

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE

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	36	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	201
-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	2				



Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE

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	4	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				

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-12	21	5	0	78	1
-6	18	4	140	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	-11	21	5	447	412	77
-5	18	4	950	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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	130	-1	21	5	311	361	130
-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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												

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	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	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	-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	-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	-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	95	-8	12	7	221	261	95
-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-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	-10	14	7	281		

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s							
-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	-15	17	8	1791	1774	24	-16	22	8	452	456	179	
-9	17	7	0	64	1	-12	22	7	118	141	118	0	10	8	340	334	130	-15	17	8	1791	1774	24	-15	22	8	382	298	170	-14	17	8	796	766	47	-15	22	8	720	760	55	
-8	17	7	0	64	1	-11	22	7	718	694	58	-11	11	8	687	758	50	-14	17	8	796	766	47	-14	22	8	0	148	1	-13	17	8	554	528	52	-12	17	8	2388	2382	23	
-7	17	7	258	242	146	-9	22	7	48	138	47	-10	11	8	544	528	52	-12	17	8	554	490	72	-12	22	8	0	70	1	-10	17	8	313	343	141	-10	22	8	399	298	137	
-6	17	7	751	759	40	-8	22	7	365	273	126	-9	11	8	308	261	87	-8	17	8	1791	1774	24	-9	22	8	306	70	257	-7	17	8	690	668	49	-8	22	8	306	70	257	
-5	17	7	312	202	108	-7	22	7	208	134	208	-8	11	8	2343	2382	17	-7	17	8	714	666	51	-8	22	8	306	158	261	-6	17	8	2387	2401	21	-7	22	8	208	293	208	
-4	17	7	222	159	221	-6	22	7	223	162	223	-7	11	8	0	82	1	-6	17	8	714	666	51	-6	22	8	306	158	261	-5	17	8	533	501	69	-6	22	8	536	469	176	
-3	17	7	115	111	115	-5	22	7	226	225	225	-6	11	8	510	543	58	-5	17	8	690	668	49	-5	22	8	306	158	261	-4	17	8	763	763	56	-1	2	9	0	132	1	
-2	17	7	350	399	135	-4	22	7	395	238	295	-3	11	8	2360	2416	19	-4	17	8	763	763	56	-3	17	8	700	718	49	-2	17	8	1795	1782	30	-1	3	9	724	730	47	
-1	17	7	95	117	94	-3	22	7	267	35	267	-4	11	8	218	88	217	-3	17	8	782	776	58	-2	3	9	700	718	49	-1	17	8	312	310	201	-3	4	9	0	126	1	
-17	18	7	0	32	1	-2	23	7	0	66	1	-1	11	8	512	523	60	-2	17	8	1795	1782	30	-1	3	9	700	718	49	-10	12	8	1161	1157	24	-1	17	8	1169	1207	65	
-16	18	7	369	289	121	-1	23	7	221	69	221	-2	11	8	232	260	231	-1	17	8	1795	1782	30	-1	3	9	700	718	49	-10	12	8	150	276	149	-10	12	8	870	865	28	
-15	18	7	174	36	174	-1	23	7	0	66	1	-1	11	8	512	523	60	-12	12	8	526	499	74	-1	17	8	1161	1157	24	-9	12	8	150	276	149	-12	12	8	260	245	131	
-14	18	7	141	77	141	-1	23	7	387	205	170	0	11	8	693	753	65	-12	12	8	526	499	74	-1	17	8	1161	1157	24	-9	12	8	150	276	149	-12	12	8	870	865	28	
-13	18	7	245	180	244	-1	23	7	361	297	176	-12	12	8	526	499	74	-10	12	8	150	276	149	-1	17	8	1161	1157	24	-9	12	8	150	276	149	-12	12	8	260	245	131	
-12	18	7	311	225	148	-1	23	7	317	112	238	-11	12	8	1161	1157	24	-10	12	8	150	276	149	-1	17	8	1161	1157	24	-9	12	8	150	276	149	-12	12	8	870	865	28	
-11	18	7	221	186	221	-1	23	7	264	143	264	-10	12	8	150	276	149	-10	12	8	150	276	149	-1	17	8	1161	1157	24	-9	12	8	150	276	149	-12	12	8	870	865	28	
-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	-17	18	8	565	486	93	-4	5	9	129	22	129	
-9	18	7	166	164	166	-10	23	7	0	134	1	-8	12	8	260	245	131	-17	18	8	565	486	93	-3	5	9	188	141	187	-15	18	8	424	509	112	-2	5	9	263	131	132	
-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	-15	18	8	424	509	112	-2	5	9	263	131	132	
-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	188	141	187	-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	-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	-12	18	8	696	737	59	-4	6	9	43	94	42	
-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	8	265	131	265	-3	6	9	1673	1665	20	
-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	8	563	486	74	-2	6	9	80	103	80	
-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	-9	18	8	1624	1573	29	-1	6	9	231	163	167	
-1	18	7	172	64	171	0	1	8	985910841	84	0	12	8	553	521	105	-9	18	8	1624	1573	29	-1	6	9	231	163	167	-6	7	9	179	43	178	-8	18	8	387	491	95		
-18	19	7	216	41	215	-1	0	1	8	901	824	52	-13	13	8	308	316	159	-8	18	8	387	491	95	-6	7	9	179	43	178	-7	18	8	231	149	231	-5	7	9	0	2	1
-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	
-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	
-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	
-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	
-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	
-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	
-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	
-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	
-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	
-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	
-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	
-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								

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s
-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	160						
-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	-1	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																						

Table 1. Observed and calculated structure factors for BOBTRAILLITE

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