Table 1. Observed and calculated structure factors for FOLVIKITE 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

1 0 0 341 340 1 5 1 1 133 131 2 -5 0 2 61 65 5 -1 6 2 317 311 1 1 4 3 380 379 1

2 0 0 385 377 1 6 1 1 221 232 3 -4 0 2 518 512 7 0 6 2 574 555 1 2 4 3 169 159 1

3 0 0 51 46 6 7 1 1 85 119 16 -3 0 2 744 721 1 1 6 2 322 332 1 3 4 3 119 114 2

4 0 0 1068 1066 6 -7 2 1 239 243 6 -2 0 2 1045 1033 1 2 6 2 90 99 4 4 4 3 392 386 5

5 0 0 230 207 2 -6 2 1 271 250 4 -1 0 2 79 67 1 3 6 2 237 240 3 5 4 3 222 219 3

6 0 0 539 530 4 -5 2 1 152 144 2 0 0 2 901 887 1 4 6 2 286 303 9 6 4 3 204 220 5

7 0 0 233 239 11 -4 2 1 261 260 4 1 0 2 390 412 1 5 6 2 251 249 3 -6 5 3 177 174 6

0 1 0 61 111 1 -3 2 1 1083 1057 1 2 0 2 511 514 1 -4 7 2 58 121 57 -5 5 3 73 62 8

1 1 0 171 164 1 -2 2 1 580 570 1 3 0 2 260 258 1 -3 7 2 100 105 7 -4 5 3 165 154 15

2 1 0 48 65 2 -1 2 1 301 311 1 4 0 2 522 532 5 -2 7 2 68 60 6 -3 5 3 144 145 3

3 1 0 149 151 1 0 2 1 222 220 1 5 0 2 126 119 2 -1 7 2 28 34 19 -2 5 3 150 140 1

4 1 0 179 201 6 1 2 1 1152 1167 1 6 0 2 439 440 3 0 7 2 110 105 3 -1 5 3 105 90 1

5 1 0 109 92 2 2 2 1 177 176 1 7 0 2 238 235 9 1 7 2 80 73 4 0 5 3 182 193 1

6 1 0 43 44 32 3 2 1 443 428 1 -7 1 2 100 121 14 2 7 2 70 63 6 1 5 3 129 118 1

7 1 0 112 126 11 4 2 1 290 301 5 -6 1 2 31 47 31 3 7 2 82 72 8 2 5 3 120 112 2

0 2 0 958 957 1 5 2 1 406 412 1 -5 1 2 98 83 2 4 7 2 98 127 32 3 5 3 127 126 4

1 2 0 280 281 1 6 2 1 142 157 5 -4 1 2 158 196 10 -2 8 2 444 431 2 4 5 3 228 209 7

2 2 0 1179 1175 1 7 2 1 303 291 4 -3 1 2 130 123 1 -1 8 2 69 71 7 5 5 3 126 125 4

3 2 0 1074 1049 1 -7 3 1 76 109 22 -2 1 2 57 49 2 0 8 2 269 266 2 -5 6 3 262 251 5

4 2 0 290 301 4 -6 3 1 252 245 4 -1 1 2 197 209 1 1 8 2 145 145 4 -4 6 3 245 259 15

5 2 0 92 86 2 -5 3 1 71 75 5 0 1 2 87 118 1 2 8 2 339 336 3 -3 6 3 244 236 3

6 2 0 443 433 3 -4 3 1 205 196 5 1 1 2 95 88 1 -7 0 3 180 185 12 -2 6 3 184 177 2

7 2 0 333 328 4 -3 3 1 143 140 2 2 1 2 55 51 2 -6 0 3 143 126 11 -1 6 3 353 352 1

0 3 0 163 184 1 -2 3 1 305 294 1 3 1 2 156 167 1 -5 0 3 178 166 3 0 6 3 174 158 2

1 3 0 108 96 1 -1 3 1 92 87 1 4 1 2 149 184 7 -4 0 3 521 501 7 1 6 3 199 198 2

2 3 0 84 93 1 0 3 1 87 96 1 5 1 2 94 79 2 -3 0 3 285 275 1 2 6 3 40 40 9

3 3 0 135 137 2 1 3 1 107 101 1 6 1 2 45 47 20 -2 0 3 581 575 1 3 6 3 412 404 2

4 3 0 156 172 7 2 3 1 314 308 1 7 1 2 85 102 18 -1 0 3 125 139 1 4 6 3 197 204 9

5 3 0 75 70 4 3 3 1 143 138 2 -7 2 2 278 280 6 0 0 3 302 305 1 5 6 3 63 62 9

6 3 0 72 73 14 4 3 1 189 176 7 -6 2 2 425 423 3 1 0 3 448 445 1 -4 7 3 166 150 14

7 3 0 63 103 29 5 3 1 80 81 4 -5 2 2 632 628 1 2 0 3 258 263 1 -3 7 3 59 75 14

0 4 0 2177 2146 1 6 3 1 232 246 4 -4 2 2 345 355 9 3 0 3 187 173 2 -2 7 3 159 141 3

1 4 0 232 233 1 7 3 1 99 103 15 -3 2 2 447 436 1 4 0 3 494 503 5 -1 7 3 44 39 9

2 4 0 333 342 1 -6 4 1 451 444 3 -2 2 2 335 334 1 5 0 3 254 251 2 0 7 3 118 138 3

3 4 0 16 33 15 -5 4 1 166 155 4 -1 2 2 499 496 1 6 0 3 286 285 4 1 7 3 102 90 4

4 4 0 749 760 3 -4 4 1 677 668 3 0 2 2 702 684 1 7 0 3 211 219 7 2 7 3 195 189 3

5 4 0 171 168 3 -3 4 1 37 30 10 1 2 2 634 642 1 -7 1 3 122 127 12 3 7 3 59 83 13

6 4 0 464 459 3 -2 4 1 224 225 1 2 2 2 138 136 1 -6 1 3 241 238 4 4 7 3 124 125 18

0 5 0 41 34 5 -1 4 1 344 353 1 3 2 2 436 432 1 -5 1 3 101 80 2 -2 8 3 80 94 6

1 5 0 134 121 1 0 4 1 42 49 3 4 2 2 382 397 4 -4 1 3 239 212 11 -1 8 3 0 36 1

2 5 0 46 41 4 1 4 1 15 13 15 5 2 2 339 344 2 -3 1 3 179 175 1 0 8 3 154 148 3

3 5 0 107 112 3 2 4 1 54 59 3 6 2 2 197 198 4 -2 1 3 233 236 1 1 8 3 235 221 3

4 5 0 141 157 7 3 4 1 508 511 1 7 2 2 287 282 4 -1 1 3 105 84 1 2 8 3 55 66 10

5 5 0 98 90 5 4 4 1 390 408 4 -7 3 2 69 99 25 0 1 3 269 270 1 -7 0 4 209 199 11

6 5 0 56 52 25 5 4 1 99 98 4 -6 3 2 72 73 17 1 1 3 181 186 1 -6 0 4 427 434 5

0 6 0 518 491 1 6 4 1 68 92 17 -5 3 2 61 57 6 2 1 3 238 245 1 -5 0 4 231 223 2

1 6 0 208 198 1 -6 5 1 166 166 7 -4 3 2 119 153 24 3 1 3 147 136 1 -4 0 4 581 575 1

2 6 0 540 554 1 -5 5 1 101 87 5 -3 3 2 149 141 2 4 1 3 242 239 5 -3 0 4 184 171 1

3 6 0 582 584 2 -4 5 1 193 184 7 -2 3 2 92 90 1 5 1 3 137 133 2 -2 0 4 803 798 1

4 6 0 231 233 7 -3 5 1 113 115 3 -1 3 2 84 71 1 6 1 3 208 210 4 -1 0 4 475 484 1

5 6 0 40 39 17 -2 5 1 112 111 2 0 3 2 157 175 1 7 1 3 103 104 10 0 0 4 1855 1884 1

0 7 0 106 103 5 -1 5 1 121 113 1 1 3 2 125 112 1 -7 2 3 273 273 5 1 0 4 87 87 1

1 7 0 58 50 6 0 5 1 217 229 1 2 3 2 69 61 2 -6 2 3 157 166 6 2 0 4 550 547 1

2 7 0 71 55 6 1 5 1 139 131 1 3 3 2 107 110 2 -5 2 3 360 359 1 3 0 4 243 237 2

3 7 0 76 94 10 2 5 1 102 98 2 4 3 2 134 161 8 -4 2 3 330 339 9 4 0 4 993 1033 4

4 7 0 115 134 26 3 5 1 72 85 5 5 3 2 72 62 5 -3 2 3 440 429 1 5 0 4 240 225 3

0 8 0 908 916 3 4 5 1 215 189 6 6 3 2 57 56 17 -2 2 3 267 267 1 6 0 4 272 272 4

1 8 0 138 132 4 5 5 1 129 131 4 -6 4 2 468 468 3 -1 2 3 492 504 1 7 0 4 175 160 8

2 8 0 217 215 4 6 5 1 168 170 7 -5 4 2 81 71 6 0 2 3 151 153 1 -7 1 4 90 95 19

3 8 0 80 67 10 -5 6 1 109 104 7 -4 4 2 390 397 6 1 2 3 488 486 1 -6 1 4 45 49 38

-7 0 1 180 181 11 -4 6 1 187 199 10 -3 4 2 512 509 1 2 2 3 16 16 9 -5 1 4 113 104 2

-6 0 1 583 573 4 -3 6 1 590 588 2 -2 4 2 780 781 1 3 2 3 577 582 1 -4 1 4 64 53 3

-5 0 1 196 185 2 -2 6 1 202 199 2 -1 4 2 78 74 1 4 2 3 253 263 5 -3 1 4 145 137 1

-4 0 1 983 949 6 -1 6 1 43 49 5 0 4 2 561 567 1 5 2 3 102 99 3 -2 1 4 78 58 1

-3 0 1 58 53 5 0 6 1 135 120 2 1 4 2 247 251 1 6 2 3 177 172 4 -1 1 4 194 196 1

-2 0 1 333 331 1 1 6 1 564 562 1 2 4 2 541 549 1 7 2 3 293 286 4 0 1 4 27 50 3

-1 0 1 518 503 1 2 6 1 29 40 15 3 4 2 229 230 1 -7 3 3 107 103 14 1 1 4 78 57 1

0 0 1 26 30 1 3 6 1 241 247 3 4 4 2 394 407 6 -6 3 3 260 251 4 2 1 4 68 57 1

1 0 1 20 15 6 4 6 1 223 223 8 5 4 2 110 103 4 -5 3 3 97 91 4 3 1 4 169 181 1

2 0 1 114 110 1 5 6 1 275 269 3 6 4 2 374 387 3 -4 3 3 211 189 9 4 1 4 150 179 6

3 0 1 745 723 1 -4 7 1 132 152 34 -6 5 2 42 55 41 -3 3 3 126 116 2 5 1 4 101 87 4

4 0 1 500 519 6 -3 7 1 107 96 8 -5 5 2 94 79 6 -2 3 3 251 235 1 6 1 4 13 34 13

5 0 1 115 107 2 -2 7 1 197 185 3 -4 5 2 116 165 31 -1 3 3 77 63 1 7 1 4 87 111 13

6 0 1 130 123 9 -1 7 1 59 48 6 -3 5 2 80 88 5 0 3 3 177 174 1 -7 2 4 279 277 5

7 0 1 223 217 8 0 7 1 70 89 5 -2 5 2 50 53 3 1 3 3 145 142 1 -6 2 4 212 209 5

-7 1 1 115 133 11 1 7 1 68 54 5 -1 5 2 184 173 1 2 3 3 298 292 1 -5 2 4 186 170 2

-6 1 1 237 230 4 2 7 1 208 201 3 0 5 2 39 36 4 3 3 3 130 123 2 -4 2 4 293 307 10

-5 1 1 98 92 2 3 7 1 90 104 7 1 5 2 76 65 2 4 3 3 180 174 7 -3 2 4 577 580 1

-4 1 1 267 234 5 4 7 1 150 135 14 2 5 2 46 43 4 5 3 3 104 88 4 -2 2 4 701 703 1

-3 1 1 160 156 1 -3 8 1 84 64 10 3 5 2 139 141 3 6 3 3 247 246 4 -1 2 4 253 252 1

-2 1 1 222 235 1 -2 8 1 84 90 7 4 5 2 123 132 12 -6 4 3 98 93 11 0 2 4 569 566 1

-1 1 1 150 143 1 -1 8 1 179 175 3 5 5 2 78 82 6 -5 4 3 146 140 4 1 2 4 697 707 1

0 1 1 188 270 1 0 8 1 57 56 9 6 5 2 0 46 1 -4 4 3 381 394 10 2 2 4 1020 1015 1

1 1 1 171 174 1 1 8 1 59 42 7 -5 6 2 405 406 3 -3 4 3 243 242 1 3 2 4 478 479 1

2 1 1 201 227 1 2 8 1 37 39 17 -4 6 2 266 263 11 -2 4 3 250 257 1 4 2 4 202 202 6

3 1 1 122 118 2 -7 0 2 280 281 9 -3 6 2 250 252 3 -1 4 3 41 43 3 5 2 4 167 161 3

4 1 1 236 227 5 -6 0 2 569 541 4 -2 6 2 196 195 2 0 4 3 260 264 1 6 2 4 549 556 3

Table 1. Observed and calculated structure factors for FOLVIKITE 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

-6 3 4 32 57 32 5 1 5 115 114 3 -7 1 6 47 97 47 0 0 7 677 627 4 -1 0 8 357 365 1

-5 3 4 98 87 4 6 1 5 192 183 4 -6 1 6 0 37 1 1 0 7 215 226 1 0 0 8 889 903 1

-4 3 4 140 149 20 -7 2 5 290 283 5 -5 1 6 118 115 3 2 0 7 296 300 1 1 0 8 42 45 4

-3 3 4 126 123 2 -6 2 5 191 180 5 -4 1 6 159 156 20 3 0 7 117 115 4 2 0 8 480 480 1

-2 3 4 90 86 1 -5 2 5 406 404 2 -3 1 6 115 112 2 4 0 7 381 380 9 3 0 8 402 403 2

-1 3 4 99 91 1 -4 2 5 134 132 2 -2 1 6 88 67 1 5 0 7 185 202 5 4 0 8 443 450 9

0 3 4 151 155 1 -3 2 5 496 487 1 -1 1 6 200 194 1 6 0 7 241 236 6 5 0 8 86 99 8

1 3 4 119 106 1 -2 2 5 675 666 1 0 1 6 74 82 1 -6 1 7 193 183 5 6 0 8 369 384 4

2 3 4 67 65 2 -1 2 5 169 167 1 1 1 6 79 57 1 -5 1 7 87 82 4 -6 1 8 104 52 11

3 3 4 59 71 5 0 2 5 141 138 1 2 1 6 83 62 1 -4 1 7 229 198 9 -5 1 8 111 113 3

4 3 4 132 142 11 1 2 5 971 984 1 3 1 6 170 174 2 -3 1 7 158 170 1 -4 1 8 127 172 14

5 3 4 104 99 4 2 2 5 421 417 1 4 1 6 142 171 9 -2 1 7 152 140 1 -3 1 8 142 152 1

6 3 4 10 39 10 3 2 5 64 63 4 5 1 6 77 57 5 -1 1 7 72 47 1 -2 1 8 69 61 2

-6 4 4 382 381 4 4 2 5 250 257 4 6 1 6 0 55 1 0 1 7 235 237 1 -1 1 8 135 138 1

-5 4 4 209 201 3 5 2 5 600 613 2 -6 2 6 560 549 3 1 1 7 160 160 1 0 1 8 21 37 8

-4 4 4 421 447 9 6 2 5 36 53 36 -5 2 6 584 589 2 2 1 7 163 152 1 1 1 8 87 66 1

-3 4 4 117 114 3 -6 3 5 254 247 4 -4 2 6 294 302 7 3 1 7 161 157 2 2 1 8 52 48 3

-2 4 4 558 562 1 -5 3 5 115 107 4 -3 2 6 66 64 4 4 1 7 201 201 8 3 1 8 108 119 3

-1 4 4 381 383 1 -4 3 5 193 167 15 -2 2 6 561 558 1 5 1 7 88 85 4 4 1 8 135 158 15

0 4 4 1235 1232 1 -3 3 5 80 75 3 -1 2 6 987 996 1 6 1 7 197 182 5 5 1 8 67 57 6

1 4 4 41 48 3 -2 3 5 228 210 1 0 2 6 836 844 1 -6 2 7 26 61 26 6 1 8 37 38 36

2 4 4 407 409 1 -1 3 5 108 100 1 1 2 6 66 67 1 -5 2 7 68 70 6 -6 2 8 125 127 8

3 4 4 222 220 1 0 3 5 202 199 1 2 2 6 263 263 1 -4 2 7 336 322 5 -5 2 8 132 133 4

4 4 4 747 769 4 1 3 5 108 96 1 3 2 6 348 345 1 -3 2 7 340 337 1 -4 2 8 300 313 7

5 4 4 186 176 3 2 3 5 213 203 1 4 2 6 377 371 4 -2 2 7 186 189 1 -3 2 8 547 549 1

6 4 4 247 250 4 3 3 5 117 115 2 5 2 6 263 262 3 -1 2 7 503 513 1 -2 2 8 217 209 1

-6 5 4 0 48 1 4 3 5 167 150 7 6 2 6 125 132 7 0 2 7 181 192 1 -1 2 8 355 362 1

-5 5 4 99 84 5 5 3 5 77 76 5 -6 3 6 36 41 35 1 2 7 217 223 1 0 2 8 452 450 1

-4 5 4 120 180 22 6 3 5 213 208 5 -5 3 6 83 75 5 2 2 7 206 208 1 1 2 8 284 293 1

-3 5 4 108 127 6 -6 4 5 233 225 5 -4 3 6 120 128 16 3 2 7 546 551 1 2 2 8 429 434 1

-2 5 4 87 69 2 -5 4 5 124 110 4 -3 3 6 117 115 2 4 2 7 287 265 8 3 2 8 444 447 1

-1 5 4 166 157 1 -4 4 5 652 661 8 -2 3 6 70 65 2 5 2 7 212 203 3 4 2 8 117 147 20

0 5 4 21 45 13 -3 4 5 219 213 1 -1 3 6 120 113 1 6 2 7 67 61 18 5 2 8 247 250 3

1 5 4 63 54 3 -2 4 5 299 315 1 0 3 6 140 143 1 -6 3 7 207 207 5 -6 3 8 65 61 18

2 5 4 52 45 4 -1 4 5 259 275 1 1 3 6 103 83 1 -5 3 7 105 98 5 -5 3 8 85 65 6

3 5 4 171 180 3 0 4 5 562 567 1 2 3 6 69 52 2 -4 3 7 169 167 17 -4 3 8 69 168 69

4 5 4 92 144 17 1 4 5 24 35 7 3 3 6 71 73 4 -3 3 7 56 71 6 -3 3 8 146 156 2

5 5 4 70 73 7 2 4 5 148 151 1 4 3 6 114 143 9 -2 3 7 161 147 1 -2 3 8 79 72 2

-5 6 4 105 109 7 3 4 5 523 522 1 5 3 6 89 84 5 -1 3 7 107 98 1 -1 3 8 101 92 1

-4 6 4 218 240 18 4 4 5 488 479 4 6 3 6 29 64 28 0 3 7 231 238 1 0 3 8 64 62 2

-3 6 4 408 404 2 5 4 5 65 59 6 -6 4 6 258 255 4 1 3 7 129 114 14 1 3 8 80 72 2

-2 6 4 379 387 1 6 4 5 47 54 31 -5 4 6 18 41 17 2 3 7 148 134 1 2 3 8 61 48 3

-1 6 4 156 143 2 -5 5 5 67 64 8 -4 4 6 514 560 9 3 3 7 159 160 2 3 3 8 69 58 9

0 6 4 377 369 2 -4 5 5 180 169 12 -3 4 6 523 523 1 4 3 7 215 197 6 4 3 8 126 137 13

1 6 4 375 387 2 -3 5 5 184 182 3 -2 4 6 678 688 1 5 3 7 76 61 6 5 3 8 70 82 7

2 6 4 527 542 2 -2 5 5 133 128 2 -1 4 6 12 31 11 -6 4 7 62 57 19 -5 4 8 160 168 5

3 6 4 295 285 3 -1 5 5 55 54 4 0 4 6 469 478 1 -5 4 7 161 158 4 -4 4 8 361 351 13

4 6 4 190 170 10 0 5 5 152 156 1 1 4 6 273 281 1 -4 4 7 370 395 12 -3 4 8 76 82 7

-4 7 4 85 110 33 1 5 5 149 142 2 2 4 6 755 769 1 -3 4 7 30 28 30 -2 4 8 304 304 1

-3 7 4 66 83 12 2 5 5 131 123 2 3 4 6 26 29 26 -2 4 7 68 57 3 -1 4 8 315 323 1

-2 7 4 60 58 7 3 5 5 97 103 6 4 4 6 348 352 4 -1 4 7 143 142 1 0 4 8 693 695 1

-1 7 4 56 52 7 4 5 5 161 152 10 5 4 6 105 111 5 0 4 7 400 389 1 1 4 8 57 65 4

0 7 4 126 123 3 5 5 5 104 107 5 -5 5 6 95 103 6 1 4 7 213 216 1 2 4 8 373 375 2

1 7 4 85 85 5 -5 6 5 294 286 4 -4 5 6 113 129 20 2 4 7 203 207 1 3 4 8 360 357 2

2 7 4 59 45 7 -4 6 5 122 154 18 -3 5 6 98 104 6 3 4 7 69 88 8 4 4 8 361 371 6

3 7 4 0 35 1 -3 6 5 306 290 3 -2 5 6 77 54 4 4 4 7 296 308 6 5 4 8 74 79 8

-2 8 4 304 311 3 -2 6 5 295 301 2 -1 5 6 163 156 2 5 4 7 189 195 3 -5 5 8 103 111 6

-1 8 4 243 224 3 -1 6 5 136 132 3 0 5 6 18 4 18 -5 5 7 80 67 8 -4 5 8 0 126 1

0 8 4 609 605 2 0 6 5 59 55 6 1 5 6 53 55 5 -4 5 7 158 161 4 -3 5 8 104 132 6

1 8 4 46 39 11 1 6 5 509 506 2 2 5 6 60 57 5 -3 5 7 170 179 3 -2 5 8 56 33 6

2 8 4 245 246 4 2 6 5 197 190 3 3 5 6 174 182 3 -2 5 7 110 93 3 -1 5 8 114 107 3

-7 0 5 246 259 10 3 6 5 42 54 21 4 5 6 89 140 19 -1 5 7 40 44 8 0 5 8 0 10 1

-6 0 5 286 290 6 4 6 5 171 196 12 5 5 6 65 48 8 0 5 7 146 155 3 1 5 8 81 73 5

-5 0 5 143 136 3 -3 7 5 64 35 15 -4 6 6 225 231 10 1 5 7 154 144 3 2 5 8 49 32 7

-4 0 5 254 255 2 -2 7 5 150 138 4 -3 6 6 44 54 19 2 5 7 128 119 3 3 5 8 112 122 6

-3 0 5 233 226 1 -1 7 5 75 79 6 -2 6 6 344 341 2 3 5 7 118 134 5 4 5 8 108 134 17

-2 0 5 449 459 1 0 7 5 134 152 4 -1 6 6 515 516 2 4 5 7 149 148 11 -4 6 8 222 244 23

-1 0 5 422 434 1 1 7 5 60 62 7 0 6 6 515 517 2 -4 6 7 249 233 8 -3 6 8 399 396 2

0 0 5 1127 1137 1 2 7 5 154 141 4 1 6 6 104 96 4 -3 6 7 193 191 3 -2 6 8 165 152 3

1 0 5 116 111 1 3 7 5 49 81 16 2 6 6 192 184 3 -2 6 7 135 131 3 -1 6 8 196 203 3

2 0 5 209 215 1 -1 8 5 126 139 4 3 6 6 203 197 3 -1 6 7 350 347 12 0 6 8 324 324 2

3 0 5 736 729 1 0 8 5 213 225 3 4 6 6 279 272 8 0 6 7 144 134 4 1 6 8 224 220 3

4 0 5 627 629 7 1 8 5 64 51 8 -3 7 6 65 80 13 1 6 7 121 118 4 2 6 8 297 301 3

5 0 5 42 35 13 -7 0 6 191 190 13 -2 7 6 64 55 7 2 6 7 147 151 3 3 6 8 264 275 3

6 0 5 0 56 1 -6 0 6 281 279 6 -1 7 6 73 71 7 3 6 7 388 397 2 -2 7 8 65 64 8

-7 1 5 95 115 18 -5 0 6 19 5 19 0 7 6 102 114 5 4 6 7 189 207 15 -1 7 8 21 84 20

-6 1 5 210 212 5 -4 0 6 743 738 6 1 7 6 63 67 7 -3 7 7 40 38 39 0 7 8 57 66 10

-5 1 5 101 84 3 -3 0 6 742 730 1 2 7 6 49 50 10 -2 7 7 120 109 5 1 7 8 49 57 12

-4 1 5 207 207 11 -2 0 6 926 926 1 3 7 6 0 40 1 -1 7 7 89 88 6 -6 0 9 255 242 5

-3 1 5 178 185 1 -1 0 6 81 87 2 0 8 6 269 268 3 0 7 7 164 180 4 -5 0 9 42 50 17

-2 1 5 221 205 1 0 0 6 611 627 1 -6 0 7 66 60 23 1 7 7 41 47 12 -4 0 9 404 384 4

-1 1 5 81 62 1 1 0 6 382 393 1 -5 0 7 210 200 3 2 7 7 93 90 5 -3 0 9 398 397 1

0 1 5 231 226 1 2 0 6 1021 1032 1 -4 0 7 473 499 10 -6 0 8 437 458 3 -2 0 9 98 108 3

1 1 5 173 169 1 3 0 6 76 73 5 -3 0 7 68 67 5 -5 0 8 183 179 4 -1 0 9 104 104 3

2 1 5 203 193 1 4 0 6 433 443 5 -2 0 7 77 68 2 -4 0 8 429 434 5 0 0 9 123 105 2

3 1 5 124 112 2 5 0 6 119 132 6 -1 0 7 200 204 1 -3 0 8 110 104 3 1 0 9 77 81 3

4 1 5 184 182 5 6 0 6 439 467 4 0 0 7 533 527 1 -2 0 8 351 364 1 2 0 9 128 124 3

Table 1. Observed and calculated structure factors for FOLVIKITE 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 0 9 483 476 2 1 6 9 218 214 3 -2 5 10 24 21 23 -2 5 11 79 83 6 3 0 13 179 168 8

4 0 9 487 472 8 2 6 9 255 253 4 -1 5 10 134 128 3 -1 5 11 62 67 7 -4 1 13 139 122 26

5 0 9 93 78 9 -1 7 9 82 90 5 0 5 10 24 49 24 0 5 11 111 127 4 -3 1 13 72 70 9

-6 1 9 185 178 5 0 7 9 122 142 5 1 5 10 78 70 6 1 5 11 137 123 34 -2 1 13 134 125 3

-5 1 9 85 88 5 -6 0 10 380 387 4 2 5 10 46 31 11 2 5 11 90 93 7 -1 1 13 83 80 5

-4 1 9 228 185 13 -5 0 10 28 12 28 3 5 10 75 92 13 -1 6 11 78 77 6 0 1 13 165 174 3

-3 1 9 112 121 2 -4 0 10 545 556 4 -2 6 10 414 414 2 0 6 11 218 207 4 1 1 13 95 103 5

-2 1 9 161 152 1 -3 0 10 493 482 2 -1 6 10 304 308 3 -5 0 12 181 163 5 2 1 13 151 140 5

-1 1 9 78 65 2 -2 0 10 493 498 2 0 6 10 392 394 2 -4 0 12 278 253 13 3 1 13 114 121 12

0 1 9 237 240 1 -1 0 10 176 173 2 1 6 10 33 38 24 -3 0 12 172 158 5 -4 2 13 54 61 8

1 1 9 161 165 1 0 0 10 978 969 1 2 6 10 226 220 4 -2 0 12 488 501 3 -3 2 13 173 170 3

2 1 9 157 138 2 1 0 10 434 447 1 -5 0 11 282 281 4 -1 0 12 254 252 3 -2 2 13 28 32 24

3 1 9 103 105 5 2 0 10 578 584 2 -4 0 11 273 242 14 0 0 12 396 376 2 -1 2 13 329 307 12

4 1 9 171 182 9 3 0 10 222 218 5 -3 0 11 212 213 4 1 0 12 37 4 18 0 2 13 102 105 5

5 1 9 77 72 6 4 0 10 256 271 12 -2 0 11 140 132 4 2 0 12 274 272 4 1 2 13 261 258 4

-6 2 9 64 52 17 5 0 10 143 150 7 -1 0 11 233 229 3 3 0 12 196 205 6 2 2 13 121 111 6

-5 2 9 235 239 3 -6 1 10 51 38 24 0 0 11 507 485 1 4 0 12 297 301 7 3 2 13 212 204 6

-4 2 9 101 104 3 -5 1 10 92 97 5 1 0 11 161 163 3 -5 1 12 90 75 5 -3 3 13 39 48 23

-3 2 9 457 452 1 -4 1 10 141 156 13 2 0 11 128 119 5 -4 1 12 92 120 43 -2 3 13 117 106 4

-2 2 9 328 331 1 -3 1 10 100 105 4 3 0 11 166 165 7 -3 1 12 125 140 5 -1 3 13 0 100 1

-1 2 9 280 289 1 -2 1 10 71 61 2 4 0 11 282 285 11 -2 1 12 63 60 5 0 3 13 164 179 4

0 2 9 187 180 1 -1 1 10 130 130 1 -5 1 11 81 84 5 -1 1 12 107 110 3 1 3 13 78 79 9

1 2 9 346 357 1 0 1 10 46 50 4 -4 1 11 174 155 9 0 1 12 46 59 8 2 3 13 162 136 5

2 2 9 411 413 1 1 1 10 91 82 2 -3 1 11 86 95 5 1 1 12 75 72 5 -2 4 13 175 182 3

3 2 9 273 270 3 2 1 10 60 60 4 -2 1 11 102 97 3 2 1 12 50 41 10 -1 4 13 131 133 35

4 2 9 150 137 10 3 1 10 89 95 8 -1 1 11 82 78 3 3 1 12 10 67 10 0 4 13 48 55 12

5 2 9 327 329 3 4 1 10 146 133 13 0 1 11 156 161 2 4 1 12 34 19 28 1 4 13 136 147 6

-5 3 9 90 91 5 5 1 10 87 94 6 1 1 11 110 106 3 -4 2 12 329 331 8 -3 0 14 168 172 6

-4 3 9 223 160 20 -5 2 10 232 230 3 2 1 11 116 109 4 -3 2 12 474 471 2 -2 0 14 379 374 3

-3 3 9 59 60 9 -4 2 10 99 148 34 3 1 11 119 136 6 -2 2 12 116 113 4 -1 0 14 0 14 1

-2 3 9 183 172 1 -3 2 10 275 267 2 4 1 11 168 139 12 -1 2 12 342 311 11 0 0 14 533 533 4

-1 3 9 108 99 2 -2 2 10 592 596 1 -5 2 11 0 15 1 0 2 12 324 319 2 1 0 14 247 242 5

0 3 9 199 211 1 -1 2 10 494 510 1 -4 2 11 380 375 11 1 2 12 338 343 3 2 0 14 359 351 6

1 3 9 88 77 2 0 2 10 561 566 1 -3 2 11 521 516 2 2 2 12 195 187 4 -3 1 14 107 122 6

2 3 9 154 130 3 1 2 10 28 27 16 -2 2 11 102 115 3 3 2 12 157 167 7 -2 1 14 67 42 6

3 3 9 145 144 5 2 2 10 289 287 3 -1 2 11 71 70 5 -4 3 12 91 133 47 -1 1 14 125 108 26

4 3 9 198 192 8 3 2 10 517 515 3 0 2 11 355 358 1 -3 3 12 150 163 4 0 1 14 0 38 1

5 3 9 52 37 10 4 2 10 438 426 7 1 2 11 320 342 3 -2 3 12 72 80 5 1 1 14 51 61 11

-5 4 9 24 42 24 5 2 10 34 20 22 2 2 11 164 169 4 -1 3 12 150 92 26 2 1 14 41 45 23

-4 4 9 354 317 13 -5 3 10 57 43 8 3 2 11 474 467 4 0 3 12 33 52 16 -3 2 14 191 201 4

-3 4 9 361 353 2 -4 3 10 57 41 7 4 2 11 290 282 12 1 3 12 97 96 41 -2 2 14 379 376 2

-2 4 9 88 93 4 -3 3 10 135 144 4 -5 3 11 80 91 7 2 3 12 69 62 9 -1 2 14 272 266 14

-1 4 9 57 74 5 -2 3 10 91 85 3 -4 3 11 177 166 15 3 3 12 0 45 1 0 2 14 254 245 3

0 4 9 68 81 4 -1 3 10 77 70 3 -3 3 11 62 60 10 -3 4 12 133 130 5 1 2 14 150 143 5

1 4 9 99 97 4 0 3 10 35 53 8 -2 3 11 104 92 3 -2 4 12 397 404 2 2 2 14 334 323 4

2 4 9 101 99 4 1 3 10 92 90 4 -1 3 11 79 101 79 -1 4 12 206 226 21 -2 3 14 73 49 7

3 4 9 374 376 2 2 3 10 95 80 5 0 3 11 155 163 3 0 4 12 330 326 2 -1 3 14 40 86 40

4 4 9 397 390 6 3 3 10 66 59 16 1 3 11 69 57 7 1 4 12 0 28 1 0 3 14 12 50 12

-4 5 9 137 156 36 4 3 10 119 143 16 2 3 11 110 101 5 2 4 12 239 223 4 1 3 14 66 77 11

-3 5 9 119 123 5 -4 4 10 474 460 12 3 3 11 128 159 8 -2 5 12 41 29 13 -2 0 15 0 11 1

-2 5 9 107 97 4 -3 4 10 383 381 2 4 3 11 170 153 25 -1 5 12 155 123 32 -1 0 15 290 278 4

-1 5 9 63 56 5 -2 4 10 407 400 2 -4 4 11 265 209 20 0 5 12 44 71 13 0 0 15 90 50 9

0 5 9 170 179 2 -1 4 10 112 105 3 -3 4 11 130 140 5 1 5 12 63 113 63 1 0 15 0 5 1

1 5 9 178 169 3 0 4 10 755 759 1 -2 4 11 98 94 4 -4 0 13 277 271 13 -2 1 15 107 97 17

2 5 9 120 114 4 1 4 10 343 341 2 -1 4 11 178 176 2 -3 0 13 208 207 5 -1 1 15 75 88 6

3 5 9 53 77 14 2 4 10 465 464 2 0 4 11 374 366 2 -2 0 13 215 211 4 0 1 15 126 130 5

-3 6 9 271 278 3 3 4 10 144 144 7 1 4 11 154 157 3 -1 0 13 61 58 8

-2 6 9 202 200 3 4 4 10 245 237 8 2 4 11 94 84 6 0 0 13 114 72 6

-1 6 9 213 208 3 -4 5 10 40 28 14 3 4 11 133 135 9 1 0 13 150 151 5

0 6 9 150 135 3 -3 5 10 45 76 20 -3 5 11 106 92 7 2 0 13 92 102 8