

poppiite_fofc

Table 7. Observed and calculated structure factors for poppiite

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
4	0	0	1363	1381	27	16	6	0	1108	1066	29	-8	2	1	902	880	12	11	5	1	221	219	10	-25	1	2	219	226	8
6	0	0	0	65	1	18	6	0	100	23	99	-6	2	1	759	733	11	13	5	1	213	215	10	-23	1	2	0	31	1
8	0	0	661	667	14	20	6	0	42	25	42	-4	2	1	784	775	11	15	5	1	80	89	42	-21	1	2	36	23	36
10	0	0	489	472	11	1	7	0	62	47	61	-2	2	1	864	841	12	17	5	1	734	718	20	-19	1	2	412	408	7
12	0	0	3297	3199	72	3	7	0	18	55	18	0	2	1	1042	1014	15	19	5	1	323	347	16	-17	1	2	159	164	6
14	0	0	614	627	12	5	7	0	51	52	50	2	2	1	965	941	13	21	5	1	390	458	22	-15	1	2	292	292	10
16	0	0	431	474	11	7	7	0	54	7	32	4	2	1	431	398	7	23	5	1	115	145	49	-13	1	2	274	277	4
18	0	0	78	97	47	9	7	0	53	59	52	6	2	1	679	671	10	-20	6	1	409	371	24	-11	1	2	75	70	6
20	0	0	1447	1435	36	11	7	0	214	217	11	8	2	1	383	395	5	-18	6	1	166	174	25	-9	1	2	41	2	10
22	0	0	49	67	48	13	7	0	79	52	48	10	2	1	1124	1110	16	-16	6	1	499	533	14	-7	1	2	204	210	4
24	0	0	912	914	27	15	7	0	0	19	1	12	2	1	334	326	5	-14	6	1	22	54	21	-5	1	2	575	581	7
26	0	0	0	32	1	17	7	0	0	14	1	14	2	1	742	763	11	-12	6	1	644	637	15	-3	1	2	280	290	4
28	0	0	342	325	12	0	8	0	1853	1815	88	16	2	1	69	84	16	-10	6	1	160	184	9	-1	1	2	330	360	5
1	1	0	0	17	1	2	8	0	100	68	34	18	2	1	505	518	10	-8	6	1	486	481	10	1	1	2	428	449	6
3	1	0	0	7	1	4	8	0	389	391	16	20	2	1	382	387	8	-6	6	1	298	309	8	3	1	2	581	593	9
5	1	0	106	105	3	6	8	0	209	231	17	22	2	1	556	557	13	-4	6	1	443	438	13	5	1	2	541	558	8
7	1	0	213	209	6	8	8	0	509	515	19	24	2	1	65	20	41	-2	6	1	392	402	9	7	1	2	60	66	8
9	1	0	108	107	4	10	8	0	130	100	20	26	2	1	463	451	11	0	6	1	488	508	11	9	1	2	115	119	10
11	1	0	209	198	5	12	8	0	1083	1023	51	-27	3	1	785	785	17	2	6	1	481	488	14	11	1	2	0	12	1
13	1	0	186	189	10	1	9	0	68	54	67	-25	3	1	199	191	13	4	6	1	253	263	7	13	1	2	295	304	9
15	1	0	0	11	1	-28	0	1	410	397	12	-23	3	1	405	409	9	6	6	1	394	387	8	15	1	2	730	758	14

												poppiite_fofc																	
17	1	0	112	130	10	-26	0	1	198	182	14	-21	3	1	85	44	24	8	6	1	166	188	12	17	1	2	436	432	11
19	1	0	209	219	9	-24	0	1	654	615	15	-19	3	1	59	44	25	10	6	1	656	660	15	19	1	2	48	54	48
21	1	0	226	219	16	-22	0	1	185	167	11	-17	3	1	477	478	9	12	6	1	270	259	14	21	1	2	318	313	26
23	1	0	58	29	38	-20	0	1	704	694	22	-15	3	1	972	960	13	14	6	1	429	418	20	23	1	2	40	67	40
25	1	0	0	46	1	-18	0	1	0	26	1	-13	3	1	82	94	10	16	6	1	56	48	55	25	1	2	328	315	10
27	1	0	226	226	10	-16	0	1	344	357	10	-11	3	1	1202	1191	18	18	6	1	389	359	17	27	1	2	249	241	15
0	2	0	1126	1127	30	-14	0	1	325	341	11	-9	3	1	248	250	4	20	6	1	191	181	33	-28	2	2	175	209	17
2	2	0	1005	1021	16	-12	0	1	759	744	15	-7	3	1	854	857	12	-17	7	1	240	246	20	-26	2	2	0	12	1
4	2	0	2591	2514	36	-10	0	1	58	47	13	-5	3	1	228	226	4	-15	7	1	601	592	14	-24	2	2	100	92	17
6	2	0	1185	1137	16	-8	0	1	894	900	16	-3	3	1	534	524	8	-13	7	1	92	81	29	-22	2	2	1730	1666	26
8	2	0	2180	2145	28	-6	0	1	374	340	9	-1	3	1	439	439	9	-11	7	1	675	652	22	-20	2	2	316	306	8
10	2	0	1067	1081	14	-4	0	1	686	687	15	1	3	1	834	819	14	-9	7	1	171	160	12	-18	2	2	113	118	9
12	2	0	778	813	11	-2	0	1	327	330	7	3	3	1	401	402	6	-7	7	1	401	418	10	-16	2	2	543	521	7
14	2	0	1285	1288	19	0	0	1	386	414	13	5	3	1	1350	1340	20	-5	7	1	64	94	64	-14	2	2	814	796	10
16	2	0	1652	1623	27	2	0	1	551	559	12	7	3	1	314	315	5	-3	7	1	241	256	15	-12	2	2	554	546	7
18	2	0	153	168	9	4	0	1	540	526	11	9	3	1	425	424	7	-1	7	1	218	219	13	-10	2	2	2716	2655	37
20	2	0	0	17	1	6	0	1	540	514	13	11	3	1	411	404	7	1	7	1	427	437	16	-8	2	2	147	158	5
22	2	0	132	143	12	8	0	1	521	491	11	13	3	1	192	166	8	3	7	1	187	205	15	-6	2	2	566	566	8
24	2	0	604	602	10	10	0	1	79	70	15	15	3	1	191	185	8	5	7	1	585	588	14	-4	2	2	548	482	10
26	2	0	220	264	14	12	0	1	337	339	8	17	3	1	405	402	9	7	7	1	175	172	12	-2	2	2	1101	1109	21
1	3	0	62	53	3	14	0	1	875	843	22	19	3	1	446	465	10	9	7	1	244	267	11	0	2	2	1424	1471	28
3	3	0	34	21	10	16	0	1	70	40	23	21	3	1	563	597	12	11	7	1	309	291	11	2	2	2	2219	2202	44
5	3	0	49	57	12	18	0	1	397	424	11	23	3	1	0	46	1	13	7	1	102	90	32	4	2	2	2017	2019	40
7	3	0	43	61	12	20	0	1	234	245	20	25	3	1	447	444	32	15	7	1	163	139	22	6	2	2	1546	1548	30
9	3	0	58	43	9	22	0	1	230	248	17	-24	4	1	462	478	14	17	7	1	132	152	114	8	2	2	242	267	5
11	3	0	329	316	5	24	0	1	338	337	22	-22	4	1	93	128	33	-12	8	1	211	188	18	10	2	2	2241	2201	39

												poppiite_fofc																	
13	3	0	115	127	7	26	0	1	622	605	25	-20	4	1	532	554	12	-10	8	1	51	21	50	12	2	2	357	354	7
15	3	0	33	43	33	28	0	1	0	52	1	-18	4	1	81	88	22	-8	8	1	278	262	23	14	2	2	79	89	12
17	3	0	67	29	19	-27	1	1	817	807	16	-16	4	1	305	313	6	-6	8	1	47	41	47	16	2	2	698	683	13
19	3	0	133	125	9	-25	1	1	102	92	17	-14	4	1	222	233	6	-4	8	1	179	217	27	18	2	2	683	694	17
21	3	0	106	108	19	-23	1	1	425	422	7	-12	4	1	474	466	7	-2	8	1	53	99	52	20	2	2	76	71	27
23	3	0	129	153	18	-21	1	1	101	94	13	-10	4	1	37	14	31	0	8	1	53	68	52	22	2	2	989	982	23
25	3	0	0	17	1	-19	1	1	194	206	7	-8	4	1	581	590	8	2	8	1	111	84	30	24	2	2	0	30	1
0	4	0	4716	4634	156	-17	1	1	676	669	11	-6	4	1	180	182	6	4	8	1	140	149	36	26	2	2	0	9	1
2	4	0	149	153	6	-15	1	1	946	961	13	-4	4	1	436	436	7	6	8	1	228	222	24	-27	3	2	70	50	70
4	4	0	809	813	13	-13	1	1	539	523	7	-2	4	1	205	211	4	8	8	1	106	86	20	-25	3	2	313	309	13
6	4	0	131	133	5	-11	1	1	1367	1373	19	0	4	1	203	210	9	10	8	1	11	75	11	-23	3	2	0	34	1
8	4	0	776	779	11	-9	1	1	74	83	5	2	4	1	282	282	9	-28	0	2	84	67	53	-21	3	2	63	67	29
10	4	0	253	256	5	-7	1	1	1714	1703	22	4	4	1	332	338	6	-26	0	2	741	730	17	-19	3	2	529	520	9
12	4	0	2197	2156	32	-5	1	1	452	436	6	6	4	1	407	407	6	-24	0	2	670	674	15	-17	3	2	83	88	11
14	4	0	417	428	7	-3	1	1	432	458	5	8	4	1	257	265	5	-22	0	2	351	330	18	-15	3	2	254	253	5
16	4	0	317	327	7	-1	1	1	356	390	5	10	4	1	97	111	7	-20	0	2	502	490	11	-13	3	2	380	370	6
18	4	0	36	38	36	1	1	1	945	947	15	12	4	1	236	224	9	-18	0	2	1123	1114	24	-11	3	2	73	81	9
20	4	0	1197	1183	25	3	1	1	299	291	4	14	4	1	569	578	9	-16	0	2	298	334	8	-9	3	2	49	33	10
22	4	0	0	50	1	5	1	1	2613	2600	38	16	4	1	0	5	1	-14	0	2	543	557	10	-7	3	2	436	425	8
24	4	0	716	727	27	7	1	1	430	417	6	18	4	1	346	366	9	-12	0	2	974	996	16	-5	3	2	411	413	6
1	5	0	46	55	45	9	1	1	556	565	7	20	4	1	218	241	12	-10	0	2	508	510	11	-3	3	2	287	280	5
3	5	0	19	18	19	11	1	1	83	88	7	22	4	1	206	219	15	-8	0	2	2760	2733	53	-1	3	2	224	223	4
5	5	0	46	53	18	13	1	1	226	219	5	24	4	1	253	280	18	-6	0	2	3001	2987	58	1	3	2	405	398	8
7	5	0	198	194	7	15	1	1	172	161	8	-23	5	1	255	296	17	-4	0	2	1106	1146	29	3	3	2	389	400	7
9	5	0	145	137	10	17	1	1	731	737	13	-21	5	1	79	85	79	-2	0	2	246	251	8	5	3	2	486	488	9
11	5	0	0	18	1	19	1	1	512	525	9	-19	5	1	225	248	13	0	0	2	956	976	23	7	3	2	161	159	6

												poppiite_fofc																	
13	5	0	85	110	15	21	1	1	621	632	11	-17	5	1	523	524	16	2	0	2	2250	2254	55	9	3	2	25	24	25
15	5	0	53	22	52	23	1	1	72	88	33	-15	5	1	559	584	11	4	0	2	1333	1389	33	11	3	2	111	114	8
17	5	0	145	152	16	25	1	1	501	522	11	-13	5	1	479	486	10	6	0	2	652	647	16	13	3	2	377	385	7
19	5	0	182	219	17	27	1	1	84	99	37	-11	5	1	780	775	13	8	0	2	332	345	10	15	3	2	611	599	12
21	5	0	203	219	18	-28	2	1	373	387	14	-9	5	1	65	52	15	10	0	2	1158	1144	28	17	3	2	335	334	19
23	5	0	94	58	60	-26	2	1	32	38	31	-7	5	1	1269	1246	22	12	0	2	786	821	19	19	3	2	107	114	25
0	6	0	575	557	28	-24	2	1	746	742	11	-5	5	1	334	317	6	14	0	2	2453	2477	53	21	3	2	278	285	17
2	6	0	491	459	17	-22	2	1	90	111	18	-3	5	1	132	132	5	16	0	2	680	672	26	23	3	2	0	27	1
4	6	0	1325	1300	36	-20	2	1	554	551	9	-1	5	1	528	531	11	18	0	2	720	729	21	25	3	2	361	374	12
6	6	0	0	35	1	-18	2	1	387	402	9	1	5	1	461	465	10	20	0	2	424	458	21	-24	4	2	558	553	14
8	6	0	988	988	20	-16	2	1	790	807	12	3	5	1	106	94	9	22	0	2	245	267	15	-22	4	2	281	278	20
10	6	0	578	556	12	-14	2	1	111	67	13	5	5	1	1687	1674	31	24	0	2	457	475	16	-20	4	2	387	366	10
12	6	0	250	242	8	-12	2	1	1246	1235	17	7	5	1	288	292	7	26	0	2	1002	939	30	-18	4	2	927	930	18
14	6	0	698	699	16	-10	2	1	204	192	4	9	5	1	416	411	8	-27	1	2	38	33	37	-16	4	2	120	140	11

Table 7. observed and calculated structure factors for poppiite

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s						
-14	4	2	504	496	8	0	8	2	278	300	22	26	2	3	127	66	26	6	6	3	168	163	14	19	1	4	79	48	25
-12	4	2	625	610	9	2	8	2	507	539	27	-25	3	3	85	72	38	8	6	3	54	40	54	21	1	4	61	73	61
-10	4	2	265	256	4	4	8	2	180	198	29	-23	3	3	37	11	36	10	6	3	277	267	12	23	1	4	0	14	1
-8	4	2	1373	1357	21	6	8	2	614	602	17	-21	3	3	275	277	9	12	6	3	69	14	43	25	1	4	376	385	11
-6	4	2	2095	2096	33	8	8	2	212	244	13	-19	3	3	103	88	17	14	6	3	162	144	20	-26	2	4	33	22	33
-4	4	2	742	718	13	10	8	2	109	152	43	-17	3	3	929	901	13	16	6	3	449	420	17	-24	2	4	140	144	14
-2	4	2	288	283	11	-28	0	3	69	54	69	-15	3	3	300	300	5	18	6	3	119	83	63	-22	2	4	38	95	37
0	4	2	556	579	11	-26	0	3	578	591	14	-13	3	3	1135	1108	15	-17	7	3	598	564	31	-20	2	4	1244	1195	19

poppiite_fofc

2	4	2	1268	1265	22	-24	0	3	126	124	18	-11	3	3	211	214	4	-15	7	3	147	178	29	-18	2	4	168	156	7
4	4	2	651	650	12	-22	0	3	678	685	15	-9	3	3	64	76	14	-13	7	3	728	713	38	-16	2	4	1444	1422	20
6	4	2	869	862	14	-20	0	3	31	44	30	-7	3	3	247	243	5	-11	7	3	129	137	21	-14	2	4	197	211	5
8	4	2	303	276	7	-18	0	3	499	509	18	-5	3	3	994	986	18	-9	7	3	91	107	26	-12	2	4	334	335	5
10	4	2	599	583	11	-16	0	3	211	241	14	-3	3	3	358	342	8	-7	7	3	43	11	43	-10	2	4	422	421	7
12	4	2	574	573	10	-14	0	3	1084	1095	19	-1	3	3	1789	1754	32	-5	7	3	540	526	18	-8	2	4	2970	2951	48
14	4	2	1799	1778	32	-12	0	3	549	543	17	1	3	3	130	146	10	-3	7	3	209	207	10	-6	2	4	136	83	7
16	4	2	462	452	19	-10	0	3	1160	1154	22	3	3	3	600	624	12	-1	7	3	929	916	25	-4	2	4	2019	1984	32
18	4	2	555	592	12	-8	0	3	311	317	6	5	3	3	72	78	11	1	7	3	71	12	47	-2	2	4	482	507	8
20	4	2	356	399	16	-6	0	3	718	699	14	7	3	3	42	25	41	3	7	3	297	285	10	0	2	4	853	839	18
22	4	2	123	162	26	-4	0	3	403	388	10	9	3	3	206	197	8	5	7	3	0	48	1	2	2	4	694	719	15
24	4	2	348	392	13	-2	0	3	1556	1570	33	11	3	3	637	636	12	7	7	3	67	23	62	4	2	4	3804	3751	66
-23	5	2	0	14	1	0	0	3	1586	1565	39	13	3	3	308	302	8	9	7	3	198	190	17	6	2	4	167	126	9
-21	5	2	0	18	1	2	0	3	790	779	23	15	3	3	738	739	22	11	7	3	424	416	13	8	2	4	911	919	16
-19	5	2	155	169	18	4	0	3	245	246	7	17	3	3	0	25	1	13	7	3	144	140	32	10	2	4	451	476	8
-17	5	2	144	165	19	6	0	3	317	301	10	19	3	3	425	445	12	15	7	3	390	389	19	12	2	4	711	707	12
-15	5	2	162	168	10	8	0	3	1068	1051	26	21	3	3	186	189	20	-12	8	3	192	199	24	14	2	4	109	89	12
-13	5	2	131	136	11	10	0	3	1082	1112	26	23	3	3	0	85	1	-10	8	3	390	419	34	16	2	4	1362	1387	28
-11	5	2	42	50	41	12	0	3	1013	1043	25	25	3	3	50	9	49	-8	8	3	82	72	39	18	2	4	32	57	31
-9	5	2	49	58	31	14	0	3	109	106	59	-24	4	3	100	119	37	-6	8	3	311	289	11	20	2	4	644	636	14
-7	5	2	101	100	18	16	0	3	663	664	20	-22	4	3	534	552	13	-4	8	3	131	121	14	22	2	4	59	81	59
-5	5	2	414	413	12	18	0	3	0	31	1	-20	4	3	68	82	52	-2	8	3	544	539	29	24	2	4	997	964	21
-3	5	2	112	108	8	20	0	3	955	950	28	-18	4	3	389	412	9	0	8	3	528	502	14	-25	3	4	81	114	45
-1	5	2	165	145	6	22	0	3	645	619	20	-16	4	3	131	139	11	2	8	3	267	279	10	-23	3	4	144	143	16
1	5	2	131	123	9	24	0	3	354	340	18	-14	4	3	886	886	13	4	8	3	104	112	22	-21	3	4	275	267	7
3	5	2	339	348	9	26	0	3	204	232	25	-12	4	3	415	418	7	6	8	3	168	148	17	-19	3	4	262	250	7

poppiite_fofc

5	5	2	342	336	7	-27	1	3	89	84	27	-10	4	3	814	816	12	8	8	3	414	414	13	-17	3	4	168	164	10
7	5	2	137	136	11	-25	1	3	53	48	53	-8	4	3	49	12	19	10	8	3	384	373	47	-15	3	4	288	296	6
9	5	2	42	57	42	-23	1	3	79	63	20	-6	4	3	550	558	9	-28	0	4	107	86	36	-13	3	4	116	115	7
11	5	2	76	81	19	-21	1	3	176	188	14	-4	4	3	285	298	6	-26	0	4	97	80	33	-11	3	4	139	150	5
13	5	2	99	99	16	-19	1	3	40	34	40	-2	4	3	1043	1067	22	-24	0	4	861	822	19	-9	3	4	781	787	12
15	5	2	531	536	13	-17	1	3	966	938	14	0	4	3	1011	1018	17	-22	0	4	63	88	46	-7	3	4	900	898	17
17	5	2	309	346	13	-15	1	3	212	232	8	2	4	3	549	556	10	-20	0	4	635	639	18	-5	3	4	288	298	7
19	5	2	0	2	1	-13	1	3	1025	1012	13	4	4	3	244	246	6	-18	0	4	368	387	11	-3	3	4	23	4	22
21	5	2	257	230	29	-11	1	3	30	32	29	6	4	3	289	296	6	-16	0	4	540	528	26	-1	3	4	481	484	9
-20	6	2	142	182	36	-9	1	3	255	227	4	8	4	3	783	792	14	-14	0	4	77	105	16	1	3	4	138	128	7
-18	6	2	110	127	41	-7	1	3	830	832	12	10	4	3	761	785	14	-12	0	4	2397	2349	46	3	3	4	633	636	14
-16	6	2	359	380	19	-5	1	3	930	937	15	12	4	3	808	824	15	-10	0	4	785	774	15	5	3	4	995	1004	19
-14	6	2	662	637	15	-3	1	3	45	24	14	14	4	3	52	59	52	-8	0	4	985	956	21	7	3	4	369	368	8
-12	6	2	218	220	10	-1	1	3	1800	1808	31	16	4	3	484	472	13	-6	0	4	1501	1539	40	9	3	4	173	178	7
-10	6	2	1438	1409	33	1	1	3	594	609	10	18	4	3	77	39	55	-4	0	4	1836	1816	40	11	3	4	130	126	14
-8	6	2	62	35	36	3	1	3	1257	1246	20	20	4	3	778	777	23	-2	0	4	1380	1354	30	13	3	4	122	124	14
-6	6	2	114	129	19	5	1	3	542	549	8	22	4	3	488	469	28	0	0	4	1626	1637	40	15	3	4	363	348	14
-4	6	2	38	43	37	7	1	3	214	208	5	-23	5	3	100	123	53	2	0	4	832	774	27	17	3	4	251	271	15
-2	6	2	1146	1139	31	9	1	3	67	89	12	-21	5	3	42	82	41	4	0	4	360	352	12	19	3	4	74	41	62
0	6	2	436	420	12	11	1	3	527	543	9	-19	5	3	125	126	24	6	0	4	1684	1694	41	21	3	4	73	20	73
2	6	2	974	959	26	13	1	3	479	472	10	-17	5	3	649	644	16	8	0	4	2470	2463	61	23	3	4	62	26	61
4	6	2	603	586	16	15	1	3	1028	1033	21	-15	5	3	59	54	50	10	0	4	390	388	10	-24	4	4	658	710	24
6	6	2	710	716	16	17	1	3	113	101	12	-13	5	3	514	504	10	12	0	4	1071	1125	31	-22	4	4	22	86	22
8	6	2	272	267	10	19	1	3	583	591	12	-11	5	3	54	83	34	14	0	4	0	66	1	-20	4	4	481	472	12
10	6	2	1482	1466	33	21	1	3	0	54	1	-9	5	3	265	282	9	16	0	4	733	757	22	-18	4	4	296	306	9
12	6	2	161	150	14	23	1	3	70	57	45	-7	5	3	494	480	12	18	0	4	674	688	21	-16	4	4	381	367	9

poppiite_fofc

14	6	2	54	51	53	25	1	3	0	8	1	-5	5	3	448	446	11	20	0	4	1065	1031	31	-14	4	4	48	44	48
16	6	2	354	367	33	-26	2	3	57	36	57	-3	5	3	170	190	7	22	0	4	0	18	1	-12	4	4	1826	1778	26
18	6	2	505	501	25	-24	2	3	144	168	13	-1	5	3	808	801	19	24	0	4	54	56	54	-10	4	4	569	543	9
20	6	2	143	23	48	-22	2	3	525	519	8	1	5	3	369	373	11	26	0	4	62	47	62	-8	4	4	484	484	8
-17	7	2	0	29	1	-20	2	3	626	598	10	3	5	3	910	908	18	-27	1	4	224	234	11	-6	4	4	830	828	15
-15	7	2	135	162	21	-18	2	3	697	697	10	5	5	3	371	372	15	-25	1	4	178	173	10	-4	4	4	1154	1168	21
-13	7	2	240	228	14	-16	2	3	158	153	5	7	5	3	264	267	7	-23	1	4	228	211	7	-2	4	4	378	400	8
-11	7	2	78	65	40	-14	2	3	150	158	6	9	5	3	264	255	9	-21	1	4	194	185	7	0	4	4	1296	1280	23
-9	7	2	16	35	16	-12	2	3	425	411	6	11	5	3	275	296	8	-19	1	4	189	194	6	2	4	4	289	307	6
-7	7	2	318	309	36	-10	2	3	434	432	6	13	5	3	359	363	9	-17	1	4	262	267	5	4	4	4	88	101	12
-5	7	2	223	214	9	-8	2	3	34	19	25	15	5	3	840	831	22	-15	1	4	111	113	7	6	4	4	1016	999	18
-3	7	2	182	188	16	-6	2	3	732	726	11	17	5	3	153	159	23	-13	1	4	160	175	6	8	4	4	1742	1719	31
-1	7	2	49	62	41	-4	2	3	188	175	6	19	5	3	476	490	21	-11	1	4	170	172	5	10	4	4	405	390	8
1	7	2	200	197	10	-2	2	3	390	403	6	21	5	3	28	55	27	-9	1	4	852	846	14	12	4	4	840	846	15
3	7	2	178	168	10	0	2	3	589	598	11	-20	6	3	324	374	19	-7	1	4	1002	1004	16	14	4	4	11	48	10
5	7	2	309	304	10	2	2	3	206	189	4	-18	6	3	469	455	13	-5	1	4	437	448	7	16	4	4	516	537	16
7	7	2	107	135	53	4	2	3	846	850	16	-16	6	3	105	124	23	-3	1	4	258	256	7	18	4	4	520	535	20
9	7	2	50	44	50	6	2	3	239	239	5	-14	6	3	32	16	32	-1	1	4	708	724	12	20	4	4	855	840	68
11	7	2	85	107	38	8	2	3	61	66	11	-12	6	3	270	254	10	1	1	4	311	313	7	22	4	4	23	50	23
13	7	2	263	245	17	10	2	3	357	344	6	-10	6	3	221	223	10	3	1	4	827	836	14	-23	5	4	179	169	29
15	7	2	317	312	37	12	2	3	40	21	39	-8	6	3	0	16	1	5	1	4	1143	1139	18	-21	5	4	106	54	41
-12	8	2	328	333	22	14	2	3	227	254	6	-6	6	3	367	371	17	7	1	4	483	470	8	-19	5	4	50	79	49
-10	8	2	11	75	10	16	2	3	682	697	14	-4	6	3	57	97	57	9	1	4	170	183	5	-17	5	4	248	264	12
-8	8	2	500	497	14	18	2	3	146	152	11	-2	6	3	130	133	12	11	1	4	154	160	6	-15	5	4	65	4	39
-6	8	2	1119	1139	54	20	2	3	74	36	29	0	6	3	280	253	9	13	1	4	39	29	39	-13	5	4	118	117	15
-4	8	2	406	434	24	22	2	3	431	436	10	2	6	3	102	115	19	15	1	4	509	511	11	-11	5	4	108	119	18

poppiite_fofc

-2 8 2 208 212 25 24 2 3 369 357 11 4 6 3 372 405 11 17 1 4 222 226 12 -9 5 4 452 440 11

Table 7. Observed and calculated structure factors for poppiite

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	5	4	492	503	12	-21	1	5	140	125	10	2	4	5	464	458	9	8	0	6	731	739	34	-12	4	6	48	66	48
-5	5	4	305	305	8	-19	1	5	437	442	8	4	4	5	596	586	13	10	0	6	1109	1114	32	-10	4	6	720	720	16
-3	5	4	131	143	12	-17	1	5	86	72	13	6	4	5	492	472	13	12	0	6	356	338	12	-8	4	6	82	55	22
-1	5	4	260	275	9	-15	1	5	82	86	12	8	4	5	298	305	8	14	0	6	1110	1067	33	-6	4	6	1168	1146	25
1	5	4	172	174	9	-13	1	5	352	340	7	10	4	5	0	9	1	16	0	6	306	301	12	-4	4	6	12	70	11
3	5	4	553	538	13	-11	1	5	750	766	13	12	4	5	164	172	13	18	0	6	172	193	17	-2	4	6	418	414	20
5	5	4	608	597	14	-9	1	5	446	445	12	14	4	5	668	657	15	20	0	6	216	235	43	0	4	6	171	159	9
7	5	4	246	262	7	-7	1	5	526	523	9	16	4	5	330	313	12	22	0	6	728	751	37	2	4	6	1553	1519	30
9	5	4	121	124	15	-5	1	5	36	19	35	18	4	5	160	159	22	-25	1	6	113	118	21	4	4	6	431	428	10
11	5	4	109	100	18	-3	1	5	973	968	15	20	4	5	377	381	34	-23	1	6	199	188	14	6	4	6	1037	1026	23
13	5	4	0	10	1	-1	1	5	155	158	5	-21	5	5	61	24	61	-21	1	6	149	156	10	8	4	6	428	412	19
15	5	4	449	474	17	1	1	5	46	59	17	-19	5	5	262	288	15	-19	1	6	299	308	7	10	4	6	841	841	21
17	5	4	69	132	69	3	1	5	328	333	9	-17	5	5	80	44	46	-17	1	6	549	552	17	12	4	6	312	290	12
19	5	4	0	45	1	5	1	5	72	82	10	-15	5	5	149	148	22	-15	1	6	329	339	8	14	4	6	932	930	20
-20	6	4	790	751	22	7	1	5	96	82	9	-13	5	5	241	252	12	-13	1	6	331	340	10	16	4	6	225	202	17
-18	6	4	14	73	13	9	1	5	1086	1105	19	-11	5	5	549	533	13	-11	1	6	116	102	9	18	4	6	183	175	24
-16	6	4	962	923	26	11	1	5	327	315	8	-9	5	5	57	72	51	-9	1	6	89	103	17	20	4	6	134	179	42
-14	6	4	52	31	52	13	1	5	380	381	9	-7	5	5	322	314	9	-7	1	6	228	232	7	-21	5	6	154	181	44
-12	6	4	90	106	26	15	1	5	156	159	10	-5	5	5	0	10	1	-5	1	6	221	222	6	-19	5	6	211	253	33
-10	6	4	109	126	21	17	1	5	249	232	14	-3	5	5	468	463	13	-3	1	6	366	384	9	-17	5	6	352	366	14

																								poppiite_fofc					
-8	6	4	1591	1511	37	19	1	5	89	76	24	-1	5	5	190	186	15	-1	1	6	360	351	7	-15	5	6	315	342	17
-6	6	4	85	17	22	21	1	5	159	171	15	1	5	5	67	67	26	1	1	6	333	351	7	-13	5	6	184	202	15
-4	6	4	999	973	27	23	1	5	443	409	11	3	5	5	44	47	44	3	1	6	510	495	9	-11	5	6	140	141	17
-2	6	4	302	299	9	-26	2	5	67	93	66	5	5	5	0	14	1	5	1	6	119	125	8	-9	5	6	85	78	27
0	6	4	582	575	14	-24	2	5	940	903	16	7	5	5	107	102	20	7	1	6	485	493	9	-7	5	6	136	152	14
2	6	4	415	420	12	-22	2	5	441	433	8	9	5	5	568	568	17	9	1	6	614	635	13	-5	5	6	137	144	13
4	6	4	1924	1866	51	-20	2	5	568	566	11	11	5	5	277	283	11	11	1	6	146	125	9	-3	5	6	358	371	20
6	6	4	112	100	19	-18	2	5	350	342	8	13	5	5	354	350	31	13	1	6	537	535	11	-1	5	6	272	278	21
8	6	4	431	429	19	-16	2	5	727	705	13	15	5	5	0	11	1	15	1	6	485	490	22	1	5	6	145	137	13
10	6	4	141	120	19	-14	2	5	266	287	6	17	5	5	187	195	45	17	1	6	77	2	28	3	5	6	340	334	10
12	6	4	585	578	14	-12	2	5	881	877	14	19	5	5	56	27	56	19	1	6	587	579	13	5	5	6	127	112	18
14	6	4	0	123	1	-10	2	5	875	855	16	-18	6	5	228	225	21	21	1	6	387	405	10	7	5	6	286	279	12
18	6	4	0	22	1	-8	2	5	714	713	12	-16	6	5	417	423	16	23	1	6	0	22	1	9	5	6	506	484	15
-15	7	4	222	269	20	-6	2	5	141	144	8	-14	6	5	94	134	33	-26	2	6	320	327	9	11	5	6	154	140	22
-13	7	4	114	66	31	-4	2	5	1223	1217	18	-12	6	5	638	600	18	-24	2	6	119	150	19	13	5	6	365	356	16
-11	7	4	42	75	42	-2	2	5	812	827	16	-10	6	5	452	438	12	-22	2	6	537	540	9	15	5	6	353	373	28
-9	7	4	446	401	24	0	2	5	681	697	15	-8	6	5	333	329	10	-20	2	6	208	212	10	17	5	6	0	77	1
-7	7	4	505	496	18	2	2	5	286	299	7	-6	6	5	87	105	22	-18	2	6	197	185	11	-18	6	6	124	132	47
-5	7	4	121	140	24	4	2	5	207	202	7	-4	6	5	670	651	18	-16	2	6	640	609	13	-16	6	6	313	349	13
-3	7	4	99	97	24	6	2	5	479	488	8	-2	6	5	480	481	12	-14	2	6	977	951	20	-14	6	6	652	638	23
-1	7	4	209	204	19	8	2	5	922	926	16	0	6	5	439	435	19	-12	2	6	360	351	10	-12	6	6	274	291	13
1	7	4	38	4	37	10	2	5	954	961	16	2	6	5	177	178	20	-10	2	6	314	322	11	-10	6	6	309	312	12
3	7	4	330	315	19	12	2	5	285	283	14	4	6	5	56	79	55	-8	2	6	563	578	10	-8	6	6	365	398	15
5	7	4	561	554	16	14	2	5	32	20	31	6	6	5	216	226	13	-6	2	6	877	873	15	-6	6	6	446	445	14
7	7	4	148	156	19	16	2	5	210	187	14	8	6	5	575	557	20	-4	2	6	1839	1834	30	-4	6	6	900	883	21
9	7	4	103	108	40	18	2	5	759	774	16	10	6	5	574	599	32	-2	2	6	1889	1877	41	-2	6	6	1113	1092	26

																								poppiite_fofc					
11	7	4	104	101	46	20	2	5	237	250	16	12	6	5	148	133	23	0	2	6	627	622	12	0	6	6	413	410	15
13	7	4	125	132	45	22	2	5	609	596	13	16	6	5	211	170	30	2	2	6	590	569	10	2	6	6	184	164	20
-10	8	4	330	342	17	24	2	5	146	188	30	-15	7	5	165	169	28	4	2	6	110	102	19	4	6	6	133	167	24
-8	8	4	170	140	19	-25	3	5	138	141	24	-13	7	5	157	155	25	6	2	6	734	720	14	6	6	6	469	464	19
-6	8	4	360	381	16	-23	3	5	829	797	17	-11	7	5	402	375	41	8	2	6	944	922	18	8	6	6	468	497	18
-4	8	4	576	554	27	-21	3	5	251	262	9	-9	7	5	458	463	14	10	2	6	902	887	19	10	6	6	566	567	38
-2	8	4	0	46	1	-19	3	5	479	454	12	-7	7	5	407	381	16	12	2	6	383	387	9	12	6	6	317	297	23
0	8	4	743	741	20	-17	3	5	68	83	20	-5	7	5	69	76	68	14	2	6	110	114	15	-13	7	6	277	275	26
2	8	4	46	29	45	-15	3	5	134	139	8	-3	7	5	835	793	28	16	2	6	707	696	15	-11	7	6	0	69	1
4	8	4	35	46	35	-13	3	5	259	240	10	-1	7	5	56	25	55	18	2	6	931	910	21	-9	7	6	0	43	1
6	8	4	447	456	14	-11	3	5	666	655	11	1	7	5	53	52	52	20	2	6	591	593	17	-7	7	6	158	181	32
8	8	4	941	882	32	-9	3	5	699	714	12	3	7	5	460	469	17	22	2	6	281	298	16	-5	7	6	128	147	25
-26	0	5	87	56	44	-7	3	5	596	593	10	5	7	5	172	137	36	-25	3	6	157	173	23	-3	7	6	78	102	57
-24	0	5	69	89	59	-5	3	5	76	62	9	7	7	5	0	55	1	-23	3	6	105	112	28	-1	7	6	257	256	14
-22	0	5	369	383	10	-3	3	5	1254	1242	18	9	7	5	832	821	50	-21	3	6	32	52	32	1	7	6	219	231	15
-20	0	5	884	841	23	-1	3	5	18	17	18	11	7	5	74	80	74	-19	3	6	249	239	8	3	7	6	278	257	16
-18	0	5	76	85	23	1	3	5	35	39	34	-8	8	5	365	373	67	-17	3	6	542	534	11	5	7	6	127	108	35
-16	0	5	940	960	23	3	3	5	690	693	15	-6	8	5	227	239	19	-15	3	6	170	162	8	7	7	6	246	251	19
-14	0	5	0	24	1	5	3	5	208	192	8	-4	8	5	122	114	27	-13	3	6	402	382	8	9	7	6	265	260	20
-12	0	5	363	368	10	7	3	5	0	13	1	-2	8	5	108	124	31	-11	3	6	28	34	27	-4	8	6	56	80	55
-10	0	5	291	292	8	9	3	5	1253	1255	24	0	8	5	157	126	20	-9	3	6	44	9	43	-2	8	6	198	208	23
-8	0	5	1000	987	27	11	3	5	197	188	9	2	8	5	212	207	21	-7	3	6	224	226	7	0	8	6	139	159	43
-6	0	5	529	530	18	13	3	5	235	240	12	4	8	5	276	293	18	-5	3	6	233	237	6	-26	0	7	623	631	17
-4	0	5	450	460	10	15	3	5	307	315	13	6	8	5	273	237	28	-3	3	6	222	212	10	-24	0	7	109	134	35
-2	0	5	9	20	9	17	3	5	176	184	32	-26	0	6	442	408	14	-1	3	6	350	344	14	-22	0	7	0	31	1
0	0	5	598	589	15	19	3	5	151	125	22	-24	0	6	90	30	34	1	3	6	365	370	12	-20	0	7	354	344	14

												poppiite_fofc																	
2	0	5	687	692	17	21	3	5	299	294	14	-22	0	6	90	120	28	3	3	6	442	438	9	-18	0	7	366	396	13
4	0	5	817	835	24	23	3	5	316	330	16	-20	0	6	102	126	20	5	3	6	0	27	1	-16	0	7	392	389	13
6	0	5	636	654	16	-24	4	5	72	37	72	-18	0	6	1716	1676	49	7	3	6	445	437	18	-14	0	7	1165	1149	34
8	0	5	482	467	12	-22	4	5	332	351	14	-16	0	6	384	385	21	9	3	6	483	488	11	-12	0	7	297	313	11
10	0	5	0	48	1	-20	4	5	703	657	18	-14	0	6	721	696	21	11	3	6	53	69	52	-10	0	7	384	379	21
12	0	5	234	271	11	-18	4	5	50	86	49	-12	0	6	77	60	24	13	3	6	492	468	16	-8	0	7	793	799	38
14	0	5	804	806	24	-16	4	5	711	692	15	-10	0	6	754	737	19	15	3	6	452	426	13	-6	0	7	27	82	26
16	0	5	405	407	13	-14	4	5	77	53	34	-8	0	6	72	31	30	17	3	6	128	101	25	-4	0	7	230	236	14
18	0	5	222	225	13	-12	4	5	278	289	11	-6	0	6	1484	1490	29	19	3	6	610	583	16	-2	0	7	1075	1079	31
20	0	5	477	470	16	-10	4	5	269	259	7	-4	0	6	93	108	34	21	3	6	363	343	18	0	0	7	521	512	16
22	0	5	220	212	38	-8	4	5	724	719	14	-2	0	6	577	583	14	-22	4	6	100	139	61	2	0	7	273	286	10
24	0	5	227	190	19	-6	4	5	431	427	9	0	0	6	185	195	9	-20	4	6	135	115	28	4	0	7	652	666	20
-27	1	5	179	170	14	-4	4	5	270	280	10	2	0	6	1823	1806	45	-18	4	6	1389	1334	40	6	0	7	42	25	41
-25	1	5	148	149	14	-2	4	5	59	82	42	4	0	6	589	606	38	-16	4	6	263	255	33	8	0	7	581	619	18
-23	1	5	963	920	16	0	4	5	383	363	8	6	0	6	1397	1396	41	-14	4	6	494	518	20	10	0	7	244	261	23

□ Table 7. Observed and calculated structure factors for poppiite

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
12	0	7	101	112	23	2	4	7	199	201	11	1	1	8	100	109	12	-14	6	8	28	125	27	-7	3	9	105	103	16
14	0	7	204	203	14	4	4	7	527	486	12	3	1	8	224	248	7	-12	6	8	577	576	17	-5	3	9	146	146	11
16	0	7	138	107	21	6	4	7	25	42	25	5	1	8	233	231	14	-10	6	8	309	350	14	-3	3	9	108	130	15
18	0	7	201	182	23	8	4	7	505	499	19	7	1	8	351	354	10	-8	6	8	1015	977	34	-1	3	9	235	232	9
20	0	7	578	550	19	10	4	7	246	233	12	9	1	8	646	653	14	-6	6	8	39	24	38	1	3	9	207	225	20
22	0	7	255	252	28	12	4	7	96	72	36	11	1	8	256	253	15	-4	6	8	337	352	14	3	3	9	0	29	1
-25	1	7	343	364	10	14	4	7	190	197	18	13	1	8	92	109	22	-2	6	8	0	41	1	5	3	9	223	209	17

poppiite_fofc

-23	1	7	0	19	1	16	4	7	8	66	8	15	1	8	115	97	19	0	6	8	674	695	24	7	3	9	243	248	13
-21	1	7	122	112	18	18	4	7	114	136	52	17	1	8	193	201	13	2	6	8	99	194	50	9	3	9	172	169	18
-19	1	7	62	97	50	-19	5	7	72	117	72	19	1	8	216	232	14	4	6	8	591	599	30	11	3	9	403	406	13
-17	1	7	52	50	51	-17	5	7	142	160	33	-24	2	8	167	154	22	6	6	8	165	127	35	13	3	9	113	101	46
-15	1	7	59	27	37	-15	5	7	48	21	48	-22	2	8	47	53	46	8	6	8	483	516	27	15	3	9	185	156	23
-13	1	7	770	757	16	-13	5	7	577	585	16	-20	2	8	734	718	15	10	6	8	301	380	26	-18	4	9	629	590	34
-11	1	7	276	283	9	-11	5	7	68	81	68	-18	2	8	76	103	37	-7	7	8	311	316	34	-16	4	9	419	424	28
-9	1	7	549	580	10	-9	5	7	446	430	14	-16	2	8	759	732	16	-5	7	8	177	200	27	-14	4	9	145	129	27
-7	1	7	326	334	8	-7	5	7	306	308	11	-14	2	8	216	204	10	-3	7	8	364	410	30	-12	4	9	536	577	17
-5	1	7	223	217	9	-5	5	7	0	2	1	-12	2	8	951	950	24	-1	7	8	218	256	33	-10	4	9	164	162	46
-3	1	7	33	9	33	-3	5	7	0	21	1	-10	2	8	457	454	11	1	7	8	69	55	68	-8	4	9	669	648	17
-1	1	7	608	616	11	-1	5	7	467	470	18	-8	2	8	1423	1394	26	-22	0	9	284	318	50	-6	4	9	474	447	16
1	1	7	454	464	9	1	5	7	171	145	22	-6	2	8	195	219	13	-20	0	9	917	889	27	-4	4	9	405	393	14
3	1	7	428	437	14	3	5	7	308	299	31	-4	2	8	573	587	16	-18	0	9	838	788	25	-2	4	9	0	17	1
5	1	7	41	54	40	5	5	7	59	88	58	-2	2	8	50	32	50	-16	0	9	516	529	17	0	4	9	815	799	21
7	1	7	514	506	13	7	5	7	226	219	29	0	2	8	1171	1172	29	-14	0	9	144	131	20	2	4	9	767	729	21
9	1	7	68	18	40	9	5	7	55	14	54	2	2	8	192	176	8	-12	0	9	727	759	22	4	4	9	437	426	13
11	1	7	23	32	22	11	5	7	22	44	22	4	2	8	808	802	17	-10	0	9	171	199	28	6	4	9	46	74	45
13	1	7	304	283	8	13	5	7	112	64	42	6	2	8	413	411	9	-8	0	9	747	777	36	8	4	9	125	106	29
15	1	7	202	184	19	15	5	7	207	153	45	8	2	8	802	784	17	-6	0	9	609	604	16	10	4	9	200	199	19
17	1	7	213	226	16	-16	6	7	69	26	68	10	2	8	616	593	16	-4	0	9	534	536	47	12	4	9	575	542	19
19	1	7	301	314	10	-14	6	7	0	69	1	12	2	8	1538	1473	32	-2	0	9	66	54	40	14	4	9	819	763	63
21	1	7	198	193	15	-12	6	7	326	329	14	14	2	8	383	397	10	0	0	9	1012	1045	30	-15	5	9	393	380	19
-24	2	7	198	229	14	-10	6	7	758	742	34	16	2	8	469	431	11	2	0	9	911	932	27	-13	5	9	233	237	20
-22	2	7	569	565	13	-8	6	7	516	518	22	18	2	8	290	295	17	4	0	9	514	526	16	-11	5	9	89	123	62
-20	2	7	216	208	10	-6	6	7	473	506	18	-21	3	8	224	228	15	6	0	9	113	95	21	-9	5	9	241	229	18

poppiite_fofc

-18	2	7	539	537	15	-4	6	7	67	77	67	-19	3	8	187	190	13	8	0	9	148	166	17	-7	5	9	224	232	32
-16	2	7	116	123	19	-2	6	7	0	9	1	-17	3	8	121	128	25	10	0	9	233	265	14	-5	5	9	300	308	26
-14	2	7	120	116	14	0	6	7	102	84	35	-15	3	8	253	257	12	12	0	9	684	664	21	-3	5	9	247	288	27
-12	2	7	488	484	13	2	6	7	597	594	21	-13	3	8	449	445	13	14	0	9	1022	947	30	-1	5	9	0	39	1
-10	2	7	1117	1113	23	4	6	7	651	670	24	-11	3	8	182	171	17	16	0	9	155	172	44	1	5	9	329	356	26
-8	2	7	886	892	16	6	6	7	281	275	21	-9	3	8	276	272	12	18	0	9	63	60	62	3	5	9	189	173	41
-6	2	7	796	797	15	8	6	7	0	11	1	-7	3	8	452	453	9	-23	1	9	5	62	4	5	5	9	100	44	54
-4	2	7	215	203	7	10	6	7	0	33	1	-5	3	8	378	368	9	-21	1	9	162	173	26	7	5	9	339	343	17
-2	2	7	72	77	21	12	6	7	362	390	25	-3	3	8	733	745	14	-19	1	9	271	280	11	9	5	9	0	37	1
0	2	7	184	182	14	-11	7	7	337	326	25	-1	3	8	431	416	17	-17	1	9	195	169	21	11	5	9	127	145	126
2	2	7	913	904	17	-9	7	7	218	240	27	1	3	8	77	12	32	-15	1	9	431	413	21	-10	6	9	116	139	70
4	2	7	1045	1030	21	-7	7	7	87	64	87	3	3	8	235	225	11	-13	1	9	213	228	10	-8	6	9	127	162	38
6	2	7	460	475	10	-5	7	7	348	382	17	5	3	8	243	247	11	-11	1	9	78	68	31	-6	6	9	109	162	45
8	2	7	34	34	33	-3	7	7	7	6	6	7	3	8	358	350	17	-9	1	9	208	226	8	-4	6	9	350	326	17
10	2	7	81	64	19	-1	7	7	212	232	20	9	3	8	523	503	14	-7	1	9	203	230	10	-2	6	9	253	226	19
12	2	7	569	581	17	1	7	7	479	466	19	11	3	8	228	239	14	-5	1	9	310	317	15	0	6	9	0	37	1
14	2	7	401	420	12	3	7	7	220	209	21	13	3	8	113	113	30	-3	1	9	273	287	8	2	6	9	271	304	25
16	2	7	580	571	12	5	7	7	46	10	45	15	3	8	0	42	1	-1	1	9	96	108	26	4	6	9	80	99	79
18	2	7	0	64	1	7	7	7	460	496	48	17	3	8	161	170	25	1	1	9	371	380	9	6	6	9	247	265	28
20	2	7	147	140	27	-24	0	8	789	804	28	-20	4	8	0	103	1	3	1	9	148	152	11	-20	0	10	303	315	17
-23	3	7	78	81	78	-22	0	8	94	95	88	-18	4	8	0	128	1	5	1	9	55	66	55	-18	0	10	306	276	57
-21	3	7	167	150	19	-20	0	8	95	87	94	-16	4	8	592	596	21	7	1	9	400	383	10	-16	0	10	221	205	33
-19	3	7	0	5	1	-18	0	8	116	98	28	-14	4	8	312	324	16	9	1	9	115	109	17	-14	0	10	137	137	45
-17	3	7	100	107	17	-16	0	8	731	745	22	-12	4	8	770	769	20	11	1	9	338	323	9	-12	0	10	492	499	16
-15	3	7	57	45	40	-14	0	8	446	425	18	-10	4	8	178	189	23	13	1	9	188	204	12	-10	0	10	943	949	46
-13	3	7	599	604	13	-12	0	8	1028	1008	30	-8	4	8	68	28	52	15	1	9	88	112	33	-8	0	10	645	701	32

poppiite_fofc

-11	3	7	449	438	10	-10	0	8	309	315	20	-6	4	8	163	183	17	17	1	9	161	178	18	-6	0	10	435	457	12
-9	3	7	434	453	12	-8	0	8	99	60	38	-4	4	8	1237	1210	36	-22	2	9	102	103	34	-4	0	10	75	103	75
-7	3	7	187	178	7	-6	0	8	110	126	14	-2	4	8	727	696	18	-20	2	9	0	7	1	-2	0	10	621	594	19
-5	3	7	462	478	9	-4	0	8	1560	1595	46	0	4	8	1058	1025	26	-18	2	9	587	579	14	0	0	10	970	954	29
-3	3	7	0	8	1	-2	0	8	979	970	29	2	4	8	161	173	21	-16	2	9	500	498	11	2	0	10	773	785	23
-1	3	7	438	434	13	0	0	8	1471	1462	43	4	4	8	666	636	20	-14	2	9	77	47	32	4	0	10	201	191	14
1	3	7	694	684	15	2	0	8	165	194	15	6	4	8	353	358	12	-12	2	9	606	611	19	6	0	10	76	42	49
3	3	7	372	371	11	4	0	8	759	751	22	8	4	8	845	815	21	-10	2	9	126	115	13	8	0	10	140	119	22
5	3	7	58	19	57	6	0	8	361	349	19	10	4	8	63	64	62	-8	2	9	263	285	8	10	0	10	500	475	16
7	3	7	700	688	20	8	0	8	1023	1028	30	12	4	8	327	325	13	-6	2	9	152	135	10	12	0	10	875	872	26
9	3	7	34	23	33	10	0	8	48	73	47	14	4	8	0	22	1	-4	2	9	441	479	12	14	0	10	497	474	17
11	3	7	11	32	11	12	0	8	457	444	15	16	4	8	598	616	20	-2	2	9	323	332	11	-21	1	10	0	11	1
13	3	7	442	442	13	14	0	8	0	53	1	-17	5	8	270	265	20	0	2	9	54	33	54	-19	1	10	45	83	44
15	3	7	144	147	22	16	0	8	695	700	21	-15	5	8	276	239	19	2	2	9	377	385	15	-17	1	10	52	11	51
17	3	7	193	206	19	18	0	8	329	347	18	-13	5	8	350	356	14	4	2	9	211	213	9	-15	1	10	332	343	10
19	3	7	376	393	14	20	0	8	548	545	36	-11	5	8	357	374	13	6	2	9	441	426	11	-13	1	10	599	590	18
-22	4	7	72	83	72	-23	1	8	534	523	14	-9	5	8	230	261	14	8	2	9	402	416	10	-11	1	10	76	71	40
-20	4	7	328	315	21	-21	1	8	296	278	13	-7	5	8	265	273	15	10	2	9	382	342	17	-9	1	10	306	314	10
-18	4	7	315	316	28	-19	1	8	190	184	14	-5	5	8	404	379	24	12	2	9	401	388	10	-7	1	10	162	200	17
-16	4	7	285	301	31	-17	1	8	270	271	13	-3	5	8	654	680	23	14	2	9	255	239	15	-5	1	10	233	261	13
-14	4	7	912	886	30	-15	1	8	314	299	9	-1	5	8	326	320	17	16	2	9	0	17	1	-3	1	10	307	311	25
-12	4	7	248	254	10	-13	1	8	481	485	10	1	5	8	130	128	51	-21	3	9	79	114	79	-1	1	10	311	317	9
-10	4	7	197	216	12	-11	1	8	329	351	32	3	5	8	148	172	45	-19	3	9	222	227	15	1	1	10	139	142	13
-8	4	7	627	602	16	-9	1	8	351	342	8	5	5	8	119	104	72	-17	3	9	77	54	52	3	1	10	284	292	9
-6	4	7	131	104	15	-7	1	8	445	453	29	7	5	8	243	259	31	-15	3	9	263	267	11	5	1	10	330	324	13
-4	4	7	175	194	24	-5	1	8	474	490	16	9	5	8	545	552	30	-13	3	9	129	113	20	7	1	10	588	583	13

poppiite_fofc

-2	4	7	780	777	17	-3	1	8	921	918	19	11	5	8	185	155	25	-11	3	9	12	27	12	9	1	10	232	211	15
0	4	7	362	375	10	-1	1	8	472	479	11	13	5	8	125	95	46	-9	3	9	106	107	18	11	1	10	0	81	1

Table 7. Observed and calculated structure factors for poppiite

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	1	10	220	187	13	-16	4	10	144	120	37	6	0	11	147	172	23	-9	3	11	82	54	38	-7	1	12	206	216	23
15	1	10	163	146	19	-14	4	10	0	128	1	8	0	11	352	367	15	-7	3	11	86	140	56	-5	1	12	95	128	29
-20	2	10	0	41	1	-12	4	10	373	388	32	10	0	11	117	101	36	-5	3	11	35	37	34	-3	1	12	354	377	15
-18	2	10	338	347	18	-10	4	10	768	746	45	12	0	11	53	21	53	-3	3	11	362	369	11	-1	1	12	0	90	1
-16	2	10	286	299	15	-8	4	10	540	575	17	-17	1	11	225	204	20	-1	3	11	222	226	12	1	1	12	321	317	19
-14	2	10	873	821	18	-6	4	10	413	416	29	-15	1	11	344	333	11	1	3	11	145	131	24	3	1	12	41	76	41
-12	2	10	219	234	23	-4	4	10	106	139	58	-13	1	11	82	79	52	3	3	11	76	36	76	5	1	12	55	23	55
-10	2	10	541	543	12	-2	4	10	506	507	14	-11	1	11	182	169	30	5	3	11	264	248	15	7	1	12	39	49	38
-8	2	10	63	77	39	0	4	10	725	742	19	-9	1	11	0	63	1	7	3	11	61	91	60	-12	2	12	277	248	14
-6	2	10	467	479	14	2	4	10	628	609	26	-7	1	11	278	287	12	9	3	11	0	52	1	-10	2	12	420	439	14
-4	2	10	111	107	20	4	4	10	132	170	28	-5	1	11	0	35	1	-12	4	11	0	60	1	-8	2	12	413	428	12
-2	2	10	566	571	15	6	4	10	57	39	57	-3	1	11	399	410	21	-10	4	11	56	15	55	-6	2	12	41	53	41
0	2	10	74	21	42	8	4	10	79	46	78	-1	1	11	419	404	10	-8	4	11	699	664	22	-4	2	12	456	449	12
2	2	10	892	873	22	10	4	10	470	427	58	1	1	11	248	231	10	-6	4	11	391	379	16	-2	2	12	344	343	28
4	2	10	606	602	13	-11	5	10	59	6	59	3	1	11	0	19	1	-4	4	11	389	374	15	0	2	12	657	644	22
6	2	10	994	959	21	-9	5	10	206	265	40	5	1	11	429	408	11	-2	4	11	341	319	25	2	2	12	682	685	28
8	2	10	419	403	10	-7	5	10	201	224	39	7	1	11	89	19	31	0	4	11	49	44	49	4	2	12	526	506	19
10	2	10	449	441	11	-5	5	10	190	215	40	9	1	11	108	85	25	2	4	11	0	15	1	6	2	12	47	90	47
12	2	10	111	92	54	-3	5	10	310	283	17	11	1	11	376	371	11	4	4	11	258	264	22	-9	3	12	130	149	38

												poppiite_fofc																	
14	2	10	730	705	31	-1	5	10	252	260	18	-16	2	11	297	294	12	6	4	11	200	162	49	-7	3	12	256	273	13
-17	3	10	0	34	1	1	5	10	96	55	65	-14	2	11	139	132	21	-3	5	11	269	299	25	-5	3	12	122	140	25
-15	3	10	341	323	12	3	5	10	209	225	23	-12	2	11	190	202	19	-14	0	12	68	61	68	-3	3	12	276	284	24
-13	3	10	447	454	21	5	5	10	337	281	38	-10	2	11	746	772	16	-12	0	12	588	602	19	-1	3	12	73	105	73
-11	3	10	151	130	16	7	5	10	465	453	54	-8	2	11	531	520	17	-10	0	12	113	39	36	1	3	12	340	330	19
-9	3	10	269	260	9	-18	0	11	385	375	29	-6	2	11	155	161	14	-8	0	12	916	955	45	3	3	12	0	70	1
-7	3	10	17	65	16	-16	0	11	158	180	26	-4	2	11	407	425	11	-6	0	12	408	438	26	-8	0	13	265	271	33
-5	3	10	205	219	10	-14	0	11	424	428	27	-2	2	11	63	104	62	-4	0	12	612	582	29	-6	0	13	106	117	106
-3	3	10	237	240	10	-12	0	11	45	81	45	0	2	11	87	77	56	-2	0	12	368	337	24	-4	0	13	204	274	29
-1	3	10	251	253	9	-10	0	11	0	20	1	2	2	11	457	449	26	0	0	12	350	335	15	-2	0	13	70	52	70
1	3	10	223	208	14	-8	0	11	810	820	40	4	2	11	508	446	26	2	0	12	274	261	26	0	0	13	347	325	16
3	3	10	296	279	14	-6	0	11	406	439	17	6	2	11	106	116	36	4	0	12	1023	949	44	-7	1	13	0	10	1
5	3	10	201	235	16	-4	0	11	473	475	13	8	2	11	188	175	20	6	0	12	489	469	17	-5	1	13	310	327	14
7	3	10	502	501	15	-2	0	11	395	377	31	10	2	11	137	140	46	8	0	12	594	589	19	-3	1	13	95	63	38
9	3	10	144	127	27	0	0	11	0	46	1	-15	3	11	324	330	13	-13	1	12	58	54	57	-1	1	13	240	232	28
11	3	10	62	51	62	2	0	11	19	21	19	-13	3	11	58	49	57	-11	1	12	76	59	76						
13	3	10	254	243	18	4	0	11	350	328	16	-11	3	11	203	76	70	-9	1	12	126	128	26						

□E