

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	0	-8	255	255	3	-4	9	-8	56	56	2	-7	9	-7	90	88	1	-9	13	-7	60	57	4	-2	8	-6	68	67	1
0	1	-8	62	58	2	-3	9	-8	104	104	1	-6	9	-7	37	34	2	-8	13	-7	42	33	5	-1	8	-6	134	133	1
-1	2	-8	92	85	1	-2	9	-8	30	32	6	-5	9	-7	41	36	1	-7	13	-7	33	33	3	0	8	-6	169	172	1
0	2	-8	76	74	1	-1	9	-8	47	51	7	-4	9	-7	38	36	2	-6	13	-7	34	33	2	-8	9	-6	43	42	1
-2	3	-8	40	41	2	0	1	-7	114	109	1	-3	9	-7	36	33	2	-5	13	-7	38	33	4	-7	9	-6	95	98	1
-1	3	-8	44	40	2	-1	2	-7	59	56	1	-2	9	-7	92	88	1	-4	13	-7	57	57	3	-6	9	-6	143	146	1
0	3	-8	86	83	2	0	2	-7	89	94	1	-1	9	-7	52	48	1	-3	13	-7	67	70	4	-5	9	-6	55	57	1
-3	4	-8	39	39	3	-2	3	-7	117	121	1	0	9	-7	35	30	2	0	0	-6	528	522	4	-4	9	-6	54	56	1
-2	4	-8	90	86	1	-1	3	-7	118	121	1	-9	10	-7	59	60	1	0	1	-6	102	103	1	-3	9	-6	145	147	1
-1	4	-8	39	39	3	0	3	-7	97	95	1	-8	10	-7	38	34	2	-1	2	-6	193	194	1	-2	9	-6	95	98	1
0	4	-8	136	135	1	-3	4	-7	151	145	1	-7	10	-7	42	41	2	0	2	-6	137	136	1	-1	9	-6	42	42	1
-4	5	-8	113	111	1	-2	4	-7	39	37	2	-6	10	-7	69	66	1	-2	3	-6	53	52	1	0	9	-6	96	96	1
-3	5	-8	60	61	2	-1	4	-7	148	146	1	-5	10	-7	38	35	2	-1	3	-6	52	52	1	-9	10	-6	73	69	1
-2	5	-8	64	62	2	0	4	-7	398	392	2	-4	10	-7	68	66	1	0	3	-6	255	252	1	-8	10	-6	99	100	1
-1	5	-8	115	111	1	-4	5	-7	47	45	1	-3	10	-7	44	41	1	-3	4	-6	43	42	1	-7	10	-6	59	58	1
0	5	-8	68	65	1	-3	5	-7	173	173	1	-2	10	-7	41	34	2	-2	4	-6	227	228	1	-6	10	-6	86	87	1
-5	6	-8	61	59	2	-2	5	-7	172	173	1	-1	10	-7	57	59	1	-1	4	-6	43	42	1	-5	10	-6	204	206	1
-4	6	-8	46	44	2	-1	5	-7	46	45	1	0	10	-7	0	10	1	0	4	-6	258	258	1	-4	10	-6	88	87	1
-3	6	-8	160	158	1	0	5	-7	61	59	1	-10	11	-7	28	28	3	-4	5	-6	144	142	1	-3	10	-6	60	59	1
-2	6	-8	45	44	2	-5	6	-7	110	111	1	-9	11	-7	95	96	1	-3	5	-6	150	155	1	-2	10	-6	99	100	1
-1	6	-8	61	58	2	-4	6	-7	89	89	1	-8	11	-7	75	77	1	-2	5	-6	151	155	1	-1	10	-6	72	70	1
0	6	-8	132	131	1	-3	6	-7	27	28	2	-7	11	-7	27	28	2	-1	5	-6	143	142	1	0	10	-6	40	33	1
-6	7	-8	49	46	2	-2	6	-7	90	89	1	-6	11	-7	131	131	1	0	5	-6	133	135	1	-10	11	-6	73	72	1
-5	7	-8	72	71	2	-1	6	-7	110	112	1	-5	11	-7	131	130	1	-5	6	-6	116	116	1	-9	11	-6	92	92	1
-4	7	-8	63	61	1	0	6	-7	67	67	1	-4	11	-7	31	29	2	-4	6	-6	82	82	1	-8	11	-6	96	97	1
-3	7	-8	63	60	1	-6	7	-7	71	70	1	-3	11	-7	77	76	1	-3	6	-6	160	161	1	-7	11	-6	160	155	1
-2	7	-8	73	71	2	-5	7	-7	60	60	1	-2	11	-7	96	96	1	-2	6	-6	81	81	1	-6	11	-6	79	79	1
-1	7	-8	45	46	2	-4	7	-7	178	175	1	-1	11	-7	28	28	3	-1	6	-6	115	116	1	-5	11	-6	79	78	1
0	7	-8	34	26	3	-3	7	-7	180	175	1	0	11	-7	103	104	1	0	6	-6	135	138	1	-4	11	-6	159	155	1
-7	8	-8	92	88	1	-2	7	-7	62	59	1	-11	12	-7	58	64	3	-6	7	-6	79	80	1	-3	11	-6	97	96	1
-6	8	-8	32	28	2	-1	7	-7	67	70	1	-10	12	-7	89	89	1	-5	7	-6	128	129	1	-2	11	-6	90	91	1
-5	8	-8	39	41	2	0	7	-7	160	156	1	-9	12	-7	41	36	2	-4	7	-6	136	135	1	-1	11	-6	72	71	1
-4	8	-8	273	272	1	-7	8	-7	24	21	3	-8	12	-7	206	206	1	-3	7	-6	136	135	1	0	11	-6	69	66	1
-3	8	-8	40	41	2	-6	8	-7	126	125	1	-7	12	-7	103	103	1	-2	7	-6	130	130	1	-11	12	-6	62	64	1
-2	8	-8	31	28	3	-5	8	-7	99	95	1	-6	12	-7	12	10	9	-1	7	-6	79	81	1	-10	12	-6	68	64	1
-1	8	-8	90	88	1	-4	8	-7	30	25	2	-5	12	-7	103	103	1	0	7	-6	77	81	1	-9	12	-6	86	84	1
0	8	-8	113	112	2	-3	8	-7	98	94	2	-4	12	-7	204	206	1	-7	8	-6	134	132	1	-8	12	-6	179	182	1
-8	9	-8	52	51	6	-2	8	-7	123	124	1	-3	12	-7	34	36	2	-6	8	-6	68	68	1	-7	12	-6	55	53	1
-7	9	-8	31	32	6	-1	8	-7	24	21	2	-2	12	-7	92	89	2	-5	8	-6	56	56	1	-6	12	-6	84	83	1
-6	9	-8	101	103	2	0	8	-7	195	197	1	-1	12	-7	65	64	3	-4	8	-6	446	438	1	-5	12	-6	56	53	1
-5	9	-8	60	56	2	-8	9	-7	54	48	1	-10	13	-7	68	69	5	-3	8	-6	55	55	1	-4	12	-6	179	181	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	12	-6	87	83	1	-9	16	-6	49	45	5	-7	9	-5	175	181	1	-12	13	-5	57	55	1	0	15	-5	12	16	10
-2	12	-6	67	64	1	-8	16	-6	197	193	2	-6	9	-5	60	61	1	-11	13	-5	52	52	1	-15	16	-5	61	74	4
-1	12	-6	65	64	1	-7	16	-6	45	45	3	-5	9	-5	70	68	1	-10	13	-5	212	218	1	-14	16	-5	27	27	2
0	12	-6	282	281	1	-6	16	-6	39	41	7	-4	9	-5	69	68	1	-9	13	-5	42	39	1	-13	16	-5	59	58	1
-12	13	-6	56	55	1	0	1	-5	133	133	1	-3	9	-5	61	61	1	-8	13	-5	59	56	1	-12	16	-5	215	217	1
-11	13	-6	127	131	1	-1	2	-5	53	56	1	-2	9	-5	174	180	1	-7	13	-5	167	171	1	-11	16	-5	32	32	2
-10	13	-6	90	89	1	0	2	-5	174	171	1	-1	9	-5	157	156	1	-6	13	-5	164	170	1	-10	16	-5	120	122	1
-9	13	-6	32	31	2	-2	3	-5	231	230	1	0	9	-5	33	31	1	-5	13	-5	57	56	1	-9	16	-5	86	84	1
-8	13	-6	88	86	1	-1	3	-5	230	230	1	-9	10	-5	136	138	1	-4	13	-5	42	40	2	-8	16	-5	19	16	4
-7	13	-6	62	59	1	0	3	-5	100	107	1	-8	10	-5	63	62	1	-3	13	-5	214	218	1	-7	16	-5	86	83	1
-6	13	-6	60	58	1	-3	4	-5	150	148	1	-7	10	-5	197	200	1	-2	13	-5	51	52	1	-6	16	-5	122	122	1
-5	13	-6	89	87	1	-2	4	-5	45	46	1	-6	10	-5	199	202	1	-1	13	-5	57	55	1	-5	16	-5	37	32	2
-4	13	-6	25	31	2	-1	4	-5	150	149	1	-5	10	-5	19	17	2	0	13	-5	56	59	1	-4	16	-5	214	217	1
-3	13	-6	89	89	1	0	4	-5	461	460	2	-4	10	-5	199	203	1	-13	14	-5	36	36	2	-3	16	-5	57	57	1
-2	13	-6	130	130	1	-4	5	-5	34	36	1	-3	10	-5	197	199	1	-12	14	-5	71	73	1	-2	16	-5	24	27	3
-1	13	-6	56	55	1	-3	5	-5	169	175	1	-2	10	-5	63	62	1	-11	14	-5	64	58	1	-1	16	-5	71	74	4
0	13	-6	41	40	2	-2	5	-5	170	175	1	-1	10	-5	134	138	1	-10	14	-5	21	22	2	-14	17	-5	64	71	3
-13	14	-6	87	89	2	-1	5	-5	37	36	1	0	10	-5	196	204	1	-9	14	-5	80	79	1	-13	17	-5	18	18	7
-12	14	-6	31	29	2	0	5	-5	136	136	1	-10	11	-5	67	69	1	-8	14	-5	54	52	1	-12	17	-5	65	67	1
-11	14	-6	58	58	1	-5	6	-5	118	120	1	-9	11	-5	68	68	1	-7	14	-5	18	16	3	-11	17	-5	91	91	1
-10	14	-6	86	87	1	-4	6	-5	131	137	1	-8	11	-5	163	166	1	-6	14	-5	55	52	1	-10	17	-5	27	25	3
-9	14	-6	60	59	1	-3	6	-5	29	28	1	-7	11	-5	40	38	1	-5	14	-5	81	79	1	-9	17	-5	48	48	1
-8	14	-6	58	56	1	-2	6	-5	130	137	1	-6	11	-5	117	124	1	-4	14	-5	23	22	2	-8	17	-5	49	47	1
-7	14	-6	60	59	1	-1	6	-5	118	119	1	-5	11	-5	119	124	1	-3	14	-5	60	58	1	-7	17	-5	22	25	4
-6	14	-6	58	56	1	0	6	-5	65	67	1	-4	11	-5	38	37	1	-2	14	-5	74	73	1	-6	17	-5	92	90	1
-5	14	-6	58	58	1	-6	7	-5	213	217	1	-3	11	-5	161	165	1	-1	14	-5	39	36	2	-5	17	-5	66	68	1
-4	14	-6	85	87	1	-5	7	-5	35	32	1	-2	11	-5	68	69	1	0	14	-5	94	96	1	-4	17	-5	20	18	7
-3	14	-6	59	58	1	-4	7	-5	98	99	1	-1	11	-5	68	69	1	-14	15	-5	41	41	2	-11	18	-5	34	32	8
-2	14	-6	31	29	2	-3	7	-5	96	99	1	0	11	-5	194	200	1	-13	15	-5	57	52	1	-10	18	-5	36	39	4
-1	14	-6	90	89	1	-2	7	-5	33	33	1	-11	12	-5	145	145	1	-12	15	-5	43	37	1	-9	18	-5	15	17	15
-12	15	-6	125	128	2	-1	7	-5	212	216	1	-10	12	-5	156	158	1	-11	15	-5	154	153	1	-8	18	-5	35	39	4
-11	15	-6	50	50	1	0	7	-5	44	44	1	-9	12	-5	39	39	2	-10	15	-5	85	85	1	-7	18	-5	38	32	6
-10	15	-6	53	54	1	-7	8	-5	40	43	1	-8	12	-5	351	351	1	-9	15	-5	64	61	1	0	0	-4	1206	1143	9
-9	15	-6	84	84	1	-6	8	-5	104	107	1	-7	12	-5	182	188	1	-8	15	-5	100	98	1	0	1	-4	148	151	1
-8	15	-6	61	59	2	-5	8	-5	283	283	1	-6	12	-5	35	37	1	-7	15	-5	100	97	1	-1	2	-4	437	416	1
-7	15	-6	58	59	1	-4	8	-5	33	33	1	-5	12	-5	185	189	1	-6	15	-5	65	62	1	0	2	-4	169	181	1
-6	15	-6	86	84	1	-3	8	-5	282	282	1	-4	12	-5	348	351	1	-5	15	-5	85	84	1	-2	3	-4	114	117	1
-5	15	-6	51	54	1	-2	8	-5	104	108	1	-3	12	-5	39	39	1	-4	15	-5	154	153	1	-1	3	-4	113	116	1
-4	15	-6	49	50	1	-1	8	-5	41	43	1	-2	12	-5	155	157	1	-3	15	-5	41	37	2	0	3	-4	354	370	1
-3	15	-6	126	127	2	0	8	-5	432	430	2	-1	12	-5	145	146	1	-2	15	-5	53	52	1	-3	4	-4	33	32	1
-10	16	-6	44	41	6	-8	9	-5	156	155	1	0	12	-5	50	46	1	-1	15	-5	41	41	2	-2	4	-4	291	290	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	4	-4	33	32	1	-5	10	-4	257	255	1	0	13	-4	31	33	1	-4	16	-4	134	137	1	-7	19	-4	82	85	1
0	4	-4	443	433	1	-4	10	-4	153	153	1	-13	14	-4	140	143	1	-3	16	-4	84	86	2	-6	19	-4	64	62	3
-4	5	-4	150	149	1	-3	10	-4	66	67	1	-12	14	-4	68	64	1	-2	16	-4	87	89	1	0	1	-3	357	350	1
-3	5	-4	331	335	1	-2	10	-4	184	187	1	-11	14	-4	56	54	1	-1	16	-4	61	64	1	-1	2	-3	56	58	1
-2	5	-4	333	336	1	-1	10	-4	120	120	1	-10	14	-4	130	136	1	0	16	-4	105	104	1	0	2	-3	386	376	1
-1	5	-4	150	149	1	0	10	-4	108	114	1	-9	14	-4	77	75	1	-16	17	-4	72	75	1	-2	3	-3	565	532	1
0	5	-4	211	208	1	-10	11	-4	125	127	1	-8	14	-4	75	74	1	-15	17	-4	69	67	1	-1	3	-3	564	532	1
-5	6	-4	177	183	2	-9	11	-4	162	165	1	-7	14	-4	70	69	1	-14	17	-4	60	61	1	0	3	-3	64	71	1
-4	6	-4	156	165	1	-8	11	-4	120	125	1	-6	14	-4	76	74	1	-13	17	-4	51	48	1	-3	4	-3	332	334	1
-3	6	-4	123	127	1	-7	11	-4	177	182	1	-5	14	-4	78	75	1	-12	17	-4	42	38	1	-2	4	-3	84	85	1
-2	6	-4	156	165	1	-6	11	-4	94	99	1	-4	14	-4	131	135	1	-11	17	-4	70	68	1	-1	4	-3	333	335	1
-1	6	-4	177	182	1	-5	11	-4	93	98	1	-3	14	-4	56	54	1	-10	17	-4	127	127	1	0	4	-3	781	759	2
0	6	-4	266	263	1	-4	11	-4	177	183	1	-2	14	-4	67	65	1	-9	17	-4	36	36	2	-4	5	-3	117	113	1
-6	7	-4	127	127	1	-3	11	-4	120	125	1	-1	14	-4	139	143	1	-8	17	-4	33	35	2	-3	5	-3	339	345	1
-5	7	-4	284	283	1	-2	11	-4	164	165	1	0	14	-4	75	72	1	-7	17	-4	127	128	1	-2	5	-3	339	345	1
-4	7	-4	181	184	1	-1	11	-4	124	126	1	-14	15	-4	69	72	1	-6	17	-4	69	67	1	-1	5	-3	115	112	1
-3	7	-4	179	183	1	0	11	-4	111	119	1	-13	15	-4	92	89	1	-5	17	-4	38	37	2	0	5	-3	153	139	1
-2	7	-4	289	284	1	-11	12	-4	100	102	1	-12	15	-4	179	176	1	-4	17	-4	50	48	1	-5	6	-3	328	331	1
-1	7	-4	127	127	1	-10	12	-4	139	143	1	-11	15	-4	85	84	1	-3	17	-4	63	61	1	-4	6	-3	139	140	1
0	7	-4	40	39	1	-9	12	-4	124	129	1	-10	15	-4	81	78	1	-2	17	-4	70	67	1	-3	6	-3	35	36	1
-7	8	-4	186	189	1	-8	12	-4	194	200	1	-9	15	-4	144	149	1	-1	17	-4	75	76	1	-2	6	-3	139	140	1
-6	8	-4	95	92	1	-7	12	-4	94	97	1	-8	15	-4	91	92	1	0	17	-4	14	16	14	-1	6	-3	328	332	1
-5	8	-4	68	68	1	-6	12	-4	94	91	1	-7	15	-4	92	92	1	-15	18	-4	64	64	2	0	6	-3	56	39	1
-4	8	-4	616	615	11	-5	12	-4	94	97	1	-6	15	-4	148	150	1	-14	18	-4	50	47	1	-6	7	-3	251	241	1
-3	8	-4	68	68	1	-4	12	-4	194	200	1	-5	15	-4	82	78	1	-13	18	-4	95	94	1	-5	7	-3	140	140	1
-2	8	-4	95	92	1	-3	12	-4	122	127	1	-4	15	-4	87	84	1	-12	18	-4	119	121	1	-4	7	-3	392	400	1
-1	8	-4	189	191	1	-2	12	-4	142	143	1	-3	15	-4	177	175	1	-11	18	-4	55	60	1	-3	7	-3	389	398	1
0	8	-4	253	263	1	-1	12	-4	100	104	1	-2	15	-4	91	89	1	-10	18	-4	108	105	1	-2	7	-3	138	139	1
-8	9	-4	94	102	1	0	12	-4	353	353	1	-1	15	-4	71	71	1	-9	18	-4	85	86	1	-1	7	-3	249	240	1
-7	9	-4	133	134	1	-12	13	-4	47	49	1	0	15	-4	115	113	1	-8	18	-4	110	105	1	0	7	-3	442	439	1
-6	9	-4	259	258	1	-11	13	-4	172	176	1	-15	16	-4	63	64	1	-7	18	-4	60	60	1	-7	8	-3	47	44	1
-5	9	-4	84	90	1	-10	13	-4	122	123	1	-14	16	-4	87	89	1	-6	18	-4	120	122	1	-6	8	-3	356	361	1
-4	9	-4	85	90	1	-9	13	-4	54	58	1	-13	16	-4	83	87	1	-5	18	-4	94	93	1	-5	8	-3	272	275	1
-3	9	-4	262	259	1	-8	13	-4	73	72	1	-12	16	-4	133	137	1	-4	18	-4	51	47	2	-4	8	-3	20	24	1
-2	9	-4	129	133	1	-7	13	-4	80	77	1	-11	16	-4	138	133	1	-3	18	-4	68	65	8	-3	8	-3	273	274	1
-1	9	-4	95	103	1	-6	13	-4	79	78	1	-10	16	-4	43	43	1	-13	19	-4	68	63	3	-2	8	-3	357	361	1
0	9	-4	169	170	1	-5	13	-4	72	72	1	-9	16	-4	71	70	1	-12	19	-4	85	86	1	-1	8	-3	45	43	1
-9	10	-4	121	121	1	-4	13	-4	54	58	1	-8	16	-4	287	284	1	-11	19	-4	117	113	1	0	8	-3	525	532	5
-8	10	-4	185	187	1	-3	13	-4	126	124	1	-7	16	-4	68	70	1	-10	19	-4	48	44	2	-8	9	-3	126	123	1
-7	10	-4	66	67	1	-2	13	-4	170	175	1	-6	16	-4	45	43	1	-9	19	-4	44	43	2	-7	9	-3	269	267	1
-6	10	-4	151	153	1	-1	13	-4	47	49	1	-5	16	-4	138	135	1	-8	19	-4	118	114	1	-6	9	-3	75	75	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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
-5	9	-3	61	62	1	-10	13	-3	144	147	1	-14	16	-3	33	32	2	-8	18	-3	75	76	1	0	4	-2	622	615	2
-4	9	-3	60	61	1	-9	13	-3	64	62	1	-13	16	-3	156	159	1	-7	18	-3	54	53	1	-4	5	-2	457	424	1
-3	9	-3	74	74	1	-8	13	-3	60	59	1	-12	16	-3	308	311	1	-6	18	-3	46	43	1	-3	5	-2	395	379	1
-2	9	-3	270	267	1	-7	13	-3	135	140	1	-11	16	-3	61	60	1	-5	18	-3	120	120	1	-2	5	-2	393	378	1
-1	9	-3	125	125	1	-6	13	-3	134	140	1	-10	16	-3	120	118	1	-4	18	-3	110	114	1	-1	5	-2	456	425	1
0	9	-3	78	83	1	-5	13	-3	59	58	1	-9	16	-3	156	159	1	-3	18	-3	43	44	2	0	5	-2	207	206	1
-9	10	-3	131	133	1	-4	13	-3	64	63	1	-8	16	-3	48	45	1	-2	18	-3	81	81	2	-5	6	-2	169	163	1
-8	10	-3	94	94	1	-3	13	-3	145	147	1	-7	16	-3	156	158	1	-1	18	-3	95	99	2	-4	6	-2	142	136	1
-7	10	-3	104	105	1	-2	13	-3	53	54	1	-6	16	-3	119	119	1	-16	19	-3	93	89	3	-3	6	-2	375	363	1
-6	10	-3	128	126	1	-1	13	-3	110	110	1	-5	16	-3	64	60	2	-15	19	-3	106	105	1	-2	6	-2	142	136	1
-5	10	-3	77	81	1	0	13	-3	65	66	1	-4	16	-3	309	311	1	-14	19	-3	50	51	1	-1	6	-2	172	164	1
-4	10	-3	129	127	1	-13	14	-3	48	48	1	-3	16	-3	153	157	1	-13	19	-3	62	64	1	0	6	-2	554	542	2
-3	10	-3	103	105	1	-12	14	-3	162	167	1	-2	16	-3	33	32	2	-12	19	-3	88	85	1	-6	7	-2	162	154	1
-2	10	-3	92	94	1	-11	14	-3	91	95	1	-1	16	-3	98	97	1	-11	19	-3	22	22	4	-5	7	-2	247	241	1
-1	10	-3	131	133	1	-10	14	-3	51	54	1	0	16	-3	260	262	1	-10	19	-3	71	70	1	-4	7	-2	114	117	1
0	10	-3	161	170	1	-9	14	-3	216	220	1	-16	17	-3	32	34	2	-9	19	-3	70	70	1	-3	7	-2	113	116	1
-10	11	-3	39	38	1	-8	14	-3	138	144	1	-15	17	-3	122	123	1	-8	19	-3	25	22	4	-2	7	-2	247	242	1
-9	11	-3	190	197	1	-7	14	-3	50	51	1	-14	17	-3	94	95	1	-7	19	-3	87	84	1	-1	7	-2	162	154	1
-8	11	-3	106	107	1	-6	14	-3	140	145	1	-13	17	-3	18	9	3	-6	19	-3	63	65	1	0	7	-2	243	230	1
-7	11	-3	60	62	1	-5	14	-3	217	220	1	-12	17	-3	65	61	1	-5	19	-3	48	50	2	-7	8	-2	451	437	1
-6	11	-3	251	256	1	-4	14	-3	49	53	1	-11	17	-3	147	147	1	-4	19	-3	106	105	2	-6	8	-2	132	138	1
-5	11	-3	248	256	1	-3	14	-3	94	96	1	-10	17	-3	38	36	1	-3	19	-3	89	88	4	-5	8	-2	174	172	1
-4	11	-3	59	62	1	-2	14	-3	164	168	1	-9	17	-3	39	39	1	-14	20	-3	67	68	2	-4	8	-2	970	938	3
-3	11	-3	104	106	1	-1	14	-3	50	48	1	-8	17	-3	39	39	1	-13	20	-3	21	25	11	-3	8	-2	172	170	1
-2	11	-3	189	198	1	0	14	-3	123	127	1	-7	17	-3	38	37	1	-12	20	-3	171	168	1	-2	8	-2	131	137	1
-1	11	-3	37	38	1	-14	15	-3	83	85	1	-6	17	-3	147	147	1	-11	20	-3	105	102	1	-1	8	-2	455	439	1
0	11	-3	166	169	1	-13	15	-3	102	105	1	-5	17	-3	66	62	1	-10	20	-3	31	35	3	0	8	-2	354	365	1
-11	12	-3	108	111	1	-12	15	-3	65	63	1	-4	17	-3	13	9	6	-9	20	-3	105	103	1	-8	9	-2	149	152	1
-10	12	-3	188	193	1	-11	15	-3	151	154	1	-3	17	-3	96	95	1	-8	20	-3	171	167	1	-7	9	-2	172	179	1
-9	12	-3	62	61	1	-10	15	-3	123	129	1	-2	17	-3	123	122	1	-7	20	-3	29	25	3	-6	9	-2	521	512	1
-8	12	-3	397	401	2	-9	15	-3	58	59	1	-1	17	-3	34	34	3	-6	20	-3	68	68	2	-5	9	-2	88	90	1
-7	12	-3	210	212	1	-8	15	-3	125	125	1	0	17	-3	23	23	6	0	0	-2	1767	1726	14	-4	9	-2	86	89	1
-6	12	-3	40	39	1	-7	15	-3	124	124	1	-17	18	-3	97	100	1	0	1	-2	291	275	1	-3	9	-2	521	513	2
-5	12	-3	211	214	1	-6	15	-3	60	59	1	-16	18	-3	82	81	1	-1	2	-2	143	143	1	-2	9	-2	170	177	1
-4	12	-3	398	401	1	-5	15	-3	124	128	1	-15	18	-3	42	44	2	0	2	-2	87	101	1	-1	9	-2	151	152	1
-3	12	-3	64	61	1	-4	15	-3	151	155	1	-14	18	-3	111	114	1	-2	3	-2	133	136	1	0	9	-2	248	247	1
-2	12	-3	186	193	1	-3	15	-3	67	63	1	-13	18	-3	120	121	1	-1	3	-2	131	135	1	-9	10	-2	123	133	1
-1	12	-3	110	112	1	-2	15	-3	105	106	1	-12	18	-3	48	43	1	0	3	-2	556	493	2	-8	10	-2	189	193	2
0	12	-3	53	49	1	-1	15	-3	84	84	1	-11	18	-3	55	53	1	-3	4	-2	120	114	1	-7	10	-2	105	107	1
-12	13	-3	107	109	1	0	15	-3	61	57	1	-10	18	-3	77	76	1	-2	4	-2	226	196	1	-6	10	-2	259	258	1
-11	13	-3	55	55	1	-15	16	-3	98	96	1	-9	18	-3	22	19	3	-1	4	-2	120	114	1	-5	10	-2	84	87	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	10	-2	259	259	1	-13	14	-2	184	186	1	-3	16	-2	27	22	2	-15	19	-2	51	47	2	-2	4	-1	25	33	1
-3	10	-2	103	107	1	-12	14	-2	86	84	1	-2	16	-2	114	119	1	-14	19	-2	78	75	1	-1	4	-1	452	408	1
-2	10	-2	190	192	1	-11	14	-2	107	108	1	-1	16	-2	111	112	1	-13	19	-2	99	98	1	0	4	-1	774	809	2
-1	10	-2	125	132	1	-10	14	-2	184	192	1	0	16	-2	94	95	1	-12	19	-2	72	69	1	-4	5	-1	271	283	1
0	10	-2	162	173	1	-9	14	-2	80	79	1	-16	17	-2	65	59	2	-11	19	-2	147	143	1	-3	5	-1	369	346	1
-10	11	-2	131	126	1	-8	14	-2	111	112	1	-15	17	-2	67	60	2	-10	19	-2	86	86	1	-2	5	-1	369	345	1
-9	11	-2	175	181	1	-7	14	-2	67	66	1	-14	17	-2	104	102	1	-9	19	-2	82	85	1	-1	5	-1	274	283	1
-8	11	-2	62	58	1	-6	14	-2	111	111	1	-13	17	-2	81	75	1	-8	19	-2	150	144	1	0	5	-1	305	311	1
-7	11	-2	229	230	1	-5	14	-2	80	79	1	-12	17	-2	48	43	1	-7	19	-2	71	69	1	-5	6	-1	269	242	1
-6	11	-2	124	129	1	-4	14	-2	187	192	1	-11	17	-2	112	109	1	-6	19	-2	97	98	1	-4	6	-1	68	69	1
-5	11	-2	122	128	1	-3	14	-2	106	108	1	-10	17	-2	214	220	1	-5	19	-2	75	74	1	-3	6	-1	36	29	1
-4	11	-2	229	230	1	-2	14	-2	87	84	1	-9	17	-2	48	47	1	-4	19	-2	49	47	2	-2	6	-1	66	69	1
-3	11	-2	63	58	1	-1	14	-2	182	187	1	-8	17	-2	48	47	1	-3	19	-2	80	80	1	-1	6	-1	271	242	1
-2	11	-2	174	181	1	0	14	-2	156	155	1	-7	17	-2	216	221	1	-2	19	-2	66	65	2	0	6	-1	109	130	1
-1	11	-2	128	125	1	-14	15	-2	72	72	1	-6	17	-2	110	108	1	-16	20	-2	177	179	2	-6	7	-1	350	364	1
0	11	-2	124	121	1	-13	15	-2	84	86	1	-5	17	-2	47	43	1	-15	20	-2	52	46	2	-5	7	-1	351	316	1
-11	12	-2	167	168	1	-12	15	-2	265	261	1	-4	17	-2	78	75	1	-14	20	-2	69	68	1	-4	7	-1	332	334	1
-10	12	-2	94	97	1	-11	15	-2	117	119	1	-3	17	-2	107	101	1	-13	20	-2	84	82	1	-3	7	-1	330	333	1
-9	12	-2	199	198	1	-10	15	-2	117	117	1	-2	17	-2	62	60	1	-12	20	-2	129	132	1	-2	7	-1	353	317	1
-8	12	-2	304	304	1	-9	15	-2	169	176	1	-1	17	-2	67	60	2	-11	20	-2	56	54	5	-1	7	-1	349	363	1
-7	12	-2	192	197	1	-8	15	-2	145	150	1	0	17	-2	48	51	2	-10	20	-2	82	87	2	0	7	-1	481	492	1
-6	12	-2	91	87	1	-7	15	-2	146	149	1	-17	18	-2	68	68	2	-9	20	-2	55	55	2	-7	8	-1	50	53	1
-5	12	-2	194	198	1	-6	15	-2	172	178	1	-16	18	-2	78	79	2	-8	20	-2	130	131	1	-6	8	-1	333	311	1
-4	12	-2	301	304	1	-5	15	-2	116	117	1	-15	18	-2	71	67	1	-7	20	-2	83	81	2	-5	8	-1	409	390	1
-3	12	-2	197	196	1	-4	15	-2	119	119	1	-14	18	-2	32	31	2	-6	20	-2	69	68	1	-4	8	-1	79	75	1
-2	12	-2	95	98	1	-3	15	-2	261	260	1	-13	18	-2	46	45	1	-5	20	-2	47	46	2	-3	8	-1	406	388	1
-1	12	-2	167	170	1	-2	15	-2	86	86	1	-12	18	-2	87	84	1	-4	20	-2	179	178	2	-2	8	-1	335	311	1
0	12	-2	408	409	1	-1	15	-2	71	71	1	-11	18	-2	70	68	1	-14	21	-2	44	43	5	-1	8	-1	48	53	1
-12	13	-2	60	60	1	0	15	-2	220	216	1	-10	18	-2	40	35	1	-13	21	-2	47	44	4	0	8	-1	1003	964	3
-11	13	-2	155	160	1	-15	16	-2	109	111	1	-9	18	-2	39	36	1	-11	21	-2	29	32	5	-8	9	-1	327	338	1
-10	13	-2	218	223	1	-14	16	-2	116	119	1	-8	18	-2	39	35	2	-10	21	-2	31	32	3	-7	9	-1	272	278	1
-9	13	-2	91	91	1	-13	16	-2	31	23	2	-7	18	-2	69	69	1	-9	21	-2	37	35	3	-6	9	-1	111	115	1
-8	13	-2	115	113	1	-12	16	-2	159	163	1	-6	18	-2	82	84	1	-8	21	-2	34	44	7	-5	9	-1	196	202	1
-7	13	-2	207	211	1	-11	16	-2	210	207	1	-5	18	-2	43	45	1	-7	21	-2	41	43	6	-4	9	-1	195	201	1
-6	13	-2	206	211	1	-10	16	-2	71	69	1	-4	18	-2	33	31	2	0	1	-1	639	616	2	-3	9	-1	110	115	1
-5	13	-2	114	114	1	-9	16	-2	76	75	1	-3	18	-2	67	67	1	-1	2	-1	86	84	1	-2	9	-1	271	277	1
-4	13	-2	90	91	1	-8	16	-2	449	443	1	-2	18	-2	80	78	1	0	2	-1	121	116	1	-1	9	-1	331	340	1
-3	13	-2	216	223	1	-7	16	-2	74	74	1	-1	18	-2	68	67	2	-2	3	-1	801	748	2	0	9	-1	149	136	1
-2	13	-2	154	159	1	-6	16	-2	69	68	1	0	18	-2	41	43	3	-1	3	-1	802	749	2	-9	10	-1	139	145	1
-1	13	-2	60	60	1	-5	16	-2	208	210	1	-17	19	-2	65	65	2	0	3	-1	263	229	1	-8	10	-1	185	192	1
0	13	-2	80	78	1	-4	16	-2	161	164	1	-16	19	-2	81	81	2	-3	4	-1	449	407	1	-7	10	-1	365	372	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	10	-1	102	104	1	-1	13	-1	147	151	1	-5	16	-1	73	74	1	-18	19	-1	68	65	2	-6	21	-1	35	32	6
-5	10	-1	58	57	1	0	13	-1	112	112	1	-4	16	-1	378	379	2	-17	19	-1	18	28	7	0	1	0	70	61	1
-4	10	-1	102	104	1	-13	14	-1	46	50	1	-3	16	-1	143	149	1	-16	19	-1	80	82	2	-1	2	0	446	579	1
-3	10	-1	367	372	1	-12	14	-1	133	136	1	-2	16	-1	34	37	1	-15	19	-1	138	134	1	0	2	0	233	142	1
-2	10	-1	184	190	1	-11	14	-1	69	70	1	-1	16	-1	140	140	1	-14	19	-1	77	77	1	-2	3	0	361	313	1
-1	10	-1	140	144	1	-10	14	-1	65	66	1	0	16	-1	284	291	1	-13	19	-1	72	66	1	-1	3	0	356	311	1
0	10	-1	215	212	1	-9	14	-1	181	184	1	-16	17	-1	47	44	2	-12	19	-1	102	98	2	0	3	0	1036	934	4
-10	11	-1	108	111	1	-8	14	-1	98	98	1	-15	17	-1	128	123	1	-11	19	-1	37	36	2	-3	4	0	106	103	1
-9	11	-1	134	135	1	-7	14	-1	36	37	1	-14	17	-1	99	102	1	-10	19	-1	40	35	2	-2	4	0	29	32	1
-8	11	-1	248	256	2	-6	14	-1	98	98	1	-13	17	-1	39	36	2	-9	19	-1	38	35	2	-1	4	0	107	103	1
-7	11	-1	46	46	1	-5	14	-1	182	184	1	-12	17	-1	150	153	1	-8	19	-1	41	37	2	0	4	0	1078	1015	4
-6	11	-1	207	208	1	-4	14	-1	65	66	1	-11	17	-1	147	147	1	-7	19	-1	98	97	1	-4	5	0	197	222	1
-5	11	-1	205	208	1	-3	14	-1	73	70	1	-10	17	-1	43	39	1	-6	19	-1	69	67	1	-3	5	0	247	273	1
-4	11	-1	47	46	1	-2	14	-1	133	136	1	-9	17	-1	87	90	1	-5	19	-1	78	76	1	-2	5	0	248	274	1
-3	11	-1	250	255	1	-1	14	-1	47	50	1	-8	17	-1	86	89	1	-4	19	-1	138	135	1	-1	5	0	198	223	1
-2	11	-1	134	135	1	0	14	-1	97	100	1	-7	17	-1	42	39	1	-3	19	-1	82	81	1	0	5	0	109	91	1
-1	11	-1	105	109	1	-14	15	-1	57	56	1	-6	17	-1	146	147	1	-2	19	-1	20	28	5	-5	6	0	200	229	1
0	11	-1	259	257	1	-13	15	-1	118	119	1	-5	17	-1	152	155	1	-1	19	-1	65	64	2	-4	6	0	41	39	1
-11	12	-1	215	219	1	-12	15	-1	62	58	1	-4	17	-1	37	36	1	-17	20	-1	75	71	3	-3	6	0	1022	938	4
-10	12	-1	147	149	1	-11	15	-1	221	226	1	-3	17	-1	100	103	1	-16	20	-1	20	18	5	-2	6	0	41	40	1
-9	12	-1	38	31	1	-10	15	-1	121	122	1	-2	17	-1	126	122	1	-15	20	-1	104	109	2	-1	6	0	199	228	1
-8	12	-1	578	570	2	-9	15	-1	62	61	1	-1	17	-1	48	45	1	-14	20	-1	77	76	2	0	6	0	43	41	1
-7	12	-1	295	298	1	-8	15	-1	215	219	1	0	17	-1	22	17	4	-13	20	-1	29	25	3	-6	7	0	41	44	1
-6	12	-1	64	62	1	-7	15	-1	214	217	1	-17	18	-1	88	83	2	-12	20	-1	181	187	2	-5	7	0	539	489	2
-5	12	-1	300	300	1	-6	15	-1	63	62	1	-16	18	-1	66	69	2	-11	20	-1	145	144	1	-4	7	0	333	290	1
-4	12	-1	573	570	2	-5	15	-1	120	121	1	-15	18	-1	96	95	1	-10	20	-1	49	48	2	-3	7	0	332	288	1
-3	12	-1	37	31	1	-4	15	-1	221	227	1	-14	18	-1	109	108	1	-9	20	-1	148	146	1	-2	7	0	536	491	2
-2	12	-1	146	148	1	-3	15	-1	60	58	1	-13	18	-1	84	86	1	-8	20	-1	186	187	2	-1	7	0	41	43	1
-1	12	-1	216	221	1	-2	15	-1	119	120	1	-12	18	-1	22	27	3	-7	20	-1	28	25	3	0	7	0	81	78	1
0	12	-1	149	152	1	-1	15	-1	58	55	1	-11	18	-1	36	33	2	-6	20	-1	77	76	2	-7	8	0	541	501	2
-12	13	-1	147	149	1	0	15	-1	37	35	1	-10	18	-1	81	77	1	-5	20	-1	105	110	1	-6	8	0	168	176	1
-11	13	-1	74	74	1	-15	16	-1	142	139	1	-9	18	-1	27	23	2	-4	20	-1	16	18	6	-5	8	0	254	240	1
-10	13	-1	126	124	1	-14	16	-1	40	37	2	-8	18	-1	79	78	1	-3	20	-1	76	70	4	-4	8	0	1041	1009	4
-9	13	-1	60	59	1	-13	16	-1	145	151	1	-7	18	-1	38	33	1	-14	21	-1	70	66	2	-3	8	0	252	238	1
-8	13	-1	114	117	1	-12	16	-1	378	379	2	-6	18	-1	25	27	3	-13	21	-1	33	30	3	-2	8	0	167	176	1
-7	13	-1	156	158	1	-11	16	-1	72	74	1	-5	18	-1	84	86	1	-12	21	-1	31	25	3	-1	8	0	546	504	2
-6	13	-1	157	157	1	-10	16	-1	215	214	1	-4	18	-1	111	108	1	-11	21	-1	80	80	1	0	8	0	445	478	1
-5	13	-1	116	118	1	-9	16	-1	194	198	1	-3	18	-1	92	95	1	-10	21	-1	83	79	2	-8	9	0	82	93	1
-4	13	-1	61	60	1	-8	16	-1	40	36	1	-2	18	-1	68	69	1	-9	21	-1	25	25	4	-7	9	0	258	256	1
-3	13	-1	125	125	1	-7	16	-1	190	196	1	-1	18	-1	86	83	1	-8	21	-1	35	30	3	-6	9	0	237	256	1
-2	13	-1	75	75	1	-6	16	-1	215	214	1	0	18	-1	15	15	10	-7	21	-1	69	66	2	-5	9	0	59	48	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	9	0	57	48	1	-9	13	0	157	160	1	-13	16	0	76	71	1	-7	18	0	122	126	1	-3	20	0	68	67	2
-3	9	0	236	257	1	-8	13	0	79	71	1	-12	16	0	196	193	1	-6	18	0	119	112	1	-15	21	0	63	60	4
-2	9	0	257	254	1	-7	13	0	146	145	1	-11	16	0	202	209	1	-5	18	0	57	62	1	-14	21	0	73	73	2
-1	9	0	82	93	1	-6	13	0	145	146	1	-10	16	0	52	49	1	-4	18	0	34	36	2	-13	21	0	73	69	6
0	9	0	530	500	2	-5	13	0	79	72	1	-9	16	0	128	122	1	-3	18	0	117	109	2	-12	21	0	28	35	4
-9	10	0	124	109	1	-4	13	0	154	160	1	-8	16	0	481	486	2	-2	18	0	133	137	1	-11	21	0	70	65	2
-8	10	0	236	260	1	-3	13	0	92	91	1	-7	16	0	126	120	1	-1	18	0	83	83	1	-10	21	0	68	65	1
-7	10	0	182	187	1	-2	13	0	106	104	1	-6	16	0	54	50	1	0	18	0	81	74	2	-9	21	0	32	34	3
-6	10	0	196	180	1	-1	13	0	18	21	2	-5	16	0	202	211	1	-18	19	0	28	26	4	-8	21	0	69	68	2
-5	10	0	30	31	1	0	13	0	154	152	1	-4	16	0	199	193	1	-17	19	0	50	53	2	-7	21	0	76	74	2
-4	10	0	196	180	1	-13	14	0	148	143	1	-3	16	0	78	70	1	-16	19	0	120	118	1	-6	21	0	65	60	2
-3	10	0	179	186	1	-12	14	0	105	109	1	-2	16	0	116	114	1	-15	19	0	66	63	2	-11	22	0	26	9	9
-2	10	0	236	260	1	-11	14	0	41	29	1	-1	16	0	104	101	1	-14	19	0	66	57	2	0	1	1	640	616	3
-1	10	0	122	109	1	-10	14	0	102	99	1	0	16	0	158	156	1	-13	19	0	56	50	3	-1	2	1	85	84	1
0	10	0	63	56	1	-9	14	0	61	68	1	-16	17	0	120	122	1	-12	19	0	105	105	1	0	2	1	122	116	1
-10	11	0	112	117	1	-8	14	0	46	49	1	-15	17	0	44	45	2	-11	19	0	135	132	1	-2	3	1	803	748	4
-9	11	0	239	225	1	-7	14	0	115	115	1	-14	17	0	49	50	2	-10	19	0	57	57	1	-1	3	1	805	749	4
-8	11	0	88	101	1	-6	14	0	46	50	1	-13	17	0	153	159	1	-9	19	0	59	57	1	0	3	1	263	229	1
-7	11	0	345	318	1	-5	14	0	60	67	1	-12	17	0	67	59	1	-8	19	0	134	133	1	-3	4	1	450	406	2
-6	11	0	116	101	1	-4	14	0	103	98	1	-11	17	0	44	50	1	-7	19	0	106	105	1	-2	4	1	26	33	1
-5	11	0	114	100	1	-3	14	0	40	30	1	-10	17	0	145	133	1	-6	19	0	51	50	2	-1	4	1	449	408	2
-4	11	0	346	319	1	-2	14	0	105	110	1	-9	17	0	31	15	2	-5	19	0	64	57	2	0	4	1	769	808	4
-3	11	0	88	100	1	-1	14	0	148	143	1	-8	17	0	30	15	2	-4	19	0	62	62	2	-4	5	1	272	283	1
-2	11	0	238	225	1	0	14	0	79	85	1	-7	17	0	143	133	1	-3	19	0	115	117	1	-3	5	1	369	345	1
-1	11	0	110	115	1	-14	15	0	75	81	1	-6	17	0	45	50	1	-2	19	0	54	53	2	-2	5	1	368	344	1
0	11	0	231	238	1	-13	15	0	49	52	1	-5	17	0	66	60	1	-1	19	0	24	27	5	-1	5	1	271	283	1
-11	12	0	127	128	1	-12	15	0	264	275	2	-4	17	0	156	159	2	0	19	0	69	66	5	0	5	1	303	310	1
-10	12	0	115	110	1	-11	15	0	70	57	1	-3	17	0	48	50	1	-17	20	0	67	67	2	-5	6	1	269	242	1
-9	12	0	327	309	1	-10	15	0	197	211	1	-2	17	0	44	45	1	-16	20	0	233	239	2	-4	6	1	67	69	1
-8	12	0	186	192	1	-9	15	0	203	204	1	-1	17	0	120	124	1	-15	20	0	78	76	2	-3	6	1	37	29	1
-7	12	0	125	134	1	-8	15	0	102	93	1	0	17	0	95	91	1	-14	20	0	43	47	2	-2	6	1	68	69	1
-6	12	0	82	62	1	-7	15	0	99	91	1	-17	18	0	85	83	2	-13	20	0	131	133	1	-1	6	1	269	242	1
-5	12	0	127	134	1	-6	15	0	205	205	1	-16	18	0	137	138	1	-12	20	0	163	160	1	0	6	1	110	130	1
-4	12	0	186	192	1	-5	15	0	198	210	1	-15	18	0	115	108	2	-11	20	0	80	77	2	-6	7	1	349	364	1
-3	12	0	324	306	1	-4	15	0	68	56	1	-14	18	0	32	36	3	-10	20	0	53	53	2	-5	7	1	352	316	1
-2	12	0	113	111	1	-3	15	0	262	273	1	-13	18	0	59	62	2	-9	20	0	77	77	1	-4	7	1	329	334	1
-1	12	0	129	129	1	-2	15	0	51	53	1	-12	18	0	117	111	1	-8	20	0	160	161	1	-3	7	1	328	332	1
0	12	0	453	447	2	-1	15	0	74	80	1	-11	18	0	121	125	1	-7	20	0	131	131	1	-2	7	1	351	317	1
-12	13	0	21	21	2	0	15	0	221	229	1	-10	18	0	80	81	1	-6	20	0	49	48	2	-1	7	1	349	363	1
-11	13	0	106	105	1	-15	16	0	105	101	1	-9	18	0	68	59	2	-5	20	0	79	76	2	0	7	1	479	491	2
-10	13	0	93	90	1	-14	16	0	117	114	1	-8	18	0	78	80	1	-4	20	0	232	239	2	-7	8	1	49	53	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	8	1	331	311	1	-7	12	1	296	298	1	-8	15	1	215	219	1	0	17	1	18	17	6	-13	20	1	21	25	5
-5	8	1	411	390	1	-6	12	1	65	62	1	-7	15	1	214	217	1	-17	18	1	88	83	2	-12	20	1	183	187	2
-4	8	1	76	75	1	-5	12	1	296	300	1	-6	15	1	59	61	1	-16	18	1	68	69	2	-11	20	1	144	144	1
-3	8	1	409	389	1	-4	12	1	562	570	9	-5	15	1	120	121	1	-15	18	1	96	95	3	-10	20	1	48	48	2
-2	8	1	334	310	1	-3	12	1	40	31	1	-4	15	1	222	227	1	-14	18	1	112	108	1	-9	20	1	149	146	1
-1	8	1	48	53	1	-2	12	1	144	148	1	-3	15	1	59	58	1	-13	18	1	85	86	2	-8	20	1	183	187	1
0	8	1	1005	965	4	-1	12	1	213	221	1	-2	15	1	119	120	1	-12	18	1	25	28	3	-7	20	1	23	25	4
-8	9	1	329	338	1	0	12	1	148	153	1	-1	15	1	57	55	1	-11	18	1	36	33	2	-6	20	1	75	76	2
-7	9	1	274	278	1	-12	13	1	147	149	1	0	15	1	39	35	2	-10	18	1	79	77	1	-5	20	1	106	110	2
-6	9	1	110	115	1	-11	13	1	75	75	1	-15	16	1	140	139	1	-9	18	1	25	23	3	-4	20	1	27	18	4
-5	9	1	197	202	1	-10	13	1	126	125	1	-14	16	1	38	37	3	-8	18	1	80	78	1	-3	20	1	74	70	3
-4	9	1	195	201	1	-9	13	1	61	60	1	-13	16	1	145	151	1	-7	18	1	37	33	2	-14	21	1	70	66	2
-3	9	1	110	115	1	-8	13	1	115	117	1	-12	16	1	377	379	2	-6	18	1	25	27	2	-13	21	1	34	30	3
-2	9	1	273	277	1	-7	13	1	161	158	1	-11	16	1	74	74	1	-5	18	1	81	86	1	-12	21	1	30	25	4
-1	9	1	331	340	1	-6	13	1	158	157	1	-10	16	1	214	214	1	-4	18	1	110	108	3	-11	21	1	81	79	2
0	9	1	149	136	1	-5	13	1	115	118	1	-9	16	1	194	198	1	-3	18	1	93	95	3	-10	21	1	80	79	2
-9	10	1	140	144	1	-4	13	1	62	60	1	-8	16	1	39	36	1	-2	18	1	70	69	3	-9	21	1	29	25	3
-8	10	1	184	192	1	-3	13	1	125	125	1	-7	16	1	191	196	1	-1	18	1	85	82	1	-8	21	1	33	30	3
-7	10	1	368	372	1	-2	13	1	77	75	1	-6	16	1	216	214	1	0	18	1	27	16	10	-7	21	1	69	66	2
-6	10	1	102	104	1	-1	13	1	147	151	1	-5	16	1	73	74	1	-18	19	1	66	65	2	-6	21	1	25	32	9
-5	10	1	58	57	1	0	13	1	114	112	1	-4	16	1	378	379	2	-17	19	1	16	28	8	0	0	2	1737	1729	20
-4	10	1	104	104	1	-13	14	1	47	50	1	-3	16	1	145	149	1	-16	19	1	82	81	2	0	1	2	290	274	1
-3	10	1	367	372	1	-12	14	1	134	135	1	-2	16	1	38	37	1	-15	19	1	141	134	1	-1	2	2	146	144	2
-2	10	1	184	191	1	-11	14	1	68	70	1	-1	16	1	140	140	1	-14	19	1	80	77	2	0	2	2	86	101	1
-1	10	1	140	144	1	-10	14	1	65	67	1	0	16	1	285	291	2	-13	19	1	68	66	2	-2	3	2	134	136	1
0	10	1	215	213	3	-9	14	1	179	184	2	-16	17	1	46	44	2	-12	19	1	101	98	1	-1	3	2	134	136	1
-10	11	1	109	111	1	-8	14	1	98	97	1	-15	17	1	124	123	3	-11	19	1	36	36	3	0	3	2	561	493	2
-9	11	1	135	135	1	-7	14	1	38	37	1	-14	17	1	100	102	1	-10	19	1	37	35	2	-3	4	2	120	114	1
-8	11	1	250	256	1	-6	14	1	98	98	1	-13	17	1	40	36	2	-9	19	1	39	35	2	-2	4	2	227	197	1
-7	11	1	49	45	1	-5	14	1	181	184	1	-12	17	1	150	153	1	-8	19	1	38	37	2	-1	4	2	121	114	1
-6	11	1	206	207	1	-4	14	1	63	66	1	-11	17	1	146	147	1	-7	19	1	101	97	1	0	4	2	629	615	3
-5	11	1	205	207	1	-3	14	1	71	71	1	-10	17	1	41	39	2	-6	19	1	68	67	1	-4	5	2	458	424	2
-4	11	1	46	46	1	-2	14	1	132	135	1	-9	17	1	84	90	1	-5	19	1	77	76	3	-3	5	2	395	378	2
-3	11	1	249	255	1	-1	14	1	48	50	1	-8	17	1	85	89	1	-4	19	1	138	135	1	-2	5	2	392	377	2
-2	11	1	136	135	1	0	14	1	99	100	1	-7	17	1	43	39	2	-3	19	1	80	80	2	-1	5	2	457	425	2
-1	11	1	104	109	1	-14	15	1	54	55	1	-6	17	1	147	147	1	-2	19	1	26	28	5	0	5	2	207	205	1
0	11	1	251	257	4	-13	15	1	117	119	1	-5	17	1	152	155	1	-1	19	1	63	64	2	-5	6	2	171	163	1
-11	12	1	215	220	1	-12	15	1	62	58	1	-4	17	1	37	36	2	-17	20	1	74	71	5	-4	6	2	142	136	1
-10	12	1	145	149	1	-11	15	1	220	226	1	-3	17	1	100	103	1	-16	20	1	22	18	5	-3	6	2	374	363	2
-9	12	1	38	31	1	-10	15	1	119	122	1	-2	17	1	127	122	1	-15	20	1	108	109	2	-2	6	2	142	136	1
-8	12	1	579	570	3	-9	15	1	59	61	2	-1	17	1	41	45	2	-14	20	1	80	76	2	-1	6	2	172	164	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	6	2	553	541	2	-4	11	2	230	230	1	-2	14	2	88	84	1	-9	17	2	45	47	2	-4	19	2	48	47	2
-6	7	2	163	153	1	-3	11	2	62	58	1	-1	14	2	181	187	1	-8	17	2	50	47	3	-3	19	2	75	80	3
-5	7	2	246	241	1	-2	11	2	176	181	1	0	14	2	157	155	1	-7	17	2	214	221	1	-2	19	2	61	65	4
-4	7	2	113	117	1	-1	11	2	127	125	1	-14	15	2	71	72	1	-6	17	2	111	108	2	-16	20	2	176	179	2
-3	7	2	114	117	1	0	11	2	123	121	1	-13	15	2	85	86	1	-5	17	2	49	43	2	-15	20	2	48	46	2
-2	7	2	248	243	1	-11	12	2	168	168	1	-12	15	2	264	261	1	-4	17	2	78	75	1	-14	20	2	71	68	2
-1	7	2	162	153	1	-10	12	2	94	96	1	-11	15	2	119	118	1	-3	17	2	105	101	1	-13	20	2	84	82	2
0	7	2	243	229	1	-9	12	2	200	198	1	-10	15	2	116	117	1	-2	17	2	61	60	2	-12	20	2	130	132	1
-7	8	2	456	438	2	-8	12	2	301	304	1	-9	15	2	170	177	1	-1	17	2	60	60	3	-11	20	2	54	54	2
-6	8	2	131	138	1	-7	12	2	195	197	1	-8	15	2	145	149	1	0	17	2	47	51	4	-10	20	2	85	87	2
-5	8	2	172	172	1	-6	12	2	90	86	1	-7	15	2	146	149	1	-17	18	2	70	68	3	-9	20	2	53	55	2
-4	8	2	974	938	4	-5	12	2	195	198	1	-6	15	2	169	178	1	-16	18	2	77	79	2	-8	20	2	132	131	1
-3	8	2	172	170	1	-4	12	2	302	303	1	-5	15	2	118	117	1	-15	18	2	69	67	2	-7	20	2	81	81	2
-2	8	2	130	137	1	-3	12	2	197	196	2	-4	15	2	117	119	1	-14	18	2	29	31	3	-6	20	2	70	68	1
-1	8	2	456	440	2	-2	12	2	95	97	1	-3	15	2	261	260	1	-13	18	2	44	44	2	-5	20	2	58	46	4
0	8	2	353	365	1	-1	12	2	168	170	1	-2	15	2	85	86	1	-12	18	2	84	84	1	-4	20	2	182	178	3
-8	9	2	153	153	1	0	12	2	409	409	2	-1	15	2	71	71	1	-11	18	2	67	68	2	-12	21	2	29	34	5
-7	9	2	172	179	1	-12	13	2	58	60	1	0	15	2	219	216	1	-10	18	2	40	35	2	-11	21	2	40	33	5
-6	9	2	521	512	3	-11	13	2	157	160	1	-15	16	2	110	111	1	-9	18	2	33	36	4	-10	21	2	41	32	4
-5	9	2	87	89	1	-10	13	2	219	222	1	-14	16	2	116	119	1	-8	18	2	38	35	2	-9	21	2	40	35	5
-4	9	2	88	88	1	-9	13	2	92	91	1	-13	16	2	25	23	3	-7	18	2	70	69	1	-8	21	2	44	44	5
-3	9	2	522	513	2	-8	13	2	113	113	1	-12	16	2	158	163	1	-6	18	2	80	84	1	-7	21	2	38	43	6
-2	9	2	169	177	1	-7	13	2	207	211	1	-11	16	2	206	207	1	-5	18	2	51	45	2	0	1	3	356	350	1
-1	9	2	152	152	1	-6	13	2	206	211	2	-10	16	2	70	69	1	-4	18	2	30	31	3	-1	2	3	56	58	1
0	9	2	250	247	1	-5	13	2	114	114	1	-9	16	2	75	75	2	-3	18	2	70	68	2	0	2	3	387	375	1
-9	10	2	128	133	1	-4	13	2	92	91	1	-8	16	2	451	443	3	-2	18	2	78	79	3	-2	3	3	563	533	2
-8	10	2	194	193	1	-3	13	2	218	223	1	-7	16	2	73	75	1	-1	18	2	66	67	3	-1	3	3	565	533	3
-7	10	2	105	107	1	-2	13	2	156	158	1	-6	16	2	70	68	1	0	18	2	38	43	5	0	3	3	64	71	1
-6	10	2	260	259	1	-1	13	2	60	60	1	-5	16	2	211	210	1	-17	19	2	68	65	3	-3	4	3	332	334	1
-5	10	2	83	87	1	0	13	2	80	77	1	-4	16	2	160	164	2	-16	19	2	79	81	2	-2	4	3	85	85	1
-4	10	2	257	259	1	-13	14	2	182	186	1	-3	16	2	27	22	2	-15	19	2	49	47	2	-1	4	3	337	335	2
-3	10	2	105	107	1	-12	14	2	85	83	1	-2	16	2	112	119	1	-14	19	2	75	74	2	0	4	3	786	759	4
-2	10	2	189	192	1	-11	14	2	106	108	1	-1	16	2	110	112	2	-13	19	2	99	98	1	-4	5	3	115	113	1
-1	10	2	124	132	1	-10	14	2	185	191	1	0	16	2	91	95	1	-12	19	2	72	69	2	-3	5	3	339	345	2
0	10	2	162	173	1	-9	14	2	80	79	1	-16	17	2	57	59	2	-11	19	2	147	143	1	-2	5	3	340	344	2
-10	11	2	127	126	1	-8	14	2	114	112	1	-15	17	2	63	60	2	-10	19	2	85	86	1	-1	5	3	114	113	1
-9	11	2	175	181	1	-7	14	2	63	66	2	-14	17	2	104	102	1	-9	19	2	79	85	2	0	5	3	154	140	1
-8	11	2	64	58	1	-6	14	2	110	111	1	-13	17	2	76	76	1	-8	19	2	147	143	1	-5	6	3	329	332	1
-7	11	2	230	229	1	-5	14	2	80	79	1	-12	17	2	46	43	2	-7	19	2	72	68	1	-4	6	3	140	139	1
-6	11	2	122	129	2	-4	14	2	185	192	1	-11	17	2	110	109	1	-6	19	2	99	98	1	-3	6	3	32	36	1
-5	11	2	125	128	1	-3	14	2	103	107	1	-10	17	2	214	220	2	-5	19	2	78	74	2	-2	6	3	140	140	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	6	3	329	332	1	-5	11	3	251	256	1	-3	14	3	91	96	1	-10	17	3	42	37	2	-14	20	3	71	68	2
0	6	3	53	38	1	-4	11	3	59	61	1	-2	14	3	162	168	2	-9	17	3	36	39	2	-13	20	3	25	25	8
-6	7	3	251	241	1	-3	11	3	103	105	1	-1	14	3	48	48	2	-8	17	3	37	39	2	-12	20	3	165	167	2
-5	7	3	141	141	1	-2	11	3	190	198	1	0	14	3	124	127	1	-7	17	3	30	37	5	-11	20	3	101	102	2
-4	7	3	392	399	2	-1	11	3	38	38	1	-14	15	3	86	85	1	-6	17	3	144	147	1	-10	20	3	34	35	3
-3	7	3	392	398	2	0	11	3	168	169	1	-13	15	3	104	105	1	-5	17	3	66	62	1	-9	20	3	100	103	2
-2	7	3	139	140	1	-11	12	3	110	111	1	-12	15	3	64	63	1	-4	17	3	13	9	12	-8	20	3	168	167	2
-1	7	3	248	239	1	-10	12	3	188	193	1	-11	15	3	151	154	1	-3	17	3	96	96	2	-7	20	3	17	25	16
0	7	3	441	439	2	-9	12	3	61	61	1	-10	15	3	124	129	1	-2	17	3	119	122	2	-6	20	3	65	68	4
-7	8	3	46	43	1	-8	12	3	395	401	3	-9	15	3	57	59	2	-1	17	3	33	34	8	0	0	4	1181	1144	14
-6	8	3	358	361	2	-7	12	3	211	212	2	-8	15	3	126	125	1	0	17	3	23	23	9	0	1	4	147	150	1
-5	8	3	275	274	1	-6	12	3	38	39	1	-7	15	3	122	124	1	-17	18	3	97	100	3	-1	2	4	434	415	2
-4	8	3	24	24	3	-5	12	3	210	214	3	-6	15	3	58	58	1	-16	18	3	78	81	3	0	2	4	168	180	1
-3	8	3	271	274	1	-4	12	3	396	401	2	-5	15	3	126	128	1	-15	18	3	47	44	3	-2	3	4	113	117	1
-2	8	3	358	361	2	-3	12	3	60	61	1	-4	15	3	153	155	1	-14	18	3	109	114	1	-1	3	4	113	116	1
-1	8	3	44	44	1	-2	12	3	188	192	1	-3	15	3	66	63	1	-13	18	3	119	120	3	0	3	4	356	369	1
0	8	3	528	532	6	-1	12	3	110	112	1	-2	15	3	107	106	1	-12	18	3	47	42	2	-3	4	4	33	32	1
-8	9	3	123	123	1	0	12	3	54	50	2	-1	15	3	83	84	2	-11	18	3	52	53	2	-2	4	4	290	289	1
-7	9	3	261	267	7	-12	13	3	109	109	1	0	15	3	63	58	2	-10	18	3	76	76	2	-1	4	4	31	32	1
-6	9	3	76	75	1	-11	13	3	53	54	1	-15	16	3	97	96	1	-9	18	3	19	19	5	0	4	4	441	433	2
-5	9	3	60	62	2	-10	13	3	143	146	2	-14	16	3	34	32	2	-8	18	3	73	76	2	-4	5	4	151	149	1
-4	9	3	59	61	1	-9	13	3	64	62	1	-13	16	3	156	159	1	-7	18	3	54	52	2	-3	5	4	332	335	1
-3	9	3	74	75	1	-8	13	3	60	59	1	-12	16	3	308	311	2	-6	18	3	45	43	2	-2	5	4	334	335	1
-2	9	3	270	267	2	-7	13	3	136	140	1	-11	16	3	58	60	2	-5	18	3	118	120	2	-1	5	4	151	150	1
-1	9	3	127	125	1	-6	13	3	135	139	1	-10	16	3	116	118	2	-4	18	3	109	114	2	0	5	4	212	208	1
0	9	3	80	83	1	-5	13	3	58	58	1	-9	16	3	156	160	1	-3	18	3	49	44	3	-5	6	4	175	183	4
-9	10	3	130	133	1	-4	13	3	62	62	1	-8	16	3	48	45	2	-2	18	3	81	81	2	-4	6	4	156	164	1
-8	10	3	95	95	1	-3	13	3	143	146	1	-7	16	3	156	158	1	-1	18	3	103	99	3	-3	6	4	122	127	1
-7	10	3	109	105	1	-2	13	3	54	55	2	-6	16	3	118	119	1	-15	19	3	103	105	2	-2	6	4	156	165	2
-6	10	3	129	126	1	-1	13	3	113	110	1	-5	16	3	65	60	1	-14	19	3	50	51	2	-1	6	4	175	182	4
-5	10	3	75	81	2	0	13	3	68	66	1	-4	16	3	310	312	2	-13	19	3	62	64	2	0	6	4	263	262	2
-4	10	3	131	126	1	-13	14	3	49	48	1	-3	16	3	150	157	1	-12	19	3	87	85	2	-6	7	4	124	127	1
-3	10	3	102	105	1	-12	14	3	161	168	1	-2	16	3	34	32	2	-11	19	3	11	22	10	-5	7	4	284	283	4
-2	10	3	92	95	2	-11	14	3	91	95	1	-1	16	3	95	97	1	-10	19	3	69	70	2	-4	7	4	177	184	4
-1	10	3	130	132	1	-10	14	3	52	54	1	0	16	3	259	262	2	-9	19	3	66	69	2	-3	7	4	181	183	1
0	10	3	162	169	1	-9	14	3	218	219	1	-16	17	3	29	34	4	-8	19	3	23	22	6	-2	7	4	288	284	2
-10	11	3	39	38	1	-8	14	3	139	144	1	-15	17	3	120	123	1	-7	19	3	87	84	2	-1	7	4	126	127	1
-9	11	3	192	197	1	-7	14	3	48	51	2	-14	17	3	96	95	1	-6	19	3	66	65	2	0	7	4	38	39	1
-8	11	3	105	107	1	-6	14	3	139	145	1	-13	17	3	0	9	1	-5	19	3	43	51	3	-7	8	4	186	190	1
-7	11	3	59	62	1	-5	14	3	218	219	1	-12	17	3	64	61	1	-4	19	3	105	105	2	-6	8	4	94	92	3
-6	11	3	251	256	1	-4	14	3	52	53	1	-11	17	3	144	147	1	-3	19	3	88	88	2	-5	8	4	67	69	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevitte Pi4

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	8	4	627	616	7	-5	12	4	94	97	3	-6	15	4	146	150	2	-14	18	4	46	47	3	-5	7	5	34	32	3
-3	8	4	68	68	1	-4	12	4	192	200	1	-5	15	4	78	78	1	-13	18	4	94	93	1	-4	7	5	97	99	1
-2	8	4	95	92	1	-3	12	4	125	128	1	-4	15	4	86	84	1	-12	18	4	118	121	1	-3	7	5	97	99	1
-1	8	4	184	192	5	-2	12	4	146	143	1	-3	15	4	178	175	1	-11	18	4	53	60	3	-2	7	5	31	33	1
0	8	4	253	262	2	-1	12	4	100	104	1	-2	15	4	91	89	1	-10	18	4	108	105	1	-1	7	5	212	216	1
-8	9	4	94	102	1	0	12	4	355	352	2	-1	15	4	73	72	2	-9	18	4	84	86	2	0	7	5	49	44	2
-7	9	4	132	134	1	-12	13	4	45	49	2	0	15	4	116	113	1	-8	18	4	109	105	2	-7	8	5	39	43	2
-6	9	4	261	259	2	-11	13	4	171	176	1	-15	16	4	66	64	2	-7	18	4	57	60	6	-6	8	5	104	107	1
-5	9	4	85	89	1	-10	13	4	124	123	2	-14	16	4	89	89	2	-6	18	4	119	122	3	-5	8	5	283	283	2
-4	9	4	86	90	1	-9	13	4	52	58	1	-13	16	4	82	86	1	-5	18	4	94	93	3	-4	8	5	35	33	1
-3	9	4	263	259	2	-8	13	4	74	71	1	-12	16	4	132	137	2	-4	18	4	50	47	4	-3	8	5	280	283	3
-2	9	4	128	133	2	-7	13	4	77	78	1	-11	16	4	136	134	1	-3	18	4	59	65	2	-2	8	5	104	108	1
-1	9	4	94	103	1	-6	13	4	78	78	2	-10	16	4	45	44	2	-13	19	4	57	63	5	-1	8	5	40	43	2
0	9	4	174	170	1	-5	13	4	74	72	2	-9	16	4	62	70	2	-12	19	4	80	86	2	0	8	5	430	430	3
-9	10	4	122	120	1	-4	13	4	54	58	1	-8	16	4	284	284	2	-11	19	4	115	113	2	-8	9	5	154	155	1
-8	10	4	185	187	1	-3	13	4	125	124	1	-7	16	4	67	70	2	-10	19	4	45	44	3	-7	9	5	177	182	1
-7	10	4	66	67	1	-2	13	4	172	175	1	-6	16	4	42	43	3	-9	19	4	47	43	4	-6	9	5	58	62	2
-6	10	4	154	154	1	-1	13	4	48	49	2	-5	16	4	138	135	2	-8	19	4	113	114	3	-5	9	5	65	68	1
-5	10	4	259	254	2	0	13	4	34	33	2	-4	16	4	136	137	2	-7	19	4	71	85	4	-4	9	5	71	68	1
-4	10	4	153	153	1	-13	14	4	141	143	2	-3	16	4	82	86	1	0	1	5	133	133	1	-3	9	5	60	62	1
-3	10	4	66	67	1	-12	14	4	66	64	2	-2	16	4	89	89	2	-1	2	5	50	56	1	-2	9	5	175	181	1
-2	10	4	186	187	1	-11	14	4	54	54	2	-1	16	4	64	64	2	0	2	5	175	170	1	-1	9	5	158	156	1
-1	10	4	122	120	1	-10	14	4	133	136	1	0	16	4	105	104	1	-2	3	5	231	231	1	0	9	5	33	31	2
0	10	4	110	114	2	-9	14	4	77	75	1	-16	17	4	74	75	2	-1	3	5	231	231	1	-9	10	5	134	138	1
-10	11	4	129	127	1	-8	14	4	74	74	1	-15	17	4	70	67	4	0	3	5	100	106	1	-8	10	5	60	62	1
-9	11	4	163	165	1	-7	14	4	66	68	1	-14	17	4	63	61	2	-3	4	5	148	148	1	-7	10	5	196	199	1
-8	11	4	122	125	2	-6	14	4	76	74	2	-13	17	4	47	48	2	-2	4	5	44	46	1	-6	10	5	197	202	2
-7	11	4	179	182	1	-5	14	4	75	75	1	-12	17	4	40	38	2	-1	4	5	151	149	1	-5	10	5	13	17	6
-6	11	4	94	99	1	-4	14	4	133	136	1	-11	17	4	70	68	1	0	4	5	464	461	2	-4	10	5	199	203	2
-5	11	4	95	98	1	-3	14	4	56	54	1	-10	17	4	126	127	1	-4	5	5	35	36	1	-3	10	5	199	199	2
-4	11	4	178	183	1	-2	14	4	70	64	1	-9	17	4	34	36	3	-3	5	5	169	175	1	-2	10	5	63	62	1
-3	11	4	121	125	1	-1	14	4	141	143	1	-8	17	4	41	35	3	-2	5	5	170	175	1	-1	10	5	134	138	3
-2	11	4	164	166	1	0	14	4	76	72	2	-7	17	4	130	128	2	-1	5	5	36	36	1	0	10	5	197	204	1
-1	11	4	124	126	1	-14	15	4	70	72	2	-6	17	4	71	67	2	0	5	5	136	135	1	-10	11	5	65	69	1
0	11	4	114	119	1	-13	15	4	90	88	1	-5	17	4	38	37	3	-5	6	5	118	120	1	-9	11	5	68	68	1
-11	12	4	98	103	1	-12	15	4	178	176	1	-4	17	4	54	48	2	-4	6	5	129	136	1	-8	11	5	162	166	1
-10	12	4	142	143	1	-11	15	4	84	84	2	-3	17	4	64	61	2	-3	6	5	28	28	2	-7	11	5	38	37	2
-9	12	4	124	129	1	-10	15	4	81	78	1	-2	17	4	69	67	2	-2	6	5	132	136	1	-6	11	5	120	124	1
-8	12	4	193	200	1	-9	15	4	145	149	1	-1	17	4	76	76	2	-1	6	5	118	120	2	-5	11	5	119	123	3
-7	12	4	91	98	1	-8	15	4	89	92	1	0	17	4	18	17	11	0	6	5	63	67	1	-4	11	5	32	37	3
-6	12	4	91	92	1	-7	15	4	90	92	2	-15	18	4	65	64	4	-6	7	5	210	216	1	-3	11	5	161	165	2

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevitte Pi4

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
-2	11	5	68	69	3	0	14	5	99	96	2	-11	18	5	14	32	14	0	8	6	168	172	1	-1	12	6	60	64	2
-1	11	5	65	69	1	-14	15	5	42	41	2	-10	18	5	36	39	6	-8	9	6	42	42	1	0	12	6	287	281	3
0	11	5	197	199	1	-13	15	5	53	52	3	-9	18	5	17	17	17	-7	9	6	98	98	1	-12	13	6	52	55	2
-11	12	5	145	145	1	-12	15	5	42	37	2	-8	18	5	46	39	5	-6	9	6	144	146	1	-11	13	6	130	131	1
-10	12	5	158	158	1	-11	15	5	152	153	1	-7	18	5	35	32	7	-5	9	6	55	57	2	-10	13	6	91	89	2
-9	12	5	41	39	2	-10	15	5	81	86	2	0	0	6	546	524	6	-4	9	6	55	56	2	-9	13	6	31	31	3
-8	12	5	352	351	2	-9	15	5	62	61	2	0	1	6	103	102	1	-3	9	6	145	147	1	-8	13	6	89	86	2
-7	12	5	184	188	1	-8	15	5	98	98	3	-1	2	6	193	195	1	-2	9	6	95	98	1	-7	13	6	62	58	2
-6	12	5	31	38	3	-7	15	5	101	97	2	0	2	6	134	136	1	-1	9	6	43	42	1	-6	13	6	59	58	2
-5	12	5	188	189	2	-6	15	5	59	61	2	-2	3	6	54	52	1	0	9	6	96	96	1	-5	13	6	88	87	2
-4	12	5	345	351	6	-5	15	5	88	85	2	-1	3	6	51	52	1	-9	10	6	75	69	1	-4	13	6	33	31	3
-3	12	5	38	39	3	-4	15	5	156	153	2	0	3	6	257	252	1	-8	10	6	99	100	2	-3	13	6	87	89	2
-2	12	5	157	157	1	-3	15	5	43	37	3	-3	4	6	41	42	1	-7	10	6	60	58	3	-2	13	6	128	130	2
-1	12	5	147	146	1	-2	15	5	58	52	2	-2	4	6	229	227	1	-6	10	6	85	87	1	-1	13	6	58	55	4
0	12	5	48	47	2	-1	15	5	44	41	2	-1	4	6	43	42	1	-5	10	6	202	206	2	0	13	6	37	40	3
-12	13	5	54	55	2	0	15	5	23	15	5	0	4	6	258	259	1	-4	10	6	86	87	1	-13	14	6	88	88	2
-11	13	5	53	52	2	-15	16	5	71	73	2	-4	5	6	142	142	1	-3	10	6	61	58	2	-12	14	6	31	29	3
-10	13	5	212	218	2	-14	16	5	31	27	5	-3	5	6	153	155	1	-2	10	6	99	100	1	-11	14	6	59	58	3
-9	13	5	39	40	2	-13	16	5	59	58	2	-2	5	6	151	155	1	-1	10	6	73	70	1	-10	14	6	88	87	2
-8	13	5	57	56	2	-12	16	5	215	217	2	-1	5	6	144	142	2	0	10	6	37	33	2	-9	14	6	63	59	2
-7	13	5	165	171	1	-11	16	5	31	32	3	0	5	6	134	135	2	-10	11	6	71	72	2	-8	14	6	56	56	2
-6	13	5	166	170	2	-10	16	5	124	122	2	-5	6	6	116	116	1	-9	11	6	91	92	1	-7	14	6	58	59	2
-5	13	5	58	56	2	-9	16	5	82	84	2	-4	6	6	80	82	1	-8	11	6	95	96	1	-6	14	6	56	56	2
-4	13	5	36	40	3	-8	16	5	17	16	8	-3	6	6	158	161	1	-7	11	6	160	154	1	-5	14	6	57	58	2
-3	13	5	215	218	2	-7	16	5	82	83	2	-2	6	6	82	81	1	-6	11	6	79	79	1	-4	14	6	86	87	3
-2	13	5	51	52	2	-6	16	5	123	123	2	-1	6	6	115	116	1	-5	11	6	77	78	1	-3	14	6	55	57	4
-1	13	5	62	55	2	-5	16	5	34	32	4	0	6	6	135	137	1	-4	11	6	157	155	1	-2	14	6	26	29	5
0	13	5	56	59	2	-4	16	5	222	217	5	-6	7	6	80	81	1	-3	11	6	95	96	1	-1	14	6	92	88	2
-13	14	5	37	36	3	-3	16	5	57	57	3	-5	7	6	130	130	1	-2	11	6	89	91	1	0	14	6	42	52	6
-12	14	5	70	73	2	-2	16	5	29	27	3	-4	7	6	135	136	1	-1	11	6	68	71	2	-12	15	6	127	128	2
-11	14	5	62	58	2	-1	16	5	75	74	2	-3	7	6	135	135	1	0	11	6	68	67	2	-11	15	6	52	50	2
-10	14	5	16	22	7	-13	17	5	21	18	6	-2	7	6	130	130	1	-11	12	6	64	64	3	-10	15	6	56	54	2
-9	14	5	76	79	2	-12	17	5	61	67	2	-1	7	6	80	81	1	-10	12	6	68	65	2	-9	15	6	83	84	2
-8	14	5	59	52	2	-11	17	5	93	91	2	0	7	6	76	80	1	-9	12	6	86	84	1	-8	15	6	58	59	2
-7	14	5	17	16	7	-10	17	5	31	25	3	-7	8	6	134	132	1	-8	12	6	178	182	1	-7	15	6	59	59	2
-6	14	5	52	52	2	-9	17	5	46	48	2	-6	8	6	66	68	1	-7	12	6	55	53	2	-6	15	6	84	85	2
-5	14	5	81	79	2	-8	17	5	53	47	5	-5	8	6	57	56	1	-6	12	6	82	83	2	-5	15	6	56	54	2
-4	14	5	26	22	4	-7	17	5	27	25	9	-4	8	6	443	438	3	-5	12	6	57	53	2	-4	15	6	53	50	3
-3	14	5	64	58	2	-6	17	5	90	90	5	-3	8	6	53	55	3	-4	12	6	179	181	1	-3	15	6	131	127	3
-2	14	5	71	73	2	-5	17	5	70	68	2	-2	8	6	69	67	1	-3	12	6	87	83	2	0	1	7	116	109	1
-1	14	5	36	36	3	-4	17	5	24	18	6	-1	8	6	134	133	1	-2	12	6	66	65	2	-1	2	7	58	57	1

Table 6. Observed and calculated structure factors for vishnevite Pi4

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	2	7	89	93	1	0	7	7	159	156	1	-2	10	7	40	34	2	-9	13	7	47	56	5	0	6	8	137	131	2
-2	3	7	119	121	1	-7	8	7	23	21	4	-1	10	7	58	59	3	-8	13	7	32	33	5	-6	7	8	41	46	3
-1	3	7	119	121	1	-6	8	7	125	124	1	0	10	7	19	10	6	-7	13	7	32	33	3	-5	7	8	69	70	2
0	3	7	95	95	1	-5	8	7	95	95	1	-10	11	7	32	28	3	-6	13	7	37	33	3	-4	7	8	61	61	2
-3	4	7	151	145	1	-4	8	7	25	25	3	-9	11	7	95	95	2	-5	13	7	37	33	4	-3	7	8	61	60	2
-2	4	7	35	37	3	-3	8	7	94	94	1	-8	11	7	80	77	2	-4	13	7	52	56	5	-2	7	8	70	71	3
-1	4	7	152	146	1	-2	8	7	124	124	2	-7	11	7	33	28	3	-1	2	8	94	85	3	-1	7	8	47	46	4
0	4	7	404	392	2	-1	8	7	26	21	4	-6	11	7	131	131	1	0	2	8	78	74	4	0	7	8	36	25	9
-4	5	7	46	45	2	0	8	7	193	197	2	-5	11	7	131	130	1	-2	3	8	43	41	3	-7	8	8	86	88	3
-3	5	7	175	173	2	-8	9	7	51	48	2	-4	11	7	28	28	3	-1	3	8	42	40	3	-6	8	8	24	28	7
-2	5	7	172	173	2	-7	9	7	89	88	1	-3	11	7	76	76	2	0	3	8	82	83	2	-5	8	8	44	41	5
-1	5	7	48	45	2	-6	9	7	32	34	3	-2	11	7	96	96	2	-3	4	8	36	39	4	-4	8	8	276	272	2
0	5	7	60	59	1	-5	9	7	36	36	3	-1	11	7	25	28	4	-2	4	8	85	86	2	-3	8	8	44	41	3
-5	6	7	111	111	1	-4	9	7	38	36	3	0	11	7	106	104	2	-1	4	8	39	39	3	-2	8	8	23	28	5
-4	6	7	85	88	1	-3	9	7	34	33	3	-10	12	7	89	89	2	0	4	8	137	135	2	-1	8	8	91	88	2
-3	6	7	27	28	3	-2	9	7	88	88	1	-9	12	7	42	36	3	-4	5	8	117	111	2	0	8	8	108	112	3
-2	6	7	89	89	1	-1	9	7	48	48	2	-8	12	7	204	206	2	-3	5	8	59	61	2	-6	9	8	102	103	4
-1	6	7	111	111	1	0	9	7	34	30	3	-7	12	7	102	103	2	-2	5	8	61	62	2	-5	9	8	58	56	2
0	6	7	67	67	1	-9	10	7	56	59	3	-6	12	7	15	10	9	-1	5	8	116	112	2	-4	9	8	53	56	2
-6	7	7	70	71	1	-8	10	7	35	34	3	-5	12	7	103	104	2	0	5	8	63	65	2	-3	9	8	105	104	2
-5	7	7	57	59	2	-7	10	7	44	41	2	-4	12	7	203	206	2	-5	6	8	57	59	3	-2	9	8	34	32	8
-4	7	7	179	175	1	-6	10	7	66	66	2	-3	12	7	29	36	4	-4	6	8	43	43	2						
-3	7	7	181	174	1	-5	10	7	39	35	2	-2	12	7	85	89	2	-3	6	8	165	158	2						
-2	7	7	60	59	2	-4	10	7	61	66	2	-1	12	7	60	64	5	-2	6	8	46	44	2						
-1	7	7	71	70	1	-3	10	7	44	41	2	-10	13	7	79	70	4	-1	6	8	60	58	2						