

Table S1. Observed and calculated structure factors for knasibfite

Demartin *et al.*

h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ
0	0	-10	405	409	28	3	5	-6	427	424	12	5	9	-4	21	55	21	3	7	-2	193	192	11	1	3	0	188	181	6
1	1	-10	181	179	22	0	6	-6	85	60	69	0	10	-4	418	411	17	5	7	-2	248	247	18	3	3	0	183	183	8
0	2	-10	57	43	56	2	6	-6	131	120	25	2	10	-4	301	296	14	0	8	-2	299	303	14	5	3	0	86	97	28
1	3	-10	332	322	22	4	6	-6	49	40	49	4	10	-4	202	197	22	2	8	-2	562	577	7	0	4	0	530	521	9
0	4	-10	238	234	42	1	7	-6	630	627	11	1	11	-4	206	200	17	4	8	-2	105	112	25	2	4	0	227	228	7
1	0	-9	158	171	35	3	7	-6	762	764	28	3	11	-4	140	133	28	1	9	-2	237	238	8	4	4	0	193	185	14
3	0	-9	87	133	86	0	8	-6	504	492	17	0	12	-4	715	714	18	3	9	-2	629	622	10	6	4	0	95	103	32
0	1	-9	361	379	19	2	8	-6	377	378	19	2	12	-4	473	462	12	5	9	-2	9	72	9	1	5	0	665	653	5
2	1	-9	281	290	26	4	8	-6	299	278	19	4	12	-4	367	357	18	0	10	-2	409	418	18	3	5	0	326	328	7
1	2	-9	211	229	24	1	9	-6	347	344	14	1	13	-4	96	82	34	2	10	-2	294	295	10	5	5	0	241	235	14
3	2	-9	186	178	22	3	9	-6	335	331	17	3	13	-4	69	31	69	4	10	-2	187	201	16	0	6	0	925	905	9
0	3	-9	232	258	36	0	10	-6	266	277	23	0	14	-4	515	528	19	1	11	-2	459	451	11	2	6	0	762	759	5
2	3	-9	124	60	61	2	10	-6	408	411	17	2	14	-4	159	138	26	3	11	-2	285	269	16	4	6	0	447	459	10
1	4	-9	169	160	26	1	11	-6	551	540	12	1	15	-4	312	327	16	5	11	-2	243	237	26	1	7	0	833	820	10
0	5	-9	29	69	29	3	11	-6	358	362	16	3	15	-4	249	249	18	0	12	-2	310	310	18	3	7	0	1346	1328	6
2	5	-9	104	95	104	0	12	-6	364	346	21	0	16	-4	233	261	26	2	12	-2	381	390	11	5	7	0	26	49	26
1	6	-9	88	96	67	2	12	-6	79	95	78	2	16	-4	0	38	1	4	12	-2	66	87	65	0	8	0	752	742	9
0	7	-9	149	126	39	1	13	-6	324	317	16	1	17	-4	288	301	16	1	13	-2	123	102	23	2	8	0	614	614	6
2	7	-9	389	384	36	0	14	-6	312	318	24	1	0	-3	435	436	12	3	13	-2	1	55	1	4	8	0	394	385	10
1	8	-9	45	50	45	2	14	-6	146	144	28	3	0	-3	279	275	12	0	14	-2	441	451	18	1	9	0	262	249	7
0	9	-9	89	77	89	1	15	-6	70	54	70	5	0	-3	297	279	19	2	14	-2	152	148	21	3	9	0	143	144	13
0	0	-8	74	92	73	1	0	-5	1707	1656	12	0	1	-3	818	813	13	4	14	-2	254	228	20	5	9	0	116	109	24
2	0	-8	140	97	61	3	0	-5	700	702	14	2	1	-3	706	715	8	1	15	-2	414	427	13	0	10	0	372	374	9
4	0	-8	49	34	48	5	0	-5	795	769	25	4	1	-3	364	368	9	3	15	-2	274	276	19	2	10	0	565	564	7
1	1	-8	144	122	31	0	1	-5	422	430	12	6	1	-3	210	206	34	0	16	-2	656	644	18	4	10	0	196	175	13
3	1	-8	152	143	23	2	1	-5	87	98	24	1	2	-3	144	154	14	2	16	-2	239	245	17	1	11	0	478	463	7
0	2	-8	339	311	29	4	1	-5	196	192	16	3	2	-3	311	316	8	1	17	-2	139	136	24	3	11	0	280	294	10
2	2	-8	168	182	47	1	2	-5	340	334	8	5	2	-3	388	380	14	0	18	-2	147	155	33	5	11	0	197	170	21
1	3	-8	103	131	49	3	2	-5	309	293	12	0	3	-3	117	115	22	2	18	-2	131	148	28	0	12	0	54	51	54
3	3	-8	215	216	18	5	2	-5	125	128	36	2	3	-3	672	671	5	1	0	-1	844	833	10	2	12	0	161	160	14
0	4	-8	240	245	23	0	3	-5	1109	1145	11	4	3	-3	123	103	19	3	0	-1	470	487	9	4	12	0	21	29	20
2	4	-8	301	294	21	2	3	-5	797	797	8	1	4	-3	496	506	7	5	0	-1	505	540	21	1	13	0	339	344	12
1	5	-8	224	227	20	4	3	-5	617	604	11	3	4	-3	226	230	9	0	1	-1	282	285	6	3	13	0	230	235	18
3	5	-8	243	260	26	1	4	-5	227	230	14	5	4	-3	246	234	18	2	1	-1	167	157	8	0	14	0	1475	1507	14
0	6	-8	179	158	29	3	4	-5	189	195	16	0	5	-3	1196	1171	10	4	1	-1	181	176	14	2	14	0	248	240	15
2	6	-8	344	330	33	5	4	-5	31	58	30	2	5	-3	315	328	6	6	1	-1	74	50	43	4	14	0	683	689	18
1	7	-8	357	338	15	0	5	-5	267	266	18	4	5	-3	124	138	21	1	2	-1	524	514	6	1	15	0	150	169	20
3	7	-8	269	273	37	2	5	-5	115	97	22	1	6	-3	545	541	7	3	2	-1	122	121	11	3	15	0	122	110	44
0	8	-8	176	180	30	4	5	-5	98	97	31	3	6	-3	332	337	11	5	2	-1	295	291	13	0	16	0	279	288	20
2	8	-8	198	216	30	1	6	-5	294	289	13	5	6	-3	207	196	21	0	3	-1	507	503	10	2	16	0	281	290	15

h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ
1	9	-8	191	210	21	3	6	-5	341	326	12	0	7	-3	1299	1293	27	2	3	-1	183	188	8	1	17	0	377	399	14
0	10	-8	75	112	75	5	6	-5	92	99	46	2	7	-3	574	594	8	4	3	-1	204	221	11	3	17	0	336	336	23
2	10	-8	237	225	22	0	7	-5	148	168	29	4	7	-3	542	531	11	6	3	-1	73	56	45	0	18	0	344	361	21
1	11	-8	175	169	24	2	7	-5	1234	1242	11	1	8	-3	297	294	8	1	4	-1	1454	1402	11	2	18	0	205	211	19
0	12	-8	384	376	23	4	7	-5	219	227	16	3	8	-3	332	333	11	3	4	-1	879	892	7	1	19	0	242	242	17
1	0	-7	477	518	23	1	8	-5	428	426	11	5	8	-3	78	76	76	5	4	-1	461	458	11	1	0	1	831	855	9
3	0	-7	274	276	23	3	8	-5	372	392	15	0	9	-3	711	736	13	0	5	-1	788	789	9	3	0	1	473	469	12
0	1	-7	372	378	20	0	9	-5	248	218	28	2	9	-3	862	856	10	2	5	-1	1627	1594	6	5	0	1	528	552	16
2	1	-7	226	259	18	2	9	-5	234	204	18	4	9	-3	281	278	14	4	5	-1	512	525	8	0	1	1	279	277	6
4	1	-7	204	207	19	4	9	-5	132	136	32	1	10	-3	114	112	22	6	5	-1	348	323	18	2	1	1	167	164	7
1	2	-7	389	410	18	1	10	-5	162	157	19	3	10	-3	73	74	73	1	6	-1	49	57	32	4	1	1	166	170	15
3	2	-7	147	169	22	3	10	-5	120	91	33	5	10	-3	118	105	48	3	6	-1	108	117	16	6	1	1	56	47	55
0	3	-7	656	655	14	0	11	-5	467	480	18	0	11	-3	242	252	20	5	6	-1	70	55	42	1	2	1	516	517	5
2	3	-7	416	407	17	2	11	-5	470	494	15	2	11	-3	336	343	12	0	7	-1	753	714	23	3	2	1	131	117	11
4	3	-7	355	342	15	4	11	-5	283	275	20	4	11	-3	152	125	25	2	7	-1	1404	1394	6	5	2	1	300	294	13
1	4	-7	164	174	23	1	12	-5	420	400	13	1	12	-3	392	388	12	4	7	-1	46	20	46	0	3	1	532	484	19
3	4	-7	94	113	41	3	12	-5	337	332	16	3	12	-3	332	342	14	1	8	-1	564	550	6	2	3	1	175	182	7
0	5	-7	262	271	31	0	13	-5	102	104	53	0	13	-3	199	234	26	3	8	-1	292	298	9	4	3	1	220	209	13
2	5	-7	285	283	19	2	13	-5	303	311	19	2	13	-3	123	132	24	5	8	-1	231	198	19	6	3	1	59	53	59
4	5	-7	55	27	54	1	14	-5	572	551	13	4	13	-3	117	122	34	0	9	-1	653	657	6	1	4	1	1429	1398	15
1	6	-7	310	290	14	3	14	-5	202	180	21	1	14	-3	259	253	15	2	9	-1	674	670	9	3	4	1	868	887	5
3	6	-7	251	244	25	0	15	-5	120	128	47	3	14	-3	110	108	31	4	9	-1	225	221	12	5	4	1	462	458	12
0	7	-7	102	77	49	2	15	-5	88	89	57	0	15	-3	493	491	21	1	10	-1	727	729	7	0	5	1	808	796	18
2	7	-7	164	185	32	1	16	-5	245	248	18	2	15	-3	288	274	16	3	10	-1	539	540	8	2	5	1	1616	1595	8
4	7	-7	42	33	41	0	17	-5	413	393	23	1	16	-3	233	233	18	5	10	-1	310	288	17	4	5	1	515	528	10
1	8	-7	401	396	13	2	0	-4	870	870	8	3	16	-3	89	106	61	0	11	-1	575	587	14	6	5	1	338	324	15
3	8	-7	327	306	30	4	0	-4	349	353	17	0	17	-3	142	164	75	2	11	-1	567	573	8	1	6	1	61	61	15
0	9	-7	183	186	28	1	1	-4	425	430	7	2	17	-3	90	65	60	4	11	-1	288	294	14	3	6	1	123	121	12
2	9	-7	302	310	18	3	1	-4	398	396	7	1	18	-3	68	110	67	1	12	-1	773	777	10	5	6	1	40	59	40
1	10	-7	134	126	26	5	1	-4	126	80	35	2	0	-2	1054	1048	10	3	12	-1	323	338	13	0	7	1	773	709	13
3	10	-7	80	25	80	0	2	-4	1054	1055	10	4	0	-2	117	121	31	0	13	-1	276	289	18	2	7	1	1403	1398	9
0	11	-7	428	406	21	2	2	-4	230	229	7	6	0	-2	121	85	39	2	13	-1	185	208	17	4	7	1	29	22	29
2	11	-7	174	193	27	4	2	-4	454	456	10	1	1	-2	850	842	4	4	13	-1	197	192	26	1	8	1	564	552	5
1	12	-7	264	273	18	1	3	-4	98	96	25	3	1	-2	408	407	7	1	14	-1	373	380	12	3	8	1	284	298	8
0	13	-7	140	143	48	3	3	-4	129	119	19	5	1	-2	388	377	12	3	14	-1	176	172	24	5	8	1	197	199	17
2	13	-7	84	97	59	5	3	-4	56	85	56	0	2	-2	1091	1089	14	0	15	-1	62	101	62	0	9	1	666	665	10
1	14	-7	169	168	23	0	4	-4	1194	1181	11	2	2	-2	1088	1090	5	2	15	-1	116	128	27	2	9	1	673	663	6
0	0	-6	968	916	15	2	4	-4	439	439	9	4	2	-2	322	331	9	1	16	-1	86	113	40	4	9	1	232	225	14
2	0	-6	246	251	30	4	4	-4	504	507	11	6	2	-2	75	74	75	3	16	-1	126	144	34	1	10	1	744	730	5
4	0	-6	272	275	22	1	5	-4	592	593	8	1	3	-2	1110	1125	7	0	17	-1	85	121	84	3	10	1	539	541	8

h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ						
1	1	-6	301	295	13	3	5	-4	558	561	10	3	3	-2	627	641	7	2	17	-1	69	108	69	5	10	1	306	290	14
3	1	-6	224	223	16	5	5	-4	234	232	19	5	3	-2	463	449	11	1	18	-1	339	351	15	0	11	1	588	586	9
5	1	-6	127	137	30	0	6	-4	472	463	14	0	4	-2	435	447	11	0	19	-1	242	251	25	2	11	1	584	570	8
0	2	-6	805	824	17	2	6	-4	274	280	10	2	4	-2	667	679	9	2	0	0	1341	1426	7	4	11	1	303	294	13
2	2	-6	354	356	13	4	6	-4	123	137	23	4	4	-2	270	280	10	4	0	0	2016	2064	13	1	12	1	782	782	7
4	2	-6	335	335	15	1	7	-4	314	320	11	6	4	-2	160	163	25	6	0	0	694	671	18	3	12	1	348	342	10
1	3	-6	544	550	11	3	7	-4	651	669	10	1	5	-2	335	326	7	1	1	0	0	4	1	0	13	1	283	285	18
3	3	-6	380	365	15	5	7	-4	148	130	25	3	5	-2	508	521	7	2	1	0	68	60	17	2	13	1	208	201	13
5	3	-6	296	290	19	0	8	-4	511	515	15	5	5	-2	108	131	32	5	1	0	74	8	40	4	13	1	179	189	20
0	4	-6	615	634	13	2	8	-4	373	374	13	0	6	-2	369	378	13	0	2	0	151	152	8	1	14	1	361	383	13
2	4	-6	707	702	10	4	8	-4	208	198	16	2	6	-2	267	271	7	2	2	0	52	59	20	3	14	1	156	164	23
4	4	-6	328	348	17	1	9	-4	70	40	45	4	6	-2	93	83	21	4	2	0	87	51	25	0	15	1	93	100	48
1	5	-6	357	346	14	3	9	-4	161	168	24	1	7	-2	697	698	6	6	2	0	0	30	1	2	15	1	156	134	20
1	16	1	105	101	29	0	1	3	807	821	4	1	5	4	583	592	5	0	11	5	469	470	15	2	5	7	291	285	10
3	16	1	167	140	31	2	1	3	705	703	6	3	5	4	559	565	8	2	11	5	479	483	10	4	5	7	23	24	23
0	17	1	91	124	61	4	1	3	371	372	11	5	5	4	245	231	15	4	11	5	279	268	15	1	6	7	297	285	12
2	17	1	28	108	28	6	1	3	224	205	17	0	6	4	472	461	8	1	12	5	405	407	11	3	6	7	244	240	15
1	18	1	314	356	18	1	2	3	148	154	7	2	6	4	275	273	10	3	12	5	326	337	13	0	7	7	85	83	43
0	19	1	257	255	24	3	2	3	315	324	10	4	6	4	133	132	17	0	13	5	130	106	29	2	7	7	180	187	15
0	0	2	136	156	9	5	2	3	371	376	13	1	7	4	320	316	7	2	13	5	292	311	14	4	7	7	56	33	55
2	0	2	1050	1050	11	0	3	3	116	110	10	3	7	4	675	659	7	1	14	5	572	557	15	1	8	7	389	387	12
4	0	2	96	128	36	2	3	3	658	667	5	5	7	4	109	136	25	3	14	5	188	184	18	3	8	7	300	299	15
6	0	2	75	86	75	4	3	3	106	101	21	0	8	4	533	517	21	0	15	5	110	127	63	0	9	7	184	185	23
1	1	2	838	843	6	1	4	3	496	500	5	2	8	4	378	367	8	2	15	5	107	91	27	2	9	7	306	314	13
3	1	2	397	410	9	3	4	3	236	239	8	4	8	4	214	199	15	1	16	5	248	246	15	1	10	7	100	129	31
5	1	2	372	378	13	5	4	3	243	230	15	1	9	4	37	48	36	0	17	5	379	393	32	3	10	7	0	23	1
0	2	2	1097	1084	26	0	5	3	1212	1174	33	3	9	4	172	170	14	0	0	6	930	919	11	0	11	7	423	415	17
2	2	2	1097	1094	6	2	5	3	318	326	7	5	9	4	57	58	56	2	0	6	267	254	13	2	11	7	213	199	16
4	2	2	330	327	11	4	5	3	150	140	15	0	10	4	404	415	15	4	0	6	254	278	21	1	12	7	271	267	15
6	2	2	71	72	61	1	6	3	556	546	9	2	10	4	306	303	10	1	1	6	286	296	7	0	13	7	101	136	47
1	3	2	1109	1125	6	3	6	3	343	338	11	4	10	4	200	200	20	3	1	6	232	224	13	2	13	7	100	97	30
3	3	2	631	644	6	5	6	3	202	199	17	1	11	4	201	200	12	5	1	6	121	138	25	1	14	7	151	165	22
5	3	2	463	448	14	0	7	3	1351	1294	27	3	11	4	141	135	17	0	2	6	809	817	7	0	0	8	87	86	61
0	4	2	447	435	8	2	7	3	586	586	6	0	12	4	716	713	14	2	2	6	350	357	7	2	0	8	98	100	40
2	4	2	681	678	8	4	7	3	545	530	17	2	12	4	472	458	10	4	2	6	337	330	13	4	0	8	0	28	1
4	4	2	273	274	12	1	8	3	315	301	7	4	12	4	374	356	19	1	3	6	550	552	6	1	1	8	116	122	18
6	4	2	180	162	18	3	8	3	340	339	9	1	13	4	110	85	22	3	3	6	379	368	10	3	1	8	156	143	19
1	5	2	334	317	4	5	8	3	105	80	26	3	13	4	0	28	1	5	3	6	315	291	15	0	2	8	317	309	13
3	5	2	523	528	6	0	9	3	743	720	19	0	14	4	536	532	43	0	4	6	627	631	9	2	2	8	167	173	14
5	5	2	126	124	21	2	9	3	867	866	7	2	14	4	135	132	18	2	4	6	694	701	7	1	3	8	139	133	14

h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ	h	k	l	10Fo	10Fc	10σ
0	6	2	411	380	9	4	9	3	269	273	16	1	15	4	330	318	12	4	4	6	355	346	13	3	3	8	215	216	16
2	6	2	269	266	7	1	10	3	107	107	14	3	15	4	241	242	19	1	5	6	345	354	7	0	4	8	261	244	19
4	6	2	82	83	30	3	10	3	71	80	31	0	16	4	211	256	37	3	5	6	432	433	10	2	4	8	285	283	12
1	7	2	717	711	4	5	10	3	119	103	31	2	16	4	0	42	1	0	6	6	61	55	61	1	5	8	230	231	14
3	7	2	189	199	10	0	11	3	255	256	13	1	17	4	257	305	23	2	6	6	127	126	14	3	5	8	281	258	18
5	7	2	270	255	15	2	11	3	334	342	10	1	0	5	1664	1668	7	4	6	6	0	36	1	0	6	8	154	162	25
0	8	2	307	293	21	4	11	3	133	127	25	3	0	5	691	704	13	1	7	6	614	629	10	2	6	8	335	334	12
2	8	2	576	565	6	1	12	3	397	390	9	5	0	5	822	777	24	3	7	6	752	765	11	1	7	8	353	341	13
4	8	2	122	104	21	3	12	3	349	354	15	0	1	5	419	422	9	0	8	6	479	489	15	3	7	8	284	273	19
1	9	2	232	232	8	0	13	3	226	233	14	2	1	5	108	104	12	2	8	6	385	375	10	0	8	8	158	179	28
3	9	2	626	620	7	2	13	3	126	132	19	4	1	5	199	187	15	4	8	6	282	277	15	2	8	8	210	221	16
5	9	2	88	66	35	4	13	3	111	122	41	1	2	5	329	332	6	1	9	6	341	342	12	1	9	8	197	210	17
0	10	2	425	410	10	1	14	3	259	253	11	3	2	5	289	292	11	3	9	6	322	329	14	0	10	8	107	116	37
2	10	2	302	295	9	3	14	3	122	108	24	5	2	5	120	128	25	0	10	6	281	279	18	2	10	8	207	221	19
4	10	2	170	196	20	0	15	3	512	499	15	0	3	5	1118	1135	16	2	10	6	419	412	12	1	11	8	160	168	19
1	11	2	455	452	9	2	15	3	270	275	14	2	3	5	782	786	9	1	11	6	557	542	11	0	12	8	370	375	20
3	11	2	276	271	11	1	16	3	227	234	19	4	3	5	606	597	11	3	11	6	346	363	16	1	0	9	178	174	24
5	11	2	239	236	20	3	16	3	91	102	48	1	4	5	232	220	7	0	12	6	344	348	18	3	0	9	148	138	33
0	12	2	328	307	16	0	17	3	175	158	46	3	4	5	185	187	12	2	12	6	66	91	66	0	1	9	405	376	23
2	12	2	372	383	11	2	17	3	88	71	43	5	4	5	0	53	1	1	13	6	319	316	14	2	1	9	320	295	13
4	12	2	102	80	33	1	18	3	106	115	48	0	5	5	274	277	8	0	14	6	313	316	19	1	2	9	249	232	14
1	13	2	127	108	15	0	0	4	1103	1109	7	2	5	5	109	105	13	2	14	6	146	144	21	3	2	9	207	180	22
3	13	2	79	54	35	2	0	4	867	880	21	4	5	5	112	104	20	1	15	6	62	53	61	0	3	9	251	256	20
0	14	2	456	456	15	4	0	4	332	355	17	1	6	5	283	291	7	1	0	7	522	509	11	2	3	9	43	59	42
2	14	2	172	149	17	1	1	4	422	423	5	3	6	5	342	328	11	3	0	7	297	270	18	1	4	9	162	169	18
4	14	2	228	232	23	3	1	4	391	392	10	5	6	5	122	102	22	0	1	7	362	381	11	0	5	9	0	65	1
1	15	2	389	420	14	5	1	4	81	72	33	0	7	5	150	156	21	2	1	7	266	261	13	2	5	9	13	94	12
3	15	2	268	271	18	0	2	4	1038	1053	6	2	7	5	1235	1243	7	4	1	7	208	210	17	1	6	9	74	92	42
0	16	2	665	640	24	2	2	4	224	231	7	4	7	5	236	227	17	1	2	7	419	412	7	0	7	9	126	123	33
2	16	2	234	254	35	4	2	4	451	454	11	1	8	5	438	431	8	3	2	7	179	175	16	2	7	9	382	384	20
1	17	2	148	133	25	1	3	4	107	92	9	3	8	5	401	394	10	0	3	7	641	662	10	1	8	9	77	49	43
0	18	2	143	150	52	3	3	4	128	123	15	0	9	5	219	218	19	2	3	7	402	404	8	0	9	9	55	69	54
2	18	2	130	145	30	5	3	4	92	82	31	2	9	5	207	206	12	4	3	7	359	346	13	1	1	10	206	175	17
1	0	3	430	430	6	0	4	4	1185	1193	28	4	9	5	149	136	20	1	4	7	185	173	11	0	2	10	82	46	81
3	0	3	272	272	15	2	4	4	451	450	6	1	10	5	165	161	16	3	4	7	110	117	19	1	3	10	318	321	31
5	0	3	302	276	20	4	4	4	515	516	11	3	10	5	103	94	23	0	5	7	249	271	18	0	4	10	238	226	24