Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 1

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

0 1 0 33 1185 -33 -8 18 0 782 770 31 -11 26 0 1574 1604 33 -1 13 1 544 534 28 -4 19 1 322 316 87

-1 2 0 1095 1127 14 -7 18 0 276 217 97 -10 26 0 311 202 235 -13 14 1 0 44 1 -3 19 1 496 486 54

0 2 0 438 422 9 -6 18 0 1055 1084 23 -9 26 0 1011 981 48 -12 14 1 386 419 47 -2 19 1 151 121 151

-1 3 0 1917 1952 14 -5 18 0 284 272 94 -8 26 0 374 235 152 -11 14 1 810 799 22 -1 19 1 104 97 104

0 3 0 2937 2899 23 -4 18 0 253 220 114 -7 26 0 235 252 234 -10 14 1 193 191 104 -19 20 1 126 38 126

-2 4 0 929 931 11 -3 18 0 706 718 35 -6 26 0 1473 1444 39 -9 14 1 705 683 21 -18 20 1 126 118 125

-1 4 0 935 895 6 -2 18 0 745 701 34 -5 26 0 532 373 110 -8 14 1 232 199 73 -17 20 1 1458 1426 24

0 4 0 1417 1377 9 -1 18 0 807 786 31 -13 27 0 393 386 153 -7 14 1 219 238 72 -16 20 1 487 450 60

-2 5 0 790 834 9 0 18 0 1438 1394 30 -12 27 0 438 412 130 -6 14 1 195 192 98 -15 20 1 221 253 220

-1 5 0 97 55 96 -9 19 0 467 494 54 -11 27 0 0 113 1 -5 14 1 711 681 22 -14 20 1 415 368 70

0 5 0 2089 1999 12 -8 19 0 303 241 99 -10 27 0 872 857 60 -4 14 1 218 185 93 -13 20 1 420 391 66

-3 6 0 4715 4835 43 -7 19 0 375 441 73 -9 27 0 382 425 156 -3 14 1 798 808 21 -12 20 1 0 39 1

-2 6 0 570 565 12 -6 19 0 1201 1186 22 -8 27 0 493 353 143 -2 14 1 389 416 41 -11 20 1 211 243 210

-1 6 0 1111 1099 8 -5 19 0 0 42 1 -1 2 1 107 128 43 -1 14 1 0 37 1 -10 20 1 461 391 65

0 6 0 2808 2888 19 -4 19 0 1053 1014 26 -2 3 1 1626 1741 8 -14 15 1 258 181 90 -9 20 1 302 248 105

-3 7 0 143 145 65 -3 19 0 791 757 33 -1 3 1 1634 1744 6 -13 15 1 209 102 124 -8 20 1 85 35 85

-2 7 0 167 129 51 -2 19 0 815 795 34 -3 4 1 223 240 22 -12 15 1 107 84 106 -7 20 1 455 398 63

-1 7 0 474 520 16 -1 19 0 116 226 116 -2 4 1 550 560 8 -11 15 1 827 806 22 -6 20 1 374 376 78

0 7 0 2421 2375 10 0 19 0 743 729 63 -1 4 1 218 236 25 -10 15 1 0 23 1 -5 20 1 271 254 119

-4 8 0 533 495 21 -10 20 0 815 806 50 -4 5 1 67 63 67 -9 15 1 166 203 166 -4 20 1 474 442 59

-3 8 0 443 327 18 -9 20 0 761 761 38 -3 5 1 127 133 62 -8 15 1 121 11 121 -3 20 1 1434 1422 23

-2 8 0 2623 2741 14 -8 20 0 1923 1957 19 -2 5 1 93 124 93 -7 15 1 42 4 41 -2 20 1 210 110 210

-1 8 0 185 154 53 -7 20 0 142 134 141 -1 5 1 0 54 1 -6 15 1 122 201 121 -1 20 1 0 21 1

0 8 0 1659 1728 15 -6 20 0 737 707 40 -5 6 1 294 271 23 -5 15 1 0 7 1 -20 21 1 412 382 97

-4 9 0 181 175 58 -5 20 0 313 251 100 -4 6 1 99 39 99 -4 15 1 839 792 22 -19 21 1 0 14 1

-3 9 0 2358 2393 12 -4 20 0 464 415 62 -3 6 1 5683 5643 21 -3 15 1 178 83 177 -18 21 1 128 157 127

-2 9 0 1355 1331 9 -3 20 0 2308 2350 18 -2 6 1 67 24 67 -2 15 1 59 78 58 -17 21 1 248 172 205

-1 9 0 254 247 39 -2 20 0 174 180 174 -1 6 1 291 268 24 -1 15 1 111 184 110 -16 21 1 202 122 202

0 9 0 996610242 36 -1 20 0 354 382 102 -6 7 1 410 372 19 -15 16 1 0 32 1 -15 21 1 181 120 181

-5 10 0 662 642 21 0 20 0 803 708 61 -5 7 1 407 377 18 -14 16 1 154 183 154 -14 21 1 721 700 41

-4 10 0 1827 1887 10 -10 21 0 500 494 66 -4 7 1 688 673 11 -13 16 1 400 416 51 -13 21 1 201 264 201

-3 10 0 273 328 38 -9 21 0 418 469 77 -3 7 1 708 674 11 -12 16 1 250 238 107 -12 21 1 224 171 224

-2 10 0 309 312 35 -8 21 0 0 153 1 -2 7 1 420 376 19 -11 16 1 307 344 77 -11 21 1 446 396 72

-1 10 0 442 469 23 -7 21 0 277 253 143 -1 7 1 404 361 18 -10 16 1 329 312 65 -10 21 1 445 401 71

0 10 0 998 831 18 -6 21 0 2258 2216 21 -7 8 1 84 59 83 -9 16 1 220 208 99 -9 21 1 178 168 177

-5 11 0 831 850 13 -5 21 0 279 245 142 -6 8 1 232 213 36 -8 16 1 265 249 73 -8 21 1 277 276 152

-4 11 0 132 70 131 -4 21 0 338 266 106 -5 8 1 258 230 32 -7 16 1 193 207 139 -7 21 1 771 705 42

-3 11 0 3836 3782 18 -3 21 0 530 506 61 -4 8 1 672 573 13 -6 16 1 317 319 59 -6 21 1 192 121 192

-2 11 0 538 518 22 -2 21 0 0 112 1 -3 8 1 226 228 37 -5 16 1 326 342 58 -5 21 1 72 115 71

-1 11 0 770 712 15 -1 21 0 896 912 40 -2 8 1 214 196 43 -4 16 1 231 228 102 -4 21 1 209 180 209

0 11 0 1268 1315 16 0 21 0 435 415 137 -1 8 1 0 49 1 -3 16 1 338 415 58 -3 21 1 139 158 138

-6 12 0 3548 3641 22 -11 22 0 1229 1286 42 -8 9 1 449 434 22 -2 16 1 224 181 111 -2 21 1 258 7 200

-5 12 0 99 48 99 -10 22 0 448 409 80 -7 9 1 594 582 15 -1 16 1 69 39 69 -1 21 1 423 388 97

-4 12 0 305 313 26 -9 22 0 257 122 175 -6 9 1 33 50 33 -16 17 1 161 119 161 -21 22 1 222 118 222

-3 12 0 1363 1350 11 -8 22 0 282 179 157 -5 9 1 975 875 11 -15 17 1 438 475 55 -20 22 1 93 182 92

-2 12 0 330 296 38 -7 22 0 387 345 97 -4 9 1 990 886 12 -14 17 1 172 117 171 -19 22 1 322 285 130

-1 12 0 1764 1774 10 -6 22 0 568 548 58 -3 9 1 0 44 1 -13 17 1 173 186 173 -18 22 1 0 102 1

0 12 0 802 779 27 -5 22 0 539 558 65 -2 9 1 597 583 16 -12 17 1 392 334 60 -17 22 1 201 180 200

-6 13 0 262 228 53 -4 22 0 139 170 138 -1 9 1 469 438 20 -11 17 1 997 1040 24 -16 22 1 267 325 164

-5 13 0 876 859 16 -3 22 0 596 569 64 -9 10 1 348 328 32 -10 17 1 353 239 64 -15 22 1 254 186 183

-4 13 0 381 326 36 -2 22 0 755 765 54 -8 10 1 0 38 1 -9 17 1 0 21 1 -14 22 1 229 203 229

-3 13 0 883 861 16 -1 22 0 548 584 78 -7 10 1 1017 991 11 -8 17 1 141 11 140 -13 22 1 377 376 98

-2 13 0 1080 1088 15 0 22 0 282 311 281 -6 10 1 1033 1014 11 -7 17 1 272 247 74 -12 22 1 141 175 141

-1 13 0 209 192 88 -11 23 0 565 568 67 -5 10 1 493 436 21 -6 17 1 979 1027 21 -11 22 1 928 877 37

0 13 0 850 862 29 -10 23 0 299 296 147 -4 10 1 1026 1020 11 -5 17 1 340 334 63 -10 22 1 265 175 174

-7 14 0 1366 1396 19 -9 23 0 3475 3515 28 -3 10 1 997 977 11 -4 17 1 243 186 100 -9 22 1 424 365 90

-6 14 0 925 934 17 -8 23 0 963 920 38 -2 10 1 0 46 1 -3 17 1 0 118 1 -8 22 1 96 192 95

-5 14 0 2064 2103 14 -7 23 0 1244 1297 32 -1 10 1 304 333 36 -2 17 1 434 459 52 -7 22 1 0 169 1

-4 14 0 609 565 24 -6 23 0 1154 1173 33 -10 11 1 219 197 60 -1 17 1 116 140 116 -6 22 1 246 322 246

-3 14 0 1134 1146 15 -5 23 0 702 682 52 -9 11 1 468 441 24 -17 18 1 206 117 205 -5 22 1 233 190 233

-2 14 0 532 523 31 -4 23 0 341 323 133 -8 11 1 490 446 23 -16 18 1 353 296 80 -4 22 1 0 111 1

-1 14 0 665 641 28 -3 23 0 677 747 63 -7 11 1 326 332 33 -15 18 1 52 21 51 -3 22 1 261 275 261

0 14 0 5448 5643 19 -2 23 0 227 104 227 -6 11 1 356 344 33 -14 18 1 438 328 59 -2 22 1 286 177 178

-7 15 0 1227 1183 16 -1 23 0 187 347 187 -5 11 1 356 341 30 -13 18 1 433 413 59 -1 22 1 0 120 1

-6 15 0 1110 1118 16 0 23 0 4415 4508 48 -4 11 1 328 327 35 -12 18 1 371 378 72 -22 23 1 148 72 147

-5 15 0 846 829 21 -12 24 0 1408 1402 41 -3 11 1 475 449 23 -11 18 1 213 265 180 -21 23 1 273 267 273

-4 15 0 548 564 29 -11 24 0 256 126 255 -2 11 1 464 447 26 -10 18 1 221 227 154 -20 23 1 265 223 265

-3 15 0 3242 3296 12 -10 24 0 0 125 1 -1 11 1 245 207 51 -9 18 1 116 220 115 -19 23 1 0 71 1

-2 15 0 363 341 52 -9 24 0 316 323 164 -11 12 1 1903 1927 11 -8 18 1 248 230 107 -18 23 1 312 429 143

-1 15 0 483 494 40 -8 24 0 218 87 218 -10 12 1 511 502 27 -7 18 1 241 262 102 -17 23 1 0 113 1

0 15 0 1462 1433 23 -7 24 0 652 615 62 -9 12 1 220 202 66 -6 18 1 372 370 59 -16 23 1 162 59 162

-8 16 0 1015 969 29 -6 24 0 429 360 101 -8 12 1 388 373 30 -5 18 1 407 434 56 -15 23 1 286 268 171

-7 16 0 1624 1602 14 -5 24 0 359 425 131 -7 12 1 591 584 21 -4 18 1 363 303 64 -14 23 1 473 450 80

-6 16 0 851 822 22 -4 24 0 360 150 151 -6 12 1 2559 2569 14 -3 18 1 0 29 1 -13 23 1 240 101 239

-5 16 0 41 61 41 -3 24 0 1404 1411 34 -5 12 1 592 585 21 -2 18 1 241 296 131 -12 23 1 234 196 233

-4 16 0 248 212 85 -2 24 0 376 349 164 -4 12 1 407 366 30 -1 18 1 76 117 75 -11 23 1 210 192 210

-3 16 0 154 149 153 -1 24 0 562 432 103 -3 12 1 219 190 63 -18 19 1 0 94 1 -10 23 1 204 107 204

-2 16 0 931 956 22 0 24 0 709 604 118 -2 12 1 523 493 24 -17 19 1 169 127 168 -9 23 1 509 445 79

-1 16 0 270 218 86 -12 25 0 477 450 89 -1 12 1 1883 1928 11 -16 19 1 562 490 48 -8 23 1 331 275 138

0 16 0 2033 2106 21 -11 25 0 125 92 124 -12 13 1 543 530 29 -15 19 1 380 297 75 -7 23 1 0 62 1

-8 17 0 840 828 25 -10 25 0 516 512 87 -11 13 1 788 774 20 -14 19 1 88 87 88 -6 23 1 105 115 104

-7 17 0 613 613 35 -9 25 0 928 844 50 -10 13 1 653 619 23 -13 19 1 568 561 48 -5 23 1 436 414 96

-6 17 0 3152 3175 15 -8 25 0 1751 1760 32 -9 13 1 240 231 64 -12 19 1 366 317 72 -4 23 1 0 73 1

-5 17 0 646 581 35 -7 25 0 408 379 121 -8 13 1 185 208 93 -11 19 1 282 271 105 -3 23 1 0 229 1

-4 17 0 1228 1229 18 -6 25 0 822 848 54 -7 13 1 203 233 75 -10 19 1 328 245 87 -2 23 1 361 263 149

-3 17 0 1072 1063 20 -5 25 0 329 245 200 -6 13 1 181 216 88 -9 19 1 258 241 117 -1 23 1 0 65 1

-2 17 0 2180 2177 14 -4 25 0 292 249 292 -5 13 1 182 217 97 -8 19 1 269 279 111 -23 24 1 367 107 167

-1 17 0 291 226 84 -3 25 0 779 748 67 -4 13 1 256 223 61 -7 19 1 378 334 63 -22 24 1 368 159 150

0 17 0 1614 1640 26 -13 26 0 606 648 112 -3 13 1 602 614 24 -6 19 1 563 547 45 -21 24 1 522 564 87

-9 18 0 2401 2320 21 -12 26 0 531 561 88 -2 13 1 782 774 19 -5 19 1 75 83 75 -20 24 1 0 271 1

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 2

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

-19 24 1 156 66 155 -3 6 2 7869 8138 22 -5 14 2 3091 3102 14 -5 19 2 1472 1471 20 -5 23 2 1879 1895 28

-18 24 1 0 169 1 -2 6 2 673 682 13 -4 14 2 92 114 91 -4 19 2 649 636 40 -4 23 2 448 419 95

-17 24 1 0 229 1 -1 6 2 267 262 26 -3 14 2 1400 1435 15 -3 19 2 730 738 39 -3 23 2 1129 1150 38

-16 24 1 264 217 264 0 6 2 1775 1748 18 -2 14 2 468 468 38 -2 19 2 0 79 1 -2 23 2 261 266 260

-15 24 1 335 233 144 -7 7 2 1876 1824 18 -1 14 2 935 929 21 -1 19 2 300 260 110 -1 23 2 464 485 118

-14 24 1 0 65 1 -6 7 2 616 584 15 0 14 2 2177 2146 19 0 19 2 635 591 67 0 23 2 1132 1018 62

-13 24 1 348 370 128 -5 7 2 1442 1370 8 -15 15 2 804 757 37 -20 20 2 1279 1233 43 -23 24 2 324 268 234

-12 24 1 1007 1020 40 -4 7 2 697 707 12 -14 15 2 447 448 45 -19 20 2 867 882 42 -22 24 2 249 257 249

-11 24 1 373 375 120 -3 7 2 742 720 11 -13 15 2 785 782 28 -18 20 2 790 755 43 -21 24 2 872 826 54

-10 24 1 0 76 1 -2 7 2 1444 1380 11 -12 15 2 3845 3938 18 -17 20 2 2990 3018 20 -20 24 2 749 682 59

-9 24 1 229 233 229 -1 7 2 613 584 14 -11 15 2 517 531 39 -16 20 2 297 397 118 -19 24 2 400 290 116

-8 24 1 269 215 269 0 7 2 1852 1820 13 -10 15 2 184 181 183 -15 20 2 286 289 130 -18 24 2 372 345 114

-7 24 1 309 218 174 -8 8 2 1007 997 17 -9 15 2 952 963 21 -14 20 2 1174 1143 26 -17 24 2 0 182 1

-6 24 1 322 179 166 -7 8 2 243 158 40 -8 15 2 492 523 33 -13 20 2 207 234 207 -16 24 2 245 108 245

-5 24 1 209 83 208 -6 8 2 1213 1147 9 -7 15 2 516 509 32 -12 20 2 2636 2662 18 -15 24 2 462 516 82

-4 24 1 324 269 180 -5 8 2 778 741 12 -6 15 2 947 958 20 -11 20 2 1173 1185 25 -14 24 2 247 150 247

-3 24 1 597 570 86 -4 8 2 1951 1895 9 -5 15 2 0 177 1 -10 20 2 1368 1408 22 -13 24 2 843 842 54

-2 24 1 111 153 111 -3 8 2 785 747 12 -4 15 2 514 526 35 -9 20 2 1181 1183 23 -12 24 2 2013 2017 30

-1 24 1 419 108 136 -2 8 2 1202 1143 9 -3 15 2 3790 3928 16 -8 20 2 2627 2668 18 -11 24 2 847 834 52

-22 25 1 155 77 154 -1 8 2 193 158 51 -2 15 2 765 795 26 -7 20 2 287 231 122 -10 24 2 0 144 1

-21 25 1 260 265 260 0 8 2 989 990 17 -1 15 2 447 444 46 -6 20 2 1136 1136 26 -9 24 2 480 514 98

-20 25 1 231 83 231 -9 9 2 4477 4593 18 0 15 2 791 773 40 -5 20 2 313 299 100 -8 24 2 165 121 164

-19 25 1 210 190 209 -8 9 2 663 646 16 -16 16 2 699 641 50 -4 20 2 269 393 142 -7 24 2 293 165 292

-18 25 1 180 237 179 -7 9 2 1107 1116 11 -15 16 2 0 82 1 -3 20 2 2965 3016 25 -6 24 2 327 343 219

-17 25 1 371 351 136 -6 9 2 1830 1819 9 -14 16 2 427 450 57 -2 20 2 834 759 36 -5 24 2 295 279 295

-16 25 1 215 7 215 -5 9 2 2382 2427 12 -13 16 2 582 534 41 -1 20 2 875 883 37 -4 24 2 739 688 67

-15 25 1 258 127 258 -4 9 2 2363 2417 8 -12 16 2 108 171 107 0 20 2 1195 1234 41 -3 24 2 801 818 66

-14 25 1 62 129 62 -3 9 2 1799 1826 9 -11 16 2 159 186 159 -21 21 2 392 211 188 -2 24 2 248 250 248

-13 25 1 435 434 105 -2 9 2 1106 1117 11 -10 16 2 489 503 44 -20 21 2 1025 1019 40 -1 24 2 328 267 267

-12 25 1 434 436 106 -1 9 2 630 638 18 -9 16 2 1244 1257 17 -19 21 2 187 97 186 -22 25 2 935 869 53

-11 25 1 325 114 176 0 9 2 4500 4581 21 -8 16 2 66 75 65 -18 21 2 594 610 58 -21 25 2 59 191 59

-10 25 1 0 133 1 -10 10 2 0 152 1 -7 16 2 1238 1240 17 -17 21 2 1 127 1 -20 25 2 591 640 82

-9 25 1 288 19 288 -9 10 2 336 302 36 -6 16 2 492 510 38 -16 21 2 470 524 66 -19 25 2 332 191 158

-8 25 1 429 367 111 -8 10 2 325 279 39 -5 16 2 124 182 123 -15 21 2 1187 1171 29 -18 25 2 676 694 63

-7 25 1 305 245 227 -7 10 2 562 569 21 -4 16 2 0 189 1 -14 21 2 616 591 49 -17 25 2 186 224 186

-6 25 1 135 192 135 -6 10 2 1379 1356 14 -3 16 2 551 523 37 -13 21 2 404 411 74 -16 25 2 421 453 119

-5 25 1 0 88 1 -5 10 2 1329 1323 11 -2 16 2 459 457 43 -12 21 2 544 522 53 -15 25 2 273 227 273

-4 25 1 371 269 160 -4 10 2 1362 1358 10 -1 16 2 0 82 1 -11 21 2 586 533 49 -14 25 2 325 256 182

-3 25 1 78 67 78 -3 10 2 559 560 19 0 16 2 681 661 51 -10 21 2 526 519 60 -13 25 2 523 547 90

-21 26 1 401 334 164 -2 10 2 348 275 31 -17 17 2 807 828 47 -9 21 2 534 542 65 -12 25 2 513 538 95

-20 26 1 1329 1298 41 -1 10 2 371 326 32 -16 17 2 327 295 83 -8 21 2 458 426 71 -11 25 2 304 256 250

-19 26 1 358 185 176 0 10 2 163 145 163 -15 17 2 576 585 41 -7 21 2 609 586 51 -10 25 2 255 235 255

-18 26 1 66 54 65 -11 11 2 1125 1127 22 -14 17 2 1003 1007 26 -6 21 2 1187 1169 26 -9 25 2 515 472 102

-17 26 1 185 199 185 -10 11 2 1040 1007 14 -13 17 2 1038 1049 25 -5 21 2 482 530 64 -8 25 2 295 236 294

-16 26 1 65 98 64 -9 11 2 343 355 37 -12 17 2 552 550 44 -4 21 2 194 124 194 -7 25 2 763 675 71

-15 26 1 199 67 198 -8 11 2 3300 3288 20 -11 17 2 2293 2260 16 -3 21 2 633 600 51 -6 25 2 0 200 1

-14 26 1 358 319 147 -7 11 2 101 151 100 -10 17 2 240 215 106 -2 21 2 0 111 1 -5 25 2 553 639 103

-13 26 1 195 74 195 -6 11 2 1125 1147 12 -9 17 2 717 707 28 -1 21 2 1036 1010 35 -4 25 2 104 194 103

-12 26 1 390 321 154 -5 11 2 1132 1143 12 -8 17 2 731 714 27 0 21 2 183 180 182 -3 25 2 995 868 72

-11 26 1 75 51 75 -4 11 2 124 147 124 -7 17 2 199 218 150 -22 22 2 659 660 99 -20 26 2 2563 2560 26

-10 26 1 347 87 201 -3 11 2 3268 3280 12 -6 17 2 2296 2272 13 -21 22 2 441 398 101 -19 26 2 422 485 142

-9 26 1 216 184 215 -2 11 2 373 363 32 -5 17 2 531 536 37 -20 22 2 934 990 45 -18 26 2 0 48 1

-8 26 1 0 38 1 -1 11 2 1039 1010 15 -4 17 2 1004 1038 22 -19 22 2 836 748 49 -17 26 2 523 498 105

-7 26 1 0 193 1 0 11 2 1092 1124 20 -3 17 2 993 1016 24 -18 22 2 0 60 1 -16 26 2 248 94 247

-6 26 1 1258 1291 46 -12 12 2 2358 2390 30 -2 17 2 579 592 41 -17 22 2 192 88 191 -15 26 2 1696 1722 34

-5 26 1 0 331 1 -11 12 2 3060 3103 11 -1 17 2 302 297 92 -16 22 2 486 496 71 -14 26 2 730 806 66

-18 27 1 330 220 266 -10 12 2 1181 1179 17 0 17 2 848 804 43 -15 22 2 287 304 132 -13 26 2 1133 1132 44

-17 27 1 54 35 53 -9 12 2 2320 2356 13 -18 18 2 2726 2778 26 -14 22 2 527 481 59 -12 26 2 808 811 62

-16 27 1 0 123 1 -8 12 2 748 725 19 -17 18 2 400 293 71 -13 22 2 658 632 46 -11 26 2 1730 1715 35

-15 27 1 302 311 302 -7 12 2 0 46 1 -16 18 2 716 693 37 -12 22 2 991 1005 33 -10 26 2 256 95 255

-14 27 1 259 131 258 -6 12 2 5098 5211 16 -15 18 2 197 253 197 -11 22 2 1410 1489 26 -9 26 2 492 483 117

-13 27 1 0 111 1 -5 12 2 0 39 1 -14 18 2 1348 1353 23 -10 22 2 1025 1018 38 -8 26 2 0 48 1

-12 27 1 463 303 130 -4 12 2 717 724 19 -13 18 2 441 482 61 -9 22 2 591 624 60 -7 26 2 480 492 134

-11 27 1 198 123 198 -3 12 2 2295 2353 11 -12 18 2 796 809 32 -8 22 2 506 474 74 -6 26 2 2541 2565 31

-10 27 1 145 34 144 -2 12 2 1176 1180 14 -11 18 2 198 159 197 -7 22 2 340 309 110 -17 27 2 388 319 217

-9 27 1 276 217 276 -1 12 2 3067 3109 11 -10 18 2 104 37 104 -6 22 2 534 492 69 -16 27 2 354 302 209

0 0 2 2022 1829 -18 0 12 2 2331 2396 17 -9 18 2 3487 3629 14 -5 22 2 96 88 95 -15 27 2 55 177 54

-1 1 2 333 344 27 -13 13 2 990 1016 25 -8 18 2 21 36 21 -4 22 2 168 51 168 -14 27 2 91 203 90

0 1 2 337 341 27 -12 13 2 1726 1750 13 -7 18 2 204 151 153 -3 22 2 685 739 52 -13 27 2 127 204 127

-2 2 2 488 438 18 -11 13 2 545 522 30 -6 18 2 838 806 28 -2 22 2 925 972 41 -12 27 2 0 186 1

-1 2 2 281 253 20 -10 13 2 2020 2056 11 -5 18 2 487 491 46 -1 22 2 353 410 140 -11 27 2 440 302 143

0 2 2 453 435 37 -9 13 2 111 112 110 -4 18 2 1333 1339 20 0 22 2 628 662 103 -10 27 2 70 308 69

-3 3 2 4093 4016 27 -8 13 2 163 169 163 -3 18 2 263 249 121 -23 23 2 1028 1013 70 -1 2 3 147 108 71

-2 3 2 2967 2950 15 -7 13 2 306 284 50 -2 18 2 689 683 35 -22 23 2 561 482 86 -2 3 3 1934 1898 8

-1 3 2 2942 2951 14 -6 13 2 273 280 53 -1 18 2 298 291 101 -21 23 2 171 255 170 -1 3 3 1953 1913 16

0 3 2 4031 4002 27 -5 13 2 185 150 100 0 18 2 2741 2777 25 -20 23 2 1156 1147 38 -3 4 3 453 417 18

-4 4 2 1002 1025 12 -4 13 2 44 119 43 -19 19 2 652 609 74 -19 23 2 390 413 117 -2 4 3 598 569 14

-3 4 2 1853 1823 14 -3 13 2 2021 2053 13 -18 19 2 325 271 113 -18 23 2 1922 1903 23 -1 4 3 453 425 16

-2 4 2 67 62 66 -2 13 2 532 509 30 -17 19 2 56 80 56 -17 23 2 689 689 51 -4 5 3 93 10 93

-1 4 2 1858 1820 15 -1 13 2 1703 1757 13 -16 19 2 770 740 37 -16 23 2 668 704 49 -3 5 3 0 11 1

0 4 2 1057 1035 14 0 13 2 1012 1010 27 -15 19 2 599 649 46 -15 23 2 460 501 74 -2 5 3 97 3 96

-5 5 2 4058 4026 13 -14 14 2 2207 2133 19 -14 19 2 1465 1455 23 -14 23 2 1797 1798 25 -1 5 3 0 9 1

-4 5 2 792 773 8 -13 14 2 967 949 21 -13 19 2 979 972 32 -13 23 2 548 505 63 -5 6 3 205 199 40

-3 5 2 1257 1301 7 -12 14 2 424 459 43 -12 19 2 315 289 96 -12 23 2 883 874 41 -4 6 3 0 22 1

-2 5 2 1250 1307 12 -11 14 2 1397 1431 16 -11 19 2 309 354 88 -11 23 2 855 860 51 -3 6 3 1327 1087 9

-1 5 2 817 788 8 -10 14 2 139 115 139 -10 19 2 276 314 112 -10 23 2 592 508 70 -2 6 3 38 20 37

0 5 2 3999 4023 37 -9 14 2 3073 3108 19 -9 19 2 307 331 85 -9 23 2 1806 1819 28 -1 6 3 237 217 32

-6 6 2 1759 1744 16 -8 14 2 887 859 20 -8 19 2 367 348 68 -8 23 2 486 497 90 -6 7 3 621 566 12

-5 6 2 277 258 29 -7 14 2 1284 1261 14 -7 19 2 267 303 106 -7 23 2 700 709 63 -5 7 3 73 63 72

-4 6 2 712 690 9 -6 14 2 858 864 18 -6 19 2 1024 976 24 -6 23 2 739 702 59 -4 7 3 152 142 60

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 3

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

-3 7 3 90 122 89 -12 16 3 120 214 120 -12 21 3 0 72 1 -7 25 3 238 226 238 -8 11 4 2789 2789 14

-2 7 3 139 86 72 -11 16 3 211 240 139 -11 21 3 647 626 47 -6 25 3 0 13 1 -7 11 4 110 107 109

-1 7 3 625 568 13 -10 16 3 411 389 51 -10 21 3 597 602 52 -5 25 3 47 201 47 -6 11 4 922 908 13

-7 8 3 255 231 40 -9 16 3 143 55 142 -9 21 3 120 80 119 -4 25 3 118 145 117 -5 11 4 943 920 12

-6 8 3 1275 1243 9 -8 16 3 560 576 35 -8 21 3 402 414 86 -19 26 3 300 150 299 -4 11 4 0 86 1

-5 8 3 259 212 32 -7 16 3 157 48 156 -7 21 3 458 490 79 -18 26 3 428 134 141 -3 11 4 2808 2801 15

-4 8 3 219 214 53 -6 16 3 412 390 45 -6 21 3 189 330 189 -17 26 3 208 43 208 -2 11 4 414 394 35

-3 8 3 211 190 52 -5 16 3 277 218 78 -5 21 3 236 151 236 -16 26 3 78 24 78 -1 11 4 1018 1046 25

-2 8 3 1258 1229 12 -4 16 3 199 180 148 -4 21 3 251 86 250 -15 26 3 281 217 280 0 11 4 512 509 45

-1 8 3 225 234 44 -3 16 3 103 55 103 -3 21 3 246 38 245 -14 26 3 266 285 265 -12 12 4 306 263 86

-8 9 3 307 274 38 -2 16 3 191 8 190 -2 21 3 202 28 201 -13 26 3 0 27 1 -11 12 4 766 733 21

-7 9 3 412 387 26 -1 16 3 141 77 141 -1 21 3 507 452 76 -12 26 3 359 289 172 -10 12 4 950 949 17

-6 9 3 1012 1010 11 -16 17 3 0 107 1 -21 22 3 190 122 189 -11 26 3 409 218 146 -9 12 4 728 732 22

-5 9 3 1471 1489 9 -15 17 3 218 227 217 -20 22 3 286 211 211 -10 26 3 0 31 1 -8 12 4 180 157 119

-4 9 3 1454 1498 11 -14 17 3 0 32 1 -19 22 3 0 105 1 -9 26 3 363 53 207 -7 12 4 134 148 133

-3 9 3 1018 1013 10 -13 17 3 174 62 174 -18 22 3 99 73 99 -8 26 3 163 126 162 -6 12 4 5209 5270 25

-2 9 3 383 385 26 -12 17 3 175 189 174 -17 22 3 288 115 160 -7 26 3 213 141 213 -5 12 4 109 142 109

-1 9 3 278 290 39 -11 17 3 521 502 42 -16 22 3 331 333 116 -15 27 3 449 360 229 -4 12 4 178 157 98

-9 10 3 241 262 56 -10 17 3 0 17 1 -15 22 3 202 138 202 -14 27 3 435 235 206 -3 12 4 753 729 20

-8 10 3 118 112 117 -9 17 3 287 264 79 -14 22 3 247 225 247 -13 27 3 474 240 156 -2 12 4 919 955 19

-7 10 3 385 380 30 -8 17 3 281 264 78 -13 22 3 472 465 77 -12 27 3 420 348 184 -1 12 4 727 746 23

-6 10 3 240 270 47 -7 17 3 67 13 67 -12 22 3 0 25 1 0 0 4 8673 9108 49 0 12 4 328 271 79

-5 10 3 436 439 26 -6 17 3 549 512 39 -11 22 3 914 886 38 -1 1 4 840 866 19 -13 13 4 632 619 42

-4 10 3 277 264 38 -5 17 3 203 211 158 -10 22 3 0 24 1 0 1 4 858 889 18 -12 13 4 684 638 27

-3 10 3 399 399 27 -4 17 3 60 78 60 -9 22 3 473 442 82 -2 2 4 608 580 25 -11 13 4 0 71 1

-2 10 3 85 129 84 -3 17 3 57 21 57 -8 22 3 240 243 240 -1 2 4 849 862 13 -10 13 4 1222 1255 16

-1 10 3 217 239 51 -2 17 3 274 226 102 -7 22 3 0 138 1 0 2 4 595 547 26 -9 13 4 342 336 51

-10 11 3 184 213 106 -1 17 3 0 93 1 -6 22 3 320 326 149 -3 3 4 1491 1521 20 -8 13 4 667 662 26

-9 11 3 749 717 18 -17 18 3 62 125 61 -5 22 3 128 92 127 -2 3 4 73 77 72 -7 13 4 0 129 1

-8 11 3 1186 1206 13 -16 18 3 93 285 93 -4 22 3 0 81 1 -1 3 4 87 81 87 -6 13 4 126 127 125

-7 11 3 187 171 77 -15 18 3 410 371 73 -3 22 3 225 86 225 0 3 4 1509 1538 14 -5 13 4 681 676 22

-6 11 3 430 394 29 -14 18 3 1202 1208 24 -2 22 3 206 223 206 -4 4 4 113 124 113 -4 13 4 351 330 47

-5 11 3 382 393 31 -13 18 3 860 820 31 -1 22 3 187 119 186 -3 4 4 1197 1190 11 -3 13 4 1246 1271 16

-4 11 3 162 184 107 -12 18 3 430 415 56 -22 23 3 0 87 1 -2 4 4 349 313 30 -2 13 4 0 71 1

-3 11 3 1158 1194 12 -11 18 3 385 410 61 -21 23 3 0 158 1 -1 4 4 1199 1188 12 -1 13 4 677 637 27

-2 11 3 701 711 19 -10 18 3 105 134 104 -20 23 3 0 20 1 0 4 4 183 114 182 0 13 4 623 622 44

-1 11 3 253 207 57 -9 18 3 793 765 28 -19 23 3 286 231 226 -5 5 4 2118 2114 18 -14 14 4 3522 3525 19

-11 12 3 2247 2301 14 -8 18 3 195 119 194 -18 23 3 475 447 85 -4 5 4 61 57 61 -13 14 4 266 256 85

-10 12 3 964 950 18 -7 18 3 406 403 58 -17 23 3 263 158 262 -3 5 4 899 916 12 -12 14 4 256 242 82

-9 12 3 565 541 25 -6 18 3 420 394 54 -16 23 3 0 24 1 -2 5 4 918 918 12 -11 14 4 936 931 21

-8 12 3 772 769 18 -5 18 3 810 808 28 -15 23 3 463 428 88 -1 5 4 35 40 35 -10 14 4 115 159 114

-7 12 3 422 409 34 -4 18 3 1205 1206 21 -14 23 3 375 444 113 0 5 4 2181 2168 14 -9 14 4 1957 1971 16

-6 12 3 836 780 18 -3 18 3 479 383 56 -13 23 3 0 64 1 -6 6 4 3309 3454 23 -8 14 4 854 823 21

-5 12 3 460 442 31 -2 18 3 249 288 138 -12 23 3 192 120 192 -5 6 4 1013 1008 12 -7 14 4 914 931 19

-4 12 3 729 748 20 -1 18 3 92 134 92 -11 23 3 0 122 1 -4 6 4 366 384 27 -6 14 4 819 807 20

-3 12 3 572 521 25 -18 19 3 274 186 182 -10 23 3 102 68 101 -3 6 4 7738 7767 21 -5 14 4 1920 1941 19

-2 12 3 975 968 16 -17 19 3 150 132 150 -9 23 3 438 421 96 -2 6 4 372 397 27 -4 14 4 211 157 109

-1 12 3 2214 2278 12 -16 19 3 95 13 94 -8 23 3 391 431 118 -1 6 4 1032 1015 11 -3 14 4 955 931 21

-12 13 3 780 739 24 -15 19 3 78 10 78 -7 23 3 0 35 1 0 6 4 3355 3433 22 -2 14 4 272 240 72

-11 13 3 1002 1044 17 -14 19 3 810 781 35 -6 23 3 287 166 286 -7 7 4 1323 1337 16 -1 14 4 285 250 75

-10 13 3 241 250 78 -13 19 3 182 151 182 -5 23 3 470 454 98 -6 7 4 2037 2019 8 0 14 4 3529 3556 18

-9 13 3 154 120 153 -12 19 3 0 73 1 -4 23 3 314 224 177 -5 7 4 167 168 64 -15 15 4 1351 1361 30

-8 13 3 0 2 1 -11 19 3 297 289 86 -3 23 3 0 29 1 -4 7 4 171 155 62 -14 15 4 25 45 24

-7 13 3 46 147 45 -10 19 3 266 177 100 -2 23 3 196 147 195 -3 7 4 194 160 55 -13 15 4 356 334 61

-6 13 3 0 157 1 -9 19 3 257 187 111 -1 23 3 0 80 1 -2 7 4 226 190 46 -12 15 4 2774 2787 13

-5 13 3 45 21 45 -8 19 3 264 283 124 -22 24 3 293 102 293 -1 7 4 2025 2016 17 -11 15 4 296 316 71

-4 13 3 143 116 143 -7 19 3 0 73 1 -21 24 3 584 583 82 0 7 4 1349 1352 13 -10 15 4 1034 1043 20

-3 13 3 275 229 59 -6 19 3 118 132 118 -20 24 3 204 126 204 -8 8 4 1270 1261 13 -9 15 4 1454 1489 17

-2 13 3 1017 1049 18 -5 19 3 818 783 35 -19 24 3 0 57 1 -7 8 4 573 548 17 -8 15 4 2269 2322 12

-1 13 3 730 737 24 -4 19 3 139 18 138 -18 24 3 335 189 160 -6 8 4 4274 4304 19 -7 15 4 2250 2324 14

-13 14 3 170 71 170 -3 19 3 0 14 1 -17 24 3 225 67 224 -5 8 4 262 236 38 -6 15 4 1458 1498 16

-12 14 3 290 261 68 -2 19 3 263 123 144 -16 24 3 0 277 1 -4 8 4 470 424 21 -5 15 4 1002 1019 22

-11 14 3 569 593 31 -1 19 3 307 163 102 -15 24 3 0 68 1 -3 8 4 296 245 31 -4 15 4 342 312 66

-10 14 3 200 256 114 -19 20 3 208 7 207 -14 24 3 254 190 254 -2 8 4 4309 4298 16 -3 15 4 2768 2794 13

-9 14 3 1906 1919 13 -18 20 3 211 165 210 -13 24 3 362 341 130 -1 8 4 587 537 19 -2 15 4 299 328 77

-8 14 3 601 613 29 -17 20 3 366 303 100 -12 24 3 1192 1192 38 0 8 4 1209 1233 17 -1 15 4 120 39 119

-7 14 3 0 52 1 -16 20 3 248 176 179 -11 24 3 124 338 124 -9 9 4 4871 4934 29 0 15 4 1317 1334 25

-6 14 3 613 611 27 -15 20 3 193 56 193 -10 24 3 214 191 213 -8 9 4 245 258 52 -16 16 4 1419 1448 32

-5 14 3 1905 1931 12 -14 20 3 453 444 67 -9 24 3 0 58 1 -7 9 4 466 444 21 -15 16 4 185 74 185

-4 14 3 293 271 57 -13 20 3 179 57 179 -8 24 3 401 300 131 -6 9 4 2319 2327 16 -14 16 4 682 660 34

-3 14 3 571 600 32 -12 20 3 441 425 62 -7 24 3 122 70 121 -5 9 4 746 710 14 -13 16 4 343 290 68

-2 14 3 157 235 156 -11 20 3 158 112 158 -6 24 3 38 210 38 -4 9 4 724 709 13 -12 16 4 250 261 105

-1 14 3 0 66 1 -10 20 3 198 272 197 -5 24 3 254 62 254 -3 9 4 2319 2349 12 -11 16 4 186 162 186

-14 15 3 0 163 1 -9 20 3 0 117 1 -4 24 3 149 127 149 -2 9 4 463 417 24 -10 16 4 320 286 70

-13 15 3 94 49 93 -8 20 3 481 407 62 -3 24 3 674 590 73 -1 9 4 252 273 50 -9 16 4 944 925 23

-12 15 3 926 887 23 -7 20 3 116 63 116 -2 24 3 282 116 282 0 9 4 4893 4949 31 -8 16 4 1734 1773 19

-11 15 3 610 586 33 -6 20 3 407 452 81 -21 25 3 312 146 290 -10 10 4 117 150 117 -7 16 4 932 924 25

-10 15 3 377 384 54 -5 20 3 169 51 168 -20 25 3 311 203 254 -9 10 4 271 230 52 -6 16 4 274 290 87

-9 15 3 528 502 36 -4 20 3 157 173 156 -19 25 3 299 8 275 -8 10 4 93 20 93 -5 16 4 129 146 129

-8 15 3 1048 1078 19 -3 20 3 362 303 101 -18 25 3 208 201 207 -7 10 4 282 276 42 -4 16 4 278 267 88

-7 15 3 1038 1066 17 -2 20 3 228 156 227 -17 25 3 0 108 1 -6 10 4 1627 1626 11 -3 16 4 268 297 107

-6 15 3 549 514 32 -1 20 3 332 3 110 -16 25 3 0 48 1 -5 10 4 89 137 88 -2 16 4 650 651 36

-5 15 3 426 390 41 -20 21 3 492 464 92 -15 25 3 274 251 273 -4 10 4 1602 1609 11 -1 16 4 191 74 191

-4 15 3 604 584 30 -19 21 3 76 44 76 -14 25 3 219 175 219 -3 10 4 268 272 49 0 16 4 1418 1441 28

-3 15 3 920 882 22 -18 21 3 0 43 1 -13 25 3 353 389 169 -2 10 4 108 27 107 -17 17 4 1331 1312 36

-2 15 3 0 58 1 -17 21 3 0 94 1 -12 25 3 412 403 136 -1 10 4 222 239 72 -16 17 4 839 809 36

-1 15 3 73 168 72 -16 21 3 135 152 135 -11 25 3 79 178 78 0 10 4 157 167 157 -15 17 4 2809 2793 26

-15 16 3 163 61 163 -15 21 3 282 319 137 -10 25 3 314 243 242 -11 11 4 475 492 47 -14 17 4 1142 1123 24

-14 16 3 0 17 1 -14 21 3 496 501 62 -9 25 3 0 67 1 -10 11 4 1040 1054 15 -13 17 4 1059 1052 24

-13 16 3 196 71 195 -13 21 3 425 417 72 -8 25 3 207 96 207 -9 11 4 440 423 32 -12 17 4 921 919 26

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 4

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

-11 17 4 3799 3881 23 -3 21 4 677 660 58 -13 26 4 829 736 64 -6 14 5 377 332 59 -15 20 5 143 67 142

-10 17 4 0 101 1 -2 21 4 171 107 170 -12 26 4 571 519 104 -5 14 5 1439 1477 17 -14 20 5 329 350 119

-9 17 4 905 881 27 -1 21 4 452 473 105 -11 26 4 1457 1400 42 -4 14 5 229 203 124 -13 20 5 0 80 1

-8 17 4 911 891 27 0 21 4 299 104 298 -10 26 4 253 135 252 -3 14 5 452 481 48 -12 20 5 333 245 112

-7 17 4 112 98 111 -22 22 4 641 540 100 -9 26 4 896 849 62 -2 14 5 340 290 69 -11 20 5 237 125 215

-6 17 4 3809 3878 15 -21 22 4 610 548 71 -1 2 5 308 254 43 -1 14 5 0 87 1 -10 20 5 218 194 218

-5 17 4 887 906 29 -20 22 4 390 331 112 -2 3 5 1088 1116 13 -14 15 5 201 39 200 -9 20 5 47 128 46

-4 17 4 1015 1047 26 -19 22 4 752 697 53 -1 3 5 1113 1135 13 -13 15 5 0 67 1 -8 20 5 256 249 157

-3 17 4 1111 1121 24 -18 22 4 50 105 49 -3 4 5 470 422 26 -12 15 5 480 459 46 -7 20 5 0 93 1

-2 17 4 2780 2796 16 -17 22 4 427 459 97 -2 4 5 211 211 66 -11 15 5 662 638 31 -6 20 5 347 331 98

-1 17 4 787 803 35 -16 22 4 714 683 56 -1 4 5 489 418 29 -10 15 5 314 319 70 -5 20 5 0 65 1

0 17 4 1351 1319 31 -15 22 4 265 225 239 -4 5 5 114 143 113 -9 15 5 424 407 49 -4 20 5 245 259 245

-18 18 4 1356 1376 37 -14 22 4 0 43 1 -3 5 5 82 148 81 -8 15 5 642 649 34 -3 20 5 571 486 72

-17 18 4 422 395 76 -13 22 4 317 328 131 -2 5 5 135 140 134 -7 15 5 675 665 36 -2 20 5 0 91 1

-16 18 4 330 386 101 -12 22 4 684 693 52 -1 5 5 126 147 126 -6 15 5 407 417 56 -1 20 5 0 37 1

-15 18 4 820 803 34 -11 22 4 271 206 188 -5 6 5 120 32 120 -5 15 5 300 328 81 -20 21 5 321 328 178

-14 18 4 573 575 46 -10 22 4 638 688 56 -4 6 5 199 183 73 -4 15 5 631 642 37 -19 21 5 179 98 178

-13 18 4 73 79 73 -9 22 4 323 328 131 -3 6 5 802 840 15 -3 15 5 501 454 47 -18 21 5 189 49 189

-12 18 4 924 921 28 -8 22 4 0 56 1 -2 6 5 148 176 148 -2 15 5 0 43 1 -17 21 5 0 49 1

-11 18 4 320 275 87 -7 22 4 245 241 245 -1 6 5 33 20 32 -1 15 5 100 37 100 -16 21 5 161 152 161

-10 18 4 655 629 41 -6 22 4 685 688 59 -6 7 5 560 519 24 -15 16 5 0 46 1 -15 21 5 348 222 130

-9 18 4 1955 1959 17 -5 22 4 349 458 142 -5 7 5 276 221 50 -14 16 5 204 88 203 -14 21 5 459 497 84

-8 18 4 657 633 40 -4 22 4 153 103 153 -4 7 5 330 311 38 -13 16 5 175 155 175 -13 21 5 484 407 76

-7 18 4 270 251 109 -3 22 4 736 695 66 -3 7 5 312 312 41 -12 16 5 197 122 196 -12 21 5 0 78 1

-6 18 4 940 904 30 -2 22 4 343 324 162 -2 7 5 232 223 65 -11 16 5 269 290 99 -11 21 5 447 412 77

-5 18 4 150 70 149 -1 22 4 563 542 95 -1 7 5 549 503 24 -10 16 5 162 132 162 -10 21 5 521 424 61

-4 18 4 545 594 51 0 22 4 571 523 154 -7 8 5 214 221 63 -9 16 5 0 34 1 -9 21 5 100 89 99

-3 18 4 858 818 31 -23 23 4 3093 2876 54 -6 8 5 750 734 16 -8 16 5 321 298 81 -8 21 5 515 411 65

-2 18 4 376 371 87 -22 23 4 364 316 146 -5 8 5 0 26 1 -7 16 5 78 37 77 -7 21 5 517 498 63

-1 18 4 434 390 77 -21 23 4 310 92 208 -4 8 5 128 89 127 -6 16 5 125 126 125 -6 21 5 0 243 1

0 18 4 1470 1384 36 -20 23 4 719 662 63 -3 8 5 98 44 98 -5 16 5 275 292 100 -5 21 5 0 129 1

-19 19 4 563 560 94 -19 23 4 0 241 1 -2 8 5 792 730 20 -4 16 5 118 126 117 -4 21 5 0 39 1

-18 19 4 311 343 132 -18 23 4 828 804 52 -1 8 5 245 223 66 -3 16 5 159 149 159 -3 21 5 284 47 284

-17 19 4 720 691 45 -17 23 4 1030 1052 41 -8 9 5 276 258 53 -2 16 5 124 83 123 -2 21 5 0 104 1

-16 19 4 328 327 103 -16 23 4 995 982 45 -7 9 5 339 311 37 -1 16 5 0 37 1 -1 21 5 311 361 310

-15 19 4 1001 944 32 -15 23 4 586 682 69 -6 9 5 768 741 18 -16 17 5 112 25 112 -21 22 5 288 167 287

-14 19 4 360 402 86 -14 23 4 2411 2418 24 -5 9 5 1080 1061 14 -15 17 5 0 4 1 -20 22 5 0 168 1

-13 19 4 1127 1118 27 -13 23 4 0 134 1 -4 9 5 1063 1053 13 -14 17 5 0 16 1 -19 22 5 182 119 181

-12 19 4 157 133 157 -12 23 4 295 201 167 -3 9 5 788 755 17 -13 17 5 112 14 112 -18 22 5 0 8 1

-11 19 4 0 130 1 -11 23 4 125 200 124 -2 9 5 300 299 54 -12 17 5 164 189 163 -17 22 5 189 101 189

-10 19 4 242 338 157 -10 23 4 162 129 161 -1 9 5 291 256 56 -11 17 5 521 479 46 -16 22 5 413 327 123

-9 19 4 319 324 95 -9 23 4 2421 2425 24 -9 10 5 261 223 58 -10 17 5 170 68 170 -15 22 5 0 79 1

-8 19 4 135 115 134 -8 23 4 671 694 64 -8 10 5 53 94 53 -9 17 5 142 202 142 -14 22 5 0 170 1

-7 19 4 0 132 1 -7 23 4 987 989 44 -7 10 5 192 105 87 -8 17 5 220 207 190 -13 22 5 390 365 103

-6 19 4 1099 1118 27 -6 23 4 1034 1043 45 -6 10 5 298 287 51 -7 17 5 99 72 98 -12 22 5 98 8 97

-5 19 4 367 386 84 -5 23 4 742 797 64 -5 10 5 349 349 40 -6 17 5 489 503 55 -11 22 5 762 786 48

-4 19 4 957 953 33 -4 23 4 71 236 71 -4 10 5 310 293 45 -5 17 5 147 207 146 -10 22 5 168 5 168

-3 19 4 342 317 110 -3 23 4 631 663 81 -3 10 5 81 90 80 -4 17 5 123 20 122 -9 22 5 447 366 85

-2 19 4 731 704 45 -2 23 4 361 83 172 -2 10 5 23 84 23 -3 17 5 0 22 1 -8 22 5 242 173 241

-1 19 4 289 339 149 -1 23 4 345 306 262 -1 10 5 287 234 64 -2 17 5 168 21 167 -7 22 5 0 96 1

0 19 4 637 565 109 0 23 4 3079 2883 84 -10 11 5 349 338 47 -1 17 5 117 9 116 -6 22 5 340 320 131

-20 20 4 774 814 72 -21 24 4 1016 994 49 -9 11 5 492 512 31 -17 18 5 0 127 1 -5 22 5 0 98 1

-19 20 4 507 520 75 -20 24 4 101 205 100 -8 11 5 852 838 19 -16 18 5 192 224 192 -4 22 5 0 5 1

-18 20 4 263 253 218 -19 24 4 553 456 94 -7 11 5 141 83 140 -15 18 5 313 270 109 -3 22 5 68 116 68

-17 20 4 2804 2870 21 -18 24 4 0 168 1 -6 11 5 136 207 135 -14 18 5 958 925 33 -2 22 5 0 163 1

-16 20 4 415 388 84 -17 24 4 951 955 49 -5 11 5 172 208 172 -13 18 5 672 687 39 -1 22 5 342 181 259

-15 20 4 377 297 93 -16 24 4 166 195 165 -4 11 5 147 78 147 -12 18 5 335 317 88 -21 23 5 0 164 1

-14 20 4 1000 973 34 -15 24 4 0 166 1 -3 11 5 817 820 19 -11 18 5 148 280 147 -20 23 5 0 46 1

-13 20 4 115 185 114 -14 24 4 278 238 277 -2 11 5 489 504 37 -10 18 5 91 145 91 -19 23 5 131 141 131

-12 20 4 1552 1549 23 -13 24 4 209 197 209 -1 11 5 356 326 50 -9 18 5 591 575 45 -18 23 5 275 346 275

-11 20 4 520 553 56 -12 24 4 242 278 241 -11 12 5 1709 1728 13 -8 18 5 212 140 212 -17 23 5 0 184 1

-10 20 4 910 921 31 -11 24 4 336 211 160 -10 12 5 631 539 28 -7 18 5 286 300 112 -16 23 5 80 81 80

-9 20 4 565 563 53 -10 24 4 270 255 269 -9 12 5 433 407 38 -6 18 5 336 312 88 -15 23 5 143 290 143

-8 20 4 1529 1542 21 -9 24 4 163 165 163 -8 12 5 685 677 25 -5 18 5 681 683 40 -14 23 5 302 372 199

-7 20 4 245 195 181 -8 24 4 71 188 71 -7 12 5 467 478 33 -4 18 5 915 920 32 -13 23 5 0 53 1

-6 20 4 953 970 33 -7 24 4 1046 958 45 -6 12 5 1197 1230 13 -3 18 5 380 256 84 -12 23 5 311 124 164

-5 20 4 324 304 114 -6 24 4 279 181 279 -5 12 5 460 472 39 -2 18 5 315 196 118 -11 23 5 228 114 228

-4 20 4 407 373 93 -5 24 4 530 448 96 -4 12 5 648 663 30 -1 18 5 83 139 83 -10 23 5 0 31 1

-3 20 4 2805 2873 20 -4 24 4 0 191 1 -3 12 5 428 397 46 -18 19 5 231 145 230 -9 23 5 178 368 178

-2 20 4 230 246 229 -3 24 4 1003 989 55 -2 12 5 607 534 28 -17 19 5 0 138 1 -8 23 5 298 284 217

-1 20 4 413 526 96 -20 25 4 201 218 200 -1 12 5 1700 1736 14 -16 19 5 192 160 192 -7 23 5 42 69 41

0 20 4 880 820 71 -19 25 4 733 689 74 -12 13 5 685 687 29 -15 19 5 142 69 142 -6 23 5 0 189 1

-21 21 4 0 115 1 -18 25 4 269 222 269 -11 13 5 789 754 24 -14 19 5 590 594 53 -5 23 5 157 345 156

-20 21 4 518 481 79 -17 25 4 1889 1931 30 -10 13 5 246 250 84 -13 19 5 274 198 135 -4 23 5 0 153 1

-19 21 4 220 96 219 -16 25 4 543 508 93 -9 13 5 0 87 1 -12 19 5 253 224 169 -3 23 5 0 39 1

-18 21 4 633 646 58 -15 25 4 550 541 88 -8 13 5 90 40 90 -11 19 5 300 292 115 -2 23 5 0 169 1

-17 21 4 267 315 193 -14 25 4 106 57 106 -7 13 5 94 23 93 -10 19 5 284 165 122 -20 24 5 234 190 233

-16 21 4 198 173 197 -13 25 4 458 248 114 -6 13 5 0 42 1 -9 19 5 217 144 217 -19 24 5 0 72 1

-15 21 4 2631 2702 20 -12 25 4 127 250 126 -5 13 5 0 45 1 -8 19 5 283 298 126 -18 24 5 124 181 124

-14 21 4 352 260 114 -11 25 4 203 70 202 -4 13 5 167 110 167 -7 19 5 238 219 186 -17 24 5 124 182 124

-13 21 4 166 241 166 -10 25 4 475 535 112 -3 13 5 215 237 125 -6 19 5 285 197 117 -16 24 5 0 184 1

-12 21 4 304 366 128 -9 25 4 526 499 99 -2 13 5 766 744 24 -5 19 5 654 609 45 -15 24 5 230 80 230

-11 21 4 264 189 172 -8 25 4 1843 1927 31 -1 13 5 697 696 29 -4 19 5 212 65 211 -14 24 5 191 173 191

-10 21 4 295 181 132 -7 25 4 312 219 268 -13 14 5 0 99 1 -3 19 5 322 166 111 -13 24 5 400 345 117

-9 21 4 277 355 146 -6 25 4 717 685 76 -12 14 5 269 301 83 -2 19 5 282 123 195 -12 24 5 1012 991 44

-8 21 4 255 242 171 -5 25 4 131 211 130 -11 14 5 483 487 40 -1 19 5 172 147 172 -11 24 5 391 360 130

-7 21 4 311 254 128 -17 26 4 816 847 75 -10 14 5 144 179 144 -19 20 5 0 48 1 -10 24 5 234 176 233

-6 21 4 2637 2700 20 -16 26 4 0 133 1 -9 14 5 1459 1483 15 -18 20 5 110 104 109 -9 24 5 0 83 1

-5 21 4 270 189 220 -15 26 4 1425 1388 39 -8 14 5 338 331 60 -17 20 5 587 477 64 -8 24 5 191 175 190

-4 21 4 255 311 254 -14 26 4 499 517 113 -7 14 5 0 85 1 -16 20 5 301 259 154 -7 24 5 317 149 236

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 5

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 24 5 302 168 301 -2 11 6 199 147 142 -5 17 6 628 573 45 -19 22 6 657 634 77 -9 10 7 41 187 41

-5 24 5 0 70 1 -1 11 6 868 864 24 -4 17 6 758 774 39 -18 22 6 214 39 213 -8 10 7 128 66 128

-4 24 5 264 180 263 0 11 6 742 697 41 -3 17 6 924 935 32 -17 22 6 325 104 225 -7 10 7 579 557 36

-18 25 5 486 164 183 -12 12 6 1690 1708 22 -2 17 6 738 744 50 -16 22 6 464 474 112 -6 10 7 689 654 31

-17 25 5 0 48 1 -11 12 6 2058 2070 14 -1 17 6 398 439 109 -15 22 6 262 240 262 -5 10 7 295 264 77

-16 25 5 230 56 230 -10 12 6 835 786 23 0 17 6 802 701 82 -14 22 6 469 419 102 -4 10 7 663 666 33

-15 25 5 0 184 1 -9 12 6 1733 1746 14 -18 18 6 2329 2298 30 -13 22 6 689 639 63 -3 10 7 580 554 38

-14 25 5 312 167 312 -8 12 6 477 460 38 -17 18 6 449 370 86 -12 22 6 934 903 44 -2 10 7 72 88 71

-13 25 5 416 363 132 -7 12 6 126 38 125 -16 18 6 627 601 57 -11 22 6 1031 1094 39 -1 10 7 249 200 105

-12 25 5 353 365 180 -6 12 6 4387 4487 14 -15 18 6 322 246 119 -10 22 6 892 877 41 -10 11 7 248 147 100

-11 25 5 314 160 259 -5 12 6 117 37 116 -14 18 6 1275 1261 29 -9 22 6 632 632 57 -9 11 7 184 241 183

-10 25 5 146 179 146 -4 12 6 447 471 55 -13 18 6 375 435 91 -8 22 6 435 401 89 -8 11 7 364 355 57

-9 25 5 260 60 260 -3 12 6 1757 1750 16 -12 18 6 678 663 47 -7 22 6 345 251 137 -7 11 7 234 214 104

-8 25 5 204 46 204 -2 12 6 831 781 28 -11 18 6 240 166 208 -6 22 6 524 447 95 -6 11 7 253 276 93

-7 25 5 346 171 346 -1 12 6 2082 2094 19 -10 18 6 249 134 187 -5 22 6 298 99 268 -5 11 7 206 255 153

0 0 6 427 382 92 0 12 6 1737 1712 22 -9 18 6 2753 2810 25 -4 22 6 112 36 111 -4 11 7 226 222 185

-1 1 6 498 504 43 -13 13 6 1058 1059 33 -8 18 6 127 111 126 -3 22 6 746 655 79 -3 11 7 409 376 68

0 1 6 509 506 42 -12 13 6 1417 1430 17 -7 18 6 172 157 171 -2 22 6 712 746 83 -2 11 7 184 266 184

-2 2 6 666 600 33 -11 13 6 372 356 58 -6 18 6 628 660 47 -1 22 6 307 350 307 -1 11 7 155 122 154

-1 2 6 211 244 84 -10 13 6 1674 1699 15 -5 18 6 452 450 69 -20 23 6 1037 967 80 -11 12 7 1384 1367 19

0 2 6 624 576 35 -9 13 6 170 217 169 -4 18 6 1294 1248 25 -19 23 6 425 366 146 -10 12 7 436 419 55

-3 3 6 2555 2616 16 -8 13 6 145 67 145 -3 18 6 165 269 165 -18 23 6 1683 1661 35 -9 12 7 0 112 1

-2 3 6 1766 1806 14 -7 13 6 260 281 90 -2 18 6 578 609 69 -17 23 6 604 591 88 -8 12 7 221 261 96

-1 3 6 1788 1808 12 -6 13 6 292 273 77 -1 18 6 409 387 118 -16 23 6 519 588 103 -7 12 7 381 419 66

0 3 6 2535 2622 22 -5 13 6 0 67 1 0 18 6 2303 2287 39 -15 23 6 381 391 154 -6 12 7 1679 1700 20

-4 4 6 497 516 43 -4 13 6 116 228 116 -19 19 6 449 483 149 -14 23 6 1417 1441 36 -5 12 7 414 413 67

-3 4 6 1199 1211 13 -3 13 6 1682 1706 18 -18 19 6 387 201 119 -13 23 6 488 477 102 -4 12 7 292 275 112

-2 4 6 276 236 57 -2 13 6 321 340 78 -17 19 6 265 76 265 -12 23 6 650 643 68 -3 12 7 159 107 159

-1 4 6 1227 1220 16 -1 13 6 1423 1422 19 -16 19 6 495 467 75 -11 23 6 646 660 68 -2 12 7 418 434 68

0 4 6 509 512 51 0 13 6 1006 1060 41 -15 19 6 516 527 74 -10 23 6 558 479 79 -1 12 7 1392 1351 23

-5 5 6 2973 2986 20 -14 14 6 1780 1734 24 -14 19 6 1282 1343 30 -9 23 6 1424 1448 31 -12 13 7 361 354 74

-4 5 6 347 304 47 -13 14 6 834 800 31 -13 19 6 809 827 41 -8 23 6 239 377 239 -11 13 7 529 516 47

-3 5 6 891 903 18 -12 14 6 318 319 79 -12 19 6 131 153 131 -7 23 6 598 583 77 -10 13 7 447 444 54

-2 5 6 866 903 20 -11 14 6 1173 1176 20 -11 19 6 253 287 253 -6 23 6 638 606 79 -9 13 7 210 202 209

-1 5 6 328 309 53 -10 14 6 88 115 88 -10 19 6 273 222 151 -5 23 6 1652 1665 44 -8 13 7 167 130 166

0 5 6 2941 2992 16 -9 14 6 2582 2601 14 -9 19 6 226 201 225 -4 23 6 439 362 157 -7 13 7 188 133 187

-6 6 6 1456 1440 19 -8 14 6 748 714 32 -8 19 6 304 271 118 -3 23 6 969 938 77 -6 13 7 193 194 192

-5 6 6 250 220 72 -7 14 6 1021 1031 25 -7 19 6 175 159 175 -18 24 6 386 323 299 -5 13 7 0 125 1

-4 6 6 373 365 44 -6 14 6 782 722 32 -6 19 6 844 845 38 -17 24 6 312 61 312 -4 13 7 197 191 197

-3 6 6 6733 6870 17 -5 14 6 2559 2606 15 -5 19 6 1316 1344 25 -16 24 6 72 57 72 -3 13 7 401 447 45

-2 6 6 342 350 49 -4 14 6 110 122 109 -4 19 6 523 510 64 -15 24 6 474 434 118 -2 13 7 525 501 57

-1 6 6 273 236 66 -3 14 6 1177 1159 23 -3 19 6 504 476 77 -14 24 6 260 69 260 -1 13 7 392 350 88

0 6 6 1420 1446 20 -2 14 6 333 327 82 -2 19 6 0 63 1 -13 24 6 694 714 72 -13 14 7 96 57 96

-7 7 6 1256 1256 21 -1 14 6 799 790 33 -1 19 6 176 223 175 -12 24 6 1477 1515 34 -12 14 7 330 333 87

-6 7 6 162 86 162 0 14 6 1792 1743 30 0 19 6 466 460 180 -11 24 6 607 712 78 -11 14 7 630 567 44

-5 7 6 1076 1096 16 -15 15 6 687 676 56 -20 20 6 1010 1006 72 -10 24 6 107 81 106 -10 14 7 281 199 113

-4 7 6 361 372 48 -14 15 6 299 279 95 -19 20 6 787 778 56 -9 24 6 497 422 108 -9 14 7 435 406 58

-3 7 6 358 357 47 -13 15 6 632 594 40 -18 20 6 673 613 64 -8 24 6 0 58 1 -8 14 7 217 64 216

-2 7 6 1071 1091 17 -12 15 6 3216 3267 15 -17 20 6 2796 2745 23 -7 24 6 312 54 311 -7 14 7 199 162 199

-1 7 6 0 83 1 -11 15 6 480 451 50 -16 20 6 247 273 246 -6 24 6 186 346 185 -6 14 7 222 70 221

0 7 6 1252 1267 20 -10 15 6 169 142 169 -15 20 6 285 264 209 -14 25 6 424 203 192 -5 14 7 456 417 64

-8 8 6 778 796 28 -9 15 6 867 863 29 -14 20 6 1021 1025 39 -13 25 6 496 473 158 -4 14 7 165 194 164

-7 8 6 287 250 59 -8 15 6 72 106 72 -13 20 6 82 198 81 -12 25 6 467 476 172 -3 14 7 552 558 54

-6 8 6 1179 1170 16 -7 15 6 0 111 1 -12 20 6 2147 2186 22 -11 25 6 200 210 200 -2 14 7 285 335 128

-5 8 6 674 657 25 -6 15 6 890 877 29 -11 20 6 928 911 37 -1 2 7 0 19 1 -1 14 7 0 63 1

-4 8 6 1078 1069 17 -5 15 6 175 158 175 -10 20 6 1192 1233 29 -2 3 7 958 962 21 -14 15 7 172 118 171

-3 8 6 686 661 25 -4 15 6 450 458 60 -9 20 6 947 926 36 -1 3 7 949 952 22 -13 15 7 0 2 1

-2 8 6 1181 1170 15 -3 15 6 3185 3249 17 -8 20 6 2131 2177 20 -3 4 7 180 172 180 -12 15 7 158 14 157

-1 8 6 232 254 82 -2 15 6 606 602 48 -7 20 6 209 199 208 -2 4 7 373 356 58 -11 15 7 574 552 50

0 8 6 803 802 33 -1 15 6 285 292 146 -6 20 6 1017 1007 33 -1 4 7 44 142 43 -10 15 7 0 14 1

-9 9 6 2582 2518 27 0 15 6 764 662 65 -5 20 6 268 250 186 -4 5 7 162 18 161 -9 15 7 127 128 126

-8 9 6 705 681 24 -16 16 6 510 491 96 -4 20 6 342 284 141 -3 5 7 87 149 87 -8 15 7 83 115 82

-7 9 6 929 927 20 -15 16 6 278 114 130 -3 20 6 2814 2767 25 -2 5 7 88 141 87 -7 15 7 198 122 198

-6 9 6 1437 1441 14 -14 16 6 424 405 68 -2 20 6 649 601 79 -1 5 7 156 6 155 -6 15 7 78 107 77

-5 9 6 1841 1856 16 -13 16 6 509 498 55 -1 20 6 788 763 67 -5 6 7 106 89 106 -5 15 7 162 15 161

-4 9 6 1832 1849 16 -12 16 6 59 205 59 0 20 6 1086 1034 76 -4 6 7 114 37 114 -4 15 7 550 568 51

-3 9 6 1442 1433 14 -11 16 6 105 77 105 -21 21 6 51 208 51 -3 6 7 3387 3520 14 -3 15 7 0 10 1

-2 9 6 929 912 20 -10 16 6 233 214 165 -20 21 6 639 731 77 -2 6 7 0 72 1 -2 15 7 157 40 157

-1 9 6 698 706 26 -9 16 6 966 972 29 -19 21 6 0 109 1 -1 6 7 0 71 1 -1 15 7 149 117 148

0 9 6 2577 2504 30 -8 16 6 272 231 123 -18 21 6 498 519 100 -6 7 7 225 105 113 -15 16 7 0 20 1

-10 10 6 277 294 113 -7 16 6 953 964 29 -17 21 6 0 156 1 -5 7 7 0 92 1 -14 16 7 216 163 216

-9 10 6 393 407 44 -6 16 6 191 192 190 -16 21 6 444 451 105 -4 7 7 341 329 59 -13 16 7 321 342 113

-8 10 6 256 269 75 -5 16 6 0 59 1 -15 21 6 1167 1142 38 -3 7 7 328 341 62 -12 16 7 203 130 203

-7 10 6 127 156 127 -4 16 6 76 174 75 -14 21 6 528 522 83 -2 7 7 0 88 1 -11 16 7 254 244 181

-6 10 6 1004 1022 19 -3 16 6 452 509 61 -13 21 6 358 350 129 -1 7 7 100 93 99 -10 16 7 343 299 98

-5 10 6 975 967 18 -2 16 6 370 399 89 -12 21 6 381 411 113 -7 8 7 85 15 84 -9 16 7 282 249 123

-4 10 6 1026 1021 18 -1 16 6 218 110 217 -11 21 6 314 328 135 -6 8 7 362 351 60 -8 16 7 359 318 88

-3 10 6 126 146 125 0 16 6 521 477 105 -10 21 6 296 334 149 -5 8 7 196 256 164 -7 16 7 379 247 81

-2 10 6 291 289 69 -17 17 6 734 694 72 -9 21 6 439 393 82 -4 8 7 169 244 168 -6 16 7 319 303 102

-1 10 6 402 375 49 -16 17 6 505 421 66 -8 21 6 307 331 132 -3 8 7 224 245 114 -5 16 7 306 233 113

0 10 6 310 307 102 -15 17 6 766 766 43 -7 21 6 523 510 70 -2 8 7 349 338 59 -4 16 7 286 104 134

-11 11 6 734 686 38 -14 17 6 965 926 32 -6 21 6 1138 1135 33 -1 8 7 36 34 35 -3 16 7 213 345 213

-10 11 6 887 868 22 -13 17 6 798 764 37 -5 21 6 415 451 112 -8 9 7 131 205 131 -2 16 7 217 177 216

-9 11 6 207 154 117 -12 17 6 562 584 53 -4 21 6 0 149 1 -7 9 7 527 477 38 -1 16 7 127 30 127

-8 11 6 2615 2645 13 -11 17 6 2171 2175 19 -3 21 6 547 511 100 -6 9 7 147 84 146 -16 17 7 218 94 217

-7 11 6 57 80 56 -10 17 6 194 89 193 -2 21 6 266 106 266 -5 9 7 279 326 86 -15 17 7 331 411 120

-6 11 6 926 904 21 -9 17 6 678 673 44 -1 21 6 752 755 77 -4 9 7 298 309 74 -14 17 7 147 124 147

-5 11 6 929 902 24 -8 17 6 711 680 42 0 21 6 366 228 366 -3 9 7 0 90 1 -13 17 7 0 180 1

-4 11 6 131 88 131 -7 17 6 187 90 186 -21 22 6 496 370 147 -2 9 7 490 479 45 -12 17 7 194 209 193

-3 11 6 2644 2646 15 -6 17 6 2179 2184 18 -20 22 6 658 742 81 -1 9 7 197 222 196 -11 17 7 774 746 45

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 6

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

-10 17 7 370 237 95 -13 22 7 304 282 216 -1 10 8 92 98 91 -16 17 8 179 342 178 -3 21 8 510 354 170

-9 17 7 0 64 1 -12 22 7 118 141 118 0 10 8 340 334 130 -15 17 8 1791 1774 24 -16 22 8 452 456 179

-8 17 7 0 64 1 -11 22 7 718 694 58 -11 11 8 687 758 50 -14 17 8 796 766 47 -15 22 8 382 298 170

-7 17 7 258 242 146 -10 22 7 48 138 47 -10 11 8 544 528 52 -13 17 8 720 760 55 -14 22 8 0 148 1

-6 17 7 751 759 40 -9 22 7 365 273 126 -9 11 8 308 261 87 -12 17 8 554 490 72 -13 22 8 0 70 1

-5 17 7 312 202 108 -8 22 7 208 134 208 -8 11 8 2343 2382 17 -11 17 8 2388 2382 23 -12 22 8 455 302 114

-4 17 7 222 159 221 -7 22 7 223 162 223 -7 11 8 0 82 1 -10 17 8 313 343 141 -11 22 8 907 990 55

-3 17 7 115 111 115 -6 22 7 226 225 225 -6 11 8 510 543 58 -9 17 8 714 666 51 -10 22 8 399 298 137

-2 17 7 350 399 135 -5 22 7 215 122 215 -5 11 8 611 566 49 -8 17 8 690 668 49 -9 22 8 306 70 257

-1 17 7 95 117 94 -4 22 7 267 35 267 -4 11 8 218 88 217 -7 17 8 352 337 99 -8 22 8 306 158 261

-17 18 7 0 32 1 -3 22 7 395 238 295 -3 11 8 2360 2416 19 -6 17 8 2387 2401 21 -7 22 8 208 293 208

-16 18 7 369 289 121 -17 23 7 221 69 221 -2 11 8 232 260 231 -5 17 8 533 501 69 -6 22 8 536 469 176

-15 18 7 174 36 174 -16 23 7 0 66 1 -1 11 8 512 523 60 -4 17 8 763 763 56 -1 2 9 0 132 1

-14 18 7 141 77 141 -15 23 7 387 205 170 0 11 8 693 753 65 -3 17 8 782 776 58 -2 3 9 700 718 49

-13 18 7 245 180 244 -14 23 7 361 297 176 -12 12 8 526 499 74 -2 17 8 1795 1782 30 -1 3 9 724 730 47

-12 18 7 311 225 148 -13 23 7 317 112 238 -11 12 8 1161 1157 24 -1 17 8 312 310 201 -3 4 9 0 126 1

-11 18 7 221 186 221 -12 23 7 264 143 264 -10 12 8 150 276 149 0 17 8 1169 1207 65 -2 4 9 387 318 92

-10 18 7 0 180 1 -11 23 7 70 139 69 -9 12 8 870 865 28 -18 18 8 1083 989 68 -1 4 9 0 120 1

-9 18 7 166 164 166 -10 23 7 0 134 1 -8 12 8 260 245 131 -17 18 8 565 486 93 -4 5 9 129 22 129

-8 18 7 92 149 91 -9 23 7 273 294 272 -7 12 8 0 36 1 -16 18 8 548 519 85 -3 5 9 188 141 187

-7 18 7 201 198 200 -8 23 7 335 210 180 -6 12 8 2739 2693 19 -15 18 8 424 509 112 -2 5 9 263 131 132

-6 18 7 150 242 149 -7 23 7 0 69 1 -5 12 8 236 32 236 -14 18 8 277 238 277 -1 5 9 0 15 1

-5 18 7 291 162 141 -6 23 7 126 54 125 -4 12 8 268 240 183 -13 18 8 139 103 138 -5 6 9 152 160 151

-4 18 7 0 99 1 -13 24 7 333 296 333 -3 12 8 838 843 37 -12 18 8 696 737 59 -4 6 9 43 94 42

-3 18 7 243 68 243 -12 24 7 868 758 78 -2 12 8 207 269 207 -11 18 8 265 131 265 -3 6 9 1673 1665 20

-2 18 7 181 275 180 -11 24 7 366 303 366 -1 12 8 1141 1129 32 -10 18 8 563 486 74 -2 6 9 80 103 80

-1 18 7 172 64 171 0 0 8 985910841 84 0 12 8 553 521 105 -9 18 8 1624 1573 29 -1 6 9 231 163 167

-18 19 7 216 41 215 -1 1 8 901 824 52 -13 13 8 308 316 159 -8 18 8 387 491 95 -6 7 9 179 43 178

-17 19 7 0 115 1 0 1 8 830 816 54 -12 13 8 124 177 123 -7 18 8 231 149 231 -5 7 9 0 2 1

-16 19 7 366 396 127 -2 2 8 302 248 144 -11 13 8 754 758 40 -6 18 8 708 739 53 -4 7 9 238 118 162

-15 19 7 234 227 234 -1 2 8 722 653 39 -10 13 8 642 608 42 -5 18 8 118 132 117 -3 7 9 196 120 196

-14 19 7 0 26 1 0 2 8 344 265 122 -9 13 8 120 135 120 -4 18 8 192 260 191 -2 7 9 57 10 56

-13 19 7 487 440 87 -3 3 8 1485 1498 31 -8 13 8 479 473 66 -3 18 8 455 492 122 -1 7 9 0 29 1

-12 19 7 113 200 112 -2 3 8 1251 1282 23 -7 13 8 220 147 220 -2 18 8 530 505 96 -7 8 9 185 133 185

-11 19 7 311 203 151 -1 3 8 1254 1267 23 -6 13 8 242 140 242 -1 18 8 481 487 121 -6 8 9 0 61 1

-10 19 7 71 136 71 0 3 8 1492 1510 35 -5 13 8 420 470 81 0 18 8 1027 975 79 -5 8 9 146 53 145

-9 19 7 230 94 229 -4 4 8 504 440 64 -4 13 8 280 139 134 -19 19 8 482 573 217 -4 8 9 111 176 110

-8 19 7 143 172 142 -3 4 8 530 537 46 -3 13 8 674 611 51 -18 19 8 127 120 126 -3 8 9 183 53 182

-7 19 7 305 187 134 -2 4 8 573 572 47 -2 13 8 790 778 44 -17 19 8 571 527 104 -2 8 9 41 49 41

-6 19 7 485 453 74 -1 4 8 522 513 50 -1 13 8 175 169 174 -16 19 8 557 461 90 -1 8 9 119 138 118

-5 19 7 120 34 120 0 4 8 484 446 80 0 13 8 241 324 241 -15 19 8 812 756 59 -8 9 9 178 208 177

-4 19 7 214 226 213 -5 5 8 1156 1168 32 -14 14 8 3608 3683 25 -14 19 8 211 154 210 -7 9 9 321 367 95

-3 19 7 483 406 107 -4 5 8 0 12 1 -13 14 8 300 292 123 -13 19 8 877 831 50 -6 9 9 388 303 77

-2 19 7 299 110 299 -3 5 8 465 466 53 -12 14 8 339 363 99 -12 19 8 240 189 239 -5 9 9 396 354 74

-1 19 7 0 40 1 -2 5 8 415 482 60 -11 14 8 737 742 41 -11 19 8 175 141 175 -4 9 9 408 354 76

-19 20 7 122 31 122 -1 5 8 80 12 79 -10 14 8 462 358 67 -10 19 8 263 336 262 -3 9 9 245 303 244

-18 20 7 129 154 129 0 5 8 1198 1166 32 -9 14 8 1478 1475 24 -9 19 8 246 331 245 -2 9 9 407 359 79

-17 20 7 1215 1185 40 -6 6 8 1758 1761 26 -8 14 8 585 590 54 -8 19 8 320 145 145 -1 9 9 253 220 146

-16 20 7 364 325 146 -5 6 8 642 638 38 -7 14 8 924 943 34 -7 19 8 195 185 195 -9 10 9 267 221 129

-15 20 7 199 198 199 -4 6 8 419 410 56 -6 14 8 621 610 50 -6 19 8 808 825 54 -8 10 9 181 36 181

-14 20 7 242 294 241 -3 6 8 3083 3089 14 -5 14 8 1492 1469 25 -5 19 8 342 143 162 -7 10 9 238 225 180

-13 20 7 306 320 185 -2 6 8 327 409 74 -4 14 8 407 342 85 -4 19 8 732 750 68 -6 10 9 466 484 64

-12 20 7 0 77 1 -1 6 8 693 678 35 -3 14 8 720 735 49 -3 19 8 525 452 103 -5 10 9 0 9 1

-11 20 7 252 224 252 0 6 8 1745 1746 24 -2 14 8 286 365 192 -2 19 8 527 530 123 -4 10 9 474 482 64

-10 20 7 332 309 119 -7 7 8 1362 1416 27 -1 14 8 262 297 261 -1 19 8 229 145 228 -3 10 9 358 207 100

-9 20 7 334 240 124 -6 7 8 743 731 32 0 14 8 3513 3679 35 0 19 8 555 590 169 -2 10 9 0 48 1

-8 20 7 299 49 152 -5 7 8 214 217 177 -15 15 8 967 1000 54 -19 20 8 392 283 391 -1 10 9 207 236 207

-7 20 7 346 322 119 -4 7 8 84 133 84 -14 15 8 350 309 102 -18 20 8 74 119 73 -10 11 9 67 71 66

-6 20 7 233 276 233 -3 7 8 207 149 182 -13 15 8 133 186 132 -17 20 8 1804 1756 33 -9 11 9 280 323 124

-5 20 7 218 206 217 -2 7 8 178 211 177 -12 15 8 2301 2342 19 -16 20 8 396 287 153 -8 11 9 339 342 95

-4 20 7 311 332 257 -1 7 8 761 730 30 -11 15 8 410 367 84 -15 20 8 194 191 194 -7 11 9 213 115 213

-3 20 7 1207 1174 46 0 7 8 1404 1432 27 -10 15 8 676 657 50 -14 20 8 520 506 95 -6 11 9 167 216 167

-2 20 7 174 146 173 -8 8 8 1269 1269 30 -9 15 8 795 791 43 -13 20 8 97 82 96 -5 11 9 0 208 1

-1 20 7 148 50 148 -7 8 8 287 217 88 -8 15 8 1161 1122 31 -12 20 8 1491 1479 33 -4 11 9 0 112 1

-20 21 7 200 327 200 -6 8 8 2289 2308 16 -7 15 8 1134 1130 28 -11 20 8 549 533 83 -3 11 9 377 338 102

-19 21 7 159 90 159 -5 8 8 0 37 1 -6 15 8 861 796 37 -10 20 8 628 579 70 -2 11 9 289 333 147

-18 21 7 0 119 1 -4 8 8 335 330 70 -5 15 8 694 635 47 -9 20 8 510 530 88 -1 11 9 129 69 128

-17 21 7 336 162 193 -3 8 8 150 43 149 -4 15 8 436 395 90 -8 20 8 1443 1468 30 -11 12 9 1099 1098 28

-16 21 7 42 87 41 -2 8 8 2249 2295 17 -3 15 8 2374 2357 24 -7 20 8 0 81 1 -10 12 9 339 350 105

-15 21 7 264 201 264 -1 8 8 117 201 116 -2 15 8 193 189 192 -6 20 8 459 516 115 -9 12 9 251 203 216

-14 21 7 610 574 82 0 8 8 1244 1260 30 -1 15 8 327 278 168 -5 20 8 303 208 303 -8 12 9 233 244 232

-13 21 7 132 159 132 -9 9 8 5362 5477 25 0 15 8 1050 1000 78 -4 20 8 299 263 299 -7 12 9 269 245 187

-12 21 7 315 168 167 -8 9 8 183 302 182 -16 16 8 1469 1413 45 -3 20 8 1822 1761 39 -6 12 9 912 860 40

-11 21 7 358 345 122 -7 9 8 741 732 33 -15 16 8 112 67 111 -2 20 8 0 116 1 -5 12 9 250 250 250

-10 21 7 338 334 126 -6 9 8 1471 1441 20 -14 16 8 633 644 55 -1 20 8 189 288 188 -4 12 9 377 235 113

-9 21 7 171 156 170 -5 9 8 69 86 68 -13 16 8 203 166 202 -18 21 8 396 360 395 -3 12 9 238 185 238

-8 21 7 170 168 169 -4 9 8 0 97 1 -12 16 8 195 176 195 -17 21 8 213 213 213 -2 12 9 398 349 98

-7 21 7 576 579 68 -3 9 8 1487 1452 20 -11 16 8 0 24 1 -16 21 8 189 175 188 -1 12 9 1151 1097 38

-6 21 7 268 188 267 -2 9 8 752 737 34 -10 16 8 500 452 72 -15 21 8 1790 1694 33 -12 13 9 367 353 90

-5 21 7 170 90 170 -1 9 8 322 290 86 -9 16 8 1095 1094 33 -14 21 8 0 154 1 -11 13 9 436 449 77

-4 21 7 0 158 1 0 9 8 5367 5484 24 -8 16 8 975 914 39 -13 21 8 248 128 247 -10 13 9 283 280 146

-3 21 7 182 131 182 -10 10 8 283 326 166 -7 16 8 1113 1088 30 -12 21 8 408 319 128 -9 13 9 198 6 197

-2 21 7 253 112 253 -9 10 8 18 103 18 -6 16 8 575 459 57 -11 21 8 259 352 258 -8 13 9 28 102 27

-1 21 7 503 338 134 -8 10 8 0 94 1 -5 16 8 120 32 119 -10 21 8 393 377 130 -7 13 9 0 3 1

-19 22 7 342 234 342 -7 10 8 53 105 52 -4 16 8 270 216 222 -9 21 8 371 347 150 -6 13 9 214 13 214

-18 22 7 0 35 1 -6 10 8 1202 1204 22 -3 16 8 249 145 248 -8 21 8 153 120 152 -5 13 9 298 104 183

-17 22 7 112 132 112 -5 10 8 222 240 173 -2 16 8 621 642 70 -7 21 8 288 153 287 -4 13 9 0 14 1

-16 22 7 276 213 276 -4 10 8 1173 1190 23 -1 16 8 0 65 1 -6 21 8 1786 1697 32 -3 13 9 284 273 183

-15 22 7 332 128 220 -3 10 8 0 108 1 0 16 8 1412 1441 47 -5 21 8 302 189 302 -2 13 9 435 444 99

-14 22 7 134 145 134 -2 10 8 162 84 162 -17 17 8 1285 1228 54 -4 21 8 346 210 289 -1 13 9 322 353 177

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 7

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

-13 14 9 235 12 234 -2 19 9 102 19 102 -7 11 10 203 89 203 -9 17 10 464 465 122 -6 12 11 485 425 104

-12 14 9 162 200 162 -16 20 9 329 240 329 -6 11 10 687 618 61 -8 17 10 489 469 105 -5 12 11 201 276 200

-11 14 9 435 429 85 -15 20 9 336 104 236 -5 11 10 670 616 61 -7 17 10 0 79 1 -4 12 11 442 336 119

-10 14 9 0 10 1 -14 20 9 270 253 269 -4 11 10 105 79 104 -6 17 10 1478 1494 38 -3 12 11 269 256 269

-9 14 9 801 749 46 -13 20 9 48 164 48 -3 11 10 2182 2186 24 -5 17 10 0 233 1 -2 12 11 470 384 140

-8 14 9 324 192 132 -12 20 9 0 143 1 -2 11 10 231 269 231 -4 17 10 626 581 89 -1 12 11 1041 962 57

-7 14 9 0 40 1 -11 20 9 164 73 164 -1 11 10 567 524 82 -3 17 10 509 595 122 -12 13 11 325 353 324

-6 14 9 0 192 1 -10 20 9 199 256 198 0 11 10 741 737 100 -2 17 10 419 378 172 -11 13 11 398 418 147

-5 14 9 818 747 45 -9 20 9 265 83 264 -12 12 10 1478 1431 51 -1 17 10 349 211 348 -10 13 11 298 109 297

-4 14 9 177 10 177 -8 20 9 0 130 1 -11 12 10 2044 2064 25 -15 18 10 125 126 124 -9 13 11 0 43 1

-3 14 9 500 431 90 -7 20 9 197 166 196 -10 12 10 899 872 41 -14 18 10 938 856 61 -8 13 11 0 11 1

-2 14 9 213 192 213 -6 20 9 330 244 298 -9 12 10 1370 1334 36 -13 18 10 408 291 152 -7 13 11 147 47 146

-1 14 9 0 22 1 -5 20 9 166 102 165 -8 12 10 304 381 188 -12 18 10 551 475 105 -6 13 11 0 60 1

-14 15 9 218 143 218 -4 20 9 343 240 343 -7 12 10 165 102 165 -11 18 10 91 180 91 -5 13 11 0 27 1

-13 15 9 64 49 63 -13 21 9 107 182 107 -6 12 10 2679 2617 26 -10 18 10 248 56 247 -4 13 11 165 44 165

-12 15 9 276 250 203 -12 21 9 120 92 119 -5 12 10 277 87 277 -9 18 10 2179 2136 30 -3 13 11 414 82 177

-11 15 9 364 421 114 -11 21 9 210 245 210 -4 12 10 422 398 114 -8 18 10 0 55 1 -2 13 11 523 422 124

-10 15 9 0 45 1 -10 21 9 217 240 217 -3 12 10 1338 1324 32 -7 18 10 271 160 271 -1 13 11 387 356 213

-9 15 9 213 238 213 -9 21 9 128 86 127 -2 12 10 868 866 57 -6 18 10 517 476 125 -13 14 11 74 22 74

-8 15 9 170 53 170 -8 21 9 407 196 267 -1 12 10 2081 2081 29 -5 18 10 46 307 46 -12 14 11 187 210 186

-7 15 9 0 67 1 0 0 10 1999 2100 63 0 12 10 1427 1442 55 -4 18 10 896 833 67 -11 14 11 353 198 182

-6 15 9 248 230 247 -1 1 10 382 304 182 -13 13 10 278 310 277 -3 18 10 263 116 263 -10 14 11 318 119 226

-5 15 9 0 44 1 0 1 10 342 303 213 -12 13 10 885 903 46 -13 19 10 618 586 113 -9 14 11 1011 989 48

-4 15 9 425 411 114 -2 2 10 298 219 297 -11 13 10 505 529 83 -12 19 10 316 156 316 -8 14 11 341 313 190

-3 15 9 263 252 262 -1 2 10 265 208 218 -10 13 10 1077 1086 42 -11 19 10 183 195 182 -7 14 11 315 5 315

-2 15 9 0 48 1 0 2 10 227 224 227 -9 13 10 327 135 176 -10 19 10 0 249 1 -6 14 11 328 304 206

-1 15 9 0 148 1 -3 3 10 1707 1788 39 -8 13 10 176 88 175 -9 19 10 439 266 145 -5 14 11 1030 1000 57

-15 16 9 152 60 152 -2 3 10 1422 1466 30 -7 13 10 246 181 246 -8 19 10 298 178 298 -4 14 11 0 144 1

-14 16 9 69 93 68 -1 3 10 1407 1460 30 -6 13 10 301 169 203 -7 19 10 336 173 336 -3 14 11 275 201 274

-13 16 9 305 189 177 0 3 10 1746 1783 37 -5 13 10 228 65 228 -6 19 10 664 597 150 -2 14 11 246 184 245

-12 16 9 225 160 225 -4 4 10 564 594 85 -4 13 10 88 120 88 -1 2 11 0 90 1 -1 14 11 78 9 77

-11 16 9 279 225 207 -3 4 10 853 800 37 -3 13 10 1144 1087 43 -2 3 11 362 469 132 -14 15 11 182 68 181

-10 16 9 143 8 143 -2 4 10 143 147 142 -2 13 10 547 519 97 -1 3 11 546 489 80 -13 15 11 257 22 257

-9 16 9 135 120 134 -1 4 10 798 784 49 -1 13 10 924 890 59 -3 4 11 222 161 221 -12 15 11 412 348 156

-8 16 9 0 140 1 0 4 10 542 610 106 0 13 10 436 302 208 -2 4 11 213 175 212 -11 15 11 348 281 210

-7 16 9 130 118 130 -5 5 10 1890 1964 33 -14 14 10 1663 1640 49 -1 4 11 0 168 1 -10 15 11 248 199 247

-6 16 9 245 16 244 -4 5 10 411 352 84 -13 14 10 493 403 95 -4 5 11 73 17 72 -9 15 11 243 327 243

-5 16 9 338 209 143 -3 5 10 621 645 51 -12 14 10 326 347 173 -3 5 11 0 80 1 -8 15 11 497 569 111

-4 16 9 0 129 1 -2 5 10 600 653 56 -11 14 10 973 896 45 -2 5 11 211 71 211 -7 15 11 611 571 94

-3 16 9 0 179 1 -1 5 10 292 381 142 -10 14 10 142 158 142 -1 5 11 143 16 142 -6 15 11 432 348 127

-2 16 9 212 107 212 0 5 10 1915 1939 32 -9 14 10 1818 1854 31 -5 6 11 0 49 1 -5 15 11 458 217 146

-1 16 9 0 63 1 -6 6 10 775 776 65 -8 14 10 393 498 122 -4 6 11 223 42 222 -4 15 11 480 273 151

-16 17 9 0 24 1 -5 6 10 285 157 143 -7 14 10 571 722 78 -3 6 11 296 239 173 -3 15 11 546 338 133

-15 17 9 289 176 289 -4 6 10 216 266 215 -6 14 10 539 522 89 -2 6 11 51 45 51 -2 15 11 0 10 1

-14 17 9 0 3 1 -3 6 10 3842 3890 19 -5 14 10 1893 1867 31 -1 6 11 279 72 174 -1 15 11 323 79 323

-13 17 9 64 105 63 -2 6 10 374 249 90 -4 14 10 0 148 1 -6 7 11 268 299 210 -13 16 11 0 83 1

-12 17 9 337 223 162 -1 6 10 139 157 139 -3 14 10 956 882 57 -5 7 11 260 2 260 -12 16 11 0 37 1

-11 17 9 529 556 82 0 6 10 812 782 63 -2 14 10 510 368 115 -4 7 11 0 121 1 -11 16 11 218 177 218

-10 17 9 0 93 1 -7 7 10 861 878 54 -1 14 10 441 369 143 -3 7 11 261 105 261 -10 16 11 0 123 1

-9 17 9 0 49 1 -6 7 10 191 95 191 0 14 10 1694 1633 51 -2 7 11 115 21 114 -9 16 11 150 23 150

-8 17 9 0 47 1 -5 7 10 644 579 53 -15 15 10 150 382 149 -1 7 11 240 300 240 -8 16 11 329 239 220

-7 17 9 41 93 41 -4 7 10 388 320 88 -14 15 10 414 301 144 -7 8 11 154 47 153 -7 16 11 0 17 1

-6 17 9 586 558 73 -3 7 10 361 329 105 -13 15 10 455 381 108 -6 8 11 453 499 89 -6 16 11 155 125 155

-5 17 9 144 234 143 -2 7 10 599 590 58 -12 15 10 2310 2280 27 -5 8 11 250 65 249 -5 16 11 160 161 160

-4 17 9 255 95 254 -1 7 10 0 92 1 -11 15 10 155 247 155 -4 8 11 0 7 1 -4 16 11 0 14 1

-3 17 9 314 5 262 0 7 10 832 876 55 -10 15 10 0 99 1 -3 8 11 186 41 185 -3 16 11 193 60 192

-2 17 9 240 145 239 -8 8 10 621 597 75 -9 15 10 464 462 95 -2 8 11 553 480 77 -11 17 11 203 271 202

-1 17 9 0 55 1 -7 8 10 219 134 219 -8 15 10 292 266 291 -1 8 11 199 59 198 -10 17 11 148 61 148

-17 18 9 346 91 230 -6 8 10 658 598 52 -7 15 10 241 250 240 -8 9 11 20 105 19 -9 17 11 0 137 1

-16 18 9 145 148 145 -5 8 10 219 230 219 -6 15 10 519 460 92 -7 9 11 274 217 266 -8 17 11 225 147 225

-15 18 9 294 90 293 -4 8 10 725 735 48 -5 15 10 33 105 32 -6 9 11 557 556 78 -7 17 11 0 51 1

-14 18 9 535 488 93 -3 8 10 221 238 221 -4 15 10 308 231 307 -5 9 11 863 831 50 -6 17 11 608 298 220

-13 18 9 282 390 281 -2 8 10 652 587 55 -3 15 10 2343 2266 31 -4 9 11 903 838 46 0 0 12 4412 4416 67

-12 18 9 191 256 190 -1 8 10 158 132 157 -2 15 10 393 402 179 -3 9 11 542 566 87 -1 1 12 422 358 189

-11 18 9 178 194 177 0 8 10 574 595 84 -1 15 10 299 284 299 -2 9 11 138 202 138 0 1 12 369 376 286

-10 18 9 426 187 116 -9 9 10 2665 2627 26 0 15 10 442 408 246 -1 9 11 0 114 1 -2 2 12 168 202 168

-9 18 9 0 117 1 -8 9 10 445 471 76 -16 16 10 437 421 201 -9 10 11 265 139 265 -1 2 12 429 410 120

-8 18 9 91 176 91 -7 9 10 645 641 49 -15 16 10 0 74 1 -8 10 11 290 94 290 0 2 12 177 188 176

-7 18 9 263 196 263 -6 9 10 912 905 37 -14 16 10 336 277 232 -7 10 11 206 49 205 -3 3 12 788 755 74

-6 18 9 220 249 219 -5 9 10 1207 1180 32 -13 16 10 356 319 165 -6 10 11 187 108 186 -2 3 12 596 536 69

-5 18 9 346 402 166 -4 9 10 1207 1178 30 -12 16 10 136 57 136 -5 10 11 254 215 254 -1 3 12 520 540 97

-4 18 9 533 467 100 -3 9 10 962 906 40 -11 16 10 0 72 1 -4 10 11 166 105 166 0 3 12 829 757 88

-3 18 9 175 84 175 -2 9 10 696 651 54 -10 16 10 232 179 232 -3 10 11 0 70 1 -4 4 12 418 396 173

-2 18 9 139 137 139 -1 9 10 505 469 70 -9 16 10 759 766 64 -2 10 11 151 66 150 -3 4 12 524 456 85

-1 18 9 169 107 169 0 9 10 2616 2612 31 -8 16 10 324 78 178 -1 10 11 143 131 143 -2 4 12 278 258 278

-17 19 9 0 36 1 -10 10 10 186 101 186 -7 16 10 755 746 59 -10 11 11 0 178 1 -1 4 12 501 452 92

-16 19 9 148 179 147 -9 10 10 181 153 181 -6 16 10 365 179 168 -9 11 11 54 311 53 0 4 12 310 385 309

-15 19 9 269 196 269 -8 10 10 21 202 21 -5 16 10 276 77 275 -8 11 11 411 450 125 -5 5 12 1110 1144 59

-14 19 9 305 229 304 -7 10 10 83 92 82 -4 16 10 0 61 1 -7 11 11 259 6 259 -4 5 12 148 189 147

-13 19 9 364 325 167 -6 10 10 682 692 53 -3 16 10 316 300 315 -6 11 11 131 138 131 -3 5 12 520 461 88

-12 19 9 76 127 76 -5 10 10 754 734 53 -2 16 10 309 282 308 -5 11 11 0 144 1 -2 5 12 456 462 98

-11 19 9 97 126 97 -4 10 10 697 693 58 -1 16 10 178 73 178 -4 11 11 262 9 261 -1 5 12 159 178 159

-10 19 9 0 160 1 -3 10 10 232 90 231 0 16 10 260 448 259 -3 11 11 413 420 122 0 5 12 1212 1175 52

-9 19 9 0 133 1 -2 10 10 354 206 122 -16 17 10 267 212 267 -2 11 11 240 296 239 -6 6 12 1405 1394 44

-8 19 9 0 123 1 -1 10 10 135 162 134 -15 17 10 521 380 123 -1 11 11 359 174 199 -5 6 12 336 409 162

-7 19 9 115 135 114 0 10 10 0 102 1 -14 17 10 561 580 108 -11 12 11 1081 980 58 -4 6 12 363 330 142

-6 19 9 162 311 162 -11 11 10 725 736 68 -13 17 10 569 588 90 -10 12 11 310 370 268 -3 6 12 2578 2671 29

-5 19 9 394 224 165 -10 11 10 587 519 58 -12 17 10 429 239 131 -9 12 11 340 278 201 -2 6 12 255 337 254

-4 19 9 0 210 1 -9 11 10 351 251 118 -11 17 10 1469 1472 38 -8 12 11 320 362 226 -1 6 12 428 416 115

-3 19 9 326 180 307 -8 11 10 2235 2179 24 -10 17 10 270 85 269 -7 12 11 221 251 221 0 6 12 1378 1378 47

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE Page 8

h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s h k l 10Fo 10Fc 10s

-7 7 12 678 698 86 -1 9 12 129 146 128 -12 12 12 150 61 150 -8 14 12 568 416 121 -1 7 13 0 56 1

-6 7 12 864 855 49 0 9 12 2792 2773 44 -11 12 12 172 116 172 -7 14 12 540 423 144 -7 8 13 199 6 199

-5 7 12 0 54 1 -10 10 12 266 122 265 -10 12 12 99 141 99 -6 14 12 537 402 176 -6 8 13 135 17 134

-4 7 12 191 146 190 -9 10 12 0 100 1 -9 12 12 408 408 169 -5 14 12 1200 1180 143 -5 8 13 127 52 126

-3 7 12 0 146 1 -8 10 12 0 33 1 -8 12 12 123 59 122 -4 14 12 755 224 293 -4 8 13 0 4 1

-2 7 12 172 49 172 -7 10 12 0 145 1 -7 12 12 255 140 254 -1 2 13 0 92 1 -3 8 13 292 59 291

-1 7 12 894 854 50 -6 10 12 755 745 68 -6 12 12 2350 2351 29 -2 3 13 432 404 128 -2 8 13 249 26 249

0 7 12 765 697 86 -5 10 12 179 172 179 -5 12 12 283 130 282 -1 3 13 316 407 234 -1 8 13 0 2 1

-8 8 12 649 678 114 -4 10 12 758 729 69 -4 12 12 242 63 241 -3 4 13 142 126 141 -8 9 13 114 86 113

-7 8 12 295 334 224 -3 10 12 44 143 43 -3 12 12 383 416 221 -2 4 13 182 105 181 -7 9 13 0 170 1

-6 8 12 2065 2054 25 -2 10 12 166 43 166 -2 12 12 233 147 232 -1 4 13 0 111 1 -6 9 13 300 245 300

-5 8 12 262 158 262 -1 10 12 0 108 1 -1 12 12 120 103 120 -4 5 13 277 48 276 -5 9 13 424 407 158

-4 8 12 370 352 147 0 10 12 270 105 270 0 12 12 384 68 383 -3 5 13 0 30 1 -4 9 13 480 405 144

-3 8 12 251 163 250 -11 11 12 474 278 273 -11 13 12 351 256 351 -2 5 13 382 36 152 -3 9 13 329 260 328

-2 8 12 2012 2057 27 -10 11 12 516 465 114 -10 13 12 514 570 113 -1 5 13 0 55 1 -2 9 13 343 166 287

-1 8 12 213 323 213 -9 11 12 0 211 1 -9 13 12 176 98 175 -5 6 13 0 4 1 -1 9 13 127 88 126

0 8 12 696 658 96 -8 11 12 1530 1505 38 -8 13 12 423 344 164 -4 6 13 0 48 1 -7 10 13 162 92 162

-9 9 12 2774 2760 45 -7 11 12 264 42 264 -7 13 12 69 77 68 -3 6 13 992 910 52 -6 10 13 420 192 239

-8 9 12 106 130 106 -6 11 12 522 494 103 -6 13 12 0 78 1 -2 6 13 242 42 241 -5 10 13 43 59 43

-7 9 12 0 224 1 -5 11 12 439 505 131 -5 13 12 507 351 126 -1 6 13 220 7 220 -4 10 13 469 206 194

-6 9 12 1079 1027 46 -4 11 12 288 49 287 -4 13 12 0 104 1 -6 7 13 357 65 171 -3 10 13 0 85 1

-5 9 12 519 576 104 -3 11 12 1474 1506 44 -3 13 12 676 590 107 -5 7 13 262 4 262 0 0 14 526 344 526

-4 9 12 634 586 86 -2 11 12 144 182 143 -2 13 12 371 257 370 -4 7 13 113 90 112 -1 1 14 313 143 312

-3 9 12 1134 1040 49 -1 11 12 423 462 170 -10 14 12 603 225 602 -3 7 13 0 91 1 0 1 14 441 149 258

-2 9 12 309 213 309 0 11 12 330 299 330 -9 14 12 1099 1201 80 -2 7 13 0 4 1 -1 2 14 355 137 354