

Table S1. Observed and calculated structure factors for panichiite

h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ						
1	1	1	2114	2028	23	3	5	7	629	641	4	5	9	9	497	512	11	1	9	11	310	296	10	5	7	13	333	314	14
0	0	2	2481	2321	33	5	5	7	677	687	7	7	9	9	380	368	14	3	9	11	270	265	12	7	7	13	352	234	42
0	2	2	1094	1103	18	1	7	7	428	429	7	9	9	9	389	358	29	5	9	11	274	273	13	1	9	13	358	342	12
2	2	2	1948	1703	20	3	7	7	366	356	8	0	0	10	717	744	15	7	9	11	192	198	22	3	9	13	334	312	13
1	1	3	1540	1544	10	5	7	7	417	419	8	0	2	10	365	370	8	1	11	11	175	145	31	5	9	13	317	297	50
1	3	3	1160	1176	8	7	7	7	248	246	24	2	2	10	214	236	11	3	11	11	181	130	33	0	0	14	353	328	23
3	3	3	929	968	11	0	0	8	2185	2227	29	0	4	10	655	663	7	5	11	11	220	145	30	0	2	14	198	199	17
0	0	4	4610	4400	58	0	2	8	1168	1175	8	2	4	10	354	348	5	0	0	12	1011	1057	18	2	2	14	0	26	1
0	2	4	1917	1907	13	2	2	8	622	635	6	4	4	10	591	593	8	0	2	12	603	633	8	0	4	14	296	300	15
2	2	4	908	902	6	0	4	8	1864	1887	12	0	6	10	291	295	11	2	2	12	404	406	9	2	4	14	189	191	15
0	4	4	3427	3325	32	2	4	8	1021	1024	5	2	6	10	110	133	18	0	4	12	884	922	9	4	4	14	285	274	16
2	4	4	1600	1585	10	4	4	8	1617	1614	11	4	6	10	278	281	8	2	4	12	546	563	6	0	6	14	132	172	35
4	4	4	2700	2677	29	0	6	8	860	850	10	6	6	10	0	64	1	4	4	12	785	807	10	2	6	14	47	18	47
1	1	5	1577	1557	10	2	6	8	484	473	5	0	8	10	486	479	9	0	6	12	482	482	11	4	6	14	179	165	24
1	3	5	1283	1289	6	4	6	8	740	753	5	2	8	10	296	293	9	2	6	12	326	323	9	6	6	14	171	35	54
3	3	5	1041	1050	7	6	6	8	363	367	10	4	8	10	444	432	7	4	6	12	444	432	8	0	8	14	244	230	21
1	5	5	1286	1293	8	0	8	8	1212	1208	20	6	8	10	246	241	12	6	6	12	287	261	17	2	8	14	167	166	25
3	5	5	1095	1102	8	2	8	8	701	705	8	8	8	10	316	319	18	0	8	12	624	623	12	4	8	14	267	211	80
5	5	5	1083	1099	14	4	8	8	1049	1050	9	0	10	10	243	205	23	2	8	12	407	403	9	1	1	15	143	151	26
0	0	6	1473	1484	19	6	8	8	539	533	9	2	10	10	0	21	1	4	8	12	558	549	9	1	3	15	142	135	20
0	2	6	664	685	5	8	8	8	725	704	20	4	10	10	165	197	30	6	8	12	335	314	13	3	3	15	169	121	26
2	2	6	733	680	6	1	1	9	956	984	7	6	10	10	64	21	64	8	8	12	450	379	38	1	5	15	155	154	21
0	4	6	1260	1264	9	1	3	9	844	852	5	8	10	10	181	169	39	0	10	12	321	291	17	3	5	15	152	140	26
2	4	6	605	623	4	3	3	9	730	737	7	1	1	11	362	374	9	2	10	12	261	213	14	5	5	15	197	151	86
4	4	6	1090	1098	8	1	5	9	842	853	5	1	3	11	298	316	7	4	10	12	278	264	17	1	7	15	176	112	176
0	6	6	500	497	9	3	5	9	748	748	5	3	3	11	269	267	11	1	1	13	546	562	9	0	0	16	425	435	26
2	6	6	409	385	5	5	5	9	723	741	8	1	5	11	359	363	7	1	3	13	496	503	6	0	2	16	299	299	15
4	6	6	449	457	6	1	7	9	577	559	5	3	5	11	322	315	7	3	3	13	443	452	10	2	2	16	231	232	26
6	6	6	225	230	18	3	7	9	501	489	6	5	5	11	354	345	11	1	5	13	476	489	7	0	4	16	383	385	28
1	1	7	825	834	6	5	7	9	518	503	7	1	7	11	229	227	11	3	5	13	451	441	8	2	4	16	349	269	40
1	3	7	665	683	4	7	7	9	341	341	13	3	7	11	215	196	12	5	5	13	432	425	14						
3	3	7	563	559	6	1	9	9	592	588	11	5	7	11	229	229	13	1	7	13	354	354	10						
1	5	7	749	761	4	3	9	9	518	526	10	7	7	11	170	153	30	3	7	13	313	320	11						