	302	309	7	1	5	22	47	31	5	3	-1	23	110	105	4
0	-4	21	194	201	2	4	3	21	107	116	12	-6	-2	22	99	89	4	2	5	22	39	41	10	4	-1	23	38	11	7
1	-4	21	124	116	3	5	3	21	78	80	8	-5	-2	22	65	66	5	3	5	22	85	80	5	5	-1	23	126	133	6
2	-4	21	306	315	4	-5	4	21	207	200	4	-4	-2	22	29	26	11	4	5	22	129	123	4	-6	0	23	79	61	13
3	-4	21	98	91	7	-4	4	21	164	166	5	-3	-2	22	311	320	5	-3	6	22	123	117	6	-5	0	23	402	400	4
4	-4	21	367	375	5	-3	4	21	101	103	5	-2	-2	22	346	345	7	-2	6	22	80	62	8	-4	0	23	178	177	3
5	-4	21	176	170	12	-2	4	21	347	350	3	-1	-2	22	849	860	5	-1	6	22	62	62	5	-3	0	23	359	355	3
-6	-3	21	115	126	3	-1	4	21	164	162	4	0	-2	22	48	33	4	0	6	22	514	531	6	-2	0	23	214	224	3
-5	-3	21	200	211	4	0	4	21	346	355	7	1	-2	22	1095	1103	5	1	6	22	120	125	4	-1	0	23	78	78	3
-4	-3	21	26	6	11	1	4	21	75	77	4	2	-2	22	681	695	4	2	6	22	80	61	6	0	0	23	314	318	3
-3	-3	21	345	346	4	2	4	21	155	147	3	3	-2	22	730	749	5	3	6	22	129	135	6	1	0	23	94	74	5
-2	-3	21	407	424	3	3	4	21	385	390	11	4	-2	22	318	322	10	-2	7	22	270	253	6	2	0	23	85	75	5
-1	-3	21	409	412	4	4	4	21	108	102	5	5	-2	22	212	195	4	-1	7	22	48	42	7	3	0	23	123	124	4
0	-3	21	1070	1082	7	-4	5	21	80	70	5	-6	-1	22	175	172	4	0	7	22	335	329	5	4	0	23	282	296	5
1	-3	21	565	575	5	-3	5	21	488	501	7	-5	-1	22	144	143	4	1	7	22	106	90	8	5	0	23	57	47	7

2 -3 21 33 32 7 -2 5 21 301 300 4 -4 -1 22 194 204 4 -1 -8 23 109 97 5 -6 1 23 303 294 7
3 -3 21 121 116 4 -1 5 21 439 449 5 -3 -1 22 274 283 3 0 -8 23 159 146 5 -5 1 23 412 419 4
4 -3 21 241 252 5 0 5 21 249 254 3 -2 -1 22 371 384 5 1 -8 23 188 188 6 -4 1 23 469 478 4
5 -3 21 152 156 14 1 5 21 136 129 4 -1 -1 22 139 149 3 -3 -7 23 452 461 6 -3 1 23 128 135 4
-6 -2 21 100 97 7 2 5 21 133 125 5 0 -1 22 320 320 2 -2 -7 23 272 261 8 -2 1 23 233 239 3
-5 -2 21 152 154 4 3 5 21 42 4 5 1 -1 22 44 30 11 -1 -7 23 462 466 4 -1 1 23 234 227 3
-4 -2 21 267 277 5 4 5 21 91 67 5 2 -1 22 496 500 3 0 -7 23 85 68 6 0 1 23 344 358 4
-3 -2 21 28 5 15 -4 6 21 113 107 11 3 -1 22 106 106 4 1 -7 23 73 52 7 1 1 23 219 222 5
-2 -2 21 581 580 4 -3 6 21 182 168 6 4 -1 22 176 170 5 2 -7 23 104 90 6 2 1 23 112 99 4
-1 -2 21 251 246 3 -2 6 21 509 501 4 5 -1 22 41 7 7 3 -7 23 83 63 6 3 1 23 174 171 4
0 -2 21 87 97 3 -1 6 21 99 87 5 -6 0 22 262 269 4 -4 -6 23 122 103 8 4 1 23 185 179 5
1 -2 21 25 23 6 0 6 21 483 506 8 -5 0 22 45 43 6 -3 -6 23 163 148 10 5 1 23 105 73 12
2 -2 21 96 95 3 1 6 21 174 157 4 -4 0 22 267 270 3 -2 -6 23 172 172 5 -5 2 23 179 176 4
3 -2 21 323 334 5 2 6 21 218 204 5 -3 0 22 64 57 3 -1 -6 23 283 282 4 -4 2 23 450 456 5
4 -2 21 348 353 4 3 6 21 33 26 10 -2 0 22 216 209 3 0 -6 23 266 266 4 -3 2 23 373 381 3
5 -2 21 124 108 6 -2 7 21 65 52 7 -1 0 22 89 85 3 1 -6 23 694 704 7 -2 2 23 336 336 4
-6 -1 21 287 293 4 -1 7 21 174 163 4 0 0 22 127 122 3 2 -6 23 203 193 4 -1 2 23 189 200 3
-5 -1 21 37 7 6 0 7 21 156 140 5 1 0 22 51 32 5 3 -6 23 492 496 5 0 2 23 662 661 4
-4 -1 21 35 24 5 1 7 21 208 204 7 2 0 22 217 225 3 4 -6 23 228 217 8 1 2 23 74 66 4
-3 -1 21 77 81 4 2 7 21 224 208 6 3 0 22 395 404 4 -5 -5 23 91 81 5 2 2 23 451 459 4
-2 -1 21 146 129 4 -2 -8 22 97 79 6 4 0 22 161 147 4 -4 -5 23 54 42 6 3 2 23 263 266 6
-1 -1 21 75 90 3 -1 -8 22 227 217 4 5 0 22 134 123 5 -3 -5 23 284 284 7 4 2 23 247 261 7
0 -1 21 253 250 2 0 -8 22 223 207 4 -6 1 22 171 154 7 -2 -5 23 205 211 5 5 2 23 49 44 7
1 -1 21 374 373 3 1 -8 22 187 188 6 -5 1 22 95 80 5 -1 -5 23 84 71 4 -5 3 23 39 31 6
2 -1 21 170 158 3 -3 -7 22 402 388 5 -4 1 22 105 106 4 0 -5 23 132 125 7 -4 3 23 134 137 4
3 -1 21 208 206 3 -2 -7 22 56 40 4 -3 1 22 415 414 3 1 -5 23 111 116 4 -3 3 23 129 127 5
4 -1 21 257 257 5 -1 -7 22 121 112 4 -2 1 22 626 627 4 2 -5 23 352 351 7 -2 3 23 286 293 3
5 -1 21 153 144 6 0 -7 22 532 532 6 -1 1 22 680 678 8 3 -5 23 68 43 14 -1 3 23 95 98 3
-6 0 21 37 0 9 1 -7 22 439 443 6 0 1 22 246 236 3 4 -5 23 248 255 5 0 3 23 536 553 4
-5 0 21 324 329 4 2 -7 22 160 141 6 1 1 22 115 119 4 -5 -4 23 121 111 4 1 3 23 63 55 5
-4 0 21 128 130 4 3 -7 22 98 76 6 2 1 22 490 508 4 -4 -4 23 211 213 5 2 3 23 430 454 5
-3 0 21 272 273 2 -4 -6 22 217 216 5 3 1 22 110 105 4 -3 -4 23 106 100 4 3 3 23 46 41 6
-2 0 21 38 15 5 -3 -6 22 270 270 7 4 1 22 57 30 5 -2 -4 23 246 250 5 4 3 23 257 258 6
-1 0 21 83 78 3 -2 -6 22 411 406 4 5 1 22 126 108 4 -1 -4 23 24 5 8 -5 4 23 170 169 5
0 0 21 210 225 2 -1 -6 22 257 256 3 -6 2 22 102 95 8 0 -4 23 214 216 3 -4 4 23 203 194 4
1 0 21 302 317 8 0 -6 22 192 188 6 -5 2 22 184 182 5 1 -4 23 102 99 3 -3 4 23 219 226 4
2 0 21 164 166 8 1 -6 22 249 249 5 -4 2 22 44 23 5 2 -4 23 266 271 4 -2 4 23 361 368 5
3 0 21 378 382 3 2 -6 22 126 116 13 -3 2 22 356 358 3 3 -4 23 203 204 4 -1 4 23 40 19 6
4 0 21 192 203 4 3 -6 22 145 132 5 -2 2 22 873 891 4 4 -4 23 136 142 6 0 4 23 219 224 7
5 0 21 82 70 6 4 -6 22 123 117 5 -1 2 22 437 452 4 5 -4 23 88 57 9 1 4 23 207 208 5
-6 1 21 150 162 7 -5 -5 22 42 27 6 0 2 22 1174 1172 5 -5 -3 23 280 266 4 2 4 23 87 83 11
-5 1 21 231 237 4 -4 -5 22 116 115 5 1 2 22 49 44 5 -4 -3 23 85 84 6 3 4 23 45 24 7
-4 1 21 63 60 4 -3 -5 22 49 36 10 2 2 22 27 16 12 -3 -3 23 182 173 7 4 4 23 354 351 5

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	5	23	70	64	5	-5	0	24	48	44	8	3	-5	25	66	48	6	-4	4	25	255	244	7	-1	0	26	628	642	9
-3	5	23	26	5	26	-4	0	24	26	19	7	4	-5	25	371	379	9	-3	4	25	303	302	4	0	0	26	978	978	6
-2	5	23	246	238	8	-3	0	24	302	312	3	-5	-4	25	64	45	5	-2	4	25	324	327	6	1	0	26	170	163	4
-1	5	23	93	80	8	-2	0	24	332	329	4	-4	-4	25	172	172	3	-1	4	25	442	445	5	2	0	26	785	790	4
0	5	23	185	181	4	-1	0	24	103	87	3	-3	-4	25	206	212	9	0	4	25	871	880	6	3	0	26	260	267	4
1	5	23	208	197	4	0	0	24	470	486	3	-2	-4	25	323	331	4	1	4	25	99	92	9	4	0	26	446	448	6
2	5	23	147	157	16	1	0	24	111	114	4	-1	-4	25	83	91	6	2	4	25	619	640	5	5	0	26	80	74	9
3	5	23	41	11	9	2	0	24	100	100	4	0	-4	25	322	319	4	3	4	25	220	224	7	-5	1	26	60	48	6
-3	6	23	378	376	6	3	0	24	149	141	4	1	-4	25	15	5	14	4	4	25	252	253	7	-4	1	26	199	200	3
-2	6	23	272	263	5	4	0	24	157	145	5	2	-4	25	136	132	5	-3	5	25	103	95	22	-3	1	26	83	79	6
-1	6	23	301	315	4	5	0	24	172	164	6	3	-4	25	246	254	5	-2	5	25	34	28	19	-2	1	26	43	28	5
0	6	23	238	243	4	-5	1	24	60	46	6	4	-4	25	123	110	6	-1	5	25	38	18	6	-1	1	26	172	173	3
1	6	23	207	197	4	-4	1	24	18	9	17	-5	-3	25	98	90	10	0	5	25	91	84	5	0	1	26	170	172	4
2	6	23	285	286	5	-3	1	24	29	16	7	-4	-3	25	107	103	11	1	5	25	270	274	6	1	1	26	269	274	7
-1	7	23	236	218	5	-2	1	24	189	194	3	-3	-3	25	79	74	4	2	5	25	49	18	8	2	1	26	52	38	9
0	7	23	60	46	7	-1	1	24	149	151	6	-2	-3	25	226	233	3	3	5	25	162	155	6	3	1	26	376	388	5
1	7	23	63	52	10	0	1	24	34	29	6	-1	-3	25	252	250	8	-2	6	25	71	50	23	4	1	26	49	18	12
-1	-8	24	24	6	17	1	1	24	379	384	4	0	-3	25	27	2	8	-1	6	25	133	122	9	-5	2	26	187	181	4
0	-8	24	63	55	6	2	1	24	91	82	5	1	-3	25	430	436	4	0	6	25	124	119	11	-4	2	26	421	424	8
-3	-7	24	15	17	15	3	1	24	45	38	6	2	-3	25	100	99	4	1	6	25	171	154	20	-3	2	26	341	341	5
-2	-7	24	92	88	6	4	1	24	47	43	10	3	-3	25	47	20	6	2	6	25	222	199	8	-2	2	26	31	13	7
-1	-7	24	439	451	5	5	1	24	162	155	6	4	-3	25	67	55	6	-2	-7	26	180	169	10	-1	2	26	336	343	3
0	-7	24	200	178	7	-5	2	24	112	113	5	5	-3	25	274	261	7	-1	-7	26	75	67	5	0	2	26	185	177	4
1	-7	24	171	162	7	-4	2	24	98	88	4	-5	-2	25	87	88	5	0	-7	26	187	157	5	1	2	26	267	268	4
2	-7	24	161	132	7	-3	2	24	373	369	3	-4	-2	25	284	286	5	1	-7	26	224	227	9	2	2	26	72	60	5
-4	-6	24	135	134	6	-2	2	24	397	402	4	-3	-2	25	216	216	3	2	-7	26	77	34	13	3	2	26	218	210	6
-3	-6	24	421	431	7	-1	2	24	268	269	6	-2	-2	25	128	122	3	-3	-6	26	136	129	8	4	2	26	234	235	9
-2	-6	24	195	192	12	0	2	24	72	64	4	-1	-2	25	154	159	3	-2	-6	26	185	163	14	-4	3	26	437	443	4
-1	-6	24	516	519	5	1	2	24	300	306	4	0	-2	25	113	108	3	-1	-6	26	29	3	9	-3	3	26	42	28	13
0	-6	24	369	379	4	2	2	24	439	448	4	1	-2	25	214	219	3	0	-6	26	244	237	9	-2	3	26	635	648	5
1	-6	24	120	117	7	3	2	24	466	475	9	2	-2	25	309	312	3	1	-6	26	28	26	28	-1	3	26	171	165	4
2	-6	24	373	365	5	4	2	24	39	22	10	3	-2	25	398	409	4	2	-6	26	128	135	5	0	3	26	161	152	8
3	-6	24	82	70	5	5	2	24	287	290	11	4	-2	25	45	33	8	3	-6	26	132	116	15	1	3	26	44	27	13
-4	-5	24	291	294	7	-5	3	24	57	49	6	5	-2	25	359	359	6	-4	-5	26	237	242	5	2	3	26	66	69	5
-3	-5	24	114	110	6	-4	3	24	129	128	4	-5	-1	25	37	37	7	-3	-5	26	48	9	12	3	3	26	40	32	11
-2	-5	24	49	31	6	-3	3	24	23	7	22	-4	-1	25	179	174	4	-2	-5	26	129	121	5	4	3	26	201	184	7
-1	-5	24	261	264	4	-2	3	24	235	246	6	-3	-1	25	84	68	5	-1	-5	26	66	55	4	-4	4	26	241	230	7
0	-5	24	86	75	5	-1	3	24	163	163	3	-2	-1	25	354	359	4	0	-5	26	429	437	4	-3	4	26	21	8	20
1	-5	24	98	96	5	0	3	24	274	285	4	-1	-1	25	125	126	3	1	-5	26	138	123	13	-2	4	26	419	420	7
2	-5	24	112	104	6	1	3	24	24	22	24	0	-1	25	636	656	3	2	-5	26	264	256	4	-1	4	26	540	556	5
3	-5	24	47	7	7	2	3	24	92	83	9	1	-1	25	20	6	19	3	-5	26	86	58	6	0	4	26	86	73	5
4	-5	24	136	133	5	3	3	24	61	45	6	2	-1	25	339	347	4	-5	-4	26	86	69	5	1	4	26	111	108	4
-5	-4	24	335	336	5	4	3	24	75	51	5	3	-1	25	50	36	5	-4	-4	26	333	330	4	2	4	26	224	224	4
-4	-4	24	40	10	5	-4	4	24	139	118	5	4	-1	25	41	19	8	-3	-4	26	302	314	5	3	4	26	387	391	8

-3 -4 24 314 302 9 -3 4 24 465 460 4 5 -1 25 69 69 7 -2 -4 26 48 48 6 -3 5 26 8 22 8
 -2 -4 24 65 55 7 -2 4 24 107 94 7 -5 0 25 60 38 13 -1 -4 26 196 185 5 -2 5 26 62 55 8
 -1 -4 24 91 81 6 -1 4 24 180 169 4 -4 0 25 215 214 5 0 -4 26 249 255 3 -1 5 26 76 66 5
 0 -4 24 183 174 4 0 4 24 47 9 8 -3 0 25 586 588 3 1 -4 26 89 86 4 0 5 26 204 190 5
 1 -4 24 128 129 3 1 4 24 312 324 4 -2 0 25 132 131 4 2 -4 26 111 94 5 1 5 26 50 31 6
 2 -4 24 79 81 5 2 4 24 223 223 4 -1 0 25 319 310 3 3 -4 26 41 6 7 2 5 26 200 177 7
 3 -4 24 106 99 5 3 4 24 114 103 7 0 0 25 247 209 5 4 -4 26 334 329 5 -2 6 26 58 25 10
 4 -4 24 330 338 5 4 4 24 256 253 5 1 0 25 328 342 4 -5 -3 26 103 84 5 -1 6 26 65 42 5
 -5 -3 24 326 332 8 -4 5 24 28 5 22 2 0 25 196 196 3 -4 -3 26 78 62 11 0 6 26 267 262 5
 -4 -3 24 450 452 5 -3 5 24 62 52 12 3 0 25 160 151 4 -3 -3 26 70 53 4 1 6 26 141 120 8
 -3 -3 24 136 127 3 -2 5 24 275 280 6 4 0 25 389 393 5 -2 -3 26 50 39 6 -2 -7 27 131 118 5
 -2 -3 24 50 26 20 -1 5 24 242 244 4 5 0 25 217 211 6 -1 -3 26 62 58 6 -1 -7 27 76 63 6
 -1 -3 24 152 145 4 0 5 24 26 7 11 -5 1 25 127 122 5 0 -3 26 36 22 6 0 -7 27 154 131 6
 0 -3 24 252 270 3 1 5 24 142 134 4 -4 1 25 23 13 11 1 -3 26 280 286 3 1 -7 27 215 227 8
 1 -3 24 271 274 3 2 5 24 326 338 5 -3 1 25 48 34 5 2 -3 26 226 230 4 -3 -6 27 64 64 18
 2 -3 24 67 62 9 3 5 24 80 64 8 -2 1 25 172 167 4 3 -3 26 432 439 8 -2 -6 27 73 61 5
 3 -3 24 197 195 4 -3 6 24 69 57 11 -1 1 25 260 268 3 4 -3 26 322 337 7 -1 -6 27 60 51 5
 4 -3 24 197 189 5 -2 6 24 211 194 10 0 1 25 99 92 5 -5 -2 26 56 44 10 0 -6 27 236 240 7
 5 -3 24 157 143 8 -1 6 24 98 96 5 1 1 25 320 327 4 -4 -2 26 107 100 6 1 -6 27 82 65 18
 -5 -2 24 313 321 6 0 6 24 216 203 5 2 1 25 325 326 6 -3 -2 26 132 137 5 2 -6 27 233 222 14
 -4 -2 24 195 191 5 1 6 24 147 155 5 3 1 25 218 220 5 -2 -2 26 142 129 15 -4 -5 27 254 239 10
 -3 -2 24 427 441 3 2 6 24 237 224 15 4 1 25 476 489 6 -1 -2 26 93 92 4 -3 -5 27 50 18 11
 -2 -2 24 581 597 4 -3 -7 25 187 191 6 5 1 25 252 247 5 0 -2 26 109 114 3 -2 -5 27 576 563 4
 -1 -2 24 254 258 3 -2 -7 25 309 319 7 -5 2 25 30 21 10 1 -2 26 108 93 5 -1 -5 27 110 103 8
 0 -2 24 152 150 3 -1 -7 25 68 52 5 -4 2 25 202 197 4 2 -2 26 271 276 3 0 -5 27 275 271 10
 1 -2 24 258 259 3 0 -7 25 114 93 12 -3 2 25 50 29 5 3 -2 26 48 36 5 1 -5 27 112 102 14
 2 -2 24 466 474 3 1 -7 25 323 327 7 -2 2 25 52 41 14 4 -2 26 130 132 6 2 -5 27 116 107 5
 3 -2 24 427 437 4 2 -7 25 230 223 7 -1 2 25 117 122 3 5 -2 26 92 110 7 3 -5 27 60 61 6
 4 -2 24 65 47 6 -4 -6 25 0 19 1 0 2 25 284 300 4 -5 -1 26 154 163 7 -4 -4 27 165 156 4
 5 -2 24 133 125 6 -3 -6 25 328 327 7 1 2 25 90 76 5 -4 -1 26 456 455 4 -3 -4 27 159 160 4
 -6 -1 24 64 66 7 -2 -6 25 206 186 11 2 2 25 291 297 5 -3 -1 26 36 30 6 -2 -4 27 145 145 10
 -5 -1 24 189 181 4 -1 -6 25 165 162 8 3 2 25 62 59 8 -2 -1 26 626 623 4 -1 -4 27 348 352 5
 -4 -1 24 43 36 6 0 -6 25 63 55 5 4 2 25 189 188 7 -1 -1 26 196 204 5 0 -4 27 661 664 7
 -3 -1 24 43 37 6 1 -6 25 286 293 6 -5 3 25 251 246 4 0 -1 26 70 50 3 1 -4 27 34 26 7
 -2 -1 24 130 127 4 2 -6 25 120 109 5 -4 3 25 370 370 4 1 -1 26 44 42 6 2 -4 27 683 699 5
 -1 -1 24 160 161 5 3 -6 25 489 490 5 -3 3 25 32 32 32 2 -1 26 246 257 3 3 -4 27 177 166 5
 0 -1 24 559 579 3 -4 -5 25 85 94 5 -2 3 25 168 156 4 3 -1 26 107 111 5 4 -4 27 459 455 6
 1 -1 24 150 153 5 -3 -5 25 100 99 7 -1 3 25 31 25 8 4 -1 26 371 373 5 -5 -3 27 77 64 7
 2 -1 24 574 590 3 -2 -5 25 72 59 6 0 3 25 253 259 4 5 -1 26 141 143 9 -4 -3 27 39 15 9
 3 -1 24 41 33 7 -1 -5 25 96 85 4 1 3 25 44 46 6 -5 0 26 122 117 7 -3 -3 27 44 32 7
 4 -1 24 406 399 5 0 -5 25 98 88 4 2 3 25 88 91 5 -4 0 26 204 208 4 -2 -3 27 77 55 4
 5 -1 24 127 117 7 1 -5 25 110 100 5 3 3 25 19 6 18 -3 0 26 191 190 4 -1 -3 27 223 232 6
 -6 0 24 105 101 5 2 -5 25 448 441 5 4 3 25 321 332 4 -2 0 26 225 227 4 0 -3 27 107 115 5

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
1	-3	27	81	58	4	-4	-5	28	49	39	7	2	4	28	232	228	5	1	3	29	94	68	12	2	3	30	202	202	5
2	-3	27	51	37	5	-3	-5	28	99	84	6	3	4	28	203	193	8	2	3	29	353	360	5	3	3	30	65	66	16
3	-3	27	304	315	4	-2	-5	28	425	441	5	-2	5	28	216	194	7	3	3	29	370	384	8	-3	4	30	121	129	15
4	-3	27	66	57	9	-1	-5	28	124	110	6	-1	5	28	191	165	5	-3	4	29	101	108	8	-2	4	30	109	118	7
-5	-2	27	82	88	6	0	-5	28	436	451	7	0	5	28	87	75	5	-2	4	29	53	33	11	-1	4	30	106	94	6
-4	-2	27	261	276	5	1	-5	28	46	22	11	1	5	28	37	20	36	-1	4	29	207	197	5	0	4	30	222	205	5
-3	-2	27	289	289	3	2	-5	28	210	186	5	2	5	28	74	64	19	0	4	29	150	142	8	1	4	30	195	183	5
-2	-2	27	44	35	5	3	-5	28	137	125	5	-2	-6	29	232	225	4	1	4	29	64	55	6	2	4	30	180	168	8
-1	-2	27	298	293	4	-4	-4	28	232	215	4	-1	-6	29	152	157	5	2	4	29	52	42	13	-1	5	30	308	321	7
0	-2	27	47	43	4	-3	-4	28	60	51	5	0	-6	29	73	48	11	-2	5	29	125	116	7	0	5	30	48	11	8
1	-2	27	239	234	6	-2	-4	28	453	452	8	1	-6	29	79	76	8	-1	5	29	133	121	6	-1	-6	31	34	6	10
2	-2	27	52	36	5	-1	-4	28	365	371	9	2	-6	29	99	75	8	0	5	29	143	150	5	0	-6	31	145	133	8
3	-2	27	229	223	4	0	-4	28	557	564	4	-3	-5	29	173	183	4	1	5	29	143	135	5	-3	-5	31	104	78	7
4	-2	27	187	185	6	1	-4	28	321	335	4	-2	-5	29	115	110	4	-2	-6	30	162	171	5	-2	-5	31	109	83	9
-5	-1	27	44	37	10	2	-4	28	57	32	6	-1	-5	29	34	12	11	-1	-6	30	312	293	5	-1	-5	31	39	22	11
-4	-1	27	229	235	4	3	-4	28	54	7	6	0	-5	29	425	414	5	0	-6	30	102	115	8	0	-5	31	251	244	5
-3	-1	27	42	43	6	-4	-3	28	210	212	5	1	-5	29	180	169	7	1	-6	30	79	78	10	1	-5	31	43	24	11
-2	-1	27	812	801	9	-3	-3	28	101	86	4	2	-5	29	114	114	5	-3	-5	30	123	114	10	2	-5	31	450	470	7
-1	-1	27	168	171	4	-2	-3	28	290	286	3	3	-5	29	115	106	5	-2	-5	30	140	117	4	-3	-4	31	66	53	10
0	-1	27	449	453	3	-1	-3	28	152	152	4	-4	-4	29	413	428	15	-1	-5	30	185	177	6	-2	-4	31	103	80	4
1	-1	27	87	87	4	0	-3	28	115	118	5	-3	-4	29	47	21	5	0	-5	30	214	213	5	-1	-4	31	72	50	5
2	-1	27	234	242	3	1	-3	28	72	71	4	-2	-4	29	198	190	4	1	-5	30	45	12	12	0	-4	31	214	194	6
3	-1	27	119	114	4	2	-3	28	51	27	5	-1	-4	29	85	87	6	2	-5	30	298	295	10	1	-4	31	67	66	9
4	-1	27	133	129	7	3	-3	28	198	193	5	0	-4	29	48	30	5	-4	-4	30	177	177	6	2	-4	31	215	208	5
-5	0	27	101	100	6	4	-3	28	138	122	8	1	-4	29	323	332	4	-3	-4	30	266	260	4	3	-4	31	47	41	9
-4	0	27	254	256	4	-5	-2	28	166	159	5	2	-4	29	221	221	4	-2	-4	30	44	22	6	-4	-3	31	197	187	6
-3	0	27	164	163	4	-4	-2	28	390	386	5	3	-4	29	385	392	10	-1	-4	30	259	256	5	-3	-3	31	511	505	7
-2	0	27	567	572	4	-3	-2	28	81	84	8	-4	-3	29	161	133	9	0	-4	30	108	100	4	-2	-3	31	32	18	8
-1	0	27	394	389	4	-2	-2	28	303	304	3	-3	-3	29	330	333	4	1	-4	30	66	64	14	-1	-3	31	456	456	4
0	0	27	447	444	4	-1	-2	28	26	11	7	-2	-3	29	58	51	5	2	-4	30	152	137	5	0	-3	31	167	158	5
1	0	27	313	316	10	0	-2	28	127	122	4	-1	-3	29	22	12	11	3	-4	30	191	186	5	1	-3	31	270	279	4
2	0	27	61	51	4	1	-2	28	158	153	13	0	-3	29	82	68	6	-4	-3	30	92	81	11	2	-3	31	229	217	4
3	0	27	203	188	4	2	-2	28	54	41	4	1	-3	29	56	16	8	-3	-3	30	238	238	4	3	-3	31	68	47	11
4	0	27	71	50	9	3	-2	28	288	298	4	2	-3	29	68	40	9	-2	-3	30	33	15	7	-4	-2	31	103	105	4
-5	1	27	314	312	4	4	-2	28	255	248	5	3	-3	29	550	561	5	-1	-3	30	115	102	4	-3	-2	31	103	87	12
-4	1	27	186	176	4	-5	-1	28	270	260	7	4	-3	29	64	53	36	0	-3	30	57	44	7	-2	-2	31	344	341	4
-3	1	27	99	106	4	-4	-1	28	500	513	3	-4	-2	29	242	255	4	1	-3	30	416	419	4	-1	-2	31	413	413	4
-2	1	27	189	186	4	-3	-1	28	229	234	4	-3	-2	29	197	189	4	2	-3	30	160	147	7	0	-2	31	470	481	7
-1	1	27	104	101	3	-2	-1	28	68	73	5	-2	-2	29	373	382	4	3	-3	30	64	31	6	1	-2	31	698	701	5
0	1	27	39	31	7	-1	-1	28	97	91	4	-1	-2	29	457	454	4	-4	-2	30	102	99	4	2	-2	31	218	207	4
1	1	27	90	86	4	0	-1	28	512	519	6	0	-2	29	35	9	7	-3	-2	30	227	215	9	3	-2	31	484	491	4
2	1	27	153	160	4	1	-1	28	185	190	3	1	-2	29	60	42	10	-2	-2	30	308	314	4	-4	-1	31	49	31	5
3	1	27	46	26	7	2	-1	28	88	86	5	2	-2	29	151	146	4	-1	-2	30	44	27	5	-3	-1	31	41	49	7
4	1	27	189	187	12	3	-1	28	99	96	4	3	-2	29	42	3	6	0	-2	30	121	132	5	-2	-1	31	235	223	4

-5	2 27	86	70	5	4	-1 28	259	249	5	4	-2 29	138	127	8	1	-2 30	99	92	4	-1	-1 31	51	37	7
-4	2 27	510	511	4	-5	0 28	28	21	27	-5	-1 29	28	32	28	2	-2 30	268	261	3	0	-1 31	137	136	5
-3	2 27	78	77	4	-4	0 28	351	364	4	-4	-1 29	48	22	5	3	-2 30	273	269	6	1	-1 31	34	17	7
-2	2 27	168	163	4	-3	0 28	231	232	4	-3	-1 29	231	235	4	4	-2 30	131	123	6	2	-1 31	377	386	4
-1	2 27	116	108	3	-2	0 28	154	153	6	-2	-1 29	271	279	4	-4	-1 30	98	75	4	3	-1 31	72	59	5
0	2 27	318	325	4	-1	0 28	79	73	7	-1	-1 29	182	186	4	-3	-1 30	35	13	7	-4	0 31	193	192	4
1	2 27	230	235	4	0	0 28	178	164	4	0	-1 29	313	300	4	-2	-1 30	256	251	5	-3	0 31	119	112	4
2	2 27	46	25	6	1	0 28	581	577	5	1	-1 29	96	93	4	-1	-1 30	59	48	11	-2	0 31	215	206	7
3	2 27	436	456	7	2	0 28	230	237	3	2	-1 29	363	363	3	0	-1 30	341	350	4	-1	0 31	64	41	8
4	2 27	255	277	7	3	0 28	213	209	4	3	-1 29	68	40	5	1	-1 30	32	2	7	0	0 31	214	206	4
-4	3 27	326	325	4	4	0 28	132	128	6	4	-1 29	270	261	7	2	-1 30	535	537	4	1	0 31	241	231	5
-3	3 27	82	80	5	-5	1 28	219	217	6	-5	0 29	405	398	11	3	-1 30	193	188	9	2	0 31	220	211	3
-2	3 27	114	107	4	-4	1 28	73	58	5	-4	0 29	190	208	4	4	-1 30	28	15	19	3	0 31	203	186	4
-1	3 27	128	126	5	-3	1 28	277	285	4	-3	0 29	81	60	4	-4	0 30	91	66	5	-4	1 31	145	146	5
0	3 27	156	155	4	-2	1 28	190	196	4	-2	0 29	224	228	5	-3	0 30	46	19	6	-3	1 31	529	533	5
1	3 27	58	35	5	-1	1 28	154	150	3	-1	0 29	113	110	6	-2	0 30	52	34	5	-2	1 31	44	15	6
2	3 27	214	209	4	0	1 28	177	174	4	0	0 29	290	297	4	-1	0 30	119	84	6	-1	1 31	629	637	5
3	3 27	60	44	9	1	1 28	206	206	4	1	0 29	240	230	4	0	0 30	42	9	7	0	1 31	171	160	4
4	3 27	80	76	9	2	1 28	117	114	5	2	0 29	225	233	6	1	0 30	67	63	5	1	1 31	105	81	7
-4	4 27	172	168	5	3	1 28	511	518	6	3	0 29	331	337	4	2	0 30	57	44	4	2	1 31	254	258	4
-3	4 27	298	287	5	4	1 28	126	110	8	4	0 29	251	253	5	3	0 30	121	131	4	3	1 31	123	123	6
-2	4 27	13	3	13	-4	2 28	331	337	6	-4	1 29	102	89	4	4	0 30	52	10	11	-4	2 31	212	208	5
-1	4 27	52	41	6	-3	2 28	322	322	5	-3	1 29	145	138	5	-4	1 30	171	162	4	-3	2 31	220	221	4
0	4 27	127	124	4	-2	2 28	326	327	4	-2	1 29	174	161	4	-3	1 30	474	481	4	-2	2 31	202	200	4
1	4 27	427	442	8	-1	2 28	331	341	4	-1	1 29	276	277	4	-2	1 30	89	82	4	-1	2 31	105	100	7
2	4 27	141	133	5	0	2 28	120	118	5	0	1 29	237	247	4	-1	1 30	196	192	4	0	2 31	375	385	7
3	4 27	104	93	8	1	2 28	99	98	5	1	1 29	301	308	4	0	1 30	34	10	8	1	2 31	101	86	5
-3	5 27	139	145	7	2	2 28	80	78	5	2	1 29	141	134	4	1	1 30	321	329	4	2	2 31	190	176	5
-2	5 27	172	148	7	3	2 28	282	281	7	3	1 29	59	27	11	2	1 30	119	104	5	3	2 31	313	309	10
-1	5 27	313	301	4	4	2 28	206	203	6	4	1 29	150	128	13	3	1 30	130	111	6	-3	3 31	113	102	7
0	5 27	265	259	5	-4	3 28	52	27	7	-4	2 29	87	71	8	-4	2 30	47	30	6	-2	3 31	52	45	12
1	5 27	346	339	5	-3	3 28	156	152	4	-3	2 29	60	51	5	-3	2 30	279	273	4	-1	3 31	49	6	8
2	5 27	198	179	6	-2	3 28	95	87	5	-2	2 29	299	303	7	-2	2 30	480	479	4	0	3 31	39	5	9
-1	6 27	199	203	5	-1	3 28	65	40	18	-1	2 29	58	46	6	-1	2 30	562	586	7	1	3 31	107	81	5
0	6 27	197	184	11	0	3 28	345	342	4	0	2 29	116	113	4	0	2 30	408	421	4	2	3 31	61	55	11
-1	-7 28	160	150	5	1	3 28	230	244	4	1	2 29	254	247	4	1	2 30	540	562	5	-2	4 31	59	45	14
0	-7 28	149	150	7	2	3 28	58	38	10	2	2 29	297	295	14	2	2 30	97	92	5	-1	4 31	171	158	7
-3	-6 28	258	263	7	3	3 28	67	51	15	3	2 29	293	302	7	3	2 30	268	278	9	0	4 31	52	27	6
-2	-6 28	149	122	5	-3	4 28	48	16	10	-4	3 29	42	29	9	-3	3 30	151	157	7	1	4 31	72	53	6
-1	-6 28	128	115	5	-2	4 28	290	297	7	-3	3 29	178	167	8	-2	3 30	48	16	9	-2	-5 32	208	198	3
0	-6 28	112	99	4	-1	4 28	91	78	5	-2	3 29	119	115	5	-1	3 30	95	85	7	-1	-5 32	61	40	14
1	-6 28	59	13	10	0	4 28	457	465	5	-1	3 29	195	209	6	0	3 30	148	143	5	0	-5 32	59	39	10
2	-6 28	70	73	23	1	4 28	302	310	4	0	3 29	279	276	4	1	3 30	118	110	5	1	-5 32	58	51	10

Table 1. Observed and calculated structure factors for polyphite

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	-4	32	139	126	17	-2	1	32	165	154	4	-3	-1	33	81	72	4	2	-3	34	48	6	6	1	-2	35	48	26	9

-2 -4 32 414 405 4 -1 1 32 379 383 7 -2 -1 33 89 74 5 -3 -2 34 87 67 13 2 -2 35 69 32 5
-1 -4 32 155 137 4 0 1 32 189 180 5 -1 -1 33 234 228 6 -2 -2 34 174 174 4 -3 -1 35 262 258 5
0 -4 32 390 387 5 1 1 32 107 95 6 0 -1 33 204 179 5 -1 -2 34 55 54 8 -2 -1 35 413 416 7
1 -4 32 171 168 6 2 1 32 53 35 7 1 -1 33 260 251 4 0 -2 34 136 136 6 -1 -1 35 105 82 7
2 -4 32 83 58 5 3 1 32 249 258 6 2 -1 33 438 435 4 1 -2 34 172 157 6 0 -1 35 370 375 6
-3 -3 32 287 283 4 -3 2 32 361 360 4 3 -1 33 161 157 6 2 -2 34 266 269 4 1 -1 35 43 33 9
-2 -3 32 52 50 5 -2 2 32 59 32 7 -3 0 33 477 483 5 -3 -1 34 178 152 9 2 -1 35 230 215 5
-1 -3 32 729 730 7 -1 2 32 205 208 7 -2 0 33 148 137 6 -2 -1 34 97 69 5 -2 0 35 77 42 14
0 -3 32 90 73 6 0 2 32 358 360 5 -1 0 33 105 110 7 -1 -1 34 147 134 6 -1 0 35 661 675 8
1 -3 32 72 73 7 1 2 32 101 82 5 0 0 33 155 153 7 0 -1 34 542 547 6 0 0 35 337 330 20
2 -3 32 149 134 4 2 2 32 194 196 5 1 0 33 144 134 6 1 -1 34 228 218 4 1 0 35 414 423 4
3 -3 32 317 305 5 -2 3 32 46 31 10 2 0 33 215 200 4 2 -1 34 112 102 6 2 0 35 501 519 5
-4 -2 32 135 119 5 -1 3 32 132 108 7 3 0 33 174 157 5 -3 0 34 127 113 5 -2 1 35 80 66 9
-3 -2 32 374 369 4 0 3 32 159 146 5 -3 1 33 211 211 4 -2 0 34 81 62 8 -1 1 35 84 68 8
-2 -2 32 118 113 5 1 3 32 255 246 5 -2 1 33 56 47 5 0 0 34 81 14 8 0 1 35 44 7 12
-1 -2 32 440 440 6 2 3 32 219 217 13 -1 1 33 370 353 7 1 0 34 438 420 5 1 1 35 210 206 5
0 -2 32 215 221 5 -1 4 32 30 3 22 0 1 33 85 79 6 2 0 34 75 45 12 -1 2 35 237 231 12
1 -2 32 222 215 4 0 4 32 90 87 7 1 1 33 336 345 5 -3 1 34 107 101 5 0 2 35 31 11 20
2 -2 32 181 182 4 -1 -5 33 86 68 6 2 1 33 111 121 8 -2 1 34 90 86 5 -1 -3 36 39 10 14
3 -2 32 241 237 4 0 -5 33 141 138 8 -3 2 33 43 20 8 -1 1 34 113 93 14 0 -3 36 56 26 9
-4 -1 32 119 113 5 1 -5 33 44 4 13 -2 2 33 127 107 7 0 1 34 42 15 17 -2 -2 36 259 258 6
-3 -1 32 237 229 4 -2 -4 33 81 67 6 -1 2 33 275 277 7 1 1 34 477 481 7 -1 -2 36 133 129 8
-2 -1 32 149 136 6 -1 -4 33 167 154 5 0 2 33 269 259 5 2 1 34 73 52 5 0 -2 36 176 162 6
-1 -1 32 73 50 6 0 -4 33 193 199 6 1 2 33 186 176 5 -2 2 34 188 182 7 1 -2 36 84 51 7
0 -1 32 132 106 5 1 -4 33 49 29 21 2 2 33 423 434 5 -1 2 34 83 88 8 -2 -1 36 521 543 6
1 -1 32 171 168 4 2 -4 33 57 10 11 -2 3 33 49 32 21 0 2 34 247 234 7 -1 -1 36 310 313 6
2 -1 32 125 119 6 -3 -3 33 359 361 4 -1 3 33 205 200 7 1 2 34 57 33 6 0 -1 36 89 73 18
3 -1 32 248 245 4 -2 -3 33 109 86 4 0 3 33 184 173 5 -1 3 34 190 172 7 1 -1 36 101 103 13
-4 0 32 57 31 15 -1 -3 33 365 358 4 1 3 33 191 176 5 0 3 34 228 215 6 -2 0 36 280 276 13
-3 0 32 126 126 4 0 -3 33 130 112 6 -2 -4 34 204 184 5 -1 -4 35 113 115 7 -1 0 36 86 63 8
-2 0 32 105 94 4 1 -3 33 227 235 7 -1 -4 34 222 228 5 0 -4 35 177 173 13 0 0 36 227 213 7
-1 0 32 85 58 7 2 -3 33 51 18 6 0 -4 34 242 243 5 -2 -3 35 99 107 5 1 0 36 166 161 5
0 0 32 125 132 12 -3 -2 33 329 334 4 1 -4 34 31 13 15 -1 -3 35 63 42 8 -1 1 36 135 135 11
1 0 32 80 77 5 -2 -2 33 80 71 12 -3 -3 34 142 121 7 0 -3 35 67 68 7 0 1 36 225 205 14
2 0 32 161 155 5 -1 -2 33 67 53 13 -2 -3 34 78 75 5 1 -3 35 445 443 14 -1 -1 37 86 67 11
3 0 32 329 326 5 0 -2 33 197 186 17 -1 -3 34 288 289 9 -2 -2 35 57 34 14 0 -1 37 429 434 7
-4 1 32 101 103 5 1 -2 33 35 6 8 0 -3 34 150 141 7 -1 -2 35 62 41 14 0 0 37 61 40 10
-3 1 32 246 244 4 2 -2 33 319 324 6 1 -3 34 347 360 6 0 -2 35 124 96 6

E